

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

به نام او

۱

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

کریستالوگرافی

۲

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تقسیم بندی مواد

- گازها
- مایعات
- جامدات

۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

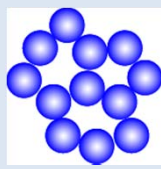
نظم اتمی

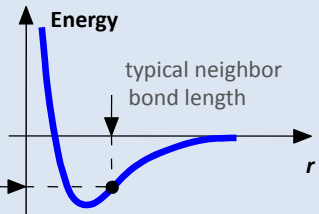
- بی نظمی کامل (disordering)
- نظم کم دامنه (short range order)
- نظم پر دامنه (long range order)

۴

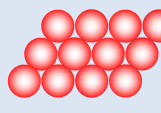
انرژی و چیده شدن

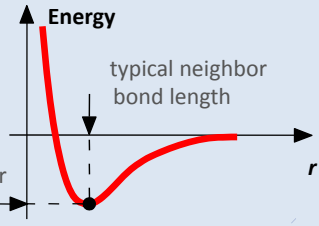
• نامتراکم و بصورت اتفاقی (random)





• متراکم و منظم (ordered)





ساختارهای متراکم و منظم معمولاً از انرژی کمتری برخوردار هستند.

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۵

ساختار کریستالی

ساختار کریستالی یعنی تکرار منظم اتم‌ها یا یون‌ها در فواصل طولانی که به ساختاری با نظم پر دامنه که قابل اندازه‌گیری است منجر می‌شود.

Crystal Structure
ساختار کریستالی

همه فلزات، بسیاری از سرامیک‌ها و بعضی از پلیمرها از انرژی پیوند بالا برخوردار هستند و ساختار آنها فشرده است.

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۶

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

موادی که از نظم پر دامنه برخوردار نیستند

Amorphous Materials
مواد آمورف

این مواد که از تراکم و انرژی پیوند کمتری برخوردار هستند را می توان در میان فلزات یافت و در شیشه سرامیک ها و بسیاری از پلاستیک ها مشاهده نمود.

<

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

جامدات

- کریستالی یا بلورین (Crystalline Solids) مانند فلزات
 - ✓ ساختار منظم داخلی
 - ✓ خواص غیر همسو (anisotropic properties)
 - ✓ نقطه ذوب ثابت
- جامدات غیر کریستالی یا آمورف (Amorphous solids) مانند شیشه ، کائوچو ، پلاستیک ها
 - ✓ مانند مایعات نظم کم دامنه دارند
 - ✓ خواص همسو (isotropic)
 - ✓ نقطه خمیری شدن بجای نقطه ذوب

۸

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

جامدات

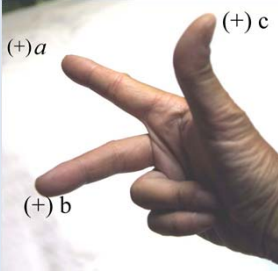
- ساختار کریستالی (Crystal Structure):
 □ ساختار کریستالی یعنی یک شبکه سه بعدی منظم از اتم‌ها، مولکول‌ها و یا یون‌ها
- به این شبکه Space Lattice گویند
- کوچکترین واحد این شبکه که تمام ویژگی‌های شبکه را داراست سلول واحد Unit Cell گویند.

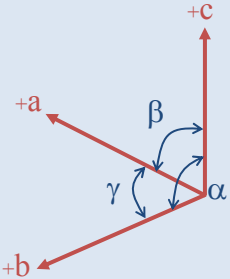
۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

شبکه‌های فضایی

راه‌های مختلف ترکیب سه محور غیر موازی و واقع بر چند سطح





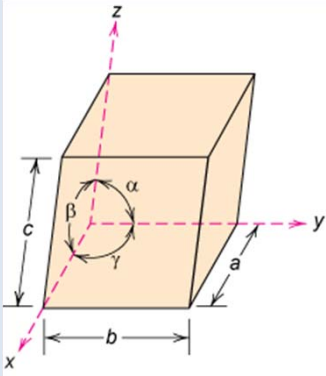
Axial convention:
"right-hand rule"

3-D Lattice Types		
Name	axes	angles
Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta \neq 90^\circ$
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal		
Hexagonal (4 axes)	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c$	$\beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$
Rhombohedral	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Isometric	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

۱۰

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

ساختار کریستال



اجزای سلول واحد:

• به یالها و زوایای بین آنها در یک سلول واحد پارامترهای شبکه یا ثوابت شبکه (Lattice Constants or Parameters) گویند.

۱۱

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

سیستم‌های کریستالی

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

۱۲

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

شبکه‌های فضایی براوه

بسته به موقعیت قرار گرفتن اجزای تشکیل دهنده شبکه در یک سلول واحد ۴ وضعیت برای یک سلول ایجاد می‌گردد:

- سلول ساده (Primitive = **P**)
- سلول با قاعده‌های مرکزدار (Base Centered = **B**)
- سلول مرکزدار (Body Centered = **I**)
- سلول با سطوح مرکزدار (Face Centered = **F**)

۱۴

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

شبکه‌های فضایی براوه

Triclinic
 $(\alpha \neq \beta \neq \gamma; a \neq b \neq c)$
 i.e. no symmetry imposed restrictions

Monoclinic
 $\alpha = \gamma = 90^\circ (\neq \beta; a \neq b \neq c)$
 (I is equivalent to C see footnote)

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

Tetragonal
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b (\neq c)$

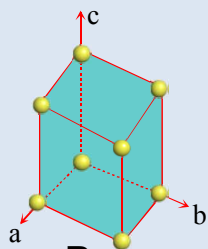
Hexagonal
 $\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ; a = b (\neq c)$

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

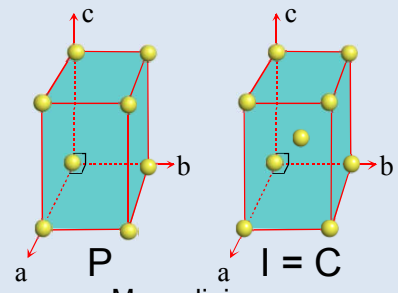
Isometric
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b = c$

۱۴

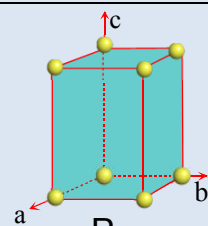
درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی



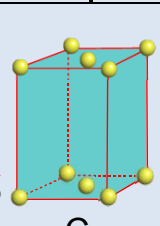
P
Triclinic
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
 $a \neq b \neq c$



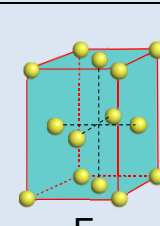
P **I = C**
Monoclinic
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
 $a \neq b \neq c$



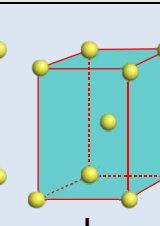
P



C



F

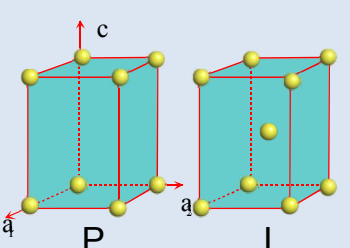


I

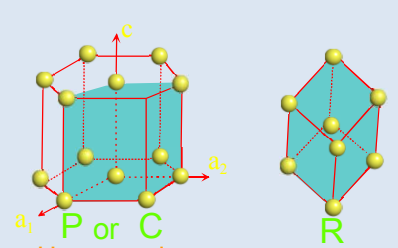
Orthorhombic
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a \neq b \neq c$

۱۵

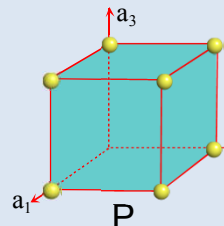
درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی



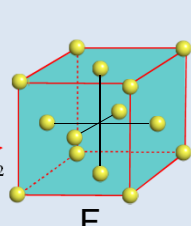
P **I**
Tetragonal
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a_1 = a_2 \neq c$



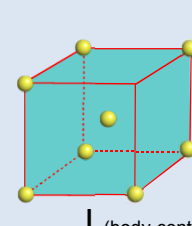
P or C **R**
Hexagonal Rhombohedral
 $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
 $a_1 = a_2 \neq c$ $a_1 = a_2 = a_3$



P



F



I (body-centered innenzentriert)

Isometric
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a_1 = a_2 = a_3$

۱۶

درس کریستالوگرافی

تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۷

Triclinic
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma; a \neq b \neq c$
 i.e. no symmetry imposed restrictions

Monoclinic
 $\alpha = \gamma = 90^\circ (\neq \beta); a \neq b \neq c$
 (I is equivalent to C see footnote)

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

Tetragonal
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b (\neq c)$

Hexagonal
 $\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ; a = b (\neq c)$

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

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

شبکه‌های فضایی براوه

اگر این طبقه‌بندی در ۷ سیستم کریستالی مطالعه گردد با حذف مشترکات در مجموع ۱۴ شبکه کریستالی باقی می‌ماند که به آنها شبکه‌های ۱۴ گانه براوه گویند.

Dolomite Triclinic

Gypsum Monoclinic

Emerald Hexagonal

Garnet Isometric

Andalusite Orthorhombic

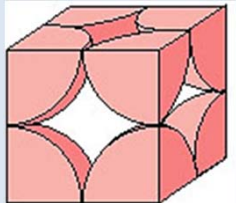
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

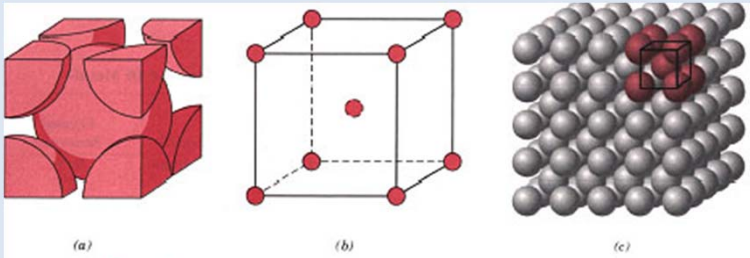
دو سیستم کریستالی مهم:

۱- مکعبی (Cubic) :

مکعبی ساده (Simple Cubic)



مکعبی مرکزدار (BCC = Body Centered Cubic)



(a) (b) (c)

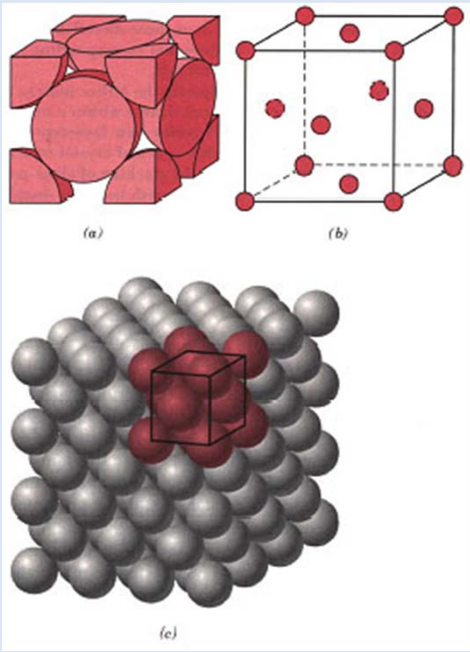
۱۹

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

دو سیستم کریستالی مهم:

۱- مکعبی (Cubic) :

مکعبی با سطوح مرکزدار
(FCC = Face Centered Cubic)



(a) (b) (c)

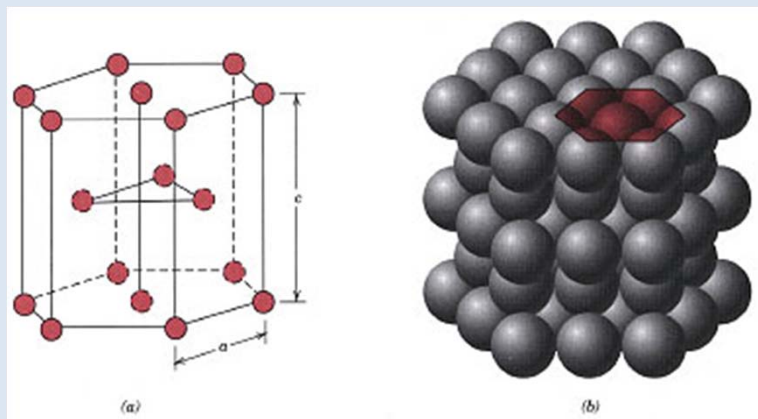
۲۰

دو سیستم کریستالی مهم:

درس کریستالوگرافی

تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۲- هگزاگونال فشرده (HCP = Hexagonal Close Packed)



۲۱

ساختارهای کریستالی فلزات

فلزات تمایل دارند که فشرده باشند.

دلایل این فشردگی عبارت است از:

به طور معمول فقط یک نوع عنصر وجود دارد پس اندازه اتمی یکسان است.

پیوند فلزی جهت دار نیست.

فاصله اتم‌های همسایه کمترین مقدار است برای اینکه انرژی پیوند کاهش یابد.

فلزات دارای ساده‌ترین ساختار کریستالی

هستند.

درس کریستالوگرافی

تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۲۲

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

ساختار کریستالی برخی از عناصر

Table 3.1 Atomic Radii and Crystal Structures for 16 Metals

<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure^a</i>	<i>Atomic Radius^b (nm)</i>	<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure</i>	<i>Atomic Radius (nm)</i>
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 (Å), multiply the nanometer value by 10.

۲۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

فرضیات برای بررسی ساختار کریستالی

اتم‌ها یا یون‌ها مانند کره‌هایی صلب در نظر گرفته می‌شوند.

اتم‌ها یا یون‌ها دارای قطر مشخص و معین هستند.

اتم‌ها یا یون‌هایی که همسایه هستند (nearest-neighbor) با همدیگر در تماسند.

۲۴

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

پلی مورفیسم / آلوتروپی

- دارا بودن دو یا چند نوع ساختار کریستالی مختلف برای یک ترکیب یا عنصر که معمولاً با تغییر دما و / یا فشار به یکدیگر تبدیل می‌شوند.

آهن:

liquid	
	1538°C
BCC	δ-Fe
	1394°C
FCC	γ-Fe
	912°C
BCC	α-Fe

titanium
α (HCP), β(BCC)-Ti

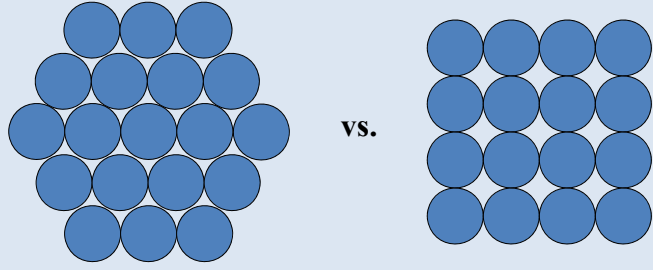
carbon:
diamond, graphite

۲۵

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چگونه می‌توان اتم‌ها را چید که فضاهای خالی به کمترین حد برسند؟

How can we stack metal atoms to minimize empty space? First in 2-dimensions:



vs.

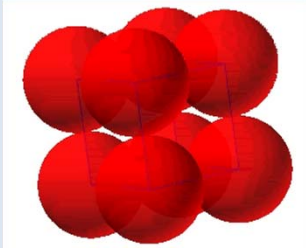
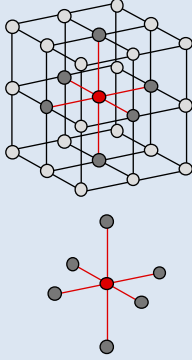
Now stack these 2-D layers to make 3-D structures – and note: the “Hard Spheres” touch as suggested above

۲۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

ساختار مکعبی ساده (SC)

- بسیار نادر است زیرا ساختار آن کمترین فشردگی را دارد. فقط Polonium این ساختار را در فلزات داراست.
- جهت‌های فشرده در روی یال‌ها قرار می‌گیرند.

- Coordination No. = 6
(# nearest neighbors) for each atom as seen

۲۷

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

فاکتور فشردگی اتمی (APF)

سه نوع است:

- خطی
- سطحی
- حجمی

رابطه زیر فاکتور فشردگی حجمی را بیان می‌کند:

$$APF = \frac{\text{Volume of atoms in unit cell}^*}{\text{Volume of unit cell}}$$

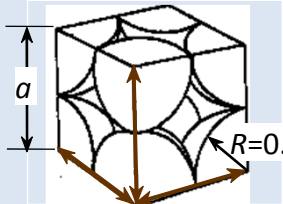
*assume hard spheres

۲۸

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

فاکتور فشردگی حجمی برای مکعبی ساده

- APF for a simple cubic structure = 0.52



close-packed directions
contains $(8 \times 1/8) =$
1 atom/unit cell

Adapted from Fig. 3.23,
Callister 7e.

$$\text{APF} = \frac{\text{atoms/unit cell} \times \text{volume/atom}}{\text{volume/unit cell}}$$

$$= \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi (0.5a)^3}{a^3}$$

Here: $a = R_{\text{at}} * 2$
Where R_{at} is the 'handbook' atomic radius

۲۹

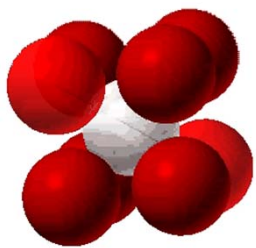
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

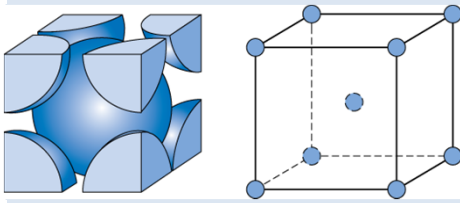
ساختار مکعبی مرکزدار (BCC)

- Atoms touch each other along cube diagonals.
--Note: All atoms are identical; the center atom is shaded differently only for ease of viewing.

ex: Cr, W, Fe (α), Tantalum, Molybdenum

- Coordination # = 8



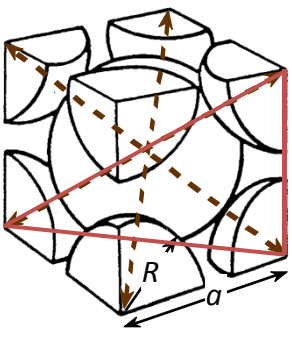
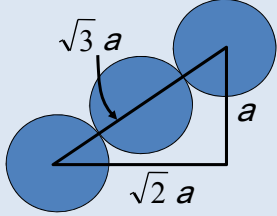


2 atoms/unit cell: (1 center) + (8 corners x 1/8)

۳۰

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

فاکتور فشردگی حجمی برای BCC

Close-packed directions:
length = $4R = \sqrt{3} a$

$$\text{APF} = \frac{\text{atoms/unit cell} \times \text{volume/atom}}{\text{volume/unit cell}}$$

$$= \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi (\sqrt{3}a/4)^3}{a^3}$$

- APF for a body-centered cubic structure = 0.68

۳۱

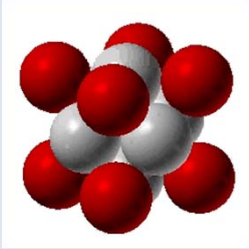
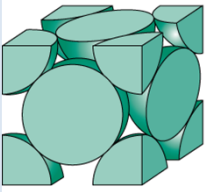
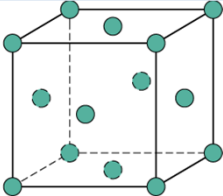
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

ساختار کریستالی مکعب با وجوه مرکزدار (FCC)

- Atoms touch each other along face diagonals.
--Note: All atoms are identical; the face-centered atoms are shaded differently only for ease of viewing.

ex: Al, Cu, Au, Pb, Ni, Pt, Ag

- Coordination # = 12

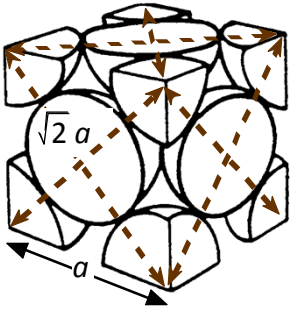
4 atoms/unit cell: (6 face x 1/2) + (8 corners x 1/8)

۳۲

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

فاکتور فشردگی حجمی FCC

- APF for a face-centered cubic structure = 0.74



The maximum achievable APF!

