جهات بلوری (Crystal directions)

در یک uc بی نهایت جهت است. بلورها خواصشان به جهت وابسته ، پس تعیین جهت مهم

*** هر جهت را در بلورشناسی با ۳عدد که به ترتیب نمایانگر تصویر جهت بر محور های x, y, z است نشان می دهند.**
سه عدد را داخل کروشه می گذارند

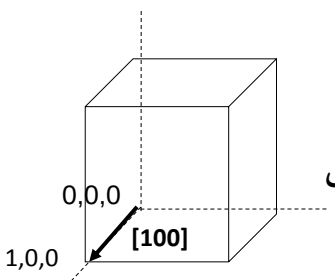
$[u\ v\ w]$

بخوانید جهت u، v ، w
u : مولفه جهت در امتداد x
V : مولفه جهت در امتداد Y
w : مولفه جهت در امتداد Z

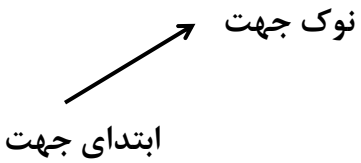
- **اگر مؤلفه های جهتی در یک عدد صحیح ضرب یا تقسیم شود به جهاتی موازی جهت اولیه می رسیم**

$[u\ v\ w] \parallel [nu\ nv\ nw] \parallel [\frac{u}{n}\ \frac{v}{n}\ \frac{w}{n}]$

$[1\ 1\ 1] \parallel [2\ 2\ 2] \parallel [\mathbf{\frac{1}{2}}\ \mathbf{\frac{1}{2}}\ \mathbf{\frac{1}{2}}]$



[1 0 0] جهتی که 0 0 0 یا مبدأ مختصات را به نقطه ی 1 0 0 متصل می کند.



- اگر مولفه های از جهت منفی بود ، به شکل بار روی سر مولفه ها قرار می دهیم $[\bar{1}1\bar{1}]$

- در مبحث جهات ۲ حالت داریم
  الف- نام گذاری جهت رسم شده
  ب- رسم [u v w]

3

نام گذاری جهات بلوری

نوک جهت

$x_2\ y_2\ z_2$

ابتدای جهت

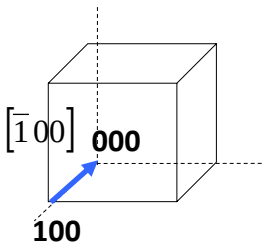
$x_1\ y_1\ z_1$

$$x_2 - x_2 = u$$

$$y_2 - y_1 = v$$

$$z_2 - z_1 = w$$

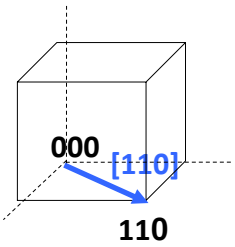
4



$x_2 - x_2 = u \rightarrow 0 - 1 = -1$

$y_2 - y_1 = v \rightarrow 0 - 0 = 0 \Rightarrow [\bar{1}\,0\,0]$

$z_2 - z_1 = w \rightarrow 0 - 0 = 0$

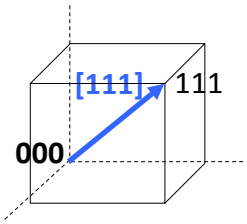


$x_2 - x_2 = u \rightarrow 1 - 0 = 1$

$y_2 - y_1 = v \rightarrow 1 - 0 = 1 \Rightarrow [1\,1\,0]$

$z_2 - z_1 = w \rightarrow 0 - 0 = 0$

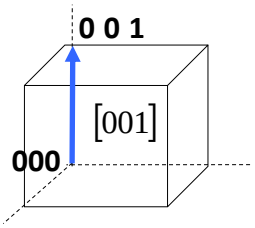
5



$x_2 - x_2 = u \rightarrow 1 - 0 = 1$

$y_2 - y_1 = v \rightarrow 1 - 0 = 1 \Rightarrow [1\,1\,1]$

$z_2 - z_1 = w \rightarrow 1 - 0 = 1$

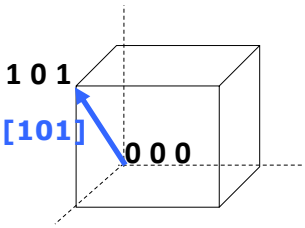


$x_2 - x_2 = u \rightarrow 0 - 0 = 0$

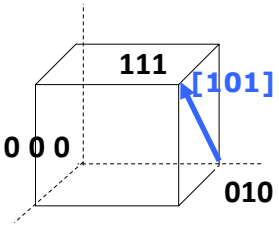
$y_2 - y_1 = v \rightarrow 0 - 0 = 0 \Rightarrow [0\,0\,1]$

