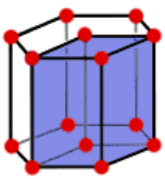
هگزاگونال

* بعضی از فلزات uc هگزاگونال دارند، پس در ادامه بطور خلاصه معرفی می شود.

نکته: گروه محدودی فرض می کنند سلول اولیه هگزاگونال از جزء کوچکتری به نام رومبوهدرال (قسمت آبی رنگ) ساخته شده است. در این حالت هر هگزاگونال از ۳ رومبوهدرال تشکیل می شود. شکل زیر نمایش رومبوهدرالی یک هگزاگونال است.



Hexagonal

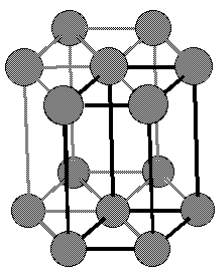
Rhombic representation of hexagonal

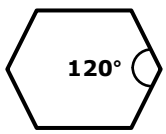
1

هگزاگونال (Hexagonal)

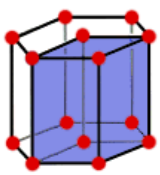
منشوری است با قاعده ی ۶ ضلعی منظم، زاویه ی قاعده ی

الف- برای uc هگزاگونال ۱۲۰درجه

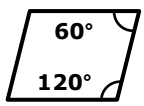




ب- برای رومبوهدرال سازنده یک هگزاگونال (۱۲۰ و ۶۰ درجه)



Hexagonal



2

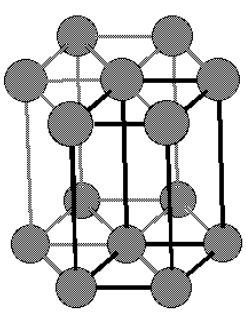
انواع هگزاگونال

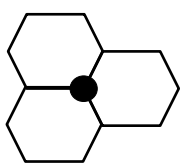
- ۱- هگزاگونال ساده
- ۲- هگزاگونال فشرده شده

3

هگزاگونال ساده (Simple hexagonal or SH)

- اتم ها در گوشه ها و وسط دو قاعده
- هر اتم گوشه با ۶ uc، و اتم وسط قاعده با ۲ uc مشترک، یک اتم گوشه مشترک با سلول های اولیه (از نمای بالا)

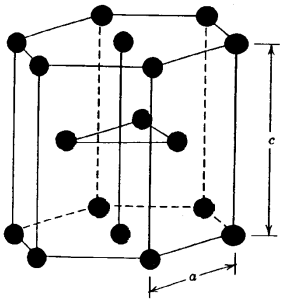




$$\frac{No.\ of\ atoms}{uc} = 12\times\frac{1}{6} + 2\times\frac{1}{2} = 3\,\frac{atoms}{uc}$$

4

- با فرض آن که می دانیم $\alpha = \beta = 90^\circ \quad \& \quad \gamma = 120^\circ$ و قاعده ۶ ضلعی منظم است، تنها ۲ ثابت شبکه ای a و c لازم



HCP

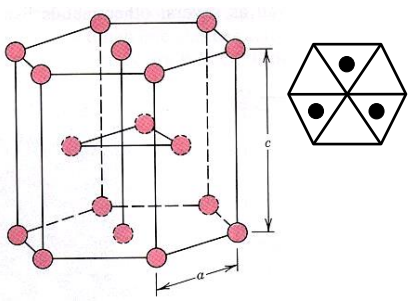
- مقدار APF کم، پس فلزات به شکل SH متبلور نمی شوند، اما به شکل هگزاگونال فشرده شده وجود دارند

5

هگزاگونال فشرده شده (مبحث ۳-۳-۳)

(Hexagonal close- packed or hcp)

- اتم ها در موقعیت هگزاگونال ساده و ۳ اتم در فضای درونی در ارتفاع C/2 اتم های درونی از نمای بالا بطور یکدرمیان در مرکز ثقل مثلث ها