Close-packed directions:
length = $4R = \sqrt{2}a$
($a = 2\sqrt{2}R$)

Unit cell contains:
 $6 \times 1/2 + 8 \times 1/8$
 $= 4 \text{ atoms/unit cell}$

$$\text{APF} = \frac{\text{atoms/unit cell} \times \text{volume/atom}}{\text{volume/unit cell}}$$

$$= \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi (\frac{\sqrt{2}a}{4})^3}{a^3}$$

۳۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

مشخصات برخی از ساختارهای کریستالی


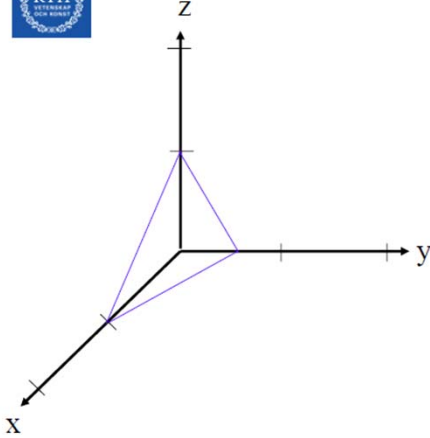
TABLE 3-2 ■ Crystal structure characteristics of some metals

Structure	a_0 versus r	Atoms per Cell	Coordination Number	Packing Factor	Examples
Simple cubic (SC)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	Polonium (Po), α -Mn
Body-centered cubic	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, Ti, W, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Zr, Cr
Face-centered cubic	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Fe, Cu, Au, Pt, Ag, Pb, Ni
Hexagonal close-packed	$a_0 = 2r$ $c_0 \approx 1.633a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr, Cd

۳۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چگونگی تعیین اندیس‌های میلر صفحات

How to find Miller indices?

- Find the intercepts of the plane with the crystal axes.
1, 1/2, 1
Express them as integral multiples of the basis vectors
2, 1, 2
- Take the reciprocals of the three integers found in step 1.
1/2, 1, 1/2
If possible reduce these to smallest set of integers ***h, k and l***.
1, 2, 1
- Label the plane **(hkl)**
(121)

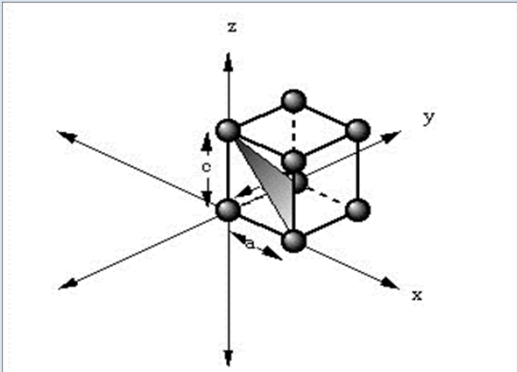
Planes and directions

(hkl) = single plane
[hkl] = direction of a plane
{hkl} = set of parallel or equivalent planes
<hkl> = set of equivalent directions

۳۵

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

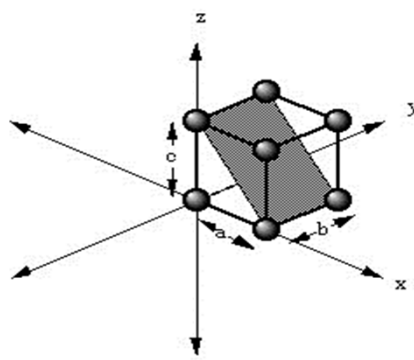
مثال:



	a	b	c
intercept length	1	1	1
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$
cleared fraction	1	1	1
Miller indice	(111)		

۳۶

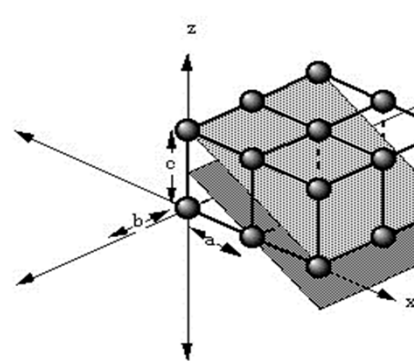
مثال:



	a	b	c
intercept length	1	∞	1
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1}$
cleared fraction	1	0	1
Miller indice	(101)		

۲۷

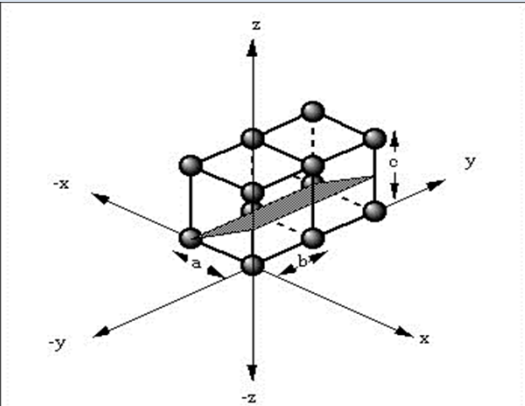
مثال:



	a	b	c
intercept length	1	∞	1/2
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1/2}$
cleared fraction	1	0	2
Miller indice	(102)		

۲۸

مثال:

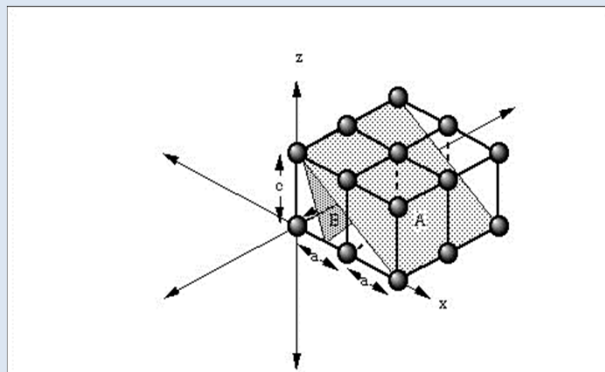


	a	b	c
intercept length	-1	∞	$\frac{1}{2}$
reciprocal	$\frac{1}{-1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1/2}$
cleared fraction	-1	0	2
Miller indice	($\bar{1}02$)		

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۳۹

مثال:



	plane A			plane B		
	a	b	c	a	b	c
intercept length	1	∞	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	∞	1
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1/2}$	$\frac{1}{1/2}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1}$
cleared fraction	1	0	2	2	0	1
Miller indice	(102)			(201)		

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۴۰

اندیس های میلر

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Figure 2.23 Miller indices for all visible faces on the crystal shown in Figure 2.22. The traces of unit cells are sketched on the crystal. See text for discussion.

Figure 2.24 Miller indices in the hexagonal crystal system. (a) Hexagonal crystal with a , b , and c crystal axes. (b) Relation of dark shaded face to the unit cell. Based on unit cell intercepts, the Miller index is (100) . (c) Relation of the light shaded face to a unit cell. Based on unit cell intercepts, the Miller index is (110) . (d) View down the c axis with the Miller indices for all vertical faces shown.

اندیس های میلر

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Miller indices and intercepts

from Klein & Hurlbut

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

نحوه تعیین اندیس‌های میلر - براوه جهت روش اول

روش:

1. Vector repositioned (if necessary) to pass through origin.
2. Read off projections in terms of unit cell dimensions a_1 , a_2 , a_3 , or c
3. Adjust to smallest integer values
4. Enclose in square brackets, no commas

$[uvw]$

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

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

dashed red lines indicate projections onto a_1 and a_2 axes

۳۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

نحوه تعیین اندیس‌های میلر - براوه جهت روش دوم

- Hexagonal Crystals
 - 4 parameter Miller-Bravais lattice coordinates are related to the direction indices (i.e., $u'v'w'$) as follows.

Fig. 3.8(a), Callister 7e.

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

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

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

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

$$w = w'$$

۴۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

نحوه تعیین اندیس‌های میلر - براوه جهت روش دوم

مثال:

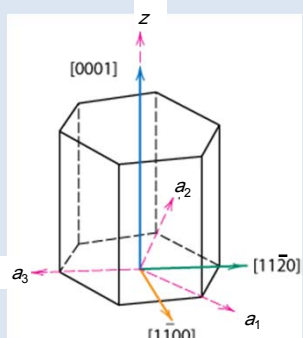


Fig. 3.8(a), Callister 7e.

Here: [1 1 0] - so now apply the models to create M-B Indices:

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

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

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

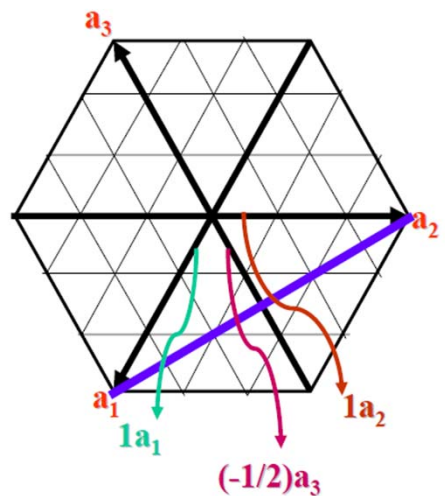
$$w = w' = 0$$

M-B Indices: $[11\bar{2}0]$

۴۵

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

اندیس‌های میلر و میلر - براوه در هگزاگونال



How to find Miller indices in a hexagonal lattice?

- 1) Primary axis is the one perpendicular to the plane of the picture, called **c**
- 2) Secondary axes are **a₁**, **a₂** and **a₃**.
- 3) Find the intercepts of the plane with the crystal axes. Express them as integral multiples of the basis vectors **a₁**, **a₂**, **a₃** and **c**.
- 4) Take the reciprocals of the 4 integers found in step 3. If possible reduce these to smallest set of integers **h**, **k**, **i** and **l**.
- 5) Label the plane (**hkil**)
- 6) $h+k = -i$
- 7) Hence sometimes (hkil) is given just as (hkl)

The plane here is $(11\bar{2}0)$

۴۶

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

نحوه تعیین اندیس‌های میلر - براوه صفحات

$$a_1 + a_2 = -a_3$$

- In hexagonal unit cells the same idea is used

example	a_1	a_2	a_3	c
1. Intercepts	1	∞	-1	1
2. Reciprocals	1	$1/\infty$	-1	1
3. Reduction	1	0	-1	1
4. Miller-Bravais Indices	$(10\bar{1}1)$			

۴۷

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

اثبات : $a_1 + a_2 = -a_3$

To show $h+k = -i$ in the hexagonal system

Plane ADC is perpendicular to the plane of the picture

DE is parallel to AB and the triangle BDE is an equilateral triangle.

Triangles ABC and DEC are similar

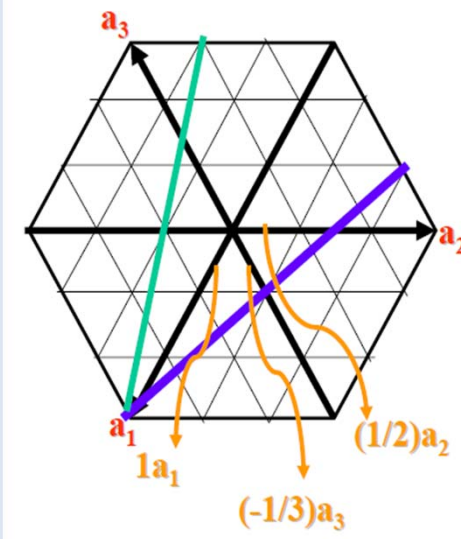
This leads to

$$(1/k)/(1/h) = [(1/k - 1/s)] / (1/s)$$

$$\Rightarrow h+k = s = -i$$

۴۸

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

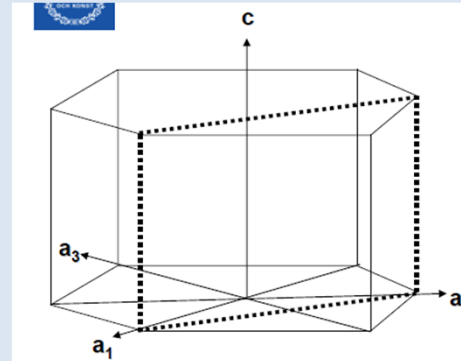


Violet plane is (1 2, -3, 0)

Green plane is (1, -3, 2, 0)

۳۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی



The plane surrounded by the dotted lines in this hexagonal lattice cuts the a_1 , a_2 , a_3 and c axes at $1a_1$, $1a_2$, $(1/2)a_3$ and ∞ , respectively. Here a_1 , a_2 , a_3 and c are the respective unit vectors. The above plane is written in terms of Miller indices as (1, 1, -2, 0) in $(hkil)$ notation or (110) in (hkl) notation. Find the Miller indices of the plane that cuts a_1 , a_2 , a_3 and c axes at $1a_1$, $(-1/3)a_2$, $(1/2)a_3$ and ∞ , respectively. Write them in both the notations.

۳۷

تمرین:

3-61 Sketch the following planes and directions within a hexagonal unit cell.

Solution: (a) $[01\bar{1}0]$ (b) $[11\bar{2}0]$ (c) $[\bar{1}011]$ (d) (0003) (e) $(\bar{1}010)$ (f) $(01\bar{1}1)$

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۵۱

تمرین:

Draw (a) the $[1\bar{2}1]$ direction and (b) the $[\bar{2}10]$ plane in a cubic unit cell.

Construction of a (a) direction and (b) plane within a unit cell (for Example 3.10)

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۵۲

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

حل:

a. Because we know that we will need to move in the negative y -direction, let's locate the origin at $0, +1, 0$. The "tail" of the direction will be located at this new origin. A second point on the direction can be determined by moving $+1$ in the x -direction, 2 in the y -direction, and $+1$ in the z direction [Figure 3.24(a)].

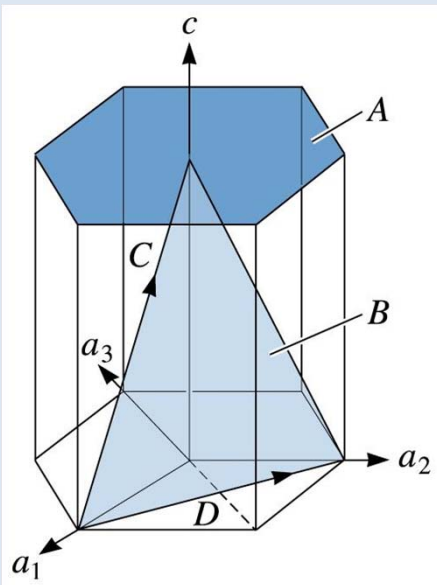
b. To draw in the $[\bar{2}10]$ plane, first take reciprocals of the indices to obtain the intercepts, that is:

$$x = 1/-2 = -1/2 \quad y = 1/1 = 1 \quad z = 1/0 = \infty$$

Since the x -intercept is in a negative direction, and we wish to draw the plane within the unit cell, let's move the origin $+1$ in the x -direction to $1, 0, 0$. Then we can locate the x -intercept at $1/2$ and the y -intercept at $+1$. The plane will be parallel to the z -axis [Figure 3.24(b)].

۵۳

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی



Miller-Bravais indices are obtained for crystallographic planes in HCP unit cells by using a four-axis coordinate system. The planes labeled A and B and the direction labeled C and D are those discussed in Example 3.11.

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

۵۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Typical directions in the HCP unit cell, using both three-and-four-axis systems. The dashed lines show that the $[1210]$ direction is equivalent to a $[010]$ direction.

۵۵

تمرین:

Determine the Miller-Bravais indices for planes A and B and directions C and D in Figure 3.25.

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Figure 3.25 Miller-Bravais indices are obtained for crystallographic planes in HCP unit cells by using a four-axis coordinate system. The planes labeled A and B and the direction labeled C and D are those discussed in Example 3.11.

۵۶

حل:

Plane A

1. $a_1 = a_2 = a_3 = \infty, c = 1$
2. $1/a_1 = 1/a_2 = 1/a_3 = 0, 1/c = 1$
3. No fractions to clear
4. (0001)

Plane B

1. $a_1 = 1, a_2 = 1, a_3 = -1/2, c = 1$
2. $1/a_1 = 1, 1/a_2 = 1, 1/a_3 = -2, 1/c = 1$
3. No fractions to clear
4. (11 $\bar{2}$ 1)

Direction C

1. Two points are 0, 0, 1 and 1, 0, 0.
2. $0, 0, 1, -1, 0, 0 = 1, 0, 1$
3. No fractions to clear or integers to reduce.
4. [$\bar{1}$ 01] or [$\bar{2}$ 113]

۵۷

حل (ادامه)

Direction D

1. Two points are 0, 1, 0 and 1, 0, 0.
2. $0, 1, 0, -1, 0, 0 = -1, 1, 0$
3. No fractions to clear or integers to reduce.
4. [$\bar{1}$ 10] or [$\bar{1}$ 100]

۵۸

درس کریستالوگرافی

تمرین:

3-62 Sketch the following planes and directions within a hexagonal unit cell.

Solution: (a) $[\bar{2}110]$ (b) $[11\bar{2}1]$ (c) $[10\bar{1}0]$ (d) $(1\bar{2}10)$ (e) $(\bar{1}\bar{1}22)$ (f) $(12\bar{3}0)$

۵۹

درس کریستالوگرافی

فکتور فشردگی (چگالی) سطحی صفحه (100) آهن

Solution: At $T < 912^\circ\text{C}$ iron has the BCC structure.

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

Radius of iron $R = 0.1241 \text{ nm}$

atoms

2D repeat unit

area

2D repeat unit

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

Atoms: wholly contained and centered in/on plane within U.C., area of plane in U.C.