$z_2 - z_1 = w \rightarrow 1 - 0 = 1$

6



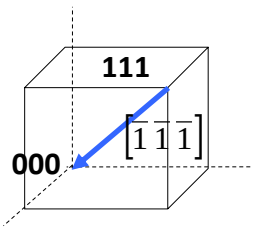
$$x_2 - x_2 = u \rightarrow 1 - 0 = 1$$
$$y_2 - y_1 = v \rightarrow 0 - 0 = 0 \Longrightarrow [1\,0\,1]$$
$$z_2 - z_1 = w \rightarrow 1 - 0 = 1$$



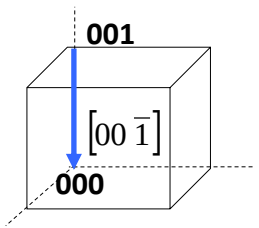
$$x_2 - x_2 = u \rightarrow 1 - 0 = 1$$
$$y_2 - y_1 = v \rightarrow 1 - 1 = 0 \Longrightarrow [1\,0\,1]$$
$$z_2 - z_1 = w \rightarrow 1 - 0 = 1$$

✓ دو جهت ترسیم شده موازی هستند و یک نام دارند.

7



$$x_2 - x_2 = u \rightarrow 0 - 1 = -1$$
$$y_2 - y_1 = v \rightarrow 0 - 1 = -1 \Longrightarrow [\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1}]$$
$$z_2 - z_1 = w \rightarrow 0 - 1 = -1$$



$$x_2 - x_2 = u \rightarrow 0 - 0 = 0$$
$$y_2 - y_1 = v \rightarrow 0 - 0 = 0 \Longrightarrow [0\,0\,\bar{1}]$$
$$z_2 - z_1 = w \rightarrow 0 - 1 = \bar{1}$$

8

* از مثال ها نتیجه می گیریم

- یال مکعب را با ۲ صفر و ۱ یک نمایش می دهند مانند

$[100]$ $[\bar{1}00]$ $[010]$ .....

- قطر وجه مکعب را با ۲ یک و ۱ صفر نشان می دهند مانند

$[101]$ $[011]$ $[\bar{1}10]$ .....

- قطر مکعب را با ۳ یک نشان می دهند مانند

$[111]$ $[\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1}]$ ...

- مقایسه $[\bar{1}00]$ $[100]$ یا $[\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1}]$ $[111]$ نشان می دهد، اگر تمام مولفه های جهتی در منفی ضرب شود، ۲ جهت بر هم منطبق اما سمت بر عکس هم دارند

9

رسم [u v w]

جهتی داده شده ، باید رسم کنیم

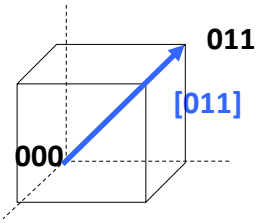
* اگر تمام مولفه های جهت مثبت، مختصات نقطه ای را بدست می آوریم که معادل مولفه های جهت و از مبدا به این نقطه وصل می کنیم

* اگر یک یا چند مولفه منفی، مبدا مختصات را طوری تغییر داده که مولفه های منفی را بتوان درون uc نشان داد و از مبدا جدید به این نقطه وصل می کنیم

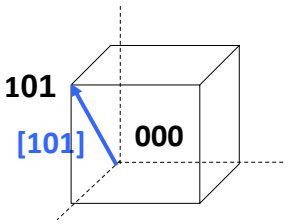
10

مثال رسم [u v w]

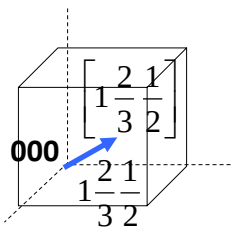
* **[011] رسم کنید**



* **[101] رسم کنید**



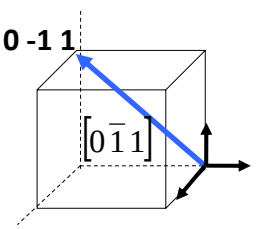
* $\left[1\frac{2}{3}\frac{1}{2}\right]$ **رسم کنید**



11

مثال رسم [u v w]

* $[0\bar{1}1]$ رسم کنید.



مولفه دوم جهت منفی است . پس باید مبدا را به گوشه
دیگر مکعب منتقل کرد طوری که بتوان ۱- را در سلول اولیه نشان داد.

12

جهات هم خانواده

*** جهاتی که خواص فیزیکی یکسان دارند یا جهاتی که از لحاظ بلوری هم ارزش ، در مکعب ۳ سری جهات هم خانواده مهم**

☐ ۱- جهات معرف یال مکعب ، ۶ جهت معرف ۱۲ یال

$[100]\ [010]\ [001]\ [\bar{1}00]\ [0\bar{1}0]\ [00\bar{1}] \equiv \langle 100 \rangle$

