# ساختار بلوری جامدات (فصل ۳)

1

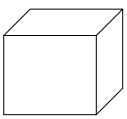
## بلور (Crystal)

- ماده جامدی که اتم های آن در ۳ جهت فضایی دارای نظم خاصی هستند ، مانند

**ABBABB**

**و یا ماده جامدی که از تکرار کوچکترین واحد ساختمانی به نام سلول اولیه (Unit cell or uc) در امتداد ۳ جهت فضایی**

**حاصل می شود را بلور نامند**



2

- تمام گازها و بسیاری از مایعات غیر بلوری هستند اما کریستال های مایع (Liquid crystal) بلور هستند.
  کریستال مایع در ساخت نمایشگرهای LCD بکار می رود.

- اما تعدادی از جامدات بلورند مانند:

الف- تمام فلزات که به روش طبیعی تولید می شوند. بعبارتی وقتی مذاب فلز درون قالب ریخته می شود و در مجاورت هوا سرد (سرد شدن طبیعی) می شود ، فلز بلوری تشکیل می شود.

ب- بسیاری از مواد سرامیکی

ج- برخی از پلیمرها

3

## بلورشناسی (Crystallography)

- علمی است که در باره نحوه ی تشکیل بلور، رشد آن ، شکل ظاهری بلور ، وضعیت آرایش اتم های درون بلور و بالاخره خواص فیزیکی بلور بحث می کند.

## انواع بلورشناسی

- ۱- هندسی: پیکره خارجی بلور مطالعه می شود مانند زمین شناسی

- ۲- ساختار درونی بلور: در این شاخه از بلورشناسی ساختار درونی بلور بررسی می شود مانند رشته های متالورژی ،شیمی ، فیزیک و دارو سازی.

4

* در بلورشناسی کلمه ای به نام موتیف (Motif) استفاده می شود.

- ۱- در بلورشناسی پیکره ی خارجی بلور: به گوشه ها، یال ها و وجوه موتیف گفته می شود.
- ۲- در بلورشناسی ساختار درونی بلور : به اتم ها ، مولکول ها و یون ها موتیف اطلاق می شود.

**مواد جامد**

**از نظر بلورشناسی مواد جامد ۲ گروه هستند: بلور و غیر بلور.**

**۱- بلور**

**موادی که اتم های آن دارای نظم خاص اند یا از تکرار یک واحد ساختمانی بدست می آیند ، فلزات ، نبات ، نمک .....**

**۲- غیر بلور ، بی شکل یا آمورف**

**موادی که اتم های آن دارای نظم خاصی نیستند ، شیشه**

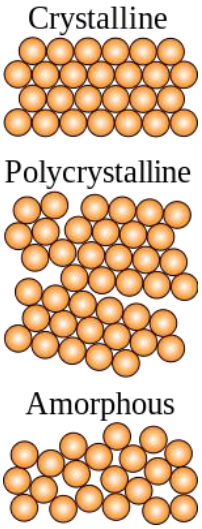
5

* نکته مهم:

**سرامیک ها و پلیمرهای غیر بلوری شفاف هستند و مانند شیشه نور را ازخود عبور می دهند اما سرامیک ها و پلیمرهای بلوری یا نیمه بلوری کدر و یا در بهترین حالت نیمه شفاف هستند.**

6

**انواع بلور**




**می دانیم هر بلور از تکرار یک نوع uc در امتداد محور فضایی حاصل می شود.**

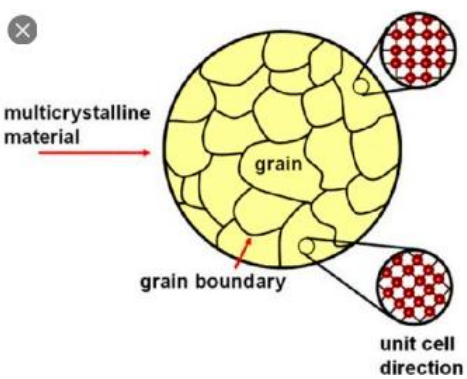
- **بلورها به دو نوع تک بلور و چند بلور تقسیم بندی می شوند. شکل روبرو لایه های اتمی را نشان می دهد که با میکروسکوپ مشاهده می شوند.**

- **۱- تک بلور (Single crystal)**
  **همانطور که در شکل بالا دیده می شود جهت چیده شدن uc در کل ماده به یک سمت است**

