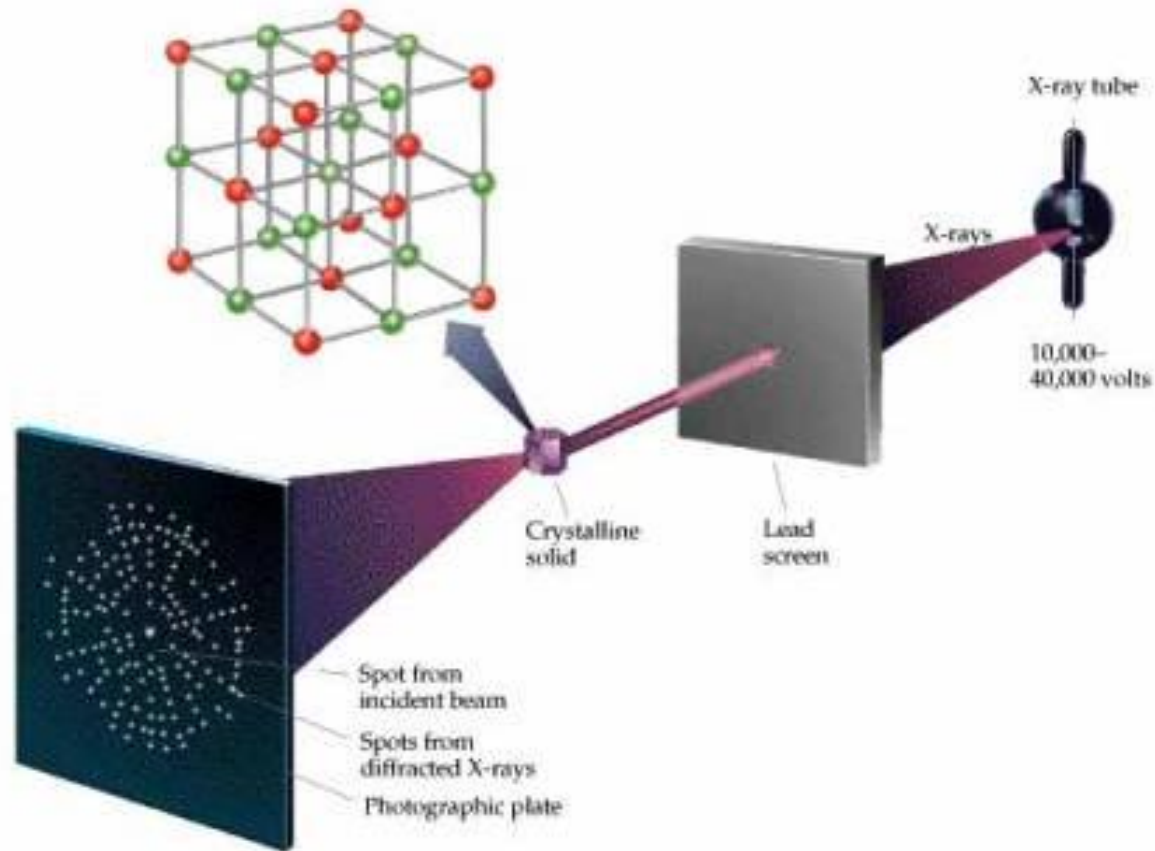
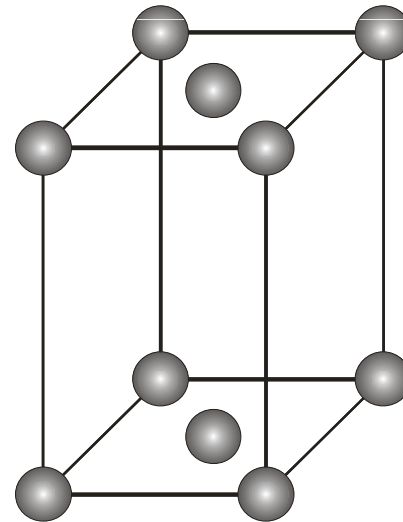
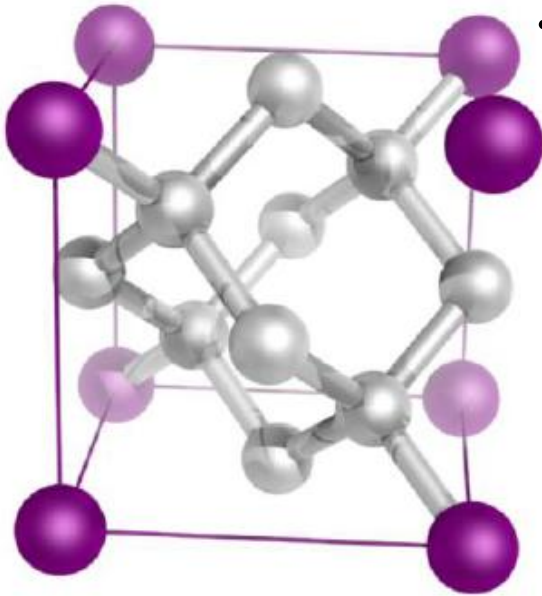


بلور شناسی مقدماتی



بلورشناسی چیست؟

○ بررسی جامدات متبلور، چگونگی تشکیل و رشد آن ها، ساختمان درونی، شکل ظاهری و خواص فیزیکی و شیمیایی مربوط به آنها را بلورشناسی می گویند.



طبقه بندی جامدات



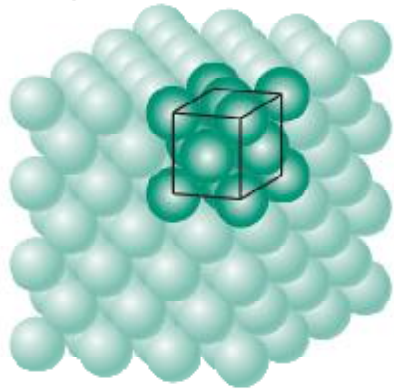
بی شکل (آمورف)



بلور

بلور چیست؟

○ به مواد معدنی جامدی که اجزای سازنده آن ها (مولکول، اتم یا یون ها) در سه جهت فضایی در یک ساختار منظم و تکرار شونده کنار هم قرار گرفته باشند و دارای نظم بلورشناسی باشند، کریستال یا بلور می گویند. در زبان یونانی کریستال به معنای منجمد شده در اثر سرماست. به مواد فاقد نظم درونی در اصطلاح آمورف گفته می شود.

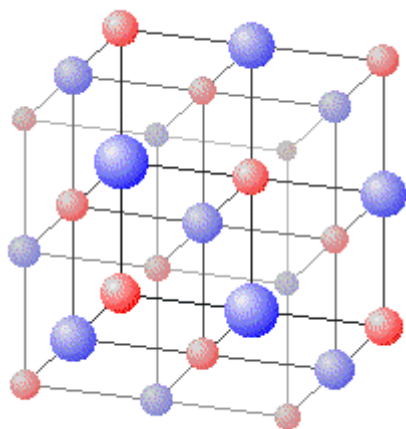


شبکه بلورین

○ آرایش سه بعدی از نقاط را شبکه می نامند.

○ از آنجایی که کار کردن (انجام محاسبات، توصیف و...) با اتم ها بعضاً مشکل است (مثلاً از نقطه نظر ترسیم) ترجیح می دهیم از مفاهیم هندسی مانند شبکه که کار کردن با آن و انجام محاسبات با آن ساده تر است، استفاده کنیم.