۶ جهت از لحاظ بلوری هم ارزش و به جهات هم خانواده ۱، ۰، ۰
یا ⟨100⟩ تعلق دارد

☐ ۲- جهات معرف قطر وجه مکعب

$[110]\ [101]\ [011]$
$[\bar{1}\bar{1}0]\ [\bar{1}0\bar{1}]\ [0\bar{1}\bar{1}]$ $\equiv \langle 110 \rangle$
$[\bar{1}10]\ [1\bar{1}0]\ [10\bar{1}]\ [\bar{1}01]\ [01\bar{1}]\ [0\bar{1}1]$

۱۲ جهت از لحاظ بلوری هم ارزش و به ⟨110⟩ تعلق دارد

☐ ۳- جهات معرف قطر مکعب

$$\begin{matrix}[111]\ [\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1}] \\ [\bar{1}11]\ [1\,\bar{1}\,1]\ [11\,\bar{1}] \\ [\bar{1}\,\bar{1}\,1]\ [\bar{1}1\,\bar{1}]\ [1\,\bar{1}\,\bar{1}]\end{matrix} \equiv \langle 111 \rangle$$

۸ جهت ، از لحاظ بلوری هم ارزش و به $\langle 111 \rangle$ تعلق

15

* اتصال اتم ها در SC در امتداد $\langle 100 \rangle$

* اتصال اتم ها در BCC در امتداد $\langle 111 \rangle$

* اتصال اتم ها در FCC در امتداد $\langle 110 \rangle$

16

زاویه بین جهات

زاویه بین ۲ جهت $[u_1v_1w_1]$ و $[u_2v_2w_2]$

$$\cos\theta = \frac{u_1u_2 + v_1v_2 + w_1w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} \cdot \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}}$$

17

مسئله

* زاویه بین $[100]$ و $[1\bar{1}0]$ را بدست آورید.

$$\boldsymbol{\cos\theta = \frac{1\times1 + 0\times(-1) + 0\times0}{\sqrt{1^2+0^2+0^2}\cdot\sqrt{1^2+(-1)^2+0^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \rightarrow}$$

$$\boldsymbol{\theta = 45^\circ}$$

18

چگالی خطی یا دانسیته خطی (Linear density)

تعداد اتم های یک ساختار بلوری در واحد طول یک جهت مشخص

$$LD = \frac{No.of\ atoms}{length} \qquad \left(\frac{1}{mm}\right) \quad or \quad mm^{-1}$$

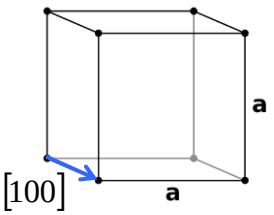
- **روش کار**

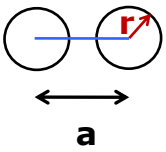
۱- uc را با اتم ها رسم کرده ، جهت مورد نظر مشخص کرده و بیرون می کشیم

۲- اگر اتم با جهت در ۱ شعاع مشترک بود سهم $\frac{1}{2}$ و اگر در ۱ قطر مشترک بود سهم ۱

مسئله

چگالی خطی را در $[100]$ مکعب ساده محاسبه کنید (بر حسب ثابت شبکه ای و شعاع اتمی).





می دانیم در مکعب ساده

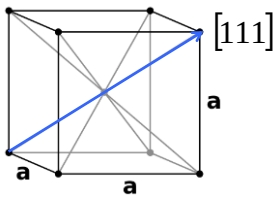
$$for\ SC \rightarrow a \approx 2r$$

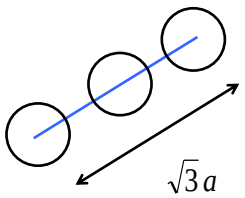
پس چگالی خطی می شود

$$LD_{[100]SC} = \frac{2\times\frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a} = \frac{1}{2r}$$

مسئله

چگالی خطی را در $[111]$ **، BCC بر حسب ثابت شبکه ای و شعاع اتمی بدست آورید.**





می دانیم در BCC

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

پس چگالی خطی می شود

$$LD_{[111]BCC} = \frac{2\times\frac{1}{2}+1\times1}{\sqrt{3}\,a} = \frac{2}{\sqrt{3}\,a} = \frac{2}{4r} = \frac{1}{2r}$$

* **اگر LD را در امتداد** $\langle 100 \rangle$ **،** $\langle 110 \rangle$ **و** $\langle 111 \rangle$ **برای SC ، BCC و FCC محاسبه کنیم داریم**

* **بیشترین LD در SC در امتداد** $\langle 100 \rangle$

* **بیشترین LD در BCC در امتداد** $\langle 111 \rangle$

* **بیشترین LD در FCC در امتداد** $\langle 110 \rangle$

sed on intersection with the cell boundaries

Indicated with square brackets [*h, k, l*]

- Direction 1 — 1, 0, 0 = [100]
- Direction 2 — 0,1,0 = [010]
- Direction 3 — 1, 0, 1 = [101]
- Direction 4 — 1, 1, 1 = [111]
- Direction 5 — ½, 1, 0 = [120]
- Direction 6 — ½, ½, 1 = [112]

-- Parallel directions have the same value