- **۲- چند بلور (Polycrystal)**
  **شکل وسط جهت چیده شدن uc در هر منطقه از ماده به سمتی**

7

- **چند بلور: هر یک از این مناطق یک دانه (grain) و مرز بین دانه ها را مرزدانه (grain boundary) می گویند.**




- *** در شکل روبرو سلول اولیه مکعب ساده است.**

- **تک بلور: تولید آن بسیار سخت است. برای تولید تک بلور باید مذاب خالص فلز بسیار آهسته و کنترل شده سرد شود. بعلاوه حجم مذاب هم نباید زیاد باشد. بنابراین فلز تک بلور را نمی توان با ابعاد بزرگ تولید کرد.**
- **اگر حجم مذاب زیاد باشد بعد از انجماد چند بلور حاصل می شود.**

8

- یک خصوصیت مهم تک بلور آن است که در دمای بالا ، استحکام بیشتری نسبت به همان ماده چند بلور دارد. بنابراین در دمای بالا تک بلور توصیه می شود.

- سوپر آلیاژها یا ابر آلیاژها (Superalloys): آلیاژهای هستند که در دمای بالا استحکام مکانیکی و مقاومت به خوردگی و اکسیداسیون بالایی دارند. در انواع این آلیاژها عنصر اصلی نیکل، کبالت و یا آهن- نیکل (آهن به همراه نیکل) است. عمده کاربرد این آلیاژها در قسمت داغ توربین های گاز (پره توربین و محفظه احتراق) می باشد که دما به بیش از ۱۰۰۰ درجه سانتی گراد می رسد.

- برای مثال از تک بلورهای سوپر آلیاژ پایه نیکل در پره ی توربین گازی نیروگاه های برق استفاده می شود.

- اکثر مواد بلوری در اطراف ما چند بلورند

- یک شاخه نبات یک چند بلور و هر تکه نبات چسبیده به شاخه یک تک بلور است.

9

## مشخصات یک سلول اولیه

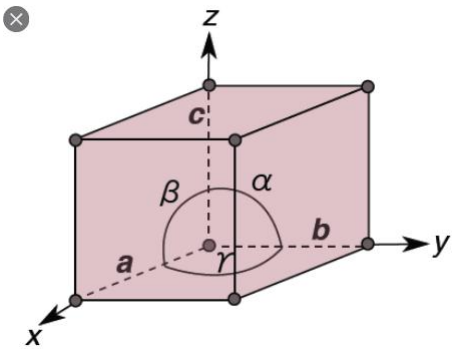
- سلول اولیه یک واحد حجم دار ، و برای نمایش آن به یک محور سه بعدی مانند x , y ,z احتیاج است

- در بلور شناسی برای معرفی یک uc از ۶ ثابت شبکه ای یا پارامتر شبکه ای استفاده می شود که عبارتند از

10

- a : اندازه در امتداد محور x
- b : اندازه در امتداد محور y
- c : اندازه در امتداد محور z

- آلفا : زاویه بین y و z (روبروی x)
- بتا : زاویه بین x و z (روبروی y)
- گاما : زاویه بین x و y (روبروی z)




* در uc مکعبی مبدا سمت چپ گوشه پایین در عقب است

11

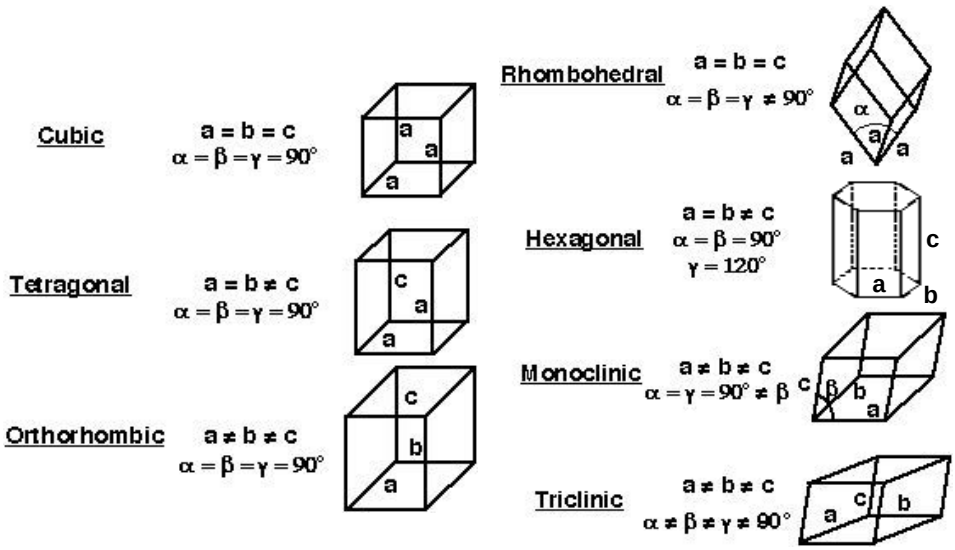
## سیستم های بلوری (Crystal systems)