○ در این حالت به جای هر اتم یا دسته ای از اتم ها یا مولکول ها یک نقطه می گذاریم. به آرایه به دست آمده شبکه Lattice گفته می شود.



○ در فلزات به جای هر اتم یک نقطه قرار می گیرد

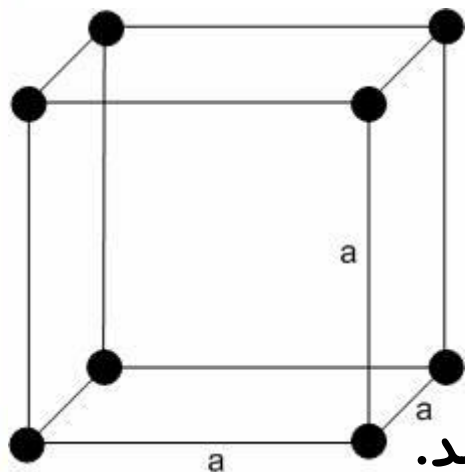
ولی در ساختارهای پیچیده که از مولکول هایی با ترکیبات

پیچیده ایجاد شده اند، یک نقطه می تواند نماینده یک یا چند

مولکول باشد که در این حالت استفاده از مفهوم شبکه کار را بسیار ساده می کند.

سلول واحد

○ از آن جایی که ساختارهای بلورین از کنار هم قرار گرفتن اتم‌ها در کنار هم به صورت منظم و تکرار شونده به دست می‌آیند، این امکان وجود دارد که بتوان یک واحد سازنده را پیدا کرد که از تکرار آن کل ساختار را ایجاد کرد. به این واحد تکرار شونده سلول واحد unit cell گفته می‌شود.



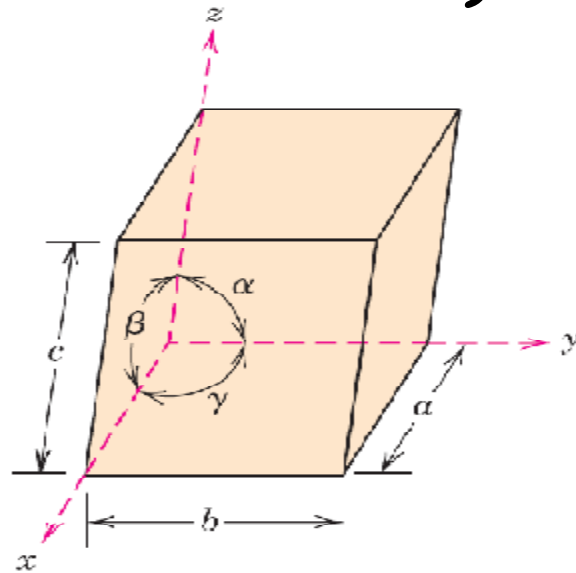
○ تعریف Unit cell: کوچک‌ترین واحد یک

ساختار کریستالی که از تکرار آن کل ساختار

ایجاد شود و کل خواص ساختار را در خود حفظ کند.

پارامترهای سلول واحد

○ سلول واحد می تواند اشکال مختلفی داشته باشد. سلول واحد در حالت کلی به صورت یک متوازی السطوح در نظر گرفته می شود که با ۶ پارامتر توصیف می شود که عبارتند از:



a, b, c

α, β, γ

محورهای بلورشناسی

در بلورشناسی محورهای فرضی موسوم به محورهای بلورشناسی به کار گرفته می شوند که منطبق بر محورهای ریاضی بوده و آن ها را با a ، b و c طوری در نظر می گیرند که :

۱- بردار a به طرف بیننده و بر محور X ها منطبق است.

۲- بردار b از چپ به طرف راست امتداد داشته و بر Y منطبق است.

۳- بردار c از پایین به بالا و بر محور Z ها منطبق است.



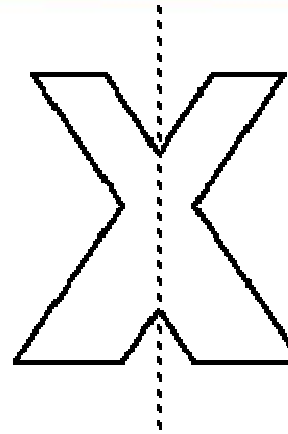
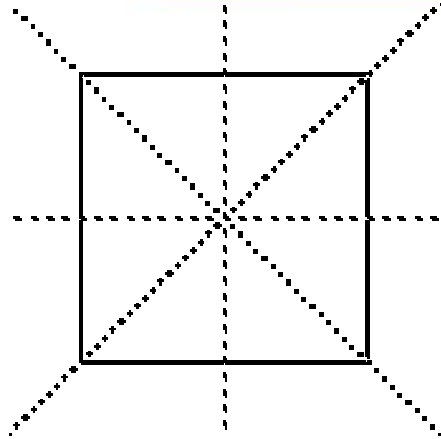
تقارن

○ یکی از قوانین مهم بلورشناسی قانون یا اصل تقارن است. با دقت در اجزای یک بلور متوجه می شویم که بعضی از سطوح، یال ها و گوشه های آن به یکدیگر شبیه هستند و با دقت بیشتر متوجه می شویم که این اجزاء هم شکل با نظم مشخصی تکرار می شوند. تکرار منظم اجزاء خارجی بلور که آنها را موتیف یا طرح الگوئی نیز می گویند، به دلیل اثر عوامل و یا عناصر تقارنی است.

○ تقارن در علم بلورشناسی عبارت است از تکرار و انطباق اجزای نظیر در یک کریستال بر روی یکدیگر. این عمل باعث تکرار و انطباق موتیف‌های تقارن می‌گردد.

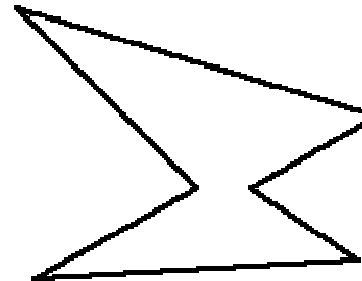
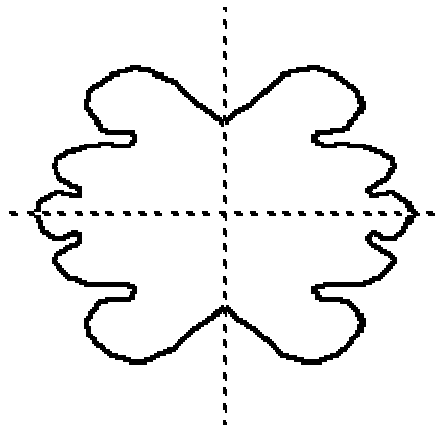


عناصر تقارن



○ محور تقارن

○ سطح تقارن

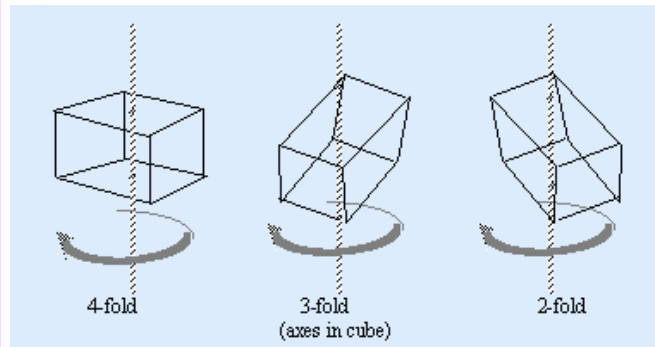


○ مرکز تقارن

محور تقارن (A)

○ محور تقارن را می توان به صورت خطی فرضی در نظر گرفت که از مرکز جسم می گذرد و اگر جسم را حول آن بچرخانیم اجزای هم شکل یا متقارن به فواصل زاویه ای معینی تکرار می شوند. محورهای تقارن فقط از درجه های ۲، ۳، ۴ و ۶ هستند.