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

فاکتور فشردگی (چگالی) سطحی صفحه (111) آهن

Solution (cont): (111) plane

1/2 atom centered on plane/ unit cell

Area 2D Unit: $\frac{1}{2}hb = \frac{1}{2}[(\sqrt{3}/2)a][(\sqrt{2})a] = \frac{1}{2}(\sqrt{3})a^2 = 8R^2/(\sqrt{3})$

atoms
2D repeat unit

area
2D repeat unit

Planar Density =

$\frac{3 \cdot 1/6}{\frac{8R^2}{\sqrt{3}}} = 7.0 \frac{\text{atoms}}{\text{nm}^2} = 0.70 \times 10^{19} \frac{\text{atoms}}{\text{m}^2}$

0.70 x 10¹⁹ atoms/m²

۶۱

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

صفحات و جهات فشرده در ساختارهای کریستالی مختلف

TABLE 3-5 ■ Close-packed planes and directions

Structure	Directions	Planes
SC	⟨100⟩	None
BCC	⟨111⟩	None
FCC	⟨110⟩	{111}
HCP	⟨100⟩, ⟨110⟩ or ⟨11 $\bar{2}$ 0⟩	(0001), (0002)

۶۲

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چیده شدن صفحات فشرده

abab closest packing

Atom in third layer lies over atom in first layer.

Unit cell is hexagonal prism: lattice structure is called

۶۴

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چیده شدن صفحات فشرده

abca closest packing

An atom in every fourth layer lies over an atom in the first layer.

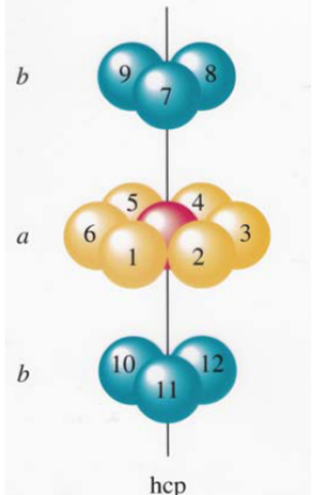
Unit cell

Unit cell is face-centered cubic (fcc): lattice structure is called

۶۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چیده شدن صفحات فشرده



hcp

In both hexagonal and cubic close packed structures, contact between atoms is maximized: each atom has 12 nearest neighbors.

۶۵

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چیده شدن صفحات فشرده



(a) *abab* — Closest packing

Top view Top view Side view

(b) *abca* — Closest packing

Top view Top view Top view Side view

۶۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

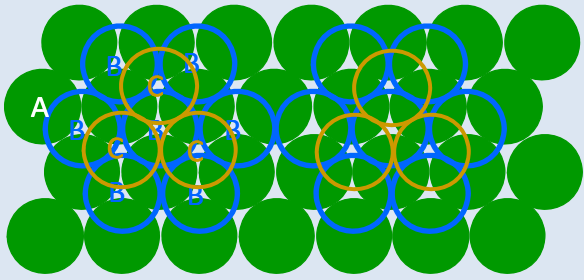
چیده شدن صفحه فشرده (111) در FCC

- ABCABC... Stacking Sequence
- 2D Projection

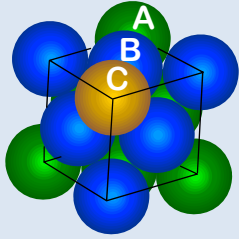
A sites

B sites

C sites



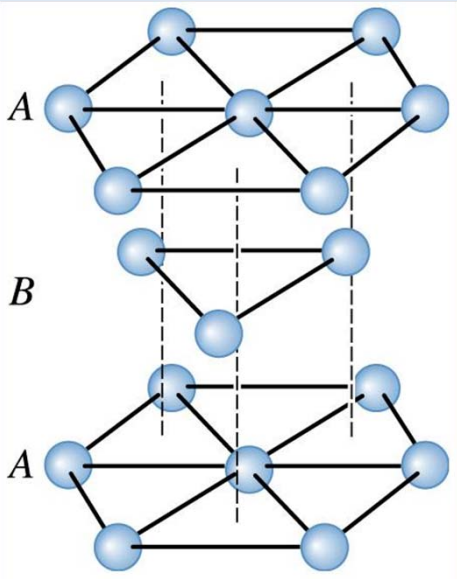
- FCC Unit Cell



۶۷

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چیده شدن صفحات فشرده در HCP



The *ABABAB* stacking sequence of close-packed planes produces the HCP structure.

۶۸

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

درس کریستالوگرافی

چیده شدن صفحات فشرده در FCC

The *ABCABCABC* stacking sequence of close-packed planes produces the FCC structure.

(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

۶۹

درس کریستالوگرافی

ساختار فشرده در HCP

ex: Cd, Mg, Ti, Zn

- ABAB... Stacking Sequence
- 3D Projection
- 2D Projection

Adapted from Fig. 3.3(a), Callister 7e.

- Coordination # = 12
- **$c/a = 1.633$ (ideal)**
- APF = 0.74
- 6 atoms/unit cell

۷۰

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چگالی تئوری ، ρ

Density = ρ = $\frac{\text{Mass of Atoms in Unit Cell}}{\text{Total Volume of Unit Cell}}$

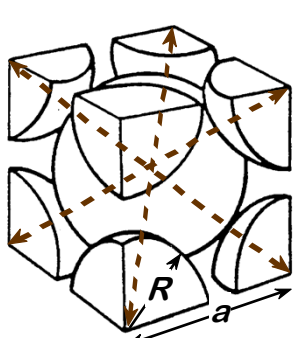
$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$

n = number of atoms/unit cell where
 A = atomic weight
 V_C = Volume of unit cell = a^3 for cubic
 N_A = Avogadro's number
 = 6.023×10^{23} atoms/mol

۲۱

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چگالی تئوری ، ρ ، در BCC



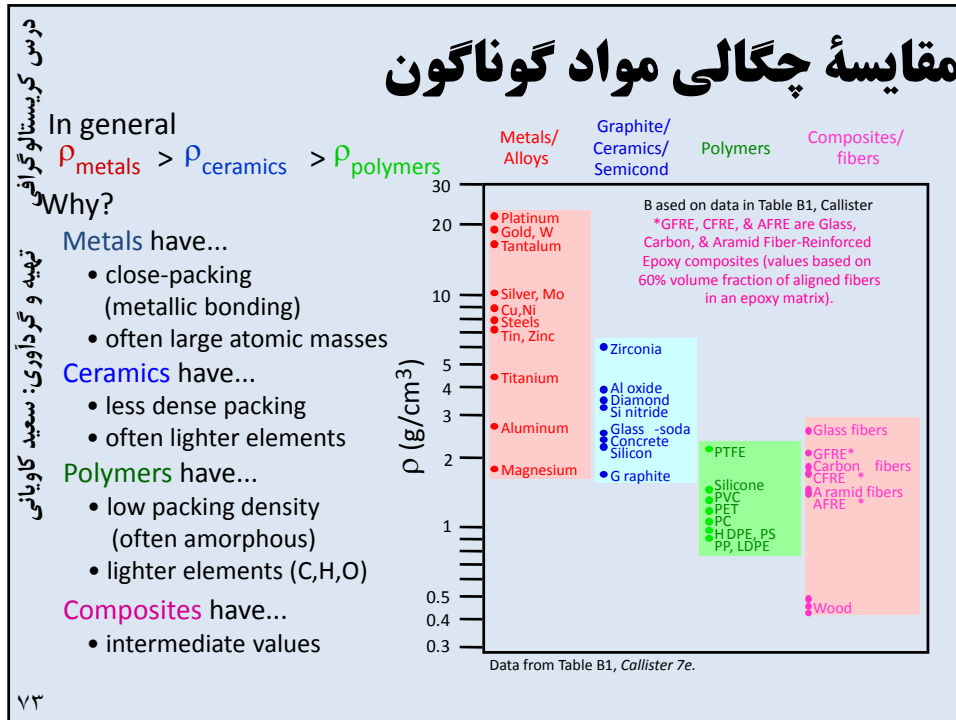
Ex: Cr (BCC) •
 $A = 52.00$ g/mol
 $R = 0.125$ nm
 $n = 2$
 $\therefore a = 4R/\sqrt{3} = 0.2887$ nm

$\rho_{\text{theoretical}}$	=	7.18 g/cm ³
ρ_{actual}	=	7.19 g/cm ³

$\rho = \frac{\frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \times A}{\frac{\text{volume}}{\text{unit cell}} \times N_A}$

$\rho = \frac{2 \times 52.00}{a^3 \times 6.023 \times 10^{23}}$

۲۲



منطقه (Zone) و محور منطقه

چگونگی دستیابی به اندیس های میلر محور منطقه:

- Write the integer Miller indices values for the first plane twice in a row.
- Write the integer Miller indices values for the second plane twice in row directly below.
- Disregard the first and last numbers in each row.
- Cross multiply each pair of adjacent columns
- Subtract the product of the upper right to lower left operation from the product of the upper left to lower right operation.
- Reduce the three integer values to the smallest integer.

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چگونگی دستیابی به اندیس‌های میلر محور منطقه و یا محل برخورد صفحات

h_1	k_1	l_1	h_2	k_2	l_2
h_2	k_2	l_2	h_1	k_1	l_1

$$u = k_1 * l_2 - l_1 * k_2$$

$$v = l_1 * h_2 - h_1 * l_2$$

$$w = h_1 * k_2 - k_1 * h_2$$

Here's an example for the intersection of the (100) and (010) faces.

1	0	0	1	0	0
0	1	0	0	1	0

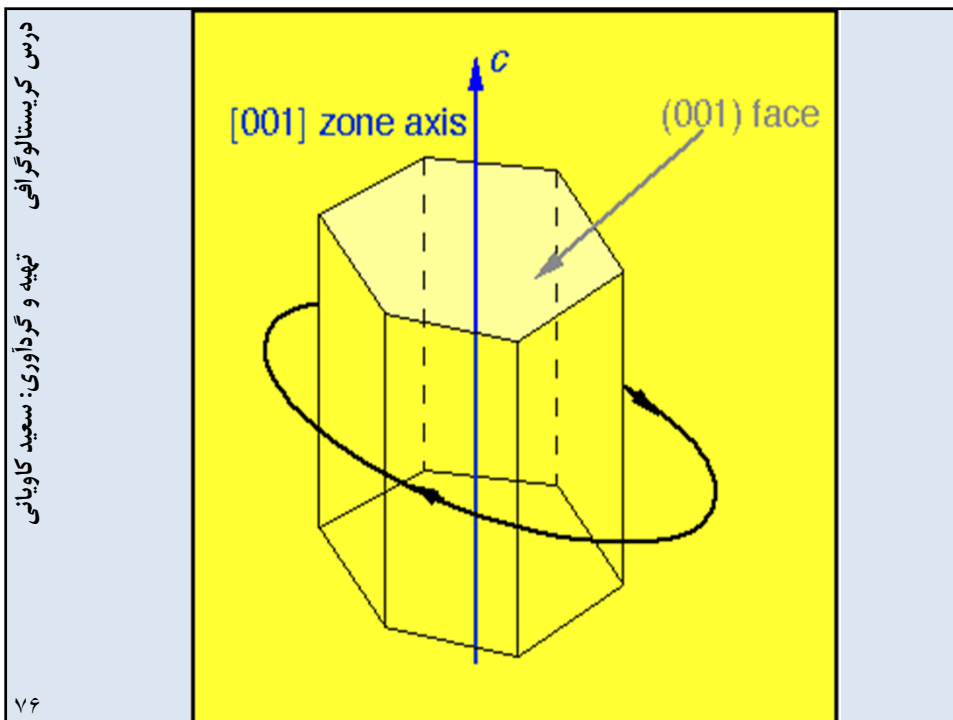
$$u = (0 * 0) - (0 * 1) = 0$$

$$v = (0 * 0) - (1 * 0) = 0$$

$$w = (1 * 1) - (0 * 0) = 1$$

$$[uvw] = [001]$$

۷۵



درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

پیدا کردن صفحه‌ای که شامل دو جهت معین است:

- $[u_1v_1w_1] , [u_2v_2w_2]$
- $h=(v_1w_2-v_2w_1)$
- $k=(w_1u_2-w_2u_1)$
- $l=(u_1v_2-u_2v_1)$

۷۷

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

صفحاتی که متعلق به یک منطقه هستند:

- دترمینان ماتریس ساخته شده از اندیس‌های میلر آن‌ها باید صفر باشد.
- $\begin{vmatrix} h_1k_1l_1 \\ h_2k_2l_2 \\ h_3k_3l_3 \end{vmatrix} = 0$
- $h_1k_2l_3+k_1l_2h_3+l_1h_2k_3-l_1k_2h_3-k_1h_2l_3-h_1l_2k_3=0$

۷۸

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

جهاتی که در یک صفحه قرار می گیرند:

- دترمینان ماتریس ساخته شده از اندیس های میلر آن ها باید برابر با صفر باشد.

$$\begin{vmatrix} u_1v_1w_1 \\ u_2v_2w_2 \\ u_3v_3w_3 \end{vmatrix} = 0$$

- $u_1v_2w_3 + v_1w_2u_3 + w_1u_2v_3 - w_1v_2u_3 - v_1u_2w_3 - u_1w_2v_3 = 0$

۷۹

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چگونگی تعیین متعلق بودن یک صفحه به یک منطقه:

باید رابطه زیر صدق کند:

$$u_1h_1 + v_1k_1 + w_1l_1 = 0$$

۸۰

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تمرین:

- 1- Is the direction [102] on (112) plane?
- 2- Find the plane that following two direction is on it? [101] and [222]
- 3- Find the intercept of (133) and (211).

۸۱

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

روابط مربوط به محاسبه فاصله صفحات (hkl)

$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$	مکعبی
$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$	تتراگونال
$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$	ارتورمبیک
$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2(1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$	رمبهدرال (تریگونال)
$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}$	هگزاگونال (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
$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$	
$S_{11} = h^2 c^2 \sin^2 \alpha,$	$S_{12} = abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma),$
$S_{22} = a^2 c^2 \sin^2 \beta,$	$S_{23} = a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha),$
$S_{33} = a^2 b^2 \sin^2 \gamma,$	$S_{13} = ab^2 c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta),$

۸۲

درس کریستالوگرافی

تمه گ. د. ا. م. : سعید کاروانی

$V=a^3$	مکعبی
$V=a^2c$	تتراگونال
$V=abc$	ارتورمبیک
$V=a^3 \sqrt{1-3\cos^2 \alpha + 2\cos^3 \alpha}$	رمبهدرال
$V=\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$	هکزاگونال
$V=abc \sin \beta$	منوکلینیک
$V=abc \sqrt{1-\cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2\cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$	تریکلینیک

۸۳

درس کریستالوگرافی

تهیه و گردآوری: سعید کاروانی

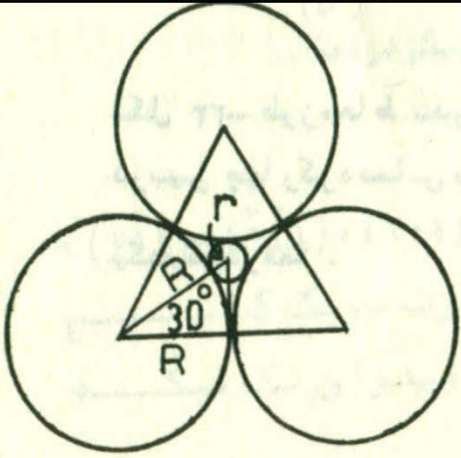
روابط مربوط به محاسبه زاویه بین دو صفحه متقاطع

$\cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$	مکعبی
$\cos \phi = \frac{\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1^2 + k_1^2}{a^2} + \frac{l_1^2}{c^2}\right)\left(\frac{h_2^2 + k_2^2}{a^2} + \frac{l_2^2}{c^2}\right)}}$	تتراگونال
$\cos \phi = \frac{\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2}}{\sqrt{\left(\frac{h_1^2}{a^2} + \frac{k_1^2}{b^2} + \frac{l_1^2}{c^2}\right)\left(\frac{h_2^2}{a^2} + \frac{k_2^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2}\right)}}$	ارتورمبیک
$\cos \phi = \frac{a^2 d_1 d_2}{V^2} [\sin^2 \alpha (h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2) + (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)(k_1 l_2 + k_2 l_1 + l_1 h_2 + l_2 h_1 + h_1 k_2 + h_2 k_1)]$	رمبهدرال (تریگونال)
$\cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \frac{3}{4} (h_1 k_2 + h_2 k_1) + \frac{3a^2}{4c^2} l_1 l_2}{\sqrt{\left(h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + \frac{3a^2}{4c^2} l_1^2\right)\left(h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + \frac{3a^2}{4c^2} l_2^2\right)}}$	هکزاگونال (تریگونال)
$\cos \phi = \frac{d_1 d_2}{\sin^2 \beta} \left[\frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2 \sin^2 \beta}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2} - \frac{(l_1 h_2 + l_2 h_1) \cos \beta}{ac} \right]$	منوکلینیک
$\cos \phi = \frac{d_1 d_2}{V^2} [S_{11} h_1 h_2 + S_{22} k_1 k_2 + S_{33} l_1 l_2 + S_{23}(k_1 l_2 + k_2 l_1) + S_{13}(l_1 h_2 + l_2 h_1) + S_{12}(h_1 k_2 + h_2 k_1)]$	تریکلینیک

۸۴

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

انواع فضاهای خالی در سلول واحد

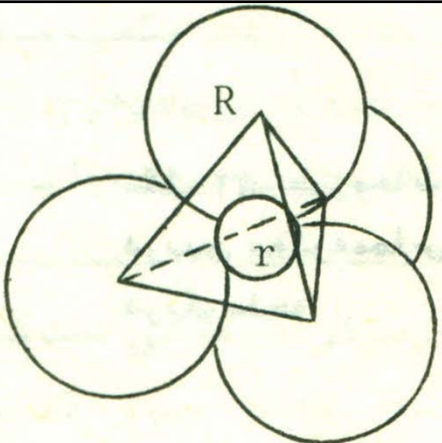


$$\cos 30^\circ = \frac{R}{R + r} = 0.866$$

$$\frac{r}{R} = \frac{1 - 0.866}{0.866} = 0.155$$

۸۵

انواع فضاهای خالی در سلول واحد (تتراهدرال)



a یا ۴ چهار روجهی = شعاع کره محیطی چهار روجهی = $\frac{a\sqrt{6}}{4}$

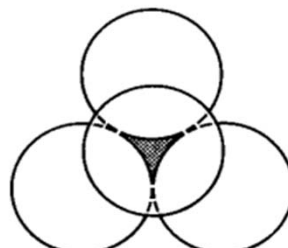
$r + R =$ طول شعاع کره محیطی چهار روجهی = $\frac{a\sqrt{6}}{4} = \frac{2R\sqrt{6}}{4} = \frac{R\sqrt{6}}{2}$

$$\frac{r}{R} = 0.225$$

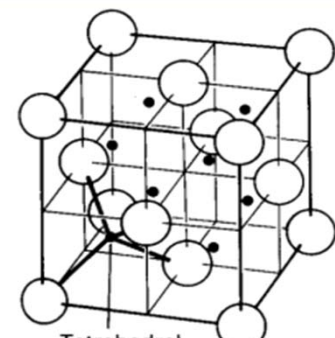
۸

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

انواع فضاهای خالی در سلول واحد (تتراهدرال)



a) A tetrahedral hole in the cleft between 4 spheres in a close packed lattice.