تنها ۷ نوع سلول اولیه در طبیعت وجود دارد و هر ماده بلوری از تکرار یک نوع سلول اولیه حاصل می شود. این سلول ها اولیه یا سیستم های بلوری عبارتند از:

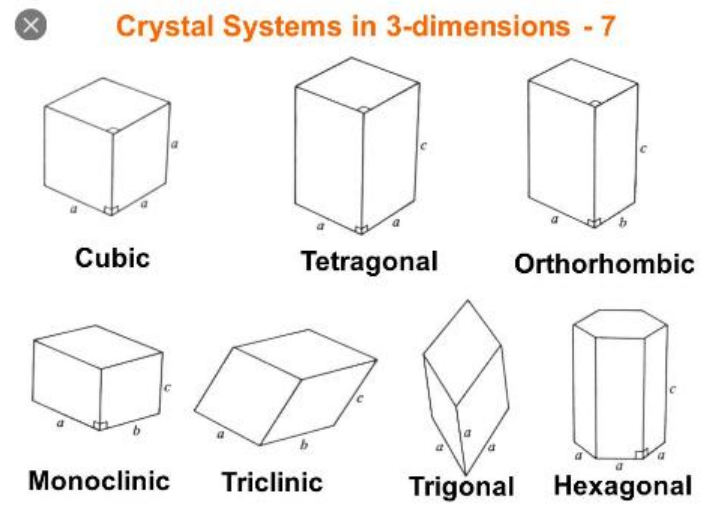
مکعبی ، تتراگونال (چهار وجهی) ، اورتورمبیک یا اورتوکلینیک ، رومبوهدرال ، هگزاگونال ، مونوکلینیک و تری کلینیک

برای هر یک از این سلول ها ، ۶ ثابت شبکه ای گزارش می شود و در شکل زیر آمده است.

12


Cubic
a = b = c
α = β = γ = 90°
Tetragonal
a = b ≠ c
α = β = γ = 90°
Orthorhombic
a ≠ b ≠ c
α = β = γ = 90°
Rhombohedral
a = b = c
α = β = γ ≠ 90°
Hexagonal
a = b ≠ c
α = β = 90°
γ = 120°
Monoclinic
a ≠ b ≠ c
α = γ = 90° ≠ β
Triclinic
a ≠ b ≠ c
α ≠ β ≠ γ ≠ 90°

13


Crystal Systems in 3-dimensions - 7
Cubic
Tetragonal
Orthorhombic
Monoclinic
Triclinic
Trigonal
Hexagonal

14

- اگر به انواع سلول های اولیه توجه شود ، ملاحظه می گردد که روی آن هیچ اتمی یا بطور کلی موتیفی قرار نگرفته است. بنابراین از تکرار آن ماده ای حاصل نمی شود مگر آن که روی آن موتیف قرار بگیرید.

- بر همین اساس آقای براوه ترتیب قرار گرفتن موتیف ها روی سلول اولیه تحت عنوان شبکه براوه مطرح کردند.

15

## شبکه های براوه

- ترتیب قرار گرفتن اتم ها، یون ها، مولکول ها در فضای ۳ بعدی ، به شرط آن هر موتیف از نظر عدد همسایگی مشابه نقاط دیگر
- عدد همسایگی یا CN : نزدیکترین همسایه های یک اتم که به فاصله مساوی از آن اتم

## تعداد شبکه های براوه

تعداد شبکه تابع ۲ عامل زیر است:

- تعداد uc : ۷
- ترتیب قرار گرفتن موتیف ها در uc

16

**ترتیب قرار گرفتن موتیف ها در uc**

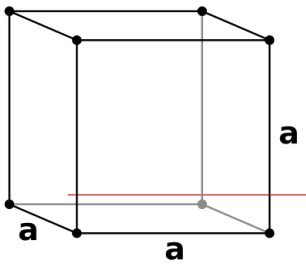
**موتیف ها به ۴ روش قرار می گیرند**

- **۱- شبکه ساده (شبکه P) :**

**اگر موتیف ها فقط در گوشه های هر نوع سلول اولیه قرار گیرد به آن شبکه ساده می گویند.**

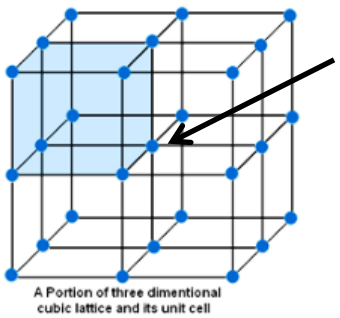
**اگر نوع سلول اولیه را مکعب انتخاب کنیم ، در این حالت کلمه مکعب به جای شبکه می نشیند و به آن مکعب ساده می گویند که به شکل زیر است.**

**در بلور شناسی متغیری به نام تعداد اتم در یک uc وجود دارد که تعداد اتم های که کاملا به یک مکعب ساده تعلق دارد را مشخص می کند.**






- **می دانیم از تکرار uc در فضا ماده بلوری حاصل می شود. بنابراین اتم روی یک گوشه مکعب ساده با uc های همسایه خود مشترک می شود. مثلا در شکل زیر اتم مشخص شده با فلش با ۸ ، uc مشترک است. پس می توان فرض کرد $\frac{1}{8}$ اتم گوشه مکعب به آن مکعب خاص کاملا تعلق دارد. بنابراین تعداد اتمها به ازای یک uc مکعب ساده برابر:**


A Portion of three dimentional cubic lattice and its unit cell

- $\frac{No\ of\ atoms}{uc} = 8 \times \frac{1}{8} = 1$

☐ ۲- شبکه قاعده دار (شبکه $A, B \text{ or } C$ ) :

اگر موتیف ها در گوشه ها و وسط ۲ وجه روبرو هر نوع uc قرار بگیرد به آن شبکه قاعده دار می گویند.

* نکته ۱ : اگر اتم وسط ۲ وجه روبرو ، در صفحاتی باشد که:

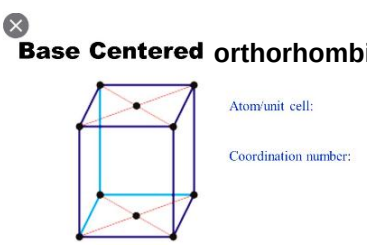
الف- امتداد محور x را قطع می کند ، به آن شبکه $A$ گفته می شود.

ب- امتداد محور y را قطع می کند ، به آن شبکه $B$ نیز گفته می شود.

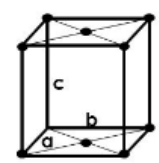
ج- امتداد محور z را قطع می کند ، به آن شبکه $C$ نیز گفته می شود. شبکه $C$ متداول تر از $A, B$ است.



✓ نکته مهم: در طبیعت مکعب قاعده دار مشاهده نشده است ، اما اورتورمبیک قاعده دار وجود دارد که به شکل زیر است (شبکه $C$ ).




✓ شکل زیر اورتورمبیک قاعده دار را با پارامترهای شبکه ای نشان می دهد.



base-centered

*Lattice parameters* :

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

سهم اتم گوشه برای uc اورتورمبیک ، $^1/_8$ و سهم اتم وسط وجه $^1/_2$

بنابراین تعداد اتمها به ازای یک uc اورتورمبیک قاعده دار برابر است با

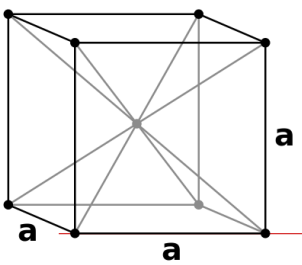
$$\frac{No\ of\ atoms}{uc} = \left(8 \times \frac{1}{8} + 2 \times \frac{1}{2}\right) = 2$$

21

☐ ۳- شبکه مرکز دار (شبکه I) :

اگر موتیف ها در گوشه ها و مرکز uc قرار بگیرد به آن شبکه مرکزدار می گویند ، مثلا اگر مکعب را در نظر بگیریم ، مکعب مرکز دار به شکل زیر خواهد بود.