$$\frac{No.\ of\ atoms}{uc} = 3 + 3 \times 1 = 6\ \frac{atoms}{uc}$$

$$HCP \rightarrow APF = 0.74$$

$$FCC \rightarrow APF = 0.74$$

6

- فلزات منیزیم (Mg)، روی (Zn)، تیتانیم (Ti)، بریلیم (Be)، کبالت (Co) .... hcp

- حالت ایده آل در hcp، یعنی اتم ها کروی اند و با هم در تماس هستند و همواره داریم

- در حالت کلی

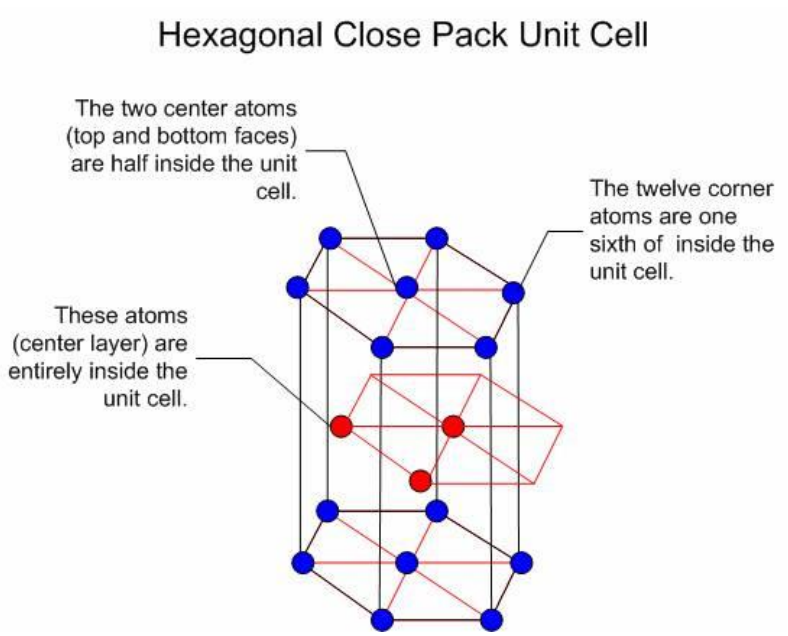
$$For\ ideal\ state \rightarrow \frac{c}{a} = 1.63$$

$$\frac{c}{a} = 1.59 - 1.85$$

$$\downarrow \quad \downarrow$$

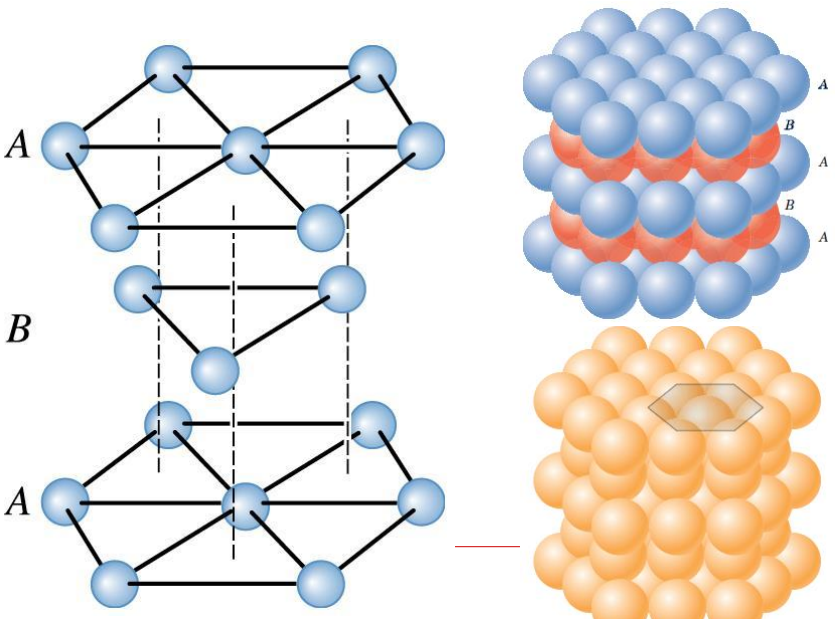
$$Ti \quad Zn$$

7



8

هر hcp روی ۳ لایه اتمی مجاور تشکیل می شود که در شکل زیر با حروف ABA نشان داده شده است.



محاسبه چگالی (مبحث ۳-۴)

در بلورشناسی، چگالی تئوری از رابطه

$$\rho = \frac{m_{uc}}{V_{uc}} \quad \rightarrow \quad \rho = \frac{n\,A}{V_C\,N_A}$$

- در فرمول اول m_{uc} جرم سلول اولیه و V_{uc} حجم سلول اولیه
- در فرمول دوم، n = تعداد اتم های متعلق به یک سلول، A وزن اتمی، V_C حجم سلول اولیه، N_A عدد آووگادرو (6.02×10^{23} atoms/mol)