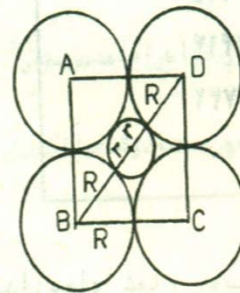
Tetrahedral hole

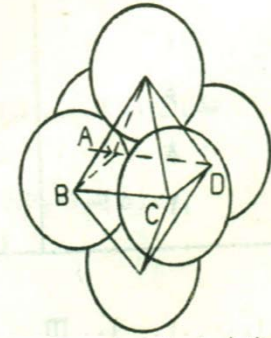
b) The location of tetrahedral holes.

۸۷

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

انواع فضاهای خالی در سلول واحد (اکتاهدرال)





فشت مثلث جانی این شکل می‌توانند بطول $(111), (1\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), (\bar{1}1\bar{1}), (11\bar{1}), (1\bar{1}1), (\bar{1}11), (111)$ هشت مکعب مجاور و متمركز در یک كنسج باشند. با این توضیح مشخص می‌گردد که این شکل را میتوان یک شبکه fcc در نظر گرفت.

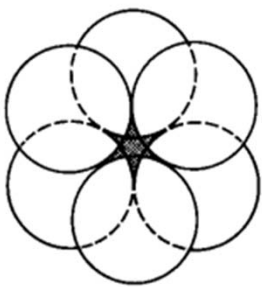
$(R + r + r + r + R)^2 = (R + R)^2 + (R + R)^2$

برای عددهم آهنکی نتیجه میشود که: $\frac{r}{R} = 0.414$

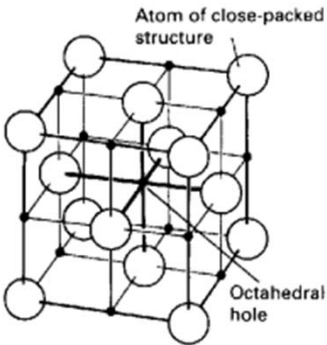
۸۸

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

انواع فضاهای خالی در سلول واحد (اکتاهدرال)



a) An octahedral hole in the cleft between six spheres.



b) The location of octahedral holes.

۸۹

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

جدول ۵- عدد هم‌آهنگی برای یونهای با اقطار مختلف

عدد هم‌آهنگی	حداقل نسبت اندازه شعاعهای یونی
۳	۰/۱۵۵
۴	۰/۲۲۵
۶	۰/۴۱۴
۸	۰/۷۳۲
۱۲	۱/۰

۹۰

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

مثال : شعاع های یونی $O^{2-} = 1/40$ ، $Si^{2+} = 0/42$ ، $Mg^{2+} = 0/66$ میباشد .
 شکل فضائی MgO و SiO_2 را با اشاره به عدد هم‌آهنگی Mg و Si تعیین کنید .

$$SiO_2 \frac{r_{Si^{2+}}}{R_{O^{2-}}} = \frac{0/42}{1/40} = 0/30$$

$$MgO \frac{r_{Mg^{2+}}}{R_{O^{2-}}} = \frac{0/66}{1/40} = 0/47$$

(a) (b)

۹۱

اتم‌ها و یا یون‌هایی که به صورت بین‌نشین در میان اتم‌ها و یون‌های یک سلول واحد قرار می‌گیرند در داخل این فضاهای تتراهدرال و یا اکتاهدرال جای خواهند گرفت.

Octahedral hole

Tetrahedral hole

(a) (b) (c)

۹۲

انواع فضاهای خالی تراهدرال و اکتاهدرال در آهن آلفا (فريت BCC)

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۹۴

تعداد فضاهای خالی تراهدرال و اکتاهدرال در FCC , BCC

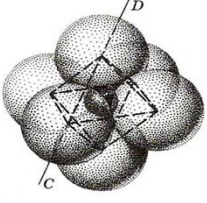
in FCC	{	tetrahedral $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ (8)	}	$\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$
				$\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}$
				$\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$
				$\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$
		octahedral $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ (4)		$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
				0 0 $\frac{1}{2}$
				$\frac{1}{2}$ 0 0
				0 $\frac{1}{2}$ 0
in bcc	{	tetrahedral (large) $\frac{1}{2} \frac{1}{4} 0$ (12)	}	midpoint of edges 0 0 $\frac{1}{2}$
		octahedral (small)		center of faces $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

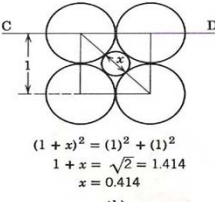
۹۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

نسبت شعاع‌ها



(a)

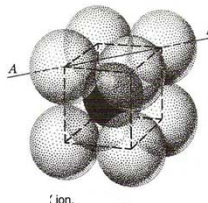


(b)

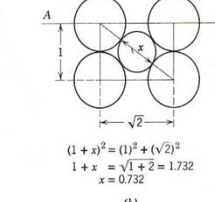
$$(1+x)^2 = (1)^2 + (1)^2$$

$$1+x = \sqrt{2} = 1.414$$

$$x = 0.414$$



(a)



(b)

$$(1+x)^2 = (1)^2 + (\sqrt{2})^2$$


$$1+x = \sqrt{1+2} = 1.732$$

$$x = 0.732$$

$R_{Ca} = R_{Na}$	12	fcc & hcp	Cu and Mg
$0.73 < R_{Ca}/R_{Na} < 1$	8	cube	CsCl
$0.41 < R_{Ca}/R_{Na} < 0.73$	6	octahedral	NaCl, CaCO ₃ , B in spinel
$0.22 < R_{Ca}/R_{Na} < 0.41$	4	tetrahedral	SiO ₄ , ZnS, A in spinel
$0.15 < R_{Ca}/R_{Na} < 0.22$	3	triangle	CO ₃ and BO ₃
$R_{Ca}/R_{Na} < 0.15$	2	linear	Cu ₂ O

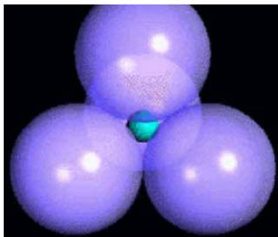
۹۵

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی



Interstitial spaces


It depends on the r/R ratios,
leading to different coordination numbers

4


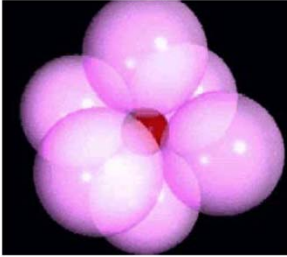
۹۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۶۷


 **Interstitial spaces**

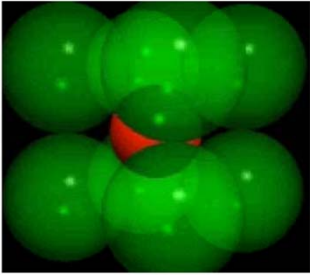
6



درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۶۸

 **Interstitial spaces -8**




درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

 **Interstitial spaces -12**

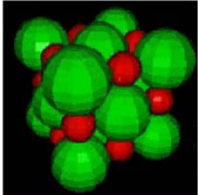


۴۹

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی


 **Examples**

NaCl (FCC, octahedral bonding)

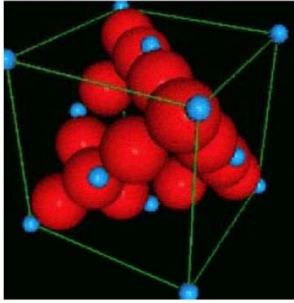


۵۰

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی



Examples – SiO₂



۱.۱

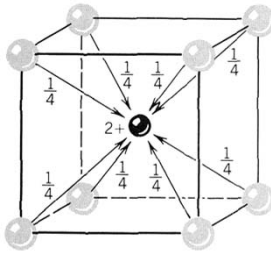
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Fluorite CaF₂

Cubic coordination of F⁻ around Ca²⁺

C.N. = 8; Each of the Ca²⁺ ions contributes +2/8 = +1/4 of a charge

$8 \times \frac{1}{4} = 2$



● Ca²⁺

● F⁻

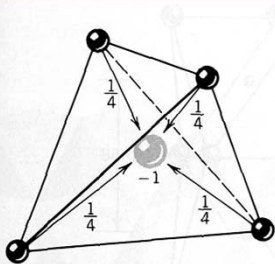
C. N. = 8; e. v. = $\frac{1}{4}$

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

Tetrahedral coordination of Ca²⁺ around F⁻

C.N. = 4; Each of the anions contributes -1/4 of a charge

$4 \times -\frac{1}{4} = -1$



● Ca²⁺

● F⁻

C. N. = 4; e. v. = $\frac{1}{4}$

$4 \times (\frac{1}{4}) = 1$

۱.۲

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Grossular $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$

Ca^{+2} in cubic coordination (CN = 8)

Al^{3+} in octahedral coordination (CN = 6)

Si^{+4} in tetrahedral coordination (CN = 4)

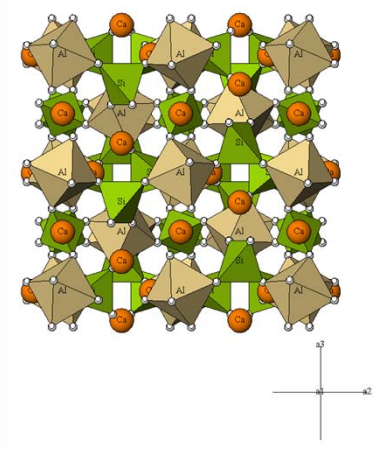
In order to satisfy the 2- charge on one shared oxygen atom, the oxygen must belong to:

For Ca, $2/8 = 1/4$ **2 cubic Ca^{2+}**

For Al, $3/6 = 1/2$ **1 octahedral Al^{3+}**

For Si, $4/4 = 1$ **1 tetrahedral Si^{4+}**

Thus will net a total charge of: $(2 * 1/4) + 1/2 + 1 = 2$



a3
a2

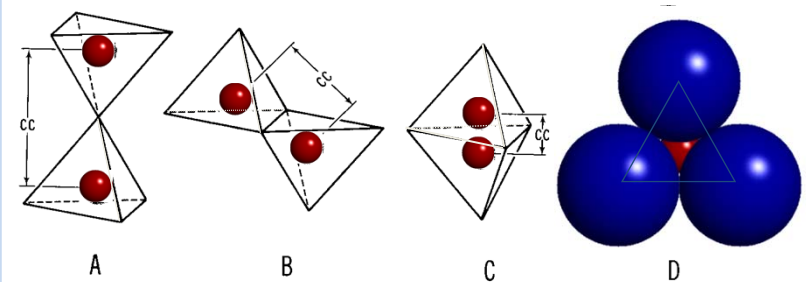
۱۰۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

3rd Rule – Sharing of Polyhedral Elements I

The existence of edges, and particularly of faces, common to two anion polyhedra in a coordinated structure, decreases the stability of ionic structures.

Thus, polyhedrons tend not to share edges (and faces even more so) as this reduces the stability of the structure (see fig. 4.8)



A B C D

Fig 9-18 of Bloss, Crystallography and Crystal Chemistry. © MSA

۱۰۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Tetrahedrons:

- Sharing corners – common
- Sharing edges – very uncommon
- Sharing faces – never found when both tetrahedra are occupied by a cation

Note: the decrease in bond length leads to repulsion & distortion of the polyhedra

(a) (b) (c)

۱۰۵

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Octahedrons:

- Sharing corners – common
- Sharing edges – common (still large enough distance)
- Sharing faces – not that uncommon (possible because cation – cation distance is sufficiently large)

Furthermore, cations in octahedral coordination tend to have a lower charge, Mg, Fe²⁺, than those in tetrahedral coordination (Si, Al). Thus, the repulsive force is less.

(a) (b) (c)

۱۰۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

4th Rule – Sharing of Polyhedral Elements II
 In a crystal containing different cations, those of high valence and small coordination number tend not to share polyhedral elements with one another .

This is because of the repulsive forces)

Si^{4+} in IV coordination is very unlikely to share edges or faces

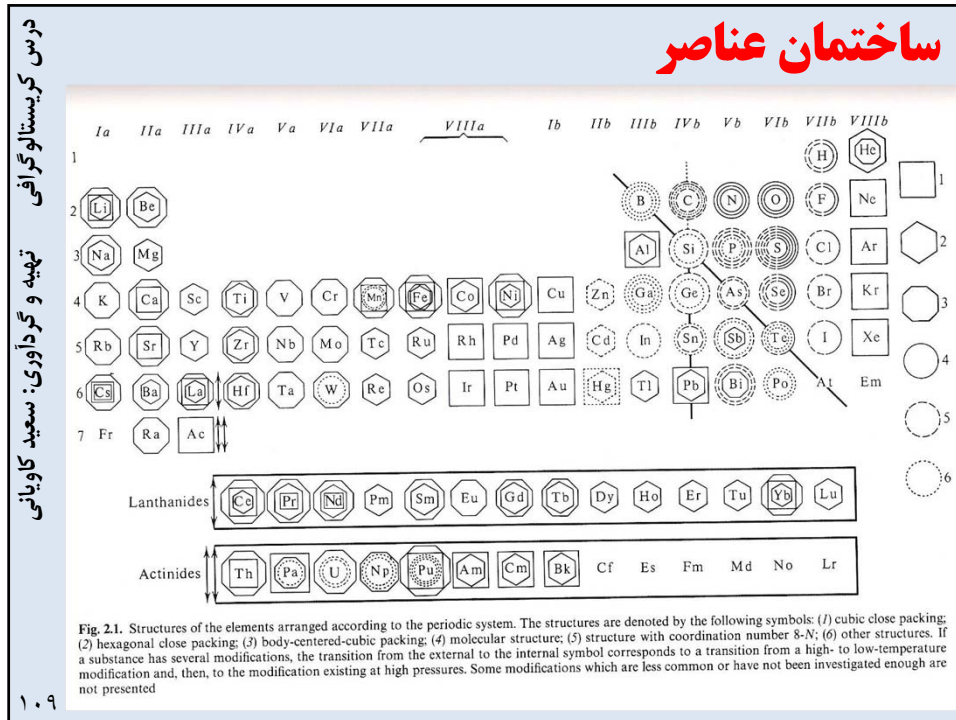
۱۰۷

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

گروه‌های اصلی

- Metals structure
- Diamond structure
- AX types
- AX₂ types
- A₂X types
- A₂X₃ types
- A_mB_nX_z types
- Derivative structures
- Structures containing anionic complex
- silicates

۱۰۸



مس

$\infty \text{Cu}_{[12].c}^3$

This structure is an important example of ccp structures.
It has 4 atoms in 000 position of ccp.
Copper doesn't accept any atoms in its unit cell.

0 0 0

0 0 0 {

- 0 0 0
- $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$
- $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
- $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۱۰

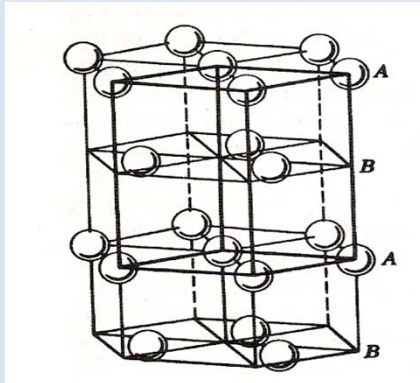
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

منیزیم

$\infty \text{Mg}^{[12].h}$

This structure is an important example of hcp structures.
It has 2 atoms in 000 position of ccp.
Magnesium structure accepts H in his octahedral holes.
The AB AB layers changes to ABAC and shown as dhcp.

$$000 \left\{ \begin{array}{l} 000 \\ 1/3 \ 2/3 \ 1/2 \end{array} \right.$$



۱۱۱

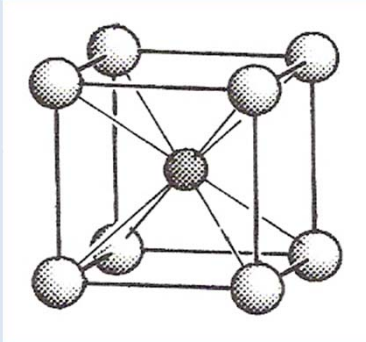
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

آهن

$\infty \text{Fe}^{[8].c}$

This structure is an important example of bcc structures.
It has 2 atoms in 000 position of ccp.
Iron accept atoms in its unit cell.

$$000 \left\{ \begin{array}{l} 000 \\ 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \end{array} \right.$$



Solid solution of C in Fe:
Ferrite – C in α -Fe
Austenite – C in γ -Fe
On further C it change to Cemantite that is orthorhombic
Martensite – finally it change to tetragonal

۱۱۲

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

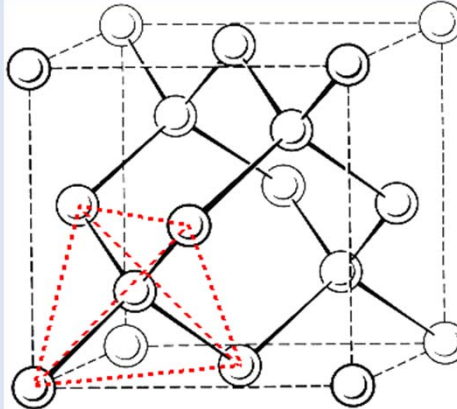
الماس

$\infty C^{[4].c}$

This structure is known as diamond like structure.
It has 8 atoms that 4 atoms are in 000 position of ccp and the rest fill one-half of tetrahedral positions.

$\left. \begin{matrix} 3/4 & 3/4 & 3/4 \\ 1/4 & 1/4 & 3/4 \\ 1/4 & 3/4 & 1/4 \\ 3/4 & 1/4 & 1/4 \end{matrix} \right\} 1/4 & 1/4 & 1/4$

Tetrahedral positions in ccp



۱۱۴

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

گرافیت

$\infty C^{[3].h}$

Both structure is made of C, but difference is in structure.
It has 4 atoms in two layer. First series are in $0 \ 0 \ 1/4$ and another series are in $2/3 \ 1/3 \ 1/4$.
weak van der waals bounding power is between the layers.

۱۱۴

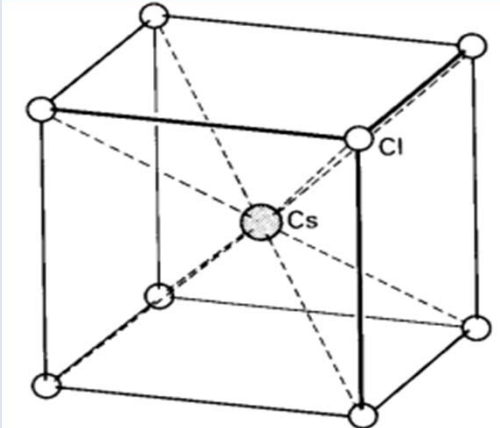
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

CsCl

$\infty \text{Cs}^{[8]}\text{Cl}^{[8]}.c$

This structure is simple cubic.