وقتی همسایه های مشترک مکعب مرکزدار را رسم کنیم ، سهم اتم گوشه برای uc مکعب مرکزدار باز ، $^1/_8$ اما اتم وسط uc ، کاملا به همان مکعب مرکزدار تعلق دارد. پس تعداد اتمها به ازای یک uc مکعب مرکز دار برابر است با:




$$\frac{No\ of\ atoms}{uc} = 8 \times \frac{1}{8} + 1 \times 1 = 2$$

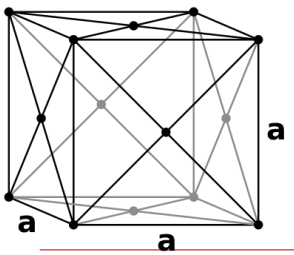
22

☐ ۴- شبکه با وجوه مرکزدار (شبکه F) :

اگر موتیف ها در گوشه ها و وسط تمام وجوه قرار بگیرند به آن شبکه با وجوه مرکزدار می گویند. مثلا اگر uc مکعب را در نظر بگیریم ، مکعب با وجوه مرکزدار به شکل زیر خواهد بود.

اگر همسایه های مشترک مکعب با وجوه مرکزدار را رسم کنیم ، سهم اتم گوشه برای uc این نوع مکعب ، $^1/_8$ اما اتم وسط وجه سهم $^1/_2$ می گیرد.

پس تعداد اتمها به ازای این مکعب برابر است با:




$$\frac{No\ of\ atoms}{uc} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$



❋ تعداد شبکه براوه

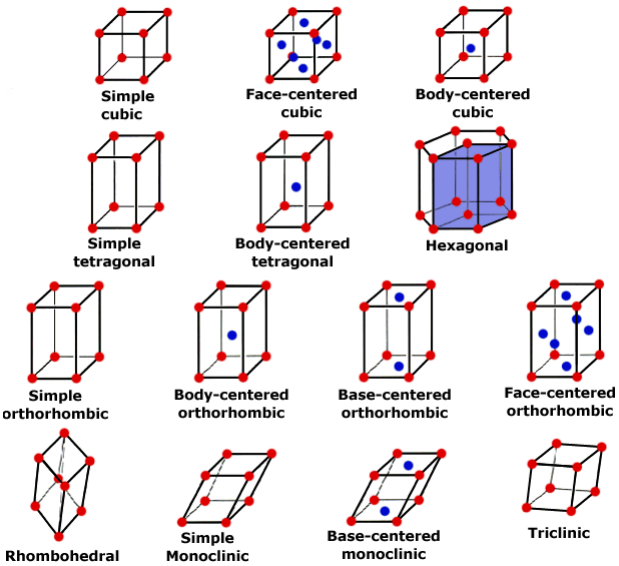
تعداد موتیف ها × تعداد سلول اولیه = تعداد شبکه براوه

=۷ × ۴ =۲۸

❋ اما به دلیل این که بعضی از شبکه ها در طبیعت مشاهده نشد ، نهایتا ۱۴ شبکه مستقل براوه شناسایی شد.

❋ هر ماده بلوری از تکرار یک شبکه براوه حاصل می شود.

## انواع شبکه های براوه



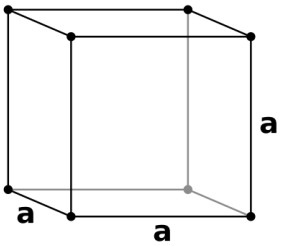

25

**بنابر این طبق شبکه های براوه در بالا، برای بعضی از سلول های اولیه ۴ حالت موتیف در طبیعت مشاهده نمی گردد. مثلا برای مکعبی تنها ۳حالت دیده می شود. به دلیل آن که**

**مکعب ، سلول اولیه اکثر فلزات است انواع شبکه های مکعبی که در طبیعت وجود دارد در ادامه توضیح داده می شوند.**

26

## انواع شبکه های مکعبی




### ۳ شبکه مکعبی

- ۱- مکعب ساده (Simple cubic or SC)

موتیف ها در گوشه ها ،

* ضریب فشردگی اتمی: نسبت حجم اتم های یک uc به حجم کل uc (اتم + فضای خالی) ، یا نسبت حجم مادی به حجم کل uc

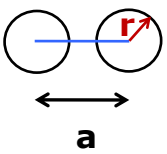
$$APF = \frac{atoms\ \ volume}{uc\ \ volume}$$

27

- ضریب فشردگی اتمی SC

$$APF = \frac{atoms\ \ volume}{uc\ \ volume} = \frac{\left(8\times\frac{1}{8}\right)\times\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$$