مسئله حل شده ۳-۳ کتاب

Cu (FCC)

r_{cu}= 0.128 nm (1.28 Å) , A_{cu}=63.5 g/mol

ρ_{th}=? , compare with ρ_{exp}=8.94 g/cm³

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4\times 0.128}{\sqrt{2}} = 0.362\ nm$$

$$\rho = \frac{n\,A}{V_C\,N_A} = \frac{4\times 63.5}{\left(0.362\times 10^{-7}\right)^3 \times 6.02\times 10^{23}} = 8.89 \quad \frac{g}{cm^3}$$

ادامه مسئله ۳-۳ کتاب

- **چگالی تئوری (8.89 g/cm³) با آزمایشگاهی یا واقعی (8.94 g/cm³) متفاوت است. چون در بلور شناسی ماده**

- **ایده آل و بدون عیب فرض می شود، در حالی که هر ماده ای دارای تعدادی نقص است و مثلا جای اتم خالی است یا اتم ناخالصی است که در نهایت باعث تغییر چگالی واقعی یا آزمایشگاهی می شود.**

مسئله

جرم سلول اولیه مس (FCC) چقدر است؟ جرم اتمی مس 63.5 g/mol است.

Cu (FCC)

A_{cu}=63.5 g/mol , m_{uc}=?

$$\rho = \frac{m_{uc}}{V_{uc}} = \frac{nA}{V_C N_A} \rightarrow m_{uc} = \frac{nA}{N_A} = \frac{4 \times 63.5}{6.02 \times 10^{23}} = 42.19 \times 10^{-23} \quad g$$

13

مسئله : فلز منیزیم ساختار hcp دارد. مطلوب است مقدار حجم سلول اولیه با استفاده از: الف- APF و شعاع اتمی 0.161 nm، ب- چگالی 1.74 g/cm³ و وزن اتمی 24.3 g/mol

الف- می دانیم APF_{hcp}=0.74

$$APF = \frac{atoms\ \ volume}{uc\ \ volume} \rightarrow 0.74 = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{V_{uc}} = \frac{8\pi (0.161)^3}{V_{uc}} \rightarrow$$

$$V_{uc} = 0.14 \quad nm^3$$

14

ادامه مسئله :

ب-

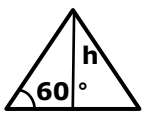
$$\rho = \frac{n\,A}{V_C\,N_A} \quad \rightarrow \quad 1.74 = \frac{6 \times 24.3}{V_C \times 6.02 \times 10^{23}} \quad \rightarrow V_C = 1.4 \times 10^{-22} \quad cm^3$$

$$= 0.14 \quad nm^3$$

$$1 \quad cm = 10^7 \quad nm \quad , \quad 1 \quad cm^3 = 10^{21} \quad nm^3$$

مسئله : **حجم سلول اولیه تیتانیم با ساختار hcp در 20 ℃ ، 0.106 nm³ و مقدار c/a=1.59 است مطلوب است: الف- a و c ، ب- شعاع اتمی تیتانیم به شرط آن که اتصال اتم ها در جهت ضلع قاعده باشد.**

الف-

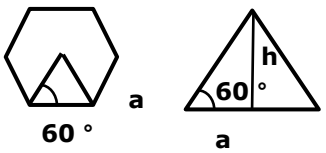


$$\sin 60 = \frac{h}{a} \quad \rightarrow \quad h = a \sin 60$$

$$A_{hexagonal \;\; base} = 6 \times \left(a \times \frac{a \sin 60}{2} \right) = 2.6\, a^2$$

ادامه مسئله

هگزاگونال چون یک منشور است، حجم آن از رابطه زیر بدست می آید

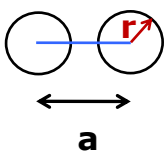


$$V_{uc} = A \times c \quad \rightarrow \quad c = \frac{V}{A} = \frac{0.106}{2.6\,a^2}$$

$$\sin ce \quad c = 1.59\,a \quad \rightarrow \quad V = 0.106 = (1.59\,a)(2.6\,a^2) = 4.13\,a^3$$

$$\rightarrow \quad a = 0.295 \quad nm \quad , \quad c = 1.59\,a = 0.469 \quad nm$$

ب- اتصال اتم ها در امتداد ضلع قاعده



$$a = 2\,r_{Ti} \quad \rightarrow \quad r = \frac{a}{2} = \frac{0.295}{2} = 0.1475 \quad nm$$

عدد همسایگی (Coordination Number or CN)