It has 1 Cs atom in 000 position of sc and 1 atom in $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ position or vice versa.



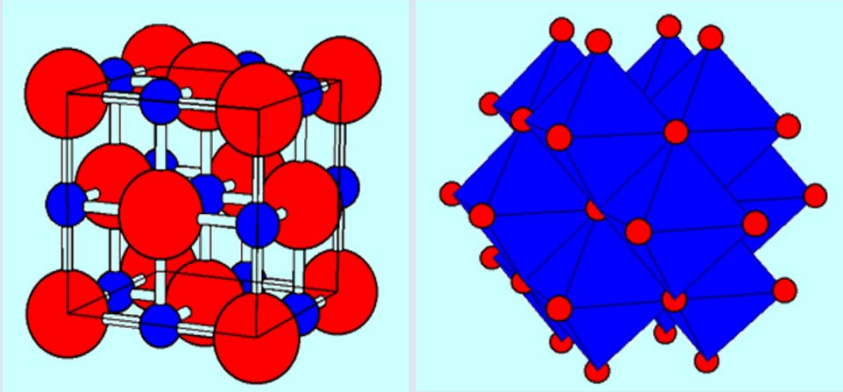
۱۱۵

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

NaCl (rock salt)

$\infty \text{Na}^{[6]}\text{Cl}^{[6]}.c$

It has ccp structure. 4 Cl atoms fill 0 0 0 position of fcc and Na 4 atoms are in octahedral positions or vice versa.



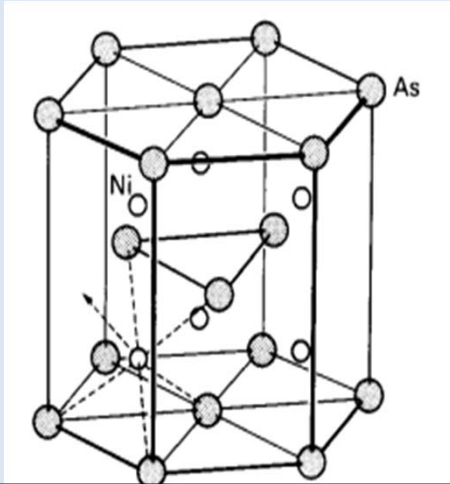
۱۱۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

NiAs

$\infty \text{Ni}^{[6]}\text{As}^{[6].h}$

It has hcp structure. 2 As atoms fill 0 0 0 position of hcp and Ni 2 atoms are in octahedral positions.



۱۱۷

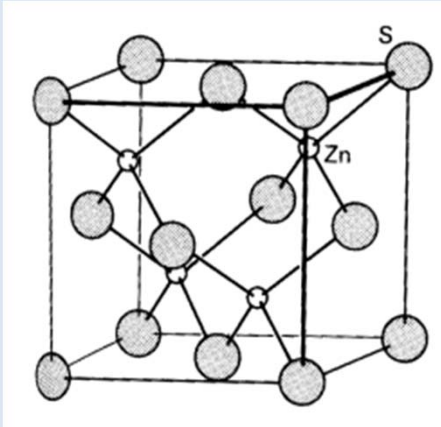
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Sphalerite

$\infty \text{Zn}^{[4]}\text{S}^{[4].c}$

It has ccp structure. 4 S atoms fill 0 0 0 position of fcc and Zn 4 atoms are in one-half of tetrahedral positions.

If it had one type atoms, it would be similar to diamond.



۱۱۸

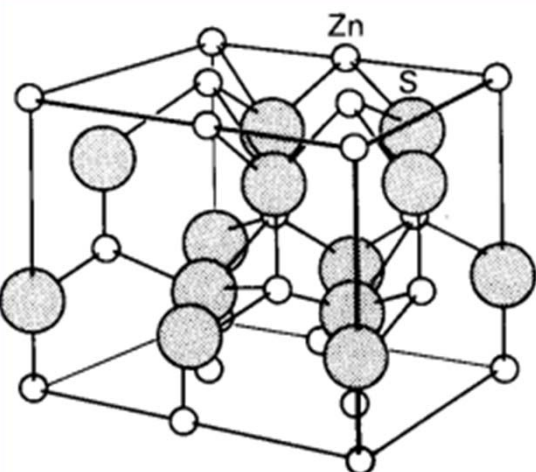
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Wurtzite

$\infty \text{Zn}^{[4]}\text{S}^{[4]}.h$

It has hexagonal closest packing structure.

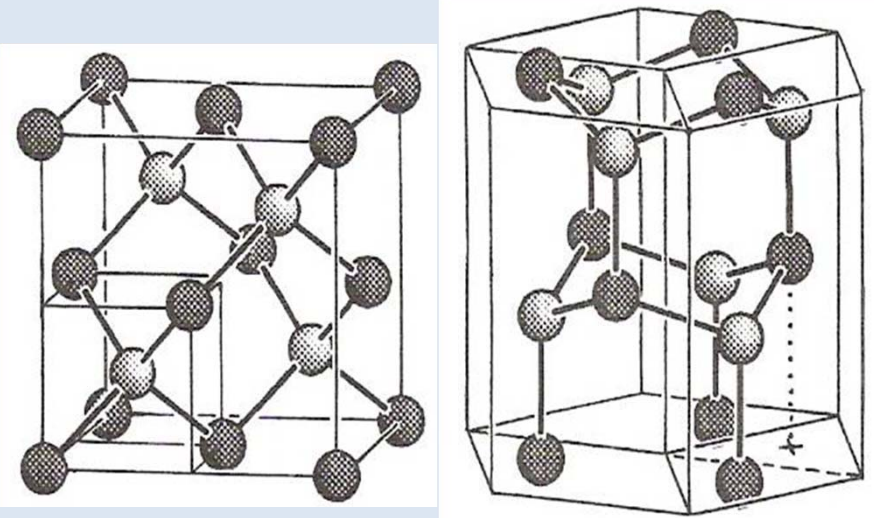
4 S atoms fill 0 0 0 position of hcp and Zn 4 atoms are in one-half of tetrahedral positions.



۱۱۹

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

مقایسه wurtzite & sphalerite



۱۲۰

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Fluorite

$\infty \text{Ca}^{[8]}\text{F}_2^{[4].c}$

It has ccp structure. 4 Ca atoms fill 0 0 0 position of fcc and F 8 atoms are in tetrahedral positions.

۱۲۱

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Antifluorite (Na_2O)

$\infty \text{Na}_2^{[4]}\text{O}^{[8].c}$

It has ccp structure. 4 O atoms fill 0 0 0 position of fcc and Na 8 atoms are in tetrahedral positions.

Li_2O , Li_2S and alkali metals oxides, selenides and tellurides.

fluorite

۱۲۲

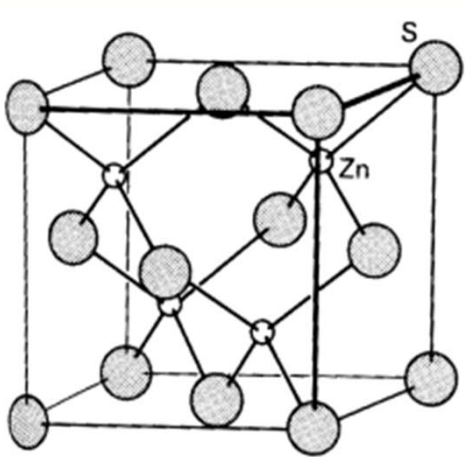
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Sphalerite

$\infty \text{Zn}^{[4]\text{S}^{[4]}\text{c}}$

It has ccp structure. 4 S atoms fill 0 0 0 position of fcc and Zn 4 atoms are in one-half of tetrahedral positions.

If it had one type atoms, it would be similar to diamond.



۱۲۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

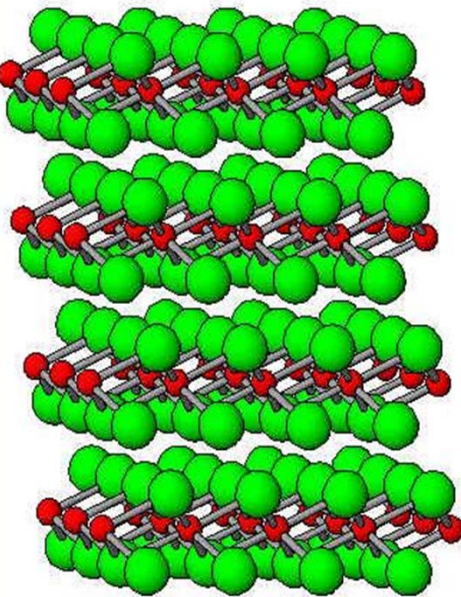
CdCl₂

$\infty \text{Cd}^{[6]\text{Cl}_2^{[3]}\text{.R}}$

It has rhombohedral or fcc structure.

Cl atoms fill 0 0 0 position of rhombohedr and Cd atoms are in one-half of octahedral positions.

But in real structure a row of octahedral sites is empty and next row is full, then it form a sandwich of AcB AcB or XmX XmX.



۱۲۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

CdI₂

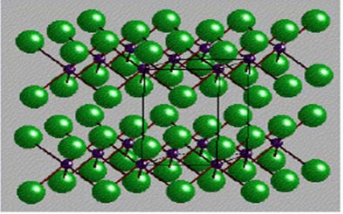
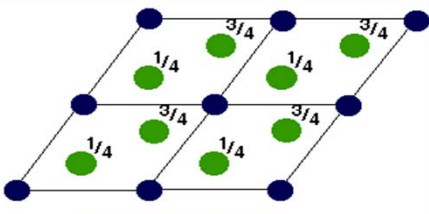
$\infty^3 \text{Cd}^{[6]}\text{I}_2^{[3]}.R$


It has rhombohedral or fcc structure.

Cl atoms fill 0 0 0 position of rhombohedr and I atoms are in one-half of octahedral positions.

But in real structure a row of octahedral sites is empty and next row is full, then it form a sandwich of AcB AcB or XmX XmX.

The difference lies in this that CdI₂ is more ionic than CdCl₂.



Comparison
CdI₂ vs NiAs

۱۲۵

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

TiO₂

$\infty^3 \text{Ti}^{[6]}\text{O}_2^{[3]}.t$

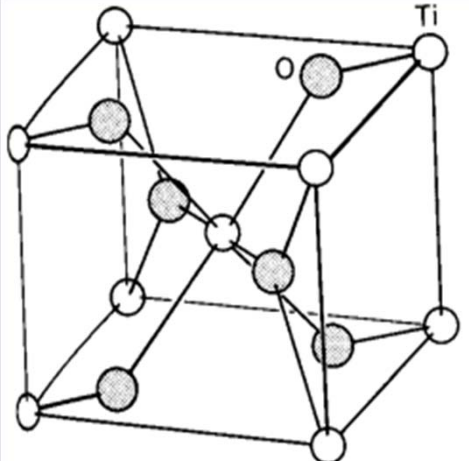
It's in tetragonal system.

Ti atoms fill 0 0 0 and 1/2 1/2 positions of bct and 6 O atoms have octahedral coordination around each Ti atoms.

There are three polymorphous of TiO₂:

In rutile coordination octahedrons share two edges and is more stable.

Brookite shares 3 and anatase shares 4 edges.



۱۲۶

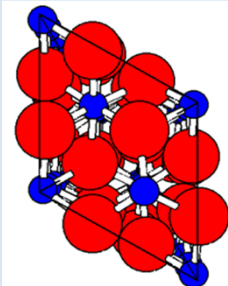
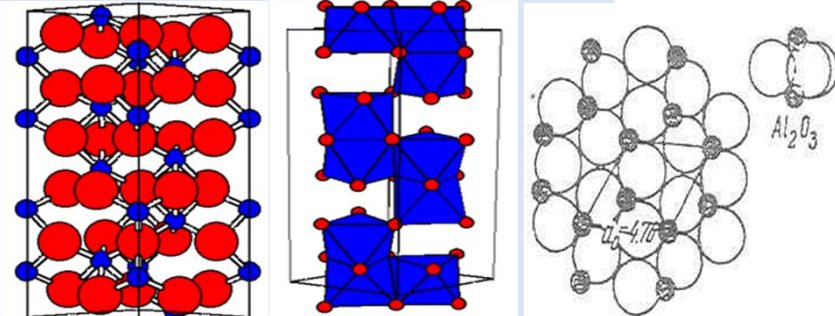
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Alumina

$\infty \text{Al}_2^{[6]}\text{O}_3^{[4]}.R$

It's in rhombohedral system. O atoms fill 0 0 0 positions of hcp and Al atoms fill 2/3 of octahedral positions. In fact 3 O atoms make a plane that 2 Al atoms places on two side of the plane. A3 axis is perpendicular to this plane.

There're three polymorphous of Al_2O_3 (α , β and γ). α is more stable than the other in the nature. β is hexagonal and γ is cubic .

Al_2O_3

$T_m = 470$

۱۲۷

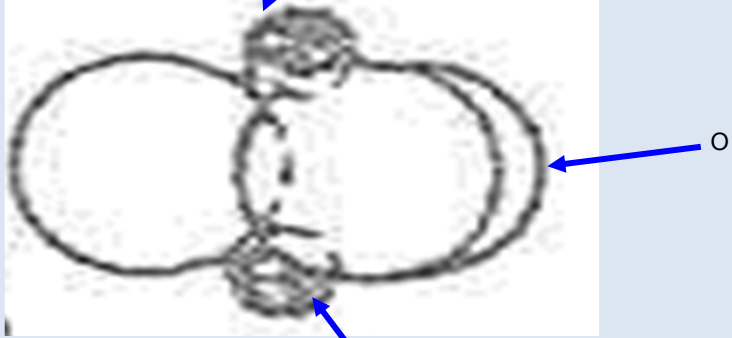
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Ilmenite

$\infty \text{Fe}^{[3]}\text{Ti}^{[3]}\text{O}_3^{[4]}.h$

It's in rhombohedral system.

Each Al atoms is changed with Fe and Ti alternatively.



Ti

O

Fe

۱۲۸

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

CaTiO₃ (perovskite)

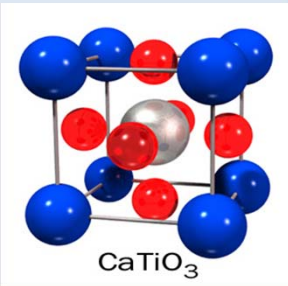
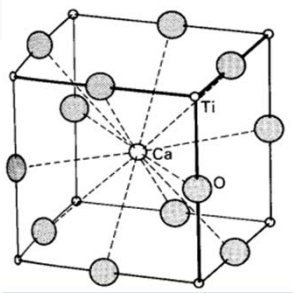
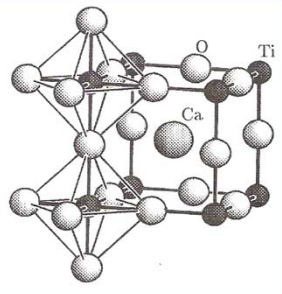
$\infty \text{Ca}^{[12]} \text{Ti}^{[6]} \text{O}_2^{[6]}.c$

It's important example of perovskite group.

It has two type structure in simple cubic lattice as follow:

A type: Ti at corners, Ca at body and O at mid point of edges

B type: Ca at corners, Ti at body and O at face centers

CaTiO₃

۱۲۹

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

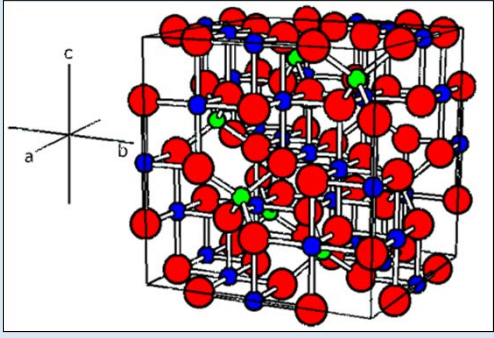
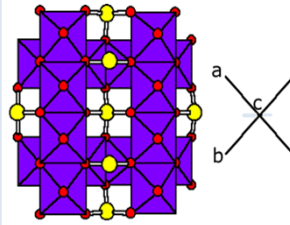
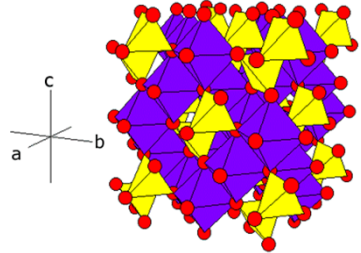
MgAl₂O₄ (spinel)

$\infty \text{Mg}^{[4]} \text{Al}_2^{[6]} \text{O}_4^{[8]}.c$

It's important example of spinel group. This structure is known by distorted ccp.

O atoms occupy framework of fcc, one-half of octahedral holes fill with Al and Mg atoms fill 1/8 tetrahedral holes.

For stability two lattice share to each other.

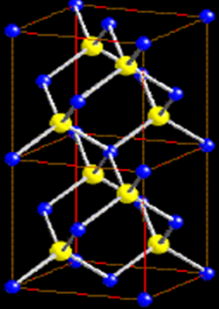
۱۳۰

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Derivative structures

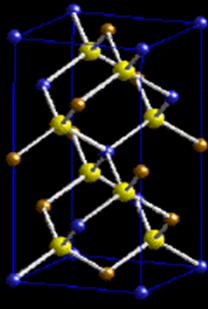
- Structures that symmetry of space group is sub-division or similar to original lattice.
- In substitutional type some atoms occupy original atoms sites. In chalcopyrite Cu and Fe each occupy one-half of the Zn sites.

Spaherite



Face-centered Isometric

Chalcopyrite



Body-centered tetragonal

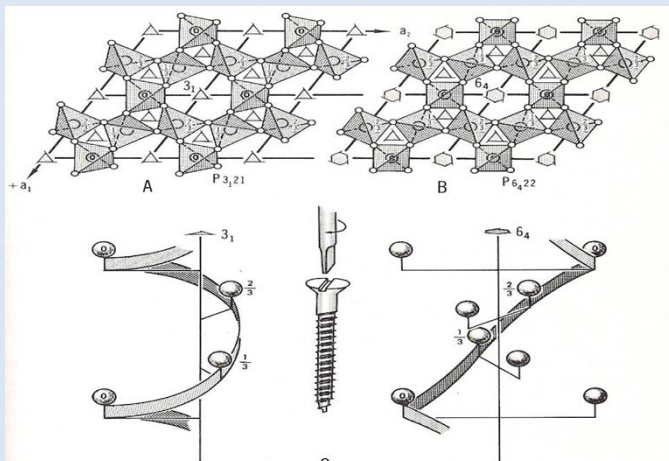
Copper
Iron
Sulfur
Zinc

۱۳۱

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Derivative structures

- Another type can be seen when a little change in atoms sites occur. This change have effect on symmetry. The best example is α and β -quartz.