- اتصال اتم ها در امتداد یال ( r شعاع اتمی)




$$for\ SC\ \ a \approx r + r \rightarrow a \approx 2r$$

$$APF = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} = 0.52$$

- کسر فضای خالی

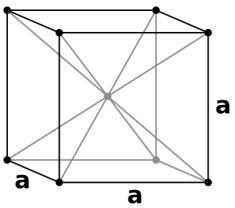
$$(1 - APF)\times 100 = (1 - 0.52)\times 100 = 48\%$$

- ساختار SC نیمی فضای خالی، دارای استحکام پایین ، پس هیچ گاه فلزات به شکل SC متبلور نمی شوند

28

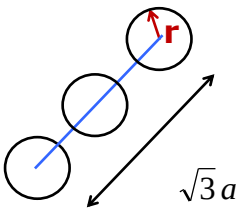
☐ ۲- مکعب مرکزدار (Body center cubic or BCC)

موتیف ها در گوشه ها و مرکز مکعب




$$APF = \frac{atoms\ \ volume}{uc\ \ volume} = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{8}{3}\pi r^3}{a^3}$$

☐ اتصال اتم ها در امتداد قطر مکعب




$$for\ BCC\ \ \sqrt{3}\,a \approx r + 2r + r \rightarrow \sqrt{3}\,a \approx 4r$$

$$APF = \frac{\frac{8}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{8}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = 0.68$$

29

☐ کسر فضای خالی BCC

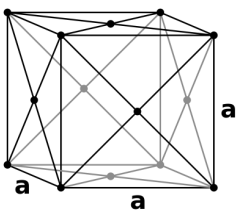
$$(1 - APF)\times 100 = (1 - 0.68)\times 100 = 32\%$$

❊ فلزات آهن (Fe)، کروم (Cr)، تنگستن (W)، وانادیم (V) و ..... BCC هستند.

30

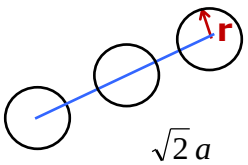
☐ ۳- مکعب با وجوه مرکزدار (Face center cubic or FCC)

موتیف ها در گوشه ها و وسط تمام وجوه




$$APF = \frac{atoms\ \ volume}{uc\ \ volume} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{16}{3}\pi r^3}{a^3}$$

☐ اتصال اتم ها در امتداد قطر وجه مکعب




$$for\ FCC\ \ \sqrt{2}\,a \approx r + 2r + r \rightarrow \sqrt{2}\,a \approx 4r$$

$$APF = \frac{\frac{8}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{16}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3} = 0.74$$



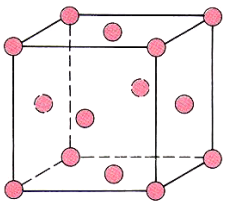
☐ کسر فضای خالی در FCC

$$(1 - APF) \times 100 = (1 - 0.74) \times 100 = 26\%$$

* اغلب فلزات نرم مانند طلا (Au)، نقره (Ag)، سرب (Pb)، نیکل (Ni) و FCC .....

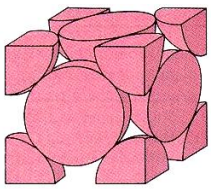
## نمایش ساختار بلوری

ساختار بلوری یا **uc** به ۳ شکل نمایش داده می شود:



۱- نمای سلول اولیه با کره های کوچک شد

۲- نمای سلول اولیه با کره های سخت



در مدل کره سخت اتم بزرگتر کشیده می شود و به دو روش می توان نمایش داد:

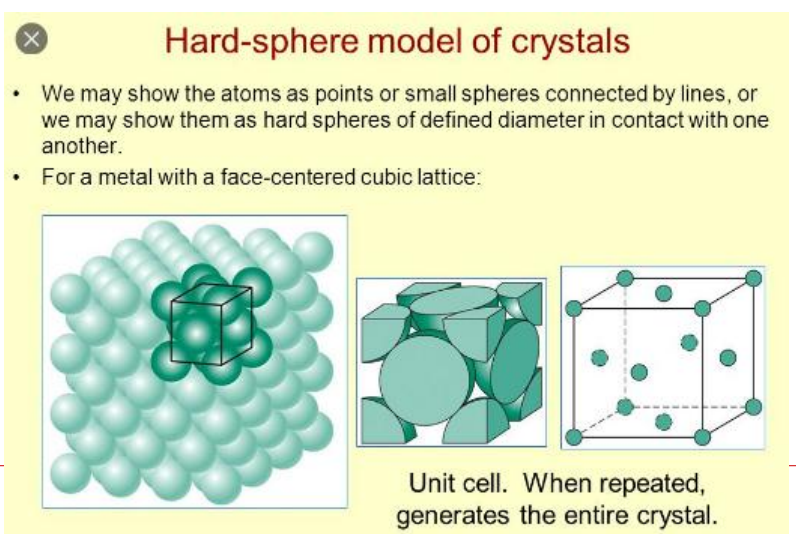
الف- سهمی از اتم که به سلول اولیه می رسد، ترسیم می شود ( $\frac{1}{8}$ اتم گوشه و $\frac{1}{2}$ اتم وسط وجه)