○ البته گاهی اصطلاح محور درجه یک را در مواردی که اجزاء پس از



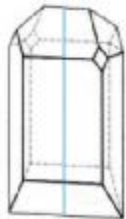
۳۶۰ درجه دوران تکرار می شوند، نیز به

کار می برند. درجه محور تقارن را از رابطه

$$n = 360/a$$

به دست می آید که در آن n

درجه محور و a فاصله زاویه ای تکرار می باشند.



محور تقارن درجه ۲، ۳، ۴ و ۶

○ محور تقارن درجه ۲ (A_2): در این نوع محور اجزای نظیر در هر دوران ۳۶۰ درجه، فقط دو بار رویت می شوند.

○ محور تقارن درجه ۳ (A_3): در این نوع محور اجزای نظیر در هر دوران ۳۶۰ درجه، فقط سه بار رویت می شوند.

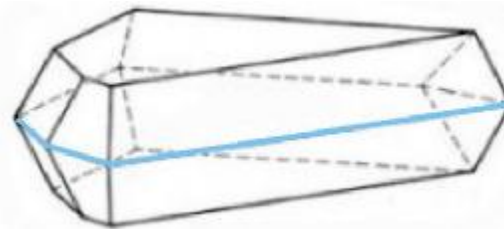
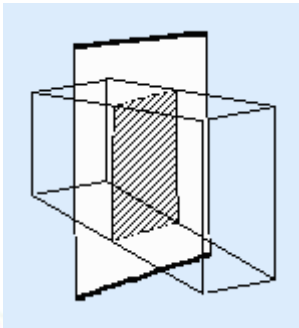
○ محور تقارن درجه ۴ (A_4): در این نوع محور اجزای نظیر در هر دوران ۳۶۰ درجه، فقط چهار بار رویت می شوند.

○ محور تقارن درجه ۶ (A_6): در این نوع محور اجزای نظیر در هر دوران ۳۶۰ درجه، فقط شش بار رویت می شوند.



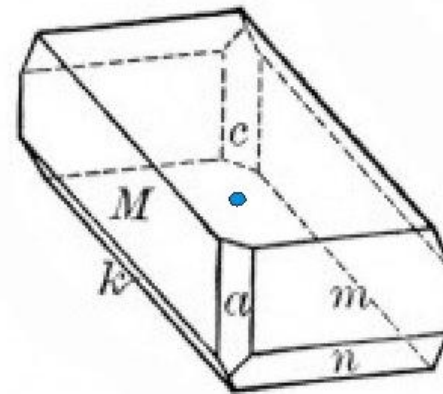
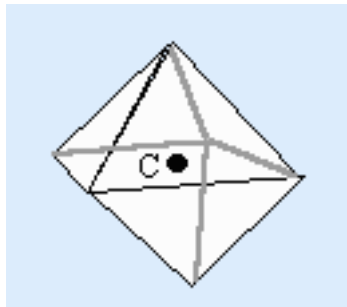
سطح تقارن (P)

○ سطح تقارن را می توان مانند آینه ای در نظر گرفت که تصویر اجسام را نسبت به سطح خود قرینه نشان می دهد. سطوح متقارن نسبت به سطح تقارن حالت دست چپ و راست را دارند. گاهی محور تقارن بر سطح تقارن عمود است. این حالت را به صورت A/P نشان می دهند.



مرکز تقارن (C)

○ مرکز تقارن یک نقطه فرضی در مرکز هر بلور است که اجزاء هم شکل بلور نسبت به آن و در فاصله مساوی و با زاویه 180° درجه قرینه آن قرار دارند.

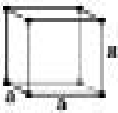
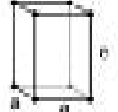
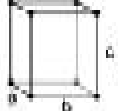



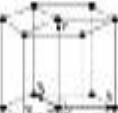


سیستم های تبلور و عناصر تقارن

مرکز تقارن	صفحه تقارن	محور تقارن					
		درجه ۶	درجه ۴	درجه ۳	درجه ۲	درجه ۱	
۱	۹		۳	۴			مکعبی
۱	۵		۱				تتراگونال
۱	۳		۱		۳		اورتورومبیک
۱	۳			۱			تری گونال
۱	۷	۱					هگزاگونال
۱	۰				۱		مونوکلینیک
۱	۰	۰	۰	۰	۰	۱	تری کلینیک



سیستم های تبلور

شکل هندسی سلول واحد	زوایای بین محورها	ارتباط پارامترهای شبکه	سیستم بلوری
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b = c$	مکعبی
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$	تتراگونال
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	اورتورمبیک
	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$a = b = c$	رومبوهدرال (تری گونال)
	$\beta = \gamma = 90^\circ \neq \alpha$	$a \neq b \neq c$	مونو کلینیک
	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	تری کلینیک
	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$a = b \neq c$	شش‌التهال

○ مکعبی یا کوبیک

○ تتراگونال

○ هگزاگونال

○ تری گونال

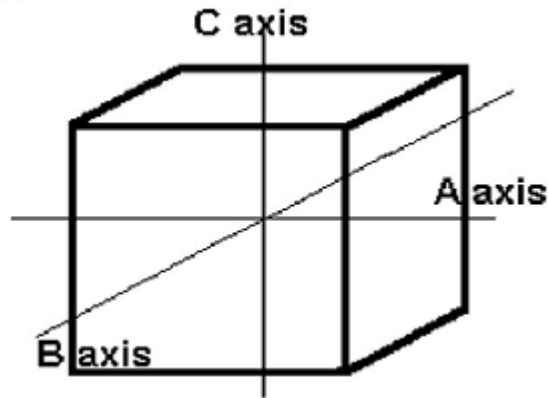
○ اورتورومبیک

○ مونو کلینیک

○ تری کلینیک



سیستم های تبلور (کوبیک)



○ اولین و ساده ترین سیستم تبلور

○ سیستم هم بعد یا ایزومتریک

○ دارای سه محور با طول یکسان

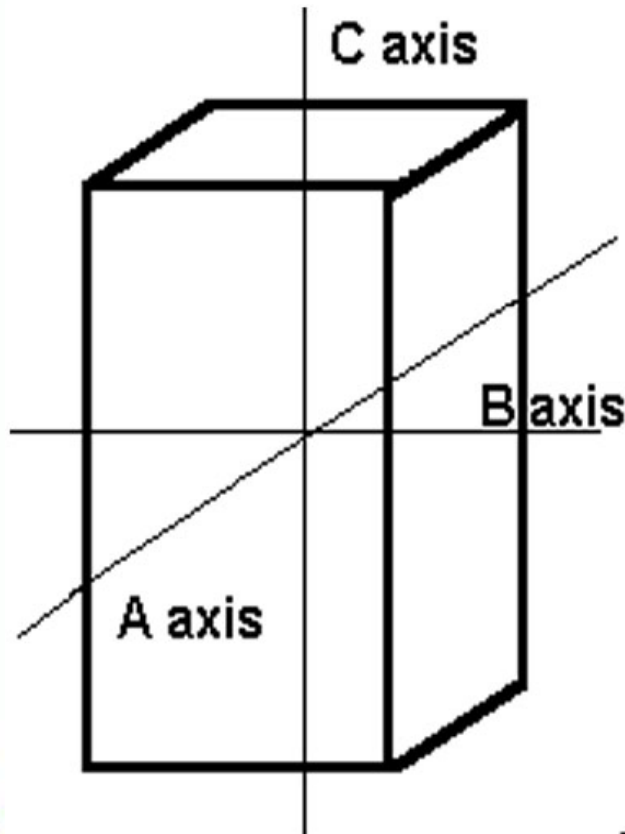
○ زوایای محورها با یکدیگر: ۹۰ درجه

○ کانی های معروف: الماس، گالن، گارنت، فلوئورین،

طلای طبیعی، نقره طبیعی، هالیت، پیریت، اسپینل، ...