۱۳۲

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Structures containing anionic complex

- When cations with big charges surrounded by low strength anions, powerful bounding groups form.
- At this structures bounding force of anion groups is powerful than the other and are anisodesmic with them.
- Bulk charge of structure is unique and crystal overall is isodesmic.
- Crystals like carbonates, nitrates, borates and sulfates have this structure.

۱۳۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Calcite structure

- Bounding force inside the complex is more than between complex and other ions. Electrostatic valency (e.v.) in calcite between C and O in anionic complex is $1/3 * 4 = 1\frac{1}{3}$, then each O have $2/3$ exceed charge.

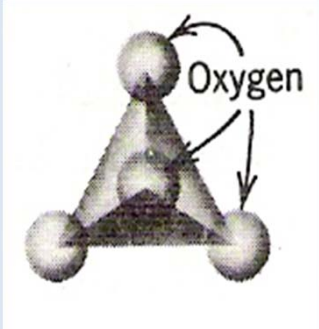
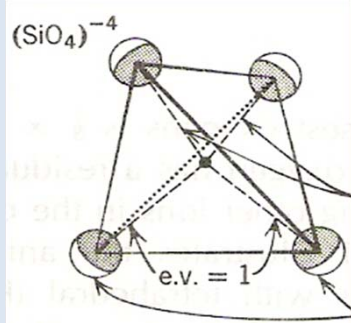
(a)

۱۳۴

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Silicates

- Contain Si and Al and are the most abundant minerals in the earth. is
- SiO_4 is framework of silicates and has compact structure.
- Al can substitute in si sites to form AlO_4 tetrahedr, that is a little bigger.
- 7 principal group of silicates are discussed later.

۱۳۵

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

silicates

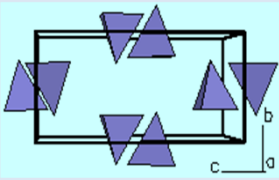
Class	Arrangement of SiO_4 tetrahedra (central Si^{4+} not shown)	Unit composition	Mineral example	Diagram	Formula	Example
Nesosilicates		$(\text{SiO}_4)^{-4}$	Olivine, $(\text{Mg, Fe})_2\text{SiO}_4$		$(\text{Si}_2\text{O}_7)^{-6}$	Amphibole e.g. Anthophyllite, $\text{M}_7\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$
Sorosilicates		$(\text{Si}_2\text{O}_7)^{-6}$	Hemimorphite, $\text{Zn}_4\text{Si}_2\text{O}_7(\text{OH})\cdot\text{H}_2\text{O}$			
Cyclosilicates		$(\text{Si}_6\text{O}_{18})^{-12}$	Beryl, $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$		$(\text{Si}_2\text{O}_5)^{-2}$	Mica e.g. Phlogopite, $\text{KMg}_3(\text{AlSi}_3\text{O}_{10})(\text{OH})_2$
Inosilicates (single chain)		$(\text{SiO}_3)^{-2}$	Pyroxene e.g. Enstatite, MgSiO_3			
Tectosilicates		$(\text{SiO}_2)^0$	High cristobalite, SiO_2			

۱۳۶

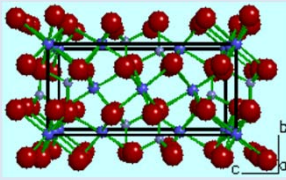
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Nesosilicates

- We can see each is isolated from the other. Because the structure possesses isolated silicate tetrahedra, olivine is called a *nesosilicate* or island silicate.
- High atomic packing and hardness, lacking of cleavage, equidimension crystals are specification of this group.



The crystal structure of olivine ((Fe, Mg)₂SiO₄).

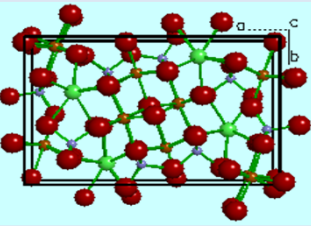


۱۳۷

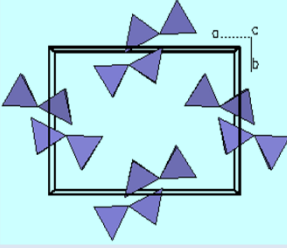
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

sorosilicates

- we can see each tetrahedra is linked at a corner to form pairs. Because the structure possesses double island silicate tetrahedra, is called *sorosilicates*.
- More than 70 minerals there aren't in this group and most of them are rare.
- Epidote group is the most important mineral of this group.



The crystal structure of Ilvaite (CaFe₃Si₂O₈(OH)).



۱۳۸

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Chain silicates

- **Inosilicates** are two groups single and double chain.
- They are similar to each other in more things like:
- Crystallize in orthorhombic and monoclinic system.
- The length of c axis are similar (about 5Å)
- Similar cations exist in both.
- They have solid solution series with Fe, Ca and Mg end members.

۱۳۹

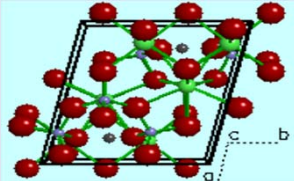
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Inosilicates

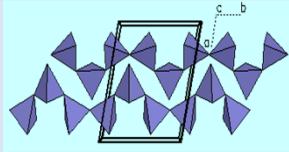
we can see each tetrahedra is linked to two others at the corners to form single chains.

Because the structure possesses parallel single chains of silicate tetrahedra, pectolite is called an *inosilicate (single chain)*.

This type of structure is represented by the *pyroxenes*.



The crystal structure of Pectolite $(Ca_2NaH(SiO_3)_3)$.

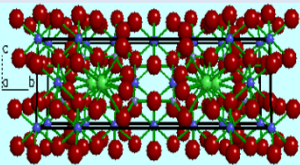


۱۴۰

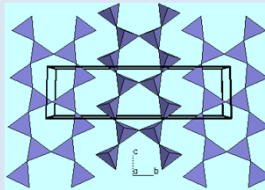
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Inosilicates

- Each tetrahedra is linked at the corners to form double chains.
- Because the structure possesses parallel double chains of silicate tetrahedra, tremolite is called an *inosilicate (double chain)*.
- This type of structure is represented by the *amphiboles*.



The crystal structure of Tremolite
($\text{Ca}_2\text{Mg}_5\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$)

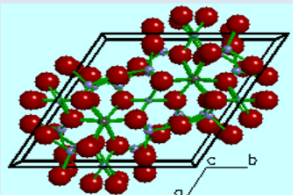


۱۴۱

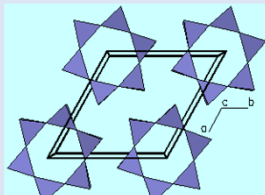
درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Cyclosilicate

- Tetrahedras are linked at the corners to form rings.
- Because the structure possesses isolated rings of silicate tetrahedra, they called *cyclosilicates*.
- The best example for this group is Beryl.



The crystal structure of Beryl ($\text{Be}_3\text{Al}_2(\text{Si}_6\text{O}_{18})$).

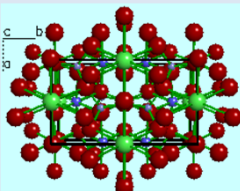


۱۴۲

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

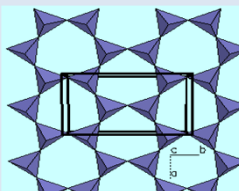
Phyllosilicates

- Each tetrahedra is linked at three corners to form a sheet.
- Because the structure possesses parallel sheets of silicate tetrahedra, biotite is called an **phyllosilicate**.
- This type of structure is represented by the *micas*.
- They are platy, have flexibility and low density.
- Their classification is based on chemical property and geometry of octahedral layers.



۱۴۴

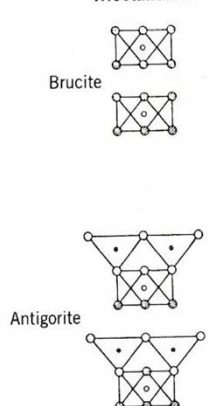
The crystal structure of Biotite
(K(Mg, Fe)₃(AlSi₃O₁₀)(OH)₂)



درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Phyllosilicates

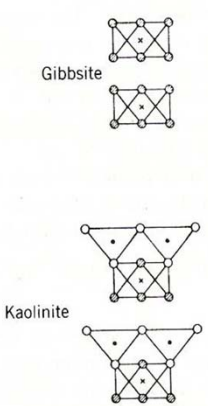
Trioctahedral



Brucite

Antigorite

Dioctahedral



Gibbsite

Kaolinite

○ = Oxygen
 ● = Hydroxyl
 • = Silicon
 × = Aluminum
 ◊ = Magnesium

Legend: o = octahedral, t = tetrahedral

۱۴۴

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Trioctahedral

Talc

Dioctahedral

Pyrophyllite

Phlogopite

Muscovite

Interlayer cation

o = octahedral
t = tetrahedral

○ = Oxygen
● = Hydroxyl
• = Silicon
x = Aluminum
◊ = Magnesium

۱۴۵

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Tectosilicate

- Every tetrahedra is linked at each corner to form a framework.
- Because the structure possesses a three-dimensional framework of silicate tetrahedra, quartz is called an **framework silicate**.
- 3/4 of crust minerals are tectosilicates.
- This group minerals are very stable and have strong bounds.
- SiO₂ and its polymorphous and feldspars are important example.

The crystal structure of Quartz (SiO₂).

۱۴۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Super lattices



- Some crystals have two order in different condition.
- PbZrTiO_3 (PZT)-a periodic tilt angle of BO_3 octahedr is seen, on heating the tilt remove.
- AuCu_3 -at low T Au occupy corners and Cu centre of faces, on heating atoms keep accidental distribution.
- β -Brass
- etc...


۱۴۷

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Crystals as Building Blocks

- Some engineering applications require single crystals:
 - diamond single crystals for abrasives
 - turbine blades
- Properties of crystalline materials often related to crystal structure.
 - Ex: Quartz fractures more easily along some crystal planes than others.

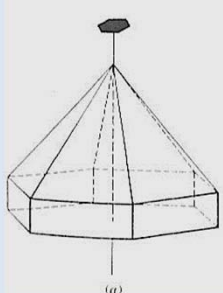





۱۴۸

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی


انواع تقارن



(a)

Rotation

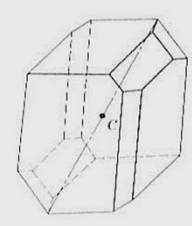
دورانی



(b)

Reflection

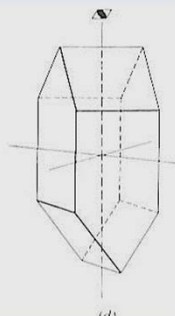
انعکاسی



(c)

Center of Symmetry

مرکزی



(d)

Rotation with Inversion

دورانی - معکوس

۱۴۹

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تقارن : انعکاسی

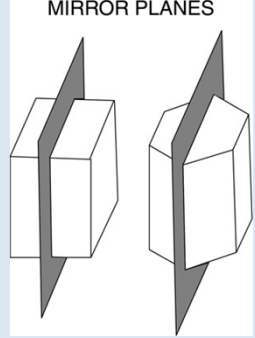
- **Reflection (m)**- produced by a mirror plane that passes through a crystal structure so the pattern on one side is a mirror image of the pattern on the other. (symmetry over a plane)

MIRROR PLANES

– How many mirror planes do these crystals have?

Both have 3!

So notation is 3m

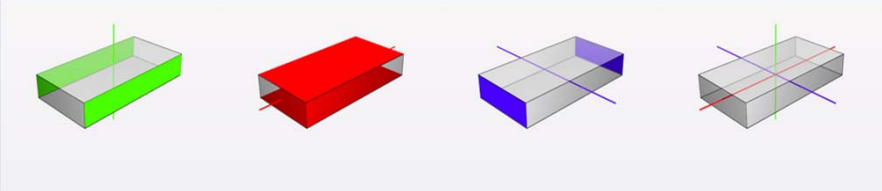


۱۵۰

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تقارن : دورانی

- **Rotation (A)**- rotational symmetry involves repeating a motif by a set of uniform rotations around an axis. (symmetry about an axis)
 - Repeating the pattern every 120° of rotation means 3-fold symmetry.
 - Every 60° = 6-fold symmetry
 - Denoted as #A_x where x=x fold rotational symmetry

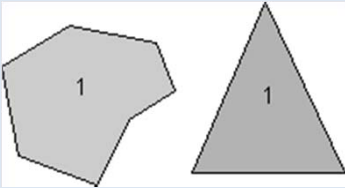


Orthorhombic- 3 axes of 2-fold symmetry, so notation is 3A₂

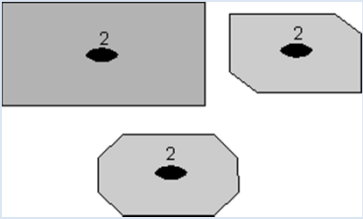
۱۵۱

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

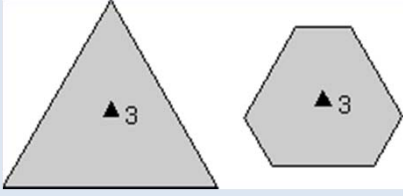
تقارن : دورانی



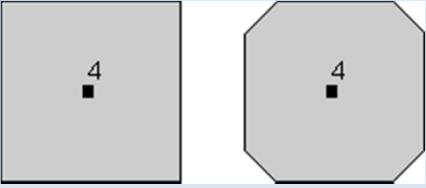
1



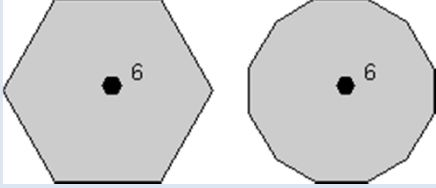
2



3



4



6

www.tulane.edu/~sanelson

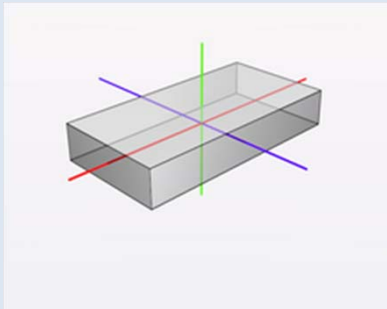
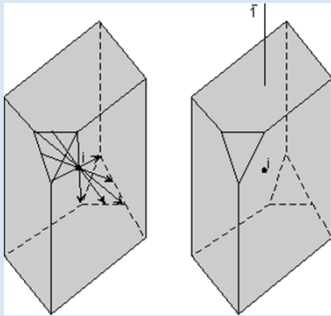
۱۵۲

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تقارن : معکوس

- Inversion (i)- also known as center symmetry. Any line drawn through the origin will find identical features equidistant from the origin on the opposite side.

Both of these crystals have center symmetry (i)

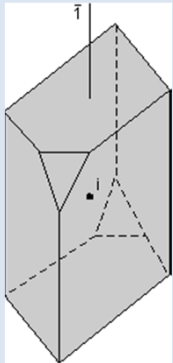
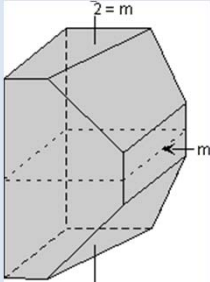
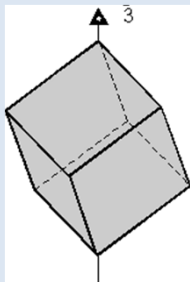
۱۵۳

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تقارن : دورانی-معکوس

- Rotoinversion (\bar{A}_x) - involves a rotation and inversion to repeat a pattern
 - Denoted as $\# \bar{A}_x$ where $x=x$ fold rotational symmetry
 - Note $\bar{A}_1 = i$ and $\bar{A}_2 = m$

i

۱۵۴

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تقارن

- The 32 crystal classes represent the 32 possible combinations of symmetry operations.
- Each crystal class will have crystal faces that uniquely define the symmetry of the class.
- These faces, or groups of faces are called crystal forms.

۱۵۵

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تقارن

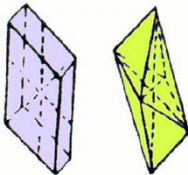
- Note that the 32 crystal classes are divided into 6 crystal systems.
- The Triclinic System has only 1-fold or 1-fold rotoinversion axes.
- The Monoclinic System has only mirror plane(s) or a single 2-fold axis.
- The Orthorhombic System has only two fold axes or a 2-fold axis and 2 mirror planes.
- The Tetragonal System has either a single 4-fold or 4-fold rotoinversion axis.
- The Hexagonal System has no 4-fold axes, but has at least 1 6-fold or 3-fold axis.
- The Isometric System has either 4 3-fold axes or 4 3-fold rotoinversion axes.

۱۵۶

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

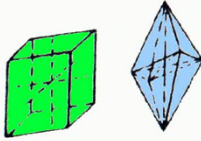
تقارن

TRICLINIC



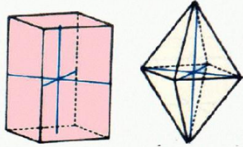
Triclinic systems have three axes all inclined toward each other.

MONOCLINIC



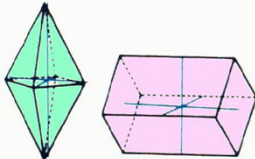
Monoclinic systems have two axes at right angles and a third axis at a right angle to one of these, but inclined to the other.

TETRAGONAL



Tetragonal systems have two equal axes and a third of different length, all at right angles.

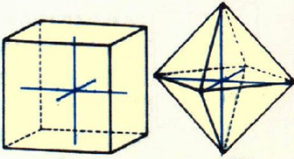
ORTHORHOMBIC



Orthorhombic systems have three unequal axes all at right angles.

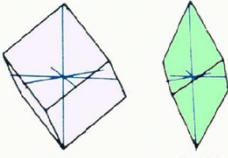
CRYSTAL SYSTEMS

ISOMETRIC



Isometric systems have three equal axes all at right angles to each other.

HEXAGONAL



Hexagonal systems have three equal axes in the same plane, intersecting at angles of 60 degrees, and a fourth axis at right angles to all of these.