ب- اتم های سلول اولیه به طور کامل ترسیم می شوند

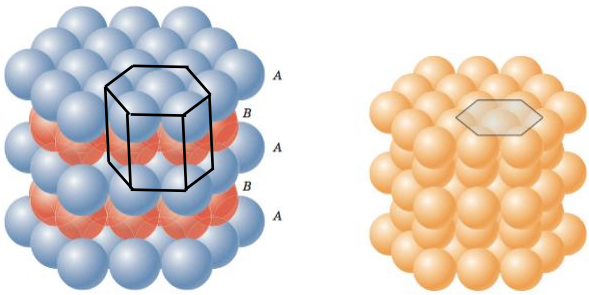
۳- توده انبوه اتم ها با کره های سخت: در شکل بعد هر ۳ حالت فوق ملاحظه می شود.

33

شکل چپ توده انبوه اتم ها را نشان می دهد و برای تشخیص دقیق تر نوع سلول اولیه باید نمای ۳ بعدی توده یا لایه های اتمی کشیده شود .



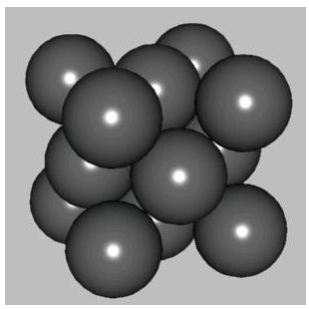
شکل زیر توده انبوه اتم ها دیگری را نشان می دهد که سلول اولیه آن هگزاگونال است.



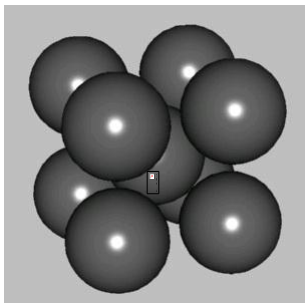

35

**انواع شبکه های مکعبی**

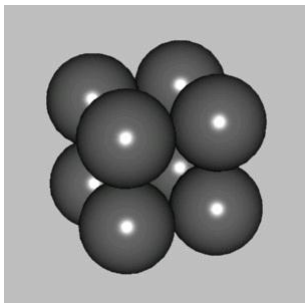
شکل زیر سلول اولیه شبکه های مکعبی را با مدل کره های سخت نشان می دهد و در اسلاید بعد سلول اولیه ترسیم شده روی آن را نشان می دهد.



مکعب با وجوه مرکزدار (FCC)

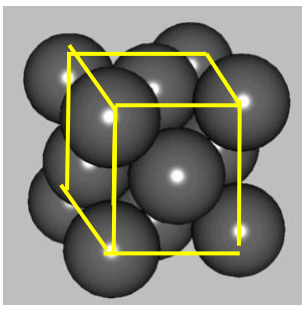


مکعب مرکزدار (BCC)

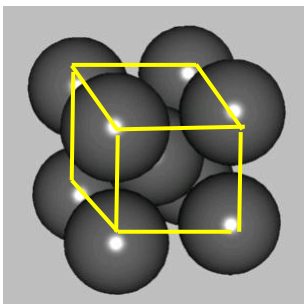


مکعب ساده (SC)

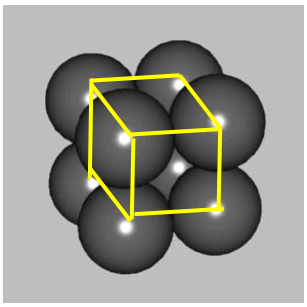
36



مکعب با وجوه مرکزدار (FCC)



مکعب مرکزدار (BCC)



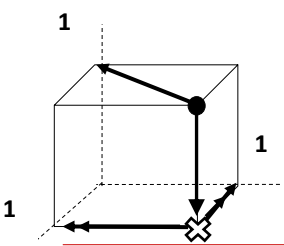
مکعب ساده (SC)