عدد هم آهنگی یا عدد کوئوردیناسیون، تعداد نزدیک ترین همسایه های یک اتم در ساختار بلوری

تعیین عدد همسایگی

- **۱- موادی با پیوند کووالانسی: CN همان تعداد پیوند های کووالانسی**
- **۲- مواد بدون پیوند کووالانسی: CN تابع uc و نسبت شعاع اتم های همسایه، اگر در ماده ۱ نوع اتم ، CN تابع uc و اگر در ماده ۲ نوع اتم، CN تابع نسبت شعاع های اتمی**

موادی با پیوند کووالانسی

* یادآوری: عناصر گروه ۴ تا ۷ جدول تناوبی دارای این پیوند

تعداد الکترون های ظرفیت – ۸ = تعداد پیوند کووالانسی

- ۱- گروه ۷ یا هالیدها: ۱ پیوند کووالانسی، پس CN=1
- ۲- گروه ۶ (مانند O): حداکثر ۲ پیوند، پس CN حداکثر ۲
- ۳- گروه ۵ (مانند N): حداکثر ۳ پیوند، پس CN حداکثر ۳
- ۴- گروه ۴ (مانند C): حداکثر ۴ پیوند، پس CN حداکثر ۴

19

مواد بدون پیوند کووالانسی

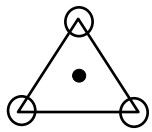
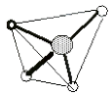
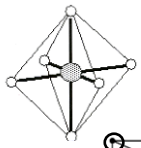
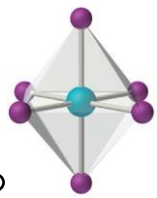
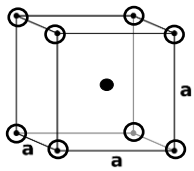
- الف- ماده ۱ نوع اتم، CN طبق جدول بر اساس uc

UC	CN
SC	6
BCC	8
FCC	12
HCP	12

- ب- ماده ۲ نوع اتم، CN بر اساس نسبت شعاع اتم های همسایه (r شعاع اتم کوچکتر، R شعاع اتم کوچکتر)، جدول اسلاید بعد

20

ادامه :

CN	r/R	geometry
3	≥ 0.155	
4	≥ 0.225	
6	≥ 0.414	 
8	≥ 0.732	
12	1	---

* جدول عدد همسایگی- نسبت شعاعی به صورت زیر نیز گزارش می شود

Coordination Number	Radius Ratio
3	0.155 - 0.225
4	0.225 - 0.414
6	0.414 - 0.732
8	0.732 - 1.000

مواد بلوری و غیر بلوری (مبحث ۳-۱۱ تا ۳-۱۳)

- کاربرد تک بلور سیلیسیمی در ریز مدارهای الکترونیکی

- یک هسته انجماد عبارت است از تعدادی اتم مذاب که فاصله اتمی آنها برابر حالت جامد می شود و نظم آنها مانند حالت جامد می گردد. هسته انجماد در دمای انجماد تشکیل می شود

23

- هنگام انجماد، مذاب فلز به چند بلور تبدیل می شود. چون در دمای انجماد در نقاط مختلفی از مذاب، هسته انجماد ظاهر می شود که هر هسته خود یک بلور کوچک است. هر بلور دارای جهت ترجیحی رشد

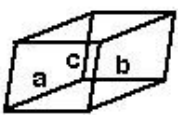
  است که به طور تصادفی در جهتی خاص قرار گرفته و بقیه اتم های مذاب همان جهت رشد را دنبال می کنند. هر هسته در نهایت یک دانه می شود و چند بلور حاصل می شود

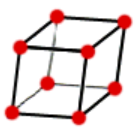
24

ادامه مواد بلوری و غیر بلوری

- ناهمسانی (Anisotropy): وابستگی خواص فیزیکی بلور را به جهت ناهمسانی می گویند
- هر چه تقارن بلور کمتر، ناهمسانی آن بیشتر
- از ۷ uc ، ساختار تری کلینیک کمترین تقارن و بیشترین ناهمسانی را دارد

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





Triclinic

25

* در ابتدای فصل ۳ گفته شد هر ماده بلوری از تکرار یک نوع سلول اولیه در فضا حاصل می گردد، با این وجود برای بعضی از بلورها چند نوع سلول اولیه گزارش شده است. البته در یک شرایط معین تنها یک نوع سلول اولیه پایدار است. ماده ای که دارای چند نوع سلول اولیه است ، دارای چند شکلی است که در ادامه توضیح داده می شود.

26