۱۵۷

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

چگونگی نشان دادن تقارن‌ها با استفاده از علائم

Symmetry Operation	Symmetry Symbol	Hermann-Mauguin Symbol
Mirror	m	m
Rotation Axis	A_1, A_2, A_3, A_4, A_6	1, 2, 3, 4, 6
		- - - -
Rotoinversion Axis	$\bar{A}_1=i, \bar{A}_2, \bar{A}_3, \bar{A}_4, \bar{A}_6$	1, 2, 3, 4, 6

۱۵۸

الگوهای موتیف در تقارن‌ها

Rotation

(a)

Reflection

(b)

Center of Symmetry

(c)

Rotation with Inversion

(d)

۱۵۹

محورهای دوران

- As an external symmetry element, rotation increments (n) range from 1 to ∞
- When considering the limits of translation, rotation increments are limited to 1, 2, 3, 4, and 6-fold

۱۶۰

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

تقارن دورانی - معکوس

Rotation with Inversion (Rotoinversion)

Equivalent to other symmetry operations

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Equivalent to Center of Symmetry

۱۶۱

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

محورهای چندگانه تقارن دورانی

- Axes at 90° (except 3-fold axes in cubic symmetry at 54°44')
- Axes intersect at point
- Possible symmetry combinations:
422, 622, 222, 32, 23, 432

(a)

(b) 422

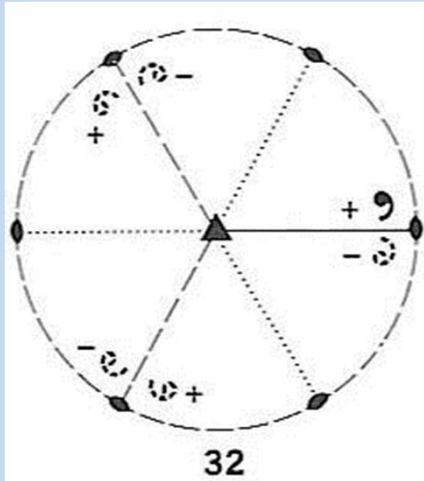
(c) 622

(d)

(e)

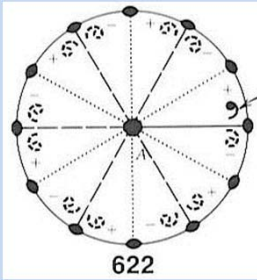
۱۶۲

محورهای چندگانه تقارن دورانی



32

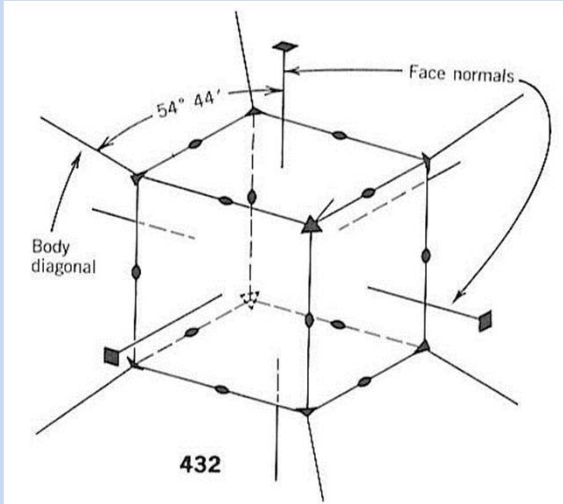
- motif projections do not require a second set of 2-fold axes



622

۱۶۴

محورهای چندگانه تقارن دورانی در مکعب



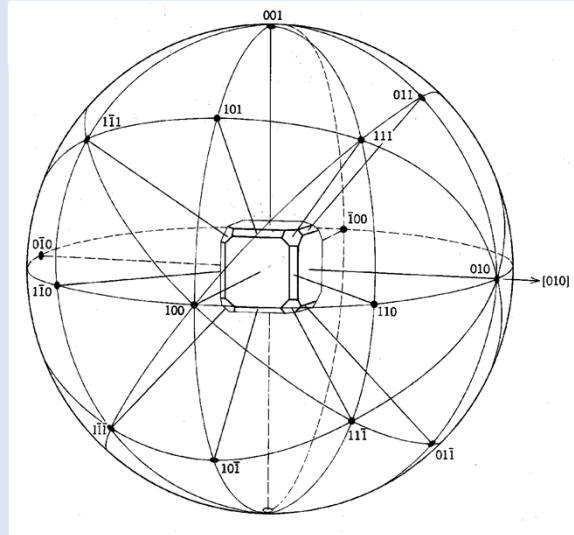
432

- 432 Point Group

۱۶۴

تصویر استریوگرافیک

برای نشان دادن فضای سه بعدی به صورت دو بعدی



A cubic xl like
our model

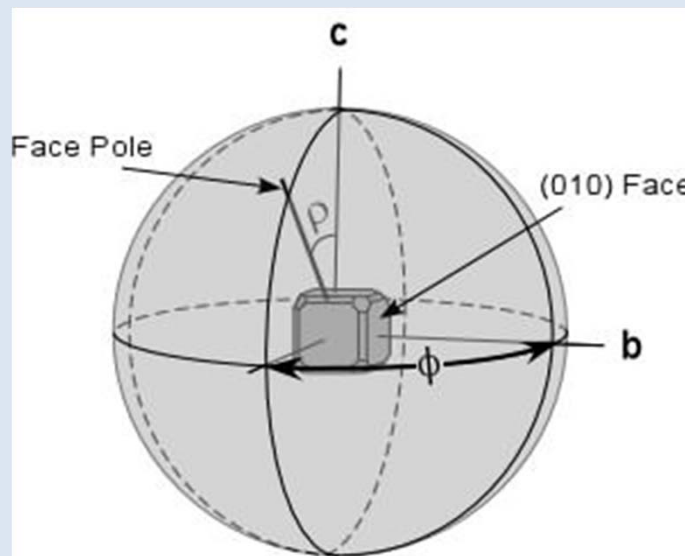
Note poles
(normals to xl
face planes)

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۶۵

تصویر استریوگرافیک

برای نشان دادن فضای سه بعدی به صورت دو بعدی



درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

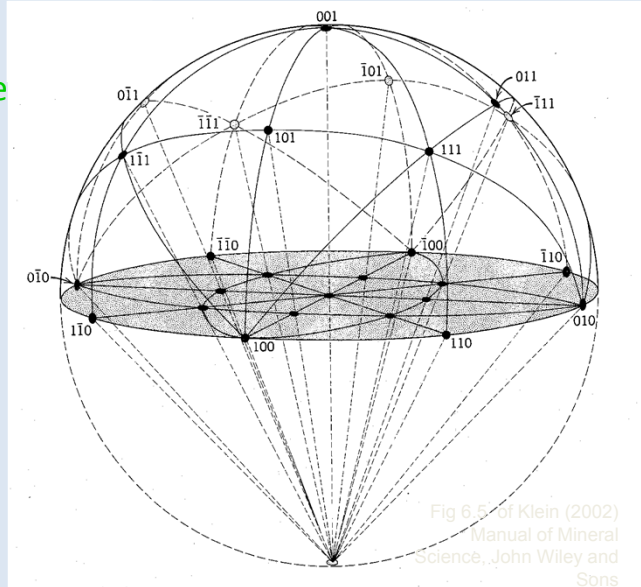
۱۶۶

تصویر استریوگرافیک

Gray plane =
Equatorial Plane

Want to use it
as our 2-D
representation
and project our
spherical poles
back to it

This is a 2-D
stereographic
projection



درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۶۷

تصویر استریوگرافیک

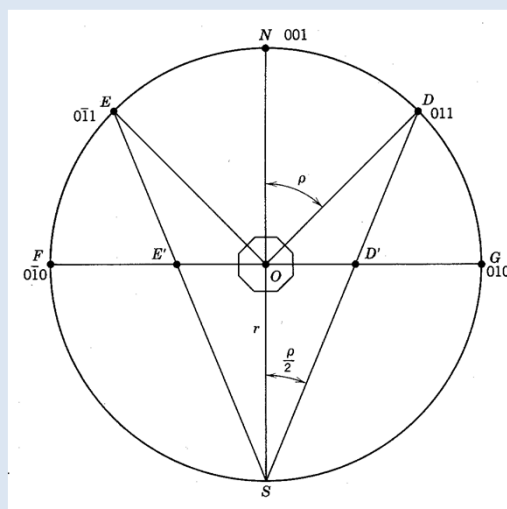
D and E are spherical

D' and E' are
stereographic

Distance $GD' = f(\rho)$

as $\rho \rightarrow 90^\circ$ $D' \rightarrow G$

as $\rho \rightarrow 0$ $D' \rightarrow O$



درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

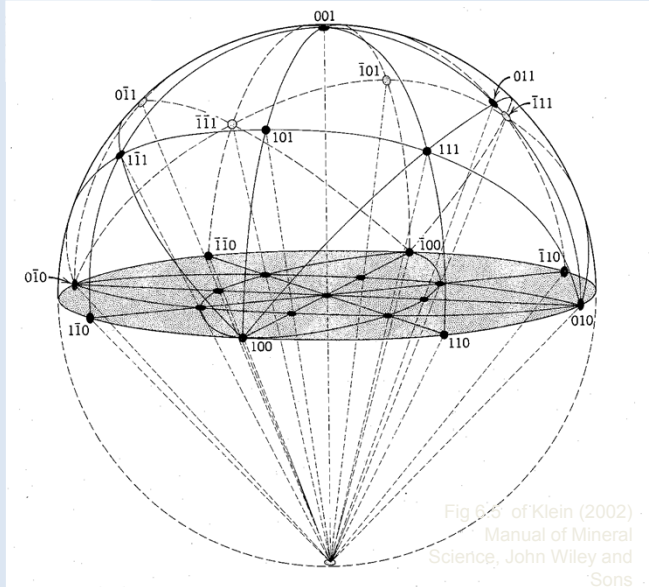
۱۶۸

تصویر استریوگرافیک

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

We can thus use the angles and calculate the 2-D distances from the center to find the stereographic poles directly

Or we can use special graph paper and avoid the calculation



۱۶۹

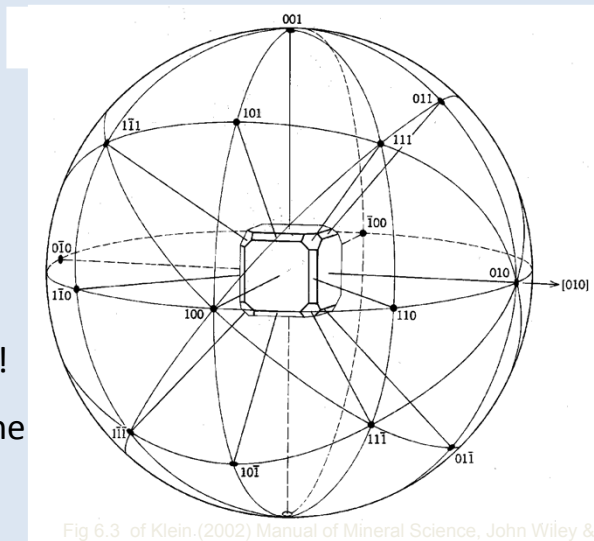
تصویر استریوگرافیک و تعیین صفحات هم منطقه

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ (100) (111)
 (011) $(\bar{1}00)$ all coplanar
 (= zone)

Thus all poles in a zone are on the same great circle!!

How do we find the zone axis??



۱۷۰

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

مدارها و نصف النهارها

دو زاویه مهم عبارتند از: ρ و ϕ

ϕ Equator $\phi = 0^\circ$

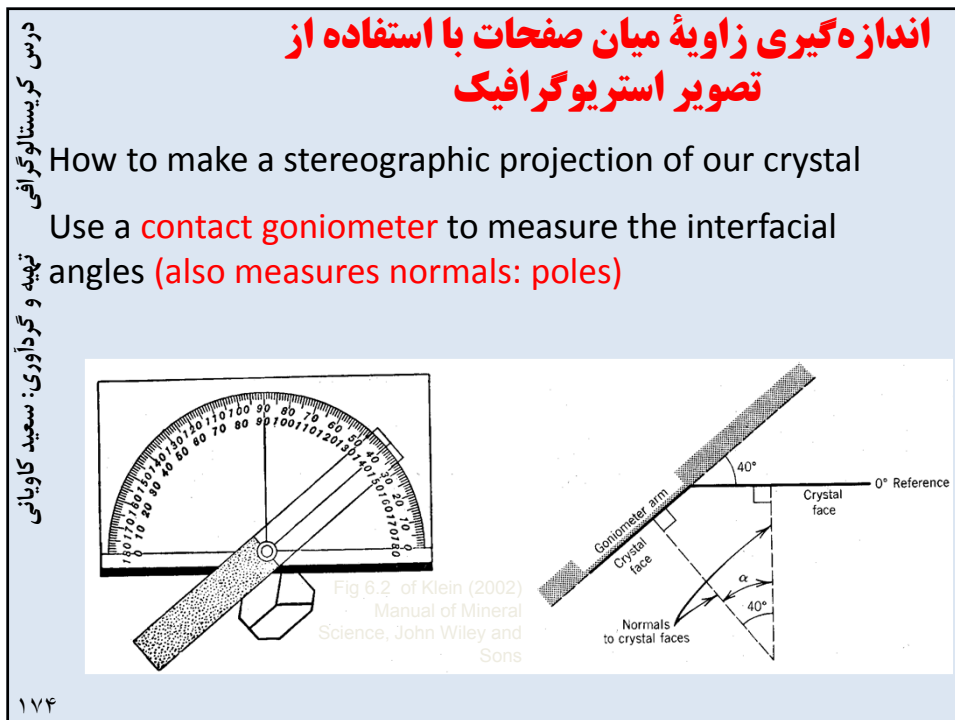
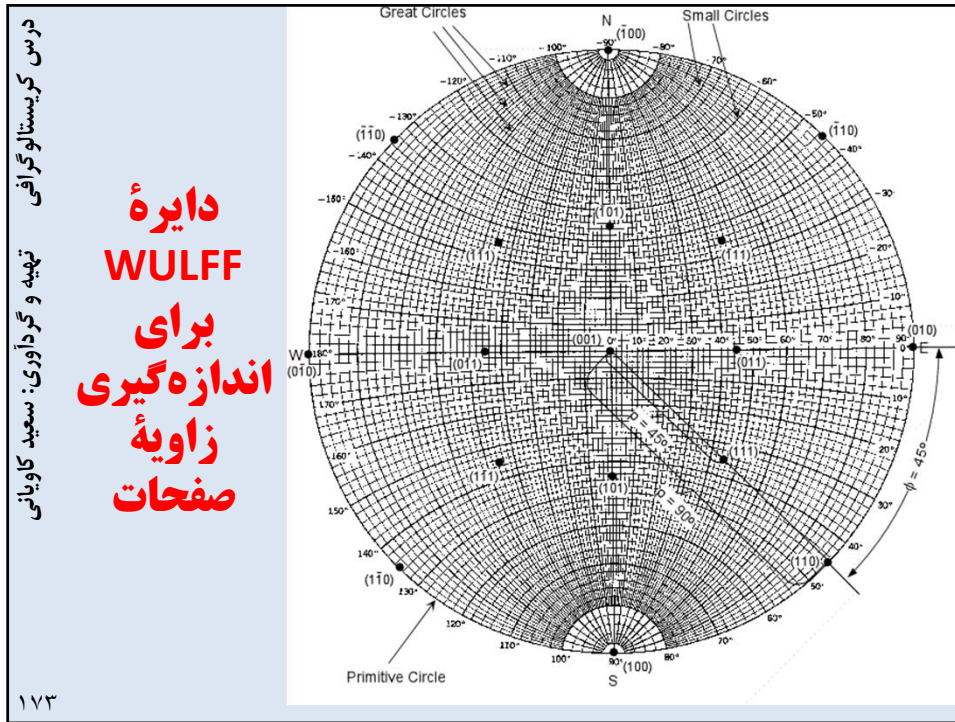
۱۲۱

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

دایره WULFF برای اندازه گیری زاویه صفحات

Combines great circles and small circles in 2° increments

۱۲۲



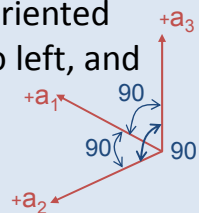
درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Plot Cardboard Model

Isometric System (p. 93)

Crystallographic Axes

“The crystal forms of classes of the isometric system are referred to three axes of equal length that make right angles with each other. Because the axes are identical, they are interchangeable, and all are designated by the letter a. When properly oriented, one axis, a_1 , is horizontal and oriented front to back, a_2 is horizontal and right to left, and a_3 is vertical.”



۱۷۵

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Plot (100) (001) (010) (110) (101) (011):

- = top half
- o = bottom half

How plot (111) ?

- a) Plot (110) & then plot (111) between (110) and (001)
 $(110) \angle (111) = 36.5^\circ$
 - go in from primitive
- b) No measure technique:
 (111) must lie between (110) & (001) (zone add rule)
 also between (100) & (011)
 thus intersection of great circles \rightarrow (111)

۱۷۶

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

The finished product

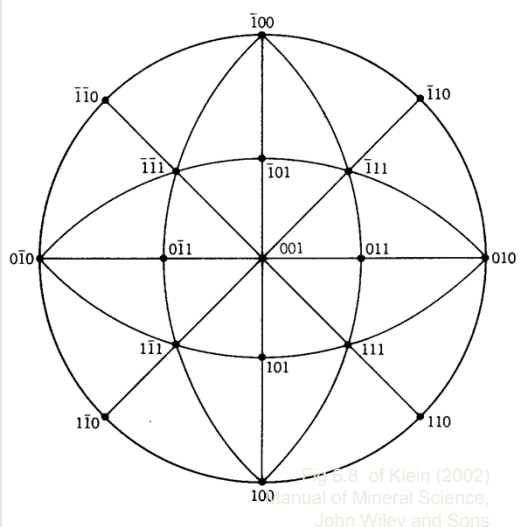
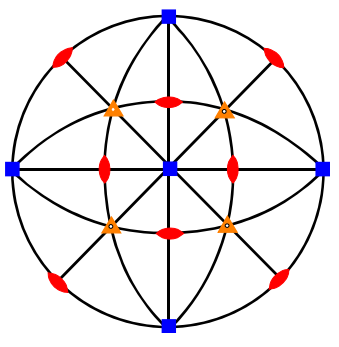



Fig. 5.8 of Klein (2002) Manual of Mineral Science, John Wiley and Sons

face poles and principal zones

symmetry elements

۱۷۷

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Once finished can determine the angles between any 2 faces w/o measuring.

What is $(100) \angle (111)$?

(54.5°)

What is $(111) \angle (\bar{1}\bar{1}\bar{1})$?

(70°)

۱۷۸

سیستم مکعبی

۱۷۹

ماهیت اشعه X

اشعه X تشعشع پر انرژی و بسیار نافذ الکترومغناطیس است.

$E = hc/\lambda$ $\lambda_{(X\text{-rays})} = 0.02\text{-}100\text{\AA} (\sim 1)$
 $\lambda_{(\text{visible light})} = 4000\text{-}7200\text{\AA}$

۱۸۰

تولید اشعه X

W Cathode (-) Cu Anode (+)

electrons

X-rays

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۸۱

تیوب (لامپ) تولید اشعه X

X-ray Vacuum Tube

Cathode (W) – electron generator

Anode (Mo, Cu, Fe, Co, Cr) – electron target, X-ray generator

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۸۲

انواع طیف‌های اشعه X:

- طیف پیوسته
- طیف مشخصه

- Continuous spectra (white radiation) – range of X-ray wavelengths generated by the absorption (stopping) of electrons by the target
- Characteristic X-rays – particular wavelengths created by dislodgement of inner shell electrons of the target metal; x-rays generated when outer shell electrons collapse into vacant inner shells
- Kα peaks created by collapse from L to K shell;
- Kβ peaks created by collapse from M to K shell

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۸۴

پراش (تفرق) اشعه X از روی صفحات کریستالها

• Incoming X-rays diffract from crystal planes.