سیستم های تبلور (تتراگونال)

○ دارای سه محور که محورهای A و B هم اندازه و محور C بلندتر از آن دو است.



○ زوایای محورها با یکدیگر: ۹۰ درجه

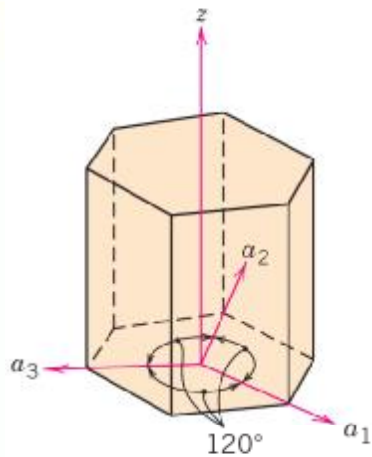
○ کانی های معروف: روتیل، زیرکن،

کاسیتريت، کالکوپیریت، شئلیت، ...



سیستم های تبلور (هگزاگونال)

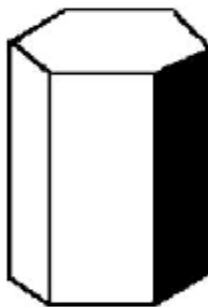
○ دارای سه محور هم اندازه و در این سیستم تبلور یک محور اضافی وجود دارد که وجه ششم بلور را تشکیل می دهد.



○ زوایای محورها با یکدیگر: تحت زاویه ۶۰ درجه یکدیگر را قطع می کنند. محور قائم یا محور C بر سه محور کوچکتر عمود می شود.

Hexagonal System

○ کانی های معروف: کوارتز، نفلین، وورتزیت، آپاتیت، بریل، ...



Hexagonal Prism



Hexagonal Dipyramid

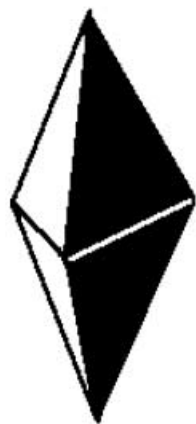


سیستم های تبلور (تری گونال، رومبوهدرال)

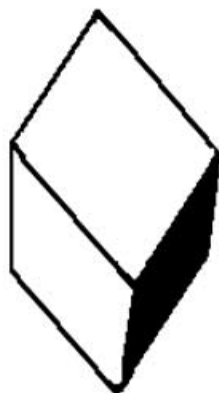
○ سیستم تریگونال در حقیقت یک زیر سیستم از سیستم هگزاگونال محسوب می شود.

○ کانی های معروف: کَرندوم، دیوپتاز، دولومیت، هماتیت، آمیتیست،

Trigonal System



Dipyramid



Rhombohedron



Scalenohedron



تورمالین، ...

سیستم های تبلور (اورتورومبیک)

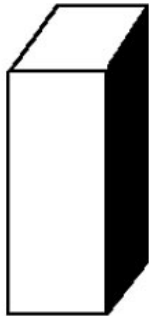
○ دارای سه محور با اندازه های متفاوت

○ زوایای محورها با یکدیگر: ۹۰ درجه

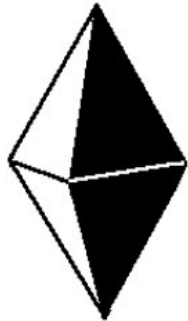
○ کانی های معروف: توپاز، انستاتیت، گوگرد، سیلیمانیت، آندالوزیت،

الیوین، اپیدوت، همی مورفیت، ...

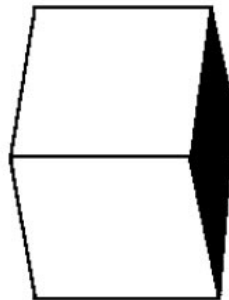
Orthorhombic System



Prism



Dipyramid



Prism



سیستم های تبلور (مونوکلینیک)

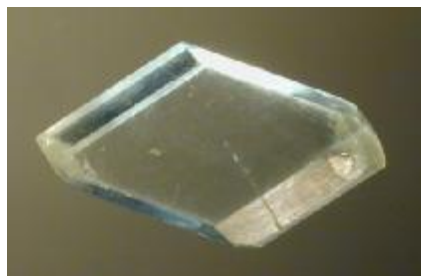
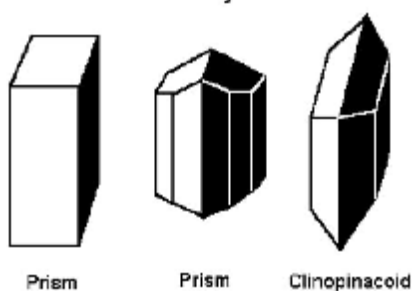
○ دارای سه محور با طول متفاوت

○ زوایای سه محور با یکدیگر: دو محور A و C تحت زاویه ۹۰ درجه یکدیگر را قطع می کنند اما محور B تحت زاویه ای متفاوت با آن ها برخورد دارد.

○ کانی های معروف: آزوریت، ملاکیت، ژیپس، دیوپسید، بیوتیت،

اسفن، اوژیت، ارتوکلاز، ...

Monoclinic System



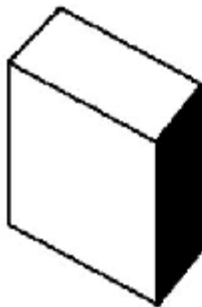
سیستم های تبلور (تری کلینیک)

○ دارای سه محور با طول های متفاوت

○ زوایای محورها با یکدیگر: هیچ یک تحت زاویه ۹۰ درجه برخورد نمی کنند.

○ کانی های معروف: ولاستونیت، پکتولیت، کائولینیت، کیانیت، لابرادوریت، میکروکلین ...