37

## تعیین مختصات یک نقطه

در بلور شناسی هر گاه مختصات یک نقطه را بخواهند آن را درون یک uc نمایش می دهند. روش تعیین مختصات یک نقطه (تو پر)

- از نقطه بر صفحه xy عمود کرده (تصویر می کنیم)
- از نقطه ضربدر بر محور x و y عمود می کنیم، اندازه روی محور x مختصات x و اندازه روی محور y مختصات y نقطه تو پر است
- از نقطه تو پر بر محور z عمود کرده و مختصات z نقطه بدست می آید
- مختصات نقطه به صورت x y z گزارش می شود



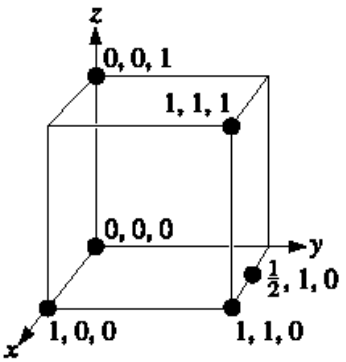

مختصات این نقطه ۱۱۱ است. در بعضی از کتاب ها مختصات با کاما جدا می شود 1,1,1

38

- در شکل زیر برای نقاط دیگری مختصات تعیین شده است. مبدا مختصات با صفر صفر صفر نمایش داده می شود.

- طبق کتاب کلیستر مختصات را بدون کاما نشان می دهیم هر چند در مثال زیر با کاما آمده است.

* اضلاع هر uc ارزش آن یک است.



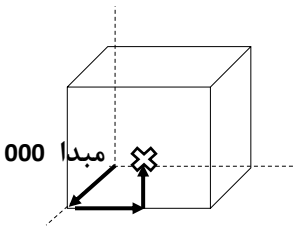



تعیین یک نقطه

مختصات نقطه داده شده، می خواهیم آن را نمایش دهیم مانند مختصات $1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}$

- نقطه باید درون یک uc نشان داده شود مانند مکعبی
- از مبدا مختصات در امتداد محور x به اندازه x نقطه حرکت می کنیم
- سپس از x مشخص شده به اندازه y نقطه در امتداد محور y حرکت کرده
- در پایان از نقطه مرحله قبل به اندازه z نقطه در امتداد محور z حرکت می کنیم.

- باید توجه داشت چون ارزش ابعاد هر نوع uc یک است مختصات بزرگتر از ۱ ، درون یک uc نمی افتد.




- نقاط $1\,0\,\frac{1}{2}\,1$ و $\frac{1}{3}\,\frac{3}{4}\,1$ را نمایش دهید (درون مکعب).

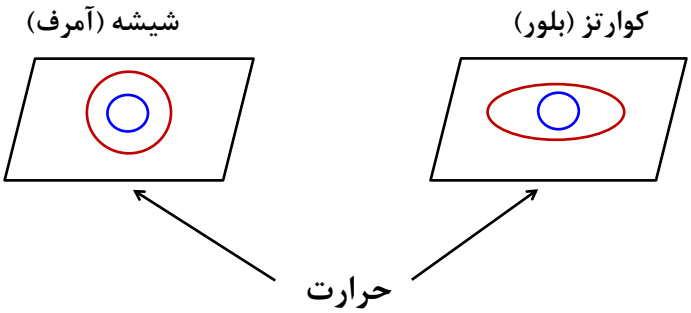
41

- بلورها خواصشان به جهت وابسته است.
- برای مثال یک صفحه کوارتز و یک صفحه شیشه داریم. ترکیب شیمیایی هر دو اکسید سیلیسیم ($SiO_2$) است اما کوارتز بلور و شیشه غیر بلوری است.

مطلابق شکل زیر روی هر صفحه یک تکه موم به شکل دایره می گذاریم (آبی رنگ) و از زیر به صفحه ها حرارت می دهیم. موم نرم می شود و منبسط می گردد. موم روی شیشه به شکل دایره (قرمز رنگ) و روی کوارتز به صورت بیضی (قرمز رنگ) منبسط می شود.

نتیجه می گیریم ضریب هدایت حرارتی شیشه در تمام جهات یکسان است اما ضریب هدایت حرارتی بلور کوارتز در جهات مختلف متفاوت می باشد. بنابر این بلورها خواصشان به جهت وابسته است.

42


شیشه (آمرف)
کوارتز (بلور)
حرارت