Reflections must be in phase for a detectable signal.

extra distance traveled by wave "2"

spacing between planes d

Measurement of critical angle, θ_c , allows computation of planar spacing, d .

For Cubic Crystals:

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

h, k, l are Miller Indices

X-ray intensity (from detector)

$$d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta_c}$$

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۸۴

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

پراش (تفرق) اشعه X از روی صفحات کریستالها

در صورتی که پرتوهای پراش یافته هم فاز باشند قابل دریافت هستند.

- Two diffracted beams both three properties:
 - Amplitude: a measure of the strength of the beam and is proportional to the intensity of the recorded spot;
 - Phase: interference, positive or negative, with other beams;
 - Wavelength: set by the x-ray source;
- We need to know all three properties to determine the position of the atoms giving rise to the diffracted beams.

۱۸۵

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

پراش (تفرق) اشعه X از روی صفحات کریستالها

قانون براگ

$$n\lambda = 2d \sin\theta$$

این قانون بیان می کند که فقط صفحاتی پراش می دهند که فاصله آنها ضریب صحیحی از طول موج اشعه X باشد.

۱۸۶

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

روش‌های کریستالوگرافی از طریق دریافت و ثبت پراش (تفرق) اشعه X از روی صفحات کریستال‌ها

روش‌های مختلفی وجود دارد که مهمترین آن‌ها عبارتند از:

- لاوه
- کریستال چرخنده
- روش پودر

روش	λ	θ
لاوه	متغیر	ثابت
کریستال چرخنده	ثابت	متغیر
پودر	ثابت	متغیر

۱۸۷

درس کریستالوگرافی تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

روش لاهه

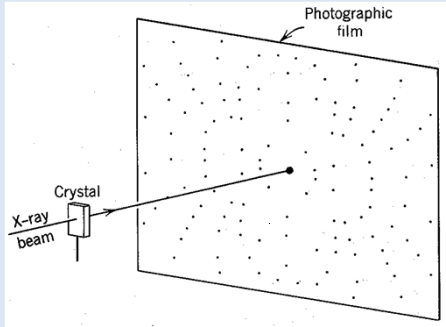
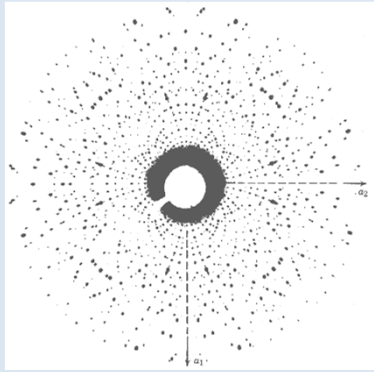



Fig. 7.8. Obtaining a Laue photograph with a stationary

۱۸۸

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Fig. 3-5 (a) Transmission and (b) back-reflection Laue methods.

Fig. 3-6 (a) Transmission and (b) back-reflection Laue patterns of an aluminum crystal (cubic). Tungsten radiation, 30 kV, 19 mA.

روش لاهه
(تک کریستال)

۱۸۹

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

Fig. 3-7 Location of Laue spots (a) on ellipses in transmission method and (b) on hyperbolas in back-reflection method. (C = crystal, F = film, Z.A. = zone axis.)

روش لاهه
(تک کریستال)

۱۹۰

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

روش کریستال چرخنده

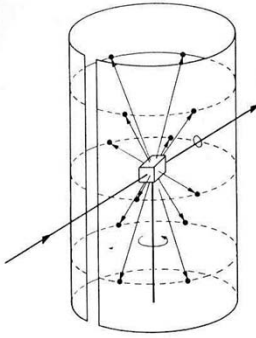


Fig. 3-9 Rotating-crystal method.

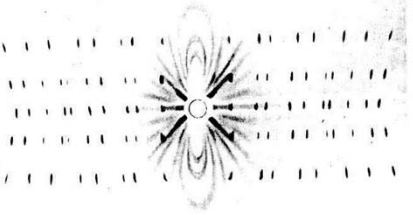


Fig. 3-10 Rotating-crystal pattern of a quartz crystal (hexagonal) rotated about its c axis. Filtered copper radiation. (The streaks are due to the white radiation not removed by the filter.) (Courtesy of B. E. Warren.)

۱۹۱

درس کریستالوگرافی
تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

روش پودر = پلی کریستال با دانه‌های ریز

Substance should be powdered and in preparation of sample orientation make some problems.

Diffracted cone of radiation is area that resonance occur.

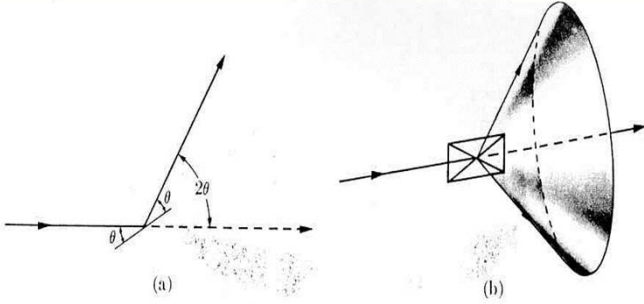


Fig. 3-11 Formation of a diffracted cone of radiation in the powder method.

۱۹۲

روش پودر = پلی کریستال با دانه‌های ریز

دیباي - شرر

Θ is calculated from distance of the curve and intensity can be quantify by micro photometer

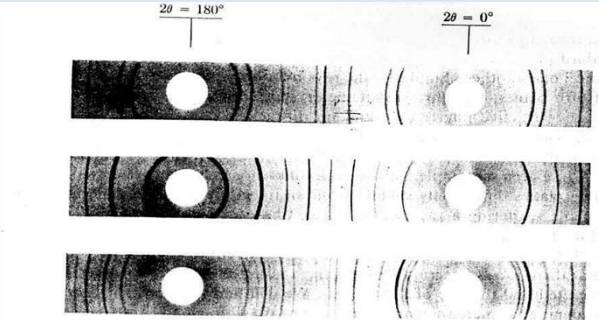


Fig. 3-13 Debye-Scherrer powder patterns of copper (FCC), tungsten (BCC), and zinc (HCP). Filtered copper radiation, camera diameter = 5.73 cm.

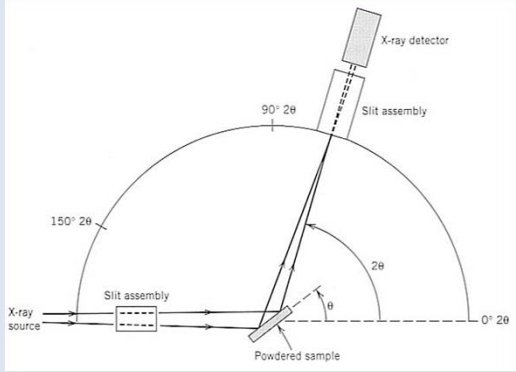
درس کریستالوگرافی

تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۹۳

دریافت و تبدیل به پالس الکتریکی

- Requires random orientation of very fine crystals
- Incident beam of a certain X-ray wavelength will diffract from atomic planes oriented at the appropriate ϑ angles for the characteristic d spacing
- Random orientation of crystals will produce more intense diffraction peaks for particular angles that correspond to characteristic atomic planes



درس کریستالوگرافی

تهیه و گردآوری: سعید کاویانی

۱۹۴

الگوی پراش اشعه X

$\theta = \arcsin (n\lambda / 2d)$
 $\lambda(\text{Cu}) = 1.54\text{\AA}$
 $d - \text{Qtz} [101] = 3.342$
 $\theta = 13.32^\circ ; 2\theta = 26.64^\circ$

Quartz

۱۹۵

کارت PDF

A pdf card contains most information of a crystalline phase such as d-spacing and their intensity, radiation, crystallographic and so on.

4-836									
d	2.09	1.81	1.28	2.09	Cu				
I/I ₁	100	46	20	100	Copper				
					(Copper)				
	d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl
Rad. CuK _{α1}	λ 1.5405	Filter Ni	Dia.	2.088	100	111			
Cut off	1/4	Diffraction	I/I	1.808	46	200			
Ref. Swanson and Tatge, JC Fel. Reports, NBS (1949)				1.278	20	220			
				1.0900	17	311			
				1.0436	5	222			
Sys. Cubic	S.G. O _h ⁵ -Fm3m			0.9038	3	400			
a ₀ 3.6150	b ₀	c ₀	A C	.8293	9	331			
α	β	γ	Z 4 Dx 8.936	.8083	8	420			
Ref. Ibid.									
εα	nωβ	εγ	Sign						
ZV	D	mp	Color						
Ref.	Johnson and Matthey-spec. sample, annealed at 700 °C in vacuum. At 26 °C. Toreplace 1-1241, 1-1242, 2-1225, 3-1005, 3-1015, 3-1018.								

۱۹۶

کارت PDF

PDF#33-1161 (Deleted Card): QM = Star (+); d = Diffractometer, l = Diffractometer PDF Card

Quartz, syn
SiO2

Radiation = CuKα1
Calibration = Internal (Si)
Ref = Natl. Bur. Stand. (U.S.) Monogr. 25, 18 61 (1981)

Lambda = 1.540598
d-Cutoff =

Filter =
l/c (RIR) = 3.6

Hexagonal—(Unknown), P3221(154)
Cell = 4.9134×5.4053
Density (c) = 2.649 Density (m) = 2.656 Mwt = 60.08 Vol = 113.01
Ref = lbid.

Z = 3 mp =
Pearson = hP9 (O2 Si)
F(30) = 76.8 (.0126,31)

NOTE: Sample from the Glass Section at NBS, Gaithersburg, MD, USA, ground single-crystals of optical quality. To replace 5-490 and validated by calculated pattern. Plus 5 additional reflections to 0.9089. Pattern taken at 25 C. Pattern reviewed by Holzer, J., McCarthy, G., North Dakota State Univ., Fargo, ND, USA, ICDD Grant-in-Aid (1990). Agrees well with experimental and calculated patterns. Deleted by 46-1045, higher F#N, more complete, LRB 1/95.

Color: Colorless

Strong Line: 3.34/X 4.26/2 1.82/1 1.54/1 2.46/1 2.28/1 1.37/1 1.38/1 2.13/1 2.24/1
39 Lines, Wavelength to Compute Theta = 1.54056A (Cu), 1%-Type = (Unknown)

#	d(A)	I(f)	h	k	l	2-Theta	Theta	1/(2d)	#	d(A)	I(f)	h	k	l	2-Theta	Theta	1/(2d)
1	4.2570	22.0	1	0	0	20.850	10.425	0.1175	21	1.2285	1.0	2	2	0	77.660	38.830	0.4070
2	3.3420	100.0	1	0	1	26.651	13.326	0.1495	22	1.1999	2.0	2	1	3	79.875	39.938	0.4167
3	2.4570	8.0	1	1	0	36.541	18.271	0.2035	23	1.1978	1.0	2	2	1	80.044	40.022	0.4174
4	2.2820	8.0	1	0	2	39.455	19.727	0.2191	24	1.1843	3.0	1	1	4	81.145	40.572	0.4222
5	2.2370	4.0	1	1	1	40.283	20.141	0.2235	25	1.1804	3.0	3	1	0	81.470	40.735	0.4236
6	2.1270	6.0	2	0	0	42.464	21.232	0.2351	26	1.1532	1.0	3	1	1	83.818	41.909	0.4336
7	1.9792	4.0	2	0	1	45.808	22.904	0.2526	27	1.1405	1.0	2	0	4	84.969	42.484	0.4384
8	1.8179	14.0	1	1	2	50.139	25.070	0.2750	28	1.1143	1.0	3	0	3	87.461	43.731	0.4487
9	1.8021	1.0	0	0	3	50.610	25.305	0.2775	29	1.0813	2.0	3	1	2	90.855	45.428	0.4624
10	1.6719	4.0	2	0	2	54.867	27.434	0.2991	30	1.0635	1.0	4	0	0	92.819	46.410	0.4701
11	1.6591	2.0	1	0	3	55.327	27.663	0.3014	31	1.0476	1.0	1	0	5	94.662	47.331	0.4773
12	1.6082	1.0	2	1	0	57.236	28.618	0.3109	32	1.0438	1.0	4	0	1	95.115	47.558	0.4790
13	1.5418	9.0	2	1	1	59.947	29.973	0.3243	33	1.0347	1.0	2	1	4	96.223	48.112	0.4832
14	1.4536	1.0	1	1	3	63.999	32.000	0.3440	34	1.0150	1.0	2	2	3	98.734	49.367	0.4926
15	1.4189	1.0	3	0	0	65.759	32.879	0.3524	35	0.9898	1.0	4	0	2	102.195	51.098	0.5052
16	1.3820	6.0	2	1	2	67.748	33.874	0.3618	36	0.9873	1.0	3	1	3	102.556	51.278	0.5064
17	1.3752	7.0	2	0	3	68.128	34.064	0.3636	37	0.9783	1.0	3	0	4	103.880	51.940	0.5111
18	1.3718	8.0	3	0	1	68.321	34.160	0.3645	38	0.9762	1.0	3	2	0	104.195	52.098	0.5122
19	1.2880	2.0	1	0	4	73.460	36.730	0.3882	39	0.9636	1.0	2	0	5	106.141	53.071	0.5189
20	1.2558	2.0	3	0	2	75.668	37.834	0.3982									

۱۹۷

الگوی پراش اشعه X برای آهن آلفا (BCC)

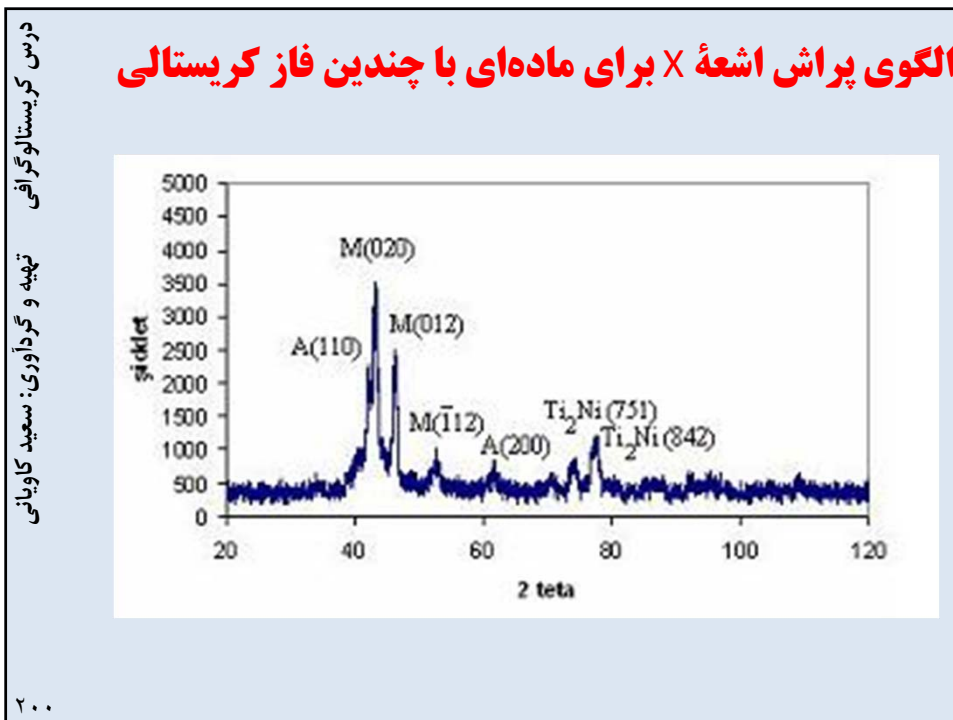
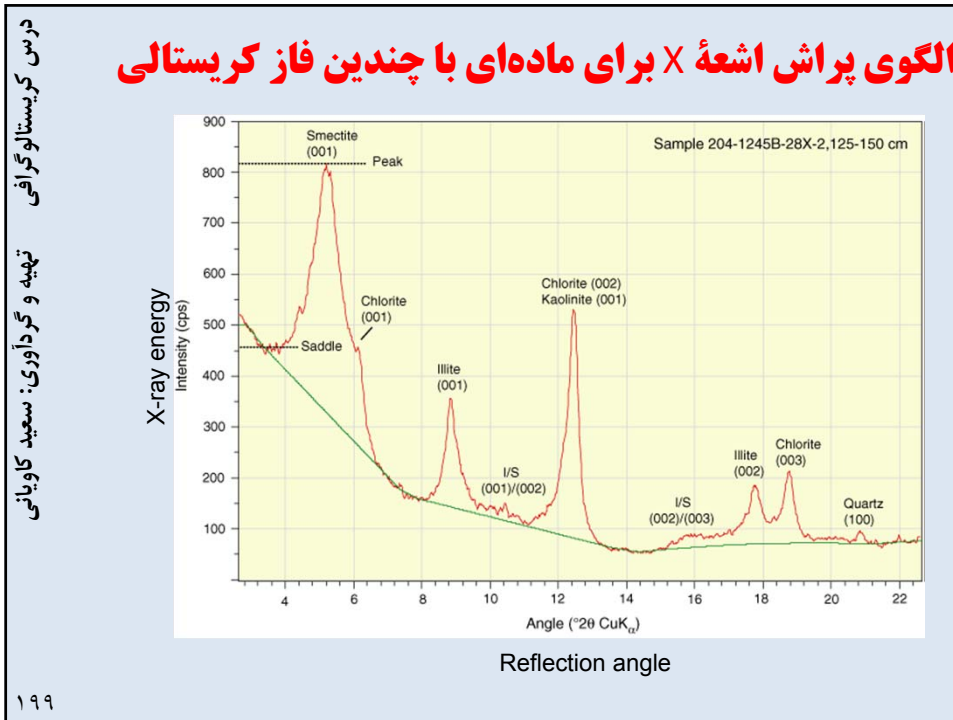
Intensity (relative)

Diffraction angle 2θ

FIGURE 3.20 Diffraction pattern for polycrystalline α -iron.

Diffraction pattern for polycrystalline α -iron (BCC)

۱۹۸



شرط تشکیل یا عدم تشکیل پراش برای صفحات مختلف کریستالی

جدول ۱۲- شرط تشکیل و یا عدم تشکیل تفرق صفحات در شبکه های مختلف — براوه

شبکه براوه	شرط تشکیل تفرق	شرط عدم تشکیل تفرق
ساده	تمام صفحات	هیچ
قاعده های مرکزدار	k و h فرد و فرد یا هر دو زوج	k و h فرد و زوج مخلوط
مرکزدار	زوج $(h+k+1)$	فرد $(h+k+1)$
سطوح مرکزدار	l و k و h همه فرد یا همه زوج	l و k و h فرد و زوج مخلوط

۲۰۱

تمرین

- 1- d-spacing of (111) plane in NaCl equals 3.21\AA . Find the radii of sodium ion, if radii of chlorine is 1.81\AA .
- 2- Find following d-spacings in a ccp crystal, that its radii is $1.3A_0$: (110), (211), (310), (111).

۲۰۲