Triclinic System



Prism



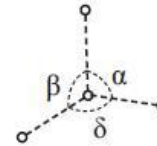
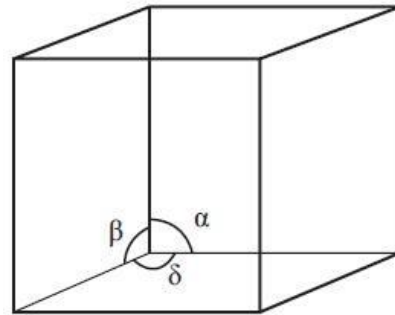
Prism



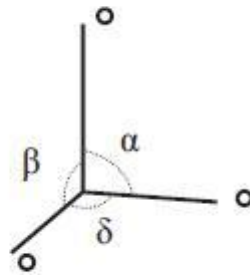
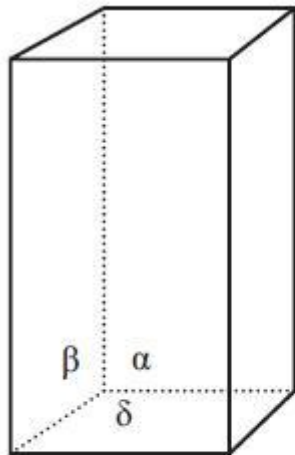
Dipyramid



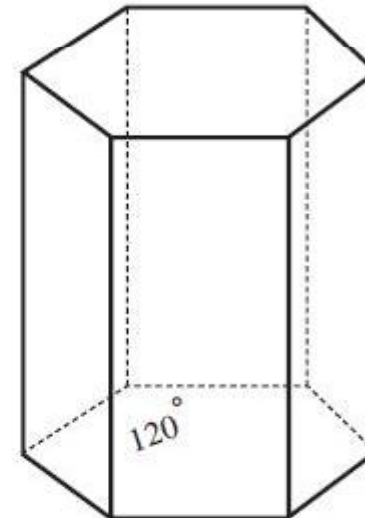
سیستم های تبلور



سیستم کوبیک

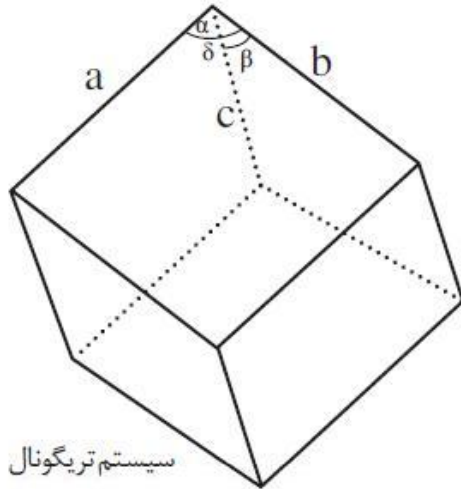


سیستم تتراگونال

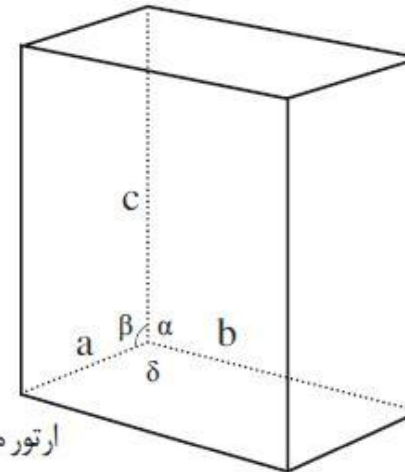


سیستم هگزاگونال

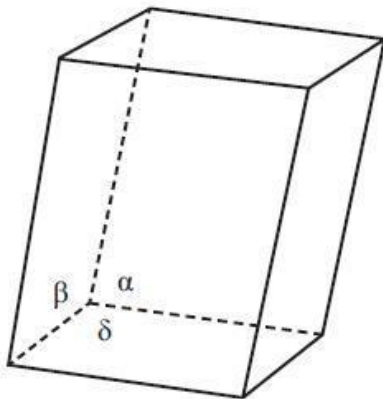
سیستم های تبلور



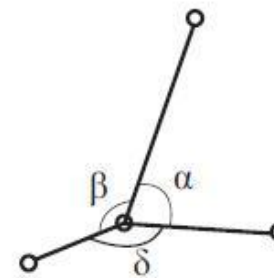
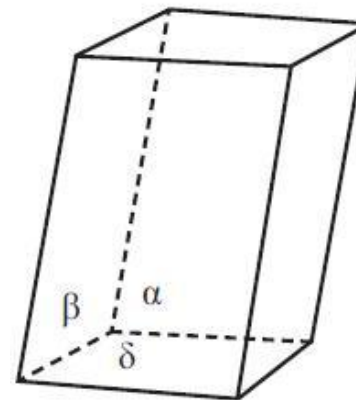
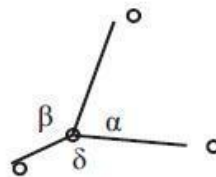
سیستم تریگونال



ارتور مبیك




مونوکلینیک



تری کلینیک

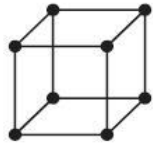
شبکه های براوه

سطوح مرکزدار (Face Centered)	مرکزدار (Body Centered)	قاعده های مرکز دار (Base Centered)	ساده (Primitive)	
				مکعبی
				تتراگونال
				اورتورومبیک
				تری گونال
				هگزاگونال
				مونوکلینیک
				تری کلینیک

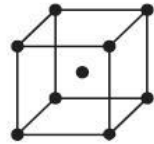
براهه ثابت کرد که با اضافه شدن نقاط و یا گره هایی به مرکز سلول و یا به مرکز بعضی از سطوح آن، هفت سلول جدید ایجاد می شود که با هفت سلول اولیه جمعاً ۱۴ شبکه موسوم به شبکه های براوه به وجود می آید. مثلاً اگر به مرکز یک سلول واحد مکعبی ساده یک اتم اضافه شود، شبکه مکعبی مرکزدار، اگر در مرکز هریک از سطوح جانبی یک اتم قرار گیرد، شبکه مکعبی سطوح مرکزدار و اگر گره ها فقط در مرکز دو قاعده قرار گیرند، شبکه قاعده مرکزدار شکل می گیرد.

۱۴ شبکه براوه

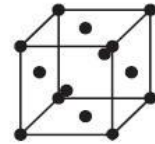
The 14 Crystal (Bravais) Lattices



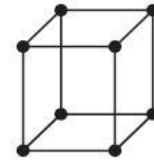
Simple cubic



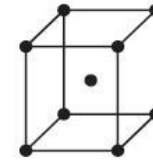
Body-centered cubic



Face-centered cubic



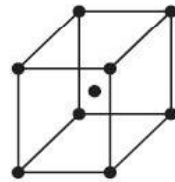
Simple tetragonal



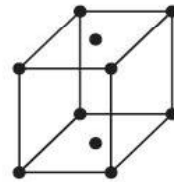
Body-centered tetragonal



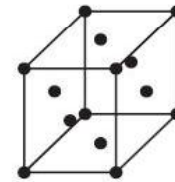
Simple orthorhombic



Body-centered orthorhombic



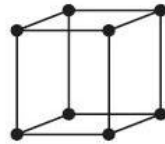
Base-centered orthorhombic



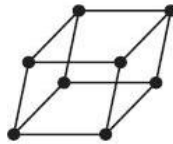
Face-centered orthorhombic



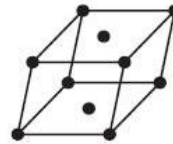
Rhombohedral



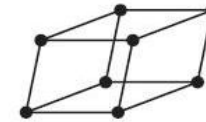
Hexagonal



Simple monoclinic



Base-centered monoclinic

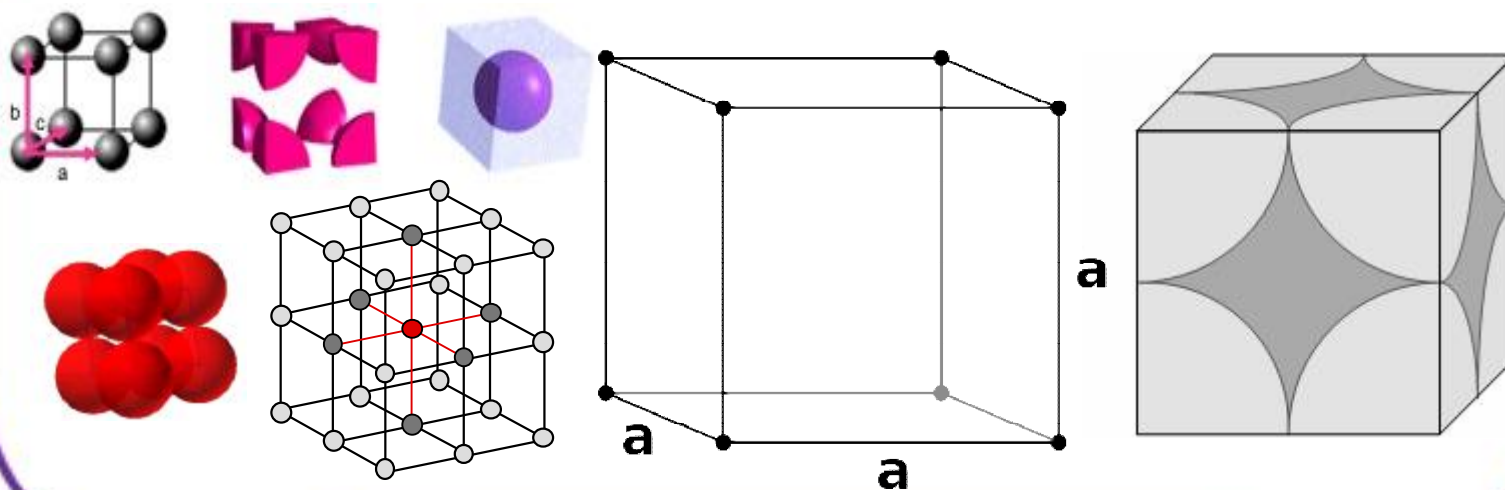


Triclinic



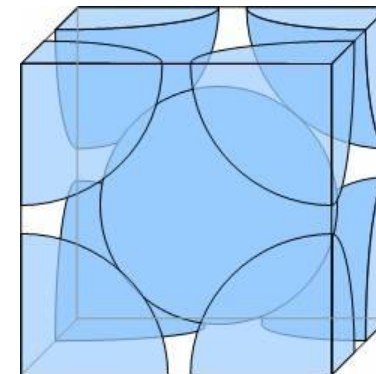
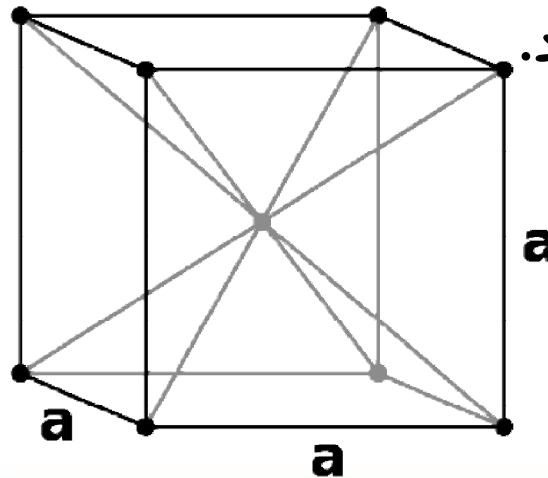
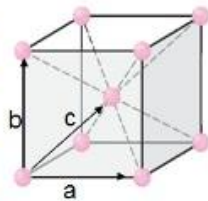
مکعب ساده (SC)

○ مکعب ساده یک نقطه شبکه دارد. بنابراین سلول واحد اولیه است. در سلول واحد سمت چپ اتم های هر گوشه باید برش بخورند چرا که تنها یک هشتم آنها به سلول واحد تعلق دارد. بقیه متعلق به سلولهای کناری هستند. عدد کوردینانسی مکعب ساده شش است.



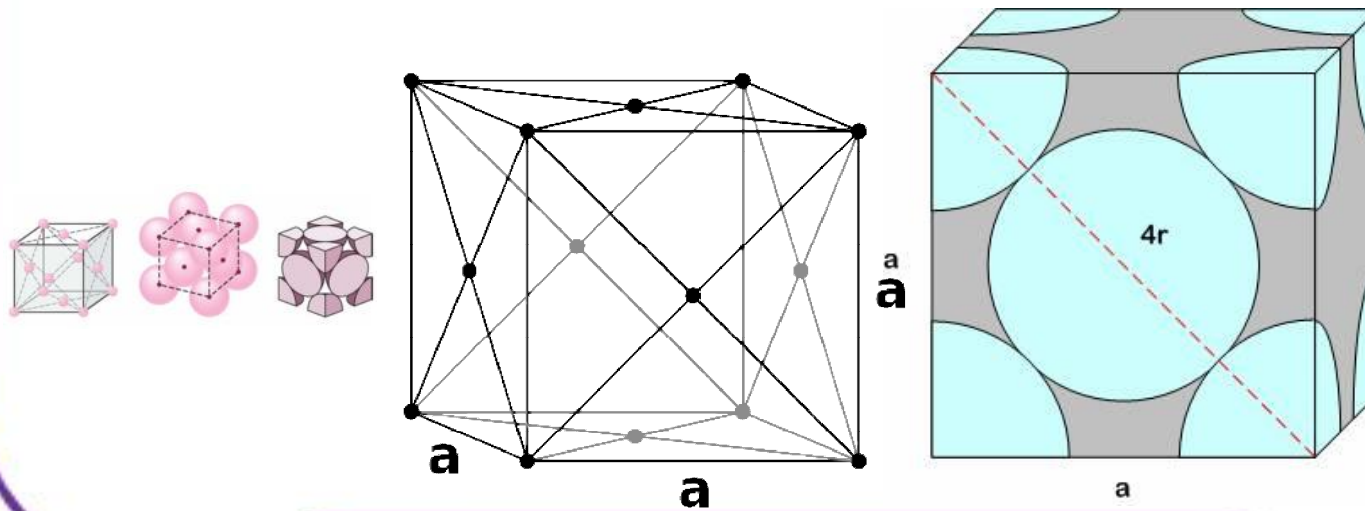
مکعب مرکزدار (BCC)

این ساختار دو نقطه شبکه دارد. بنابراین یک شبکه اولیه نیست. مکعب مرکزدار، هشت همسایه نزدیک دارد. تماس هر اتم در سلول واحد با همسایه هایش تنها از مسیر قطر است. در بسیاری از فلزات مانند فلزات قلیایی و بسیاری از عناصر واسطه ساختار BCC وجود دارد.



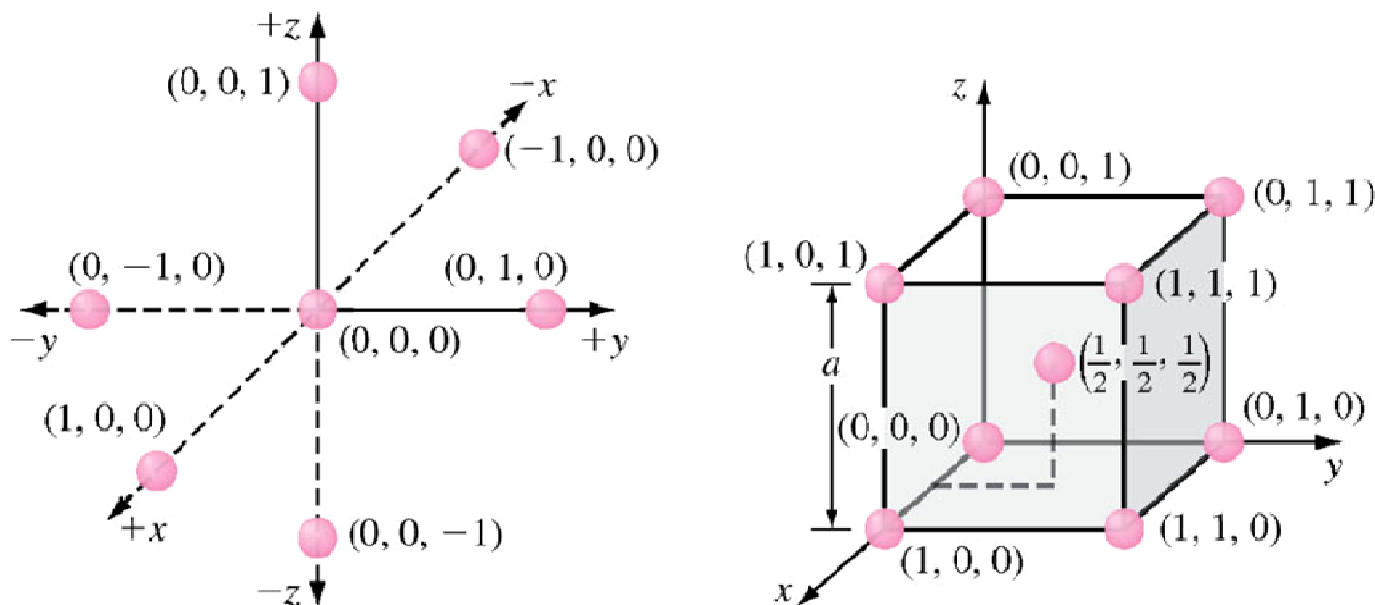
مکعب سطوح مرکزدار (FCC)

○ اتم ها علاوه بر گوشه های مکعب در وسط هر وجه نیز اضافه شده اند. ساختار مکعبی با سطوح مرکزدار، ۴ اتم (یکی در مرکز و ۶ نیم اتم در ۶ وجه که ۳ اتم را در مجموع می سازند) دارد. این سلول یک سلول اولیه نیست. بسیاری از فلزات معمول (مس، نیکل، سرب) ساختار FCC دارند.



جهات کریستالی

مکانهای شبکه در سلول واحد مکعبی به شکل زیر تعیین می شوند:

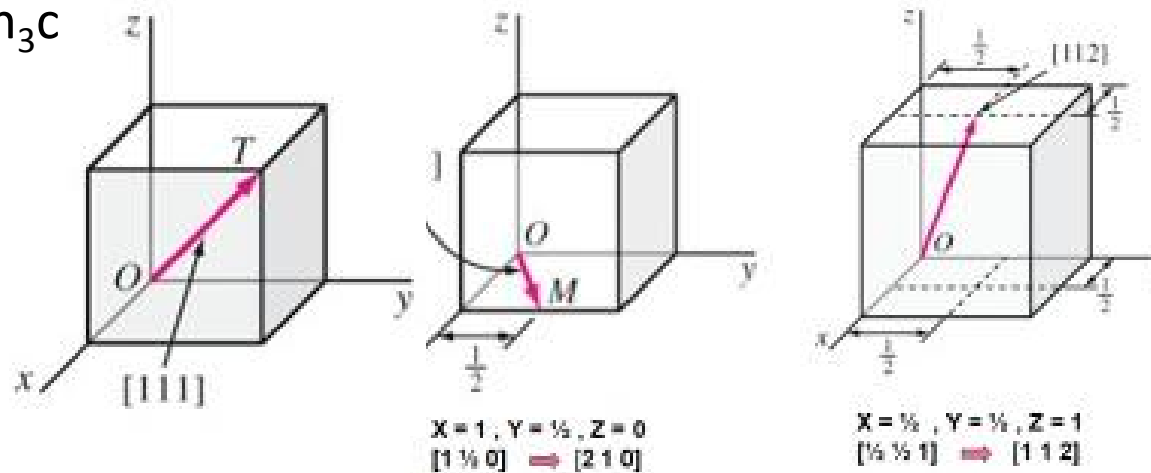


یک نقطه شبکه را به عنوان مبدا در نظر می گیریم. آن را O یا Origin می نامیم. انتخاب مبدا کاملاً دلخواه است. زیرا همه نقاط شبکه شبیه به هم هستند.

جهت کریستالی

سپس بردار شبکه را انتخاب کرده و نقطه O را به آن با یک خط وصل می کنیم. این نقطه را T می نامیم. این بردار را می توان به شکل زیر نوشت:

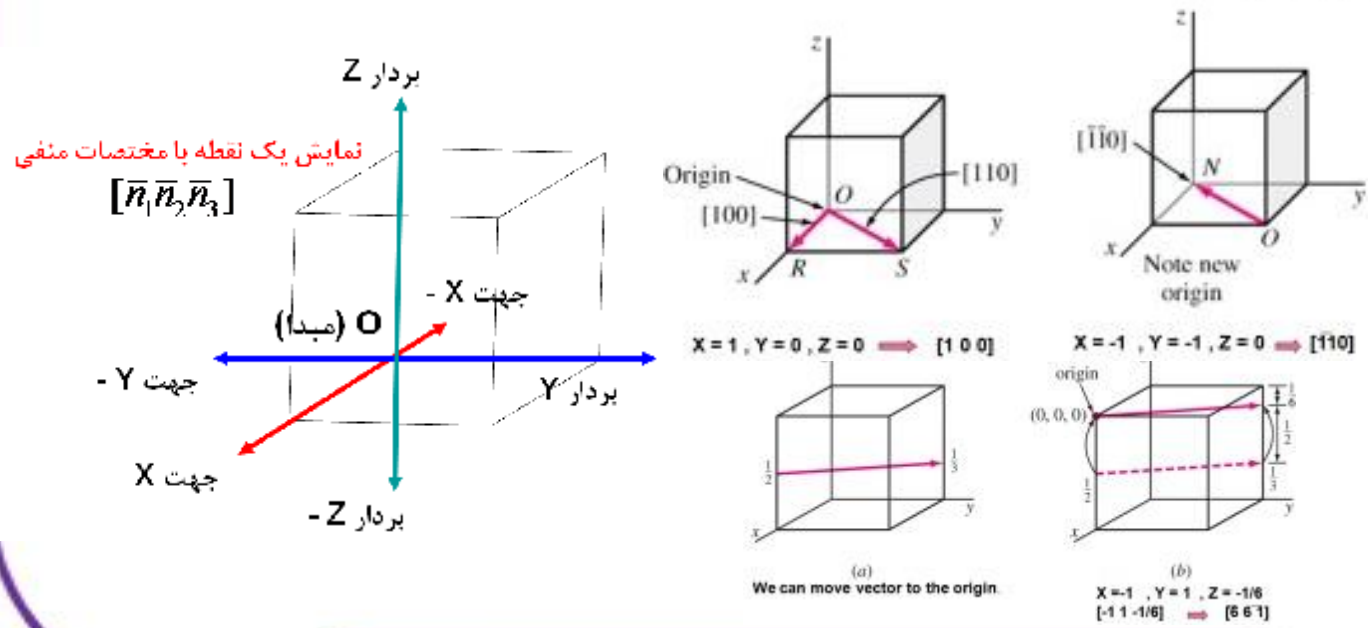
$$R = n_1a + n_2b + n_3c$$



برای تشخیص جهت شبکه از یک نقطه آن، از سه مولفه فضایی استفاده می شود که در داخل براکت $[\]$ قرار می گیرند. این سه عدد به صورت $[n_1, n_2, n_3]$ نوشته می شوند. این مقادیر کوچک ترین عدد صحیح نرخ های نسبی مشابه است.

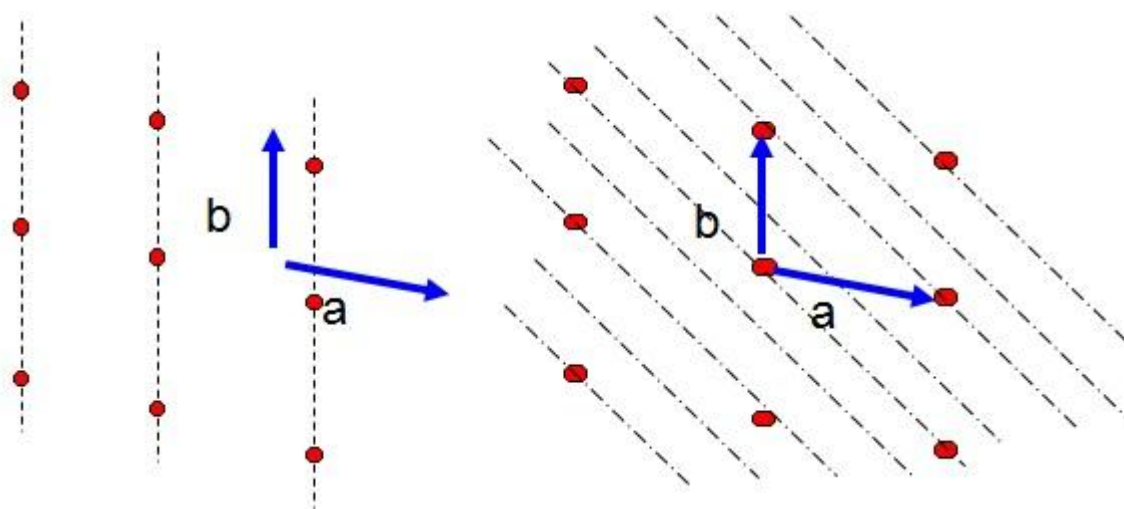
جهات کریستالی (جهات منفی)

وقتی که جهت را برای اعداد داخل براکت می نویسیم به مبدا توجه کرده و علامت های منفی را در اینجا با یک خط روی هر عدد نشان می دهیم: $[\bar{n}_1\bar{n}_2\bar{n}_3]$ بردارها باید کمترین اعداد صحیح انتخاب شوند.



صفحات کریستالی

در یک شبکه کریستالی می توان مجموعه صفحاتی موازی با فاصله برابر را شناسایی کرد. این صفحات صفحات شبکه نام دارند. در شکل مشاهده می کنید که تراکم نقاط شبکه روی هر صفحه از دسته صفحات با هم برابر است و همه نقاط شبکه در صفحه و موقعیت مشابهی تکرار می شوند.



اندیس های میلر

اندیس های میلر نمایش برداری نمادین برای آرایش یک صفحه از اتم ها در یک شبکه کریستال است و کسر معکوس محل تلاقی های صفحه با محورهای کریستالوگرافی است. برای تعیین اندیس های میلر یک صفحه مراحل زیر را انجام دهید:

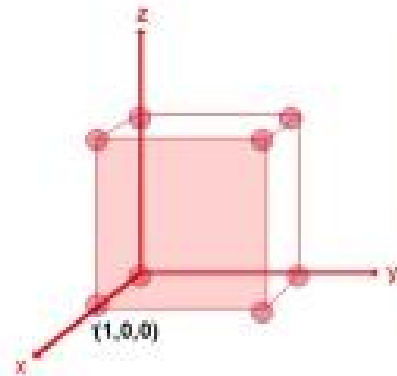
مرحله ۱: محل تقاطع صفحه را با سه محور کریستالوگرافی تعیین کنید.

مرحله ۲: کسر معکوس هر نقطه را ترسیم کنید.

مرحله ۳: اگر نسبت ها درست بود آن را در ضریب کوچک ترین نسبت ضرب کنید.

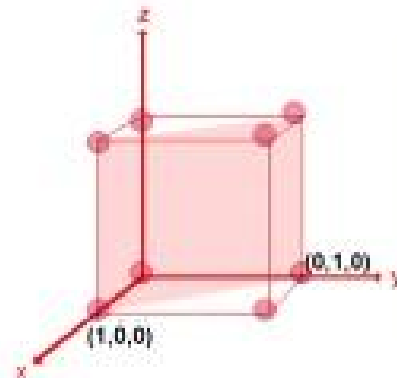


اندیس های میلر – مثال ها



محاور	X	Y	Z
نقاط تقاطع صفحه	1	∞	∞
معکوس	1/1	1/ ∞	1/ ∞
کوچکترین نسبت	1	0	0

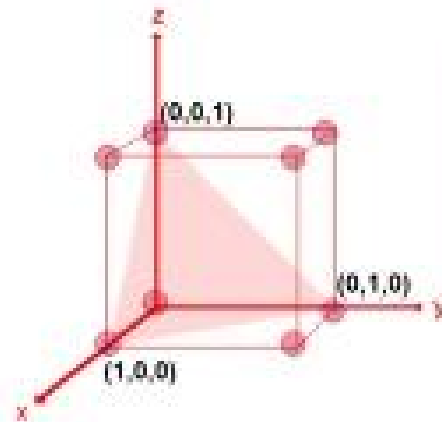
اندیس میلر (100)



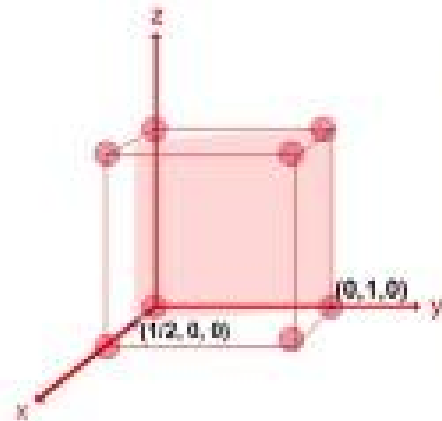
محاور	X	Y	Z
نقاط تقاطع صفحه	1	1	∞
معکوس	1/1	1/1	1/ ∞
کوچکترین نسبت	1	1	0

اندیس میلر (110)

اندیس های میلر – مثال ها



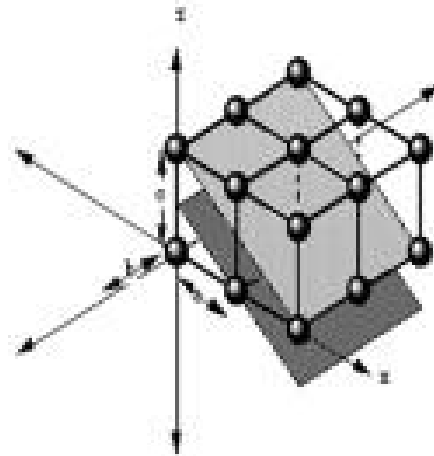
مختصات	X	Y	Z
مختصات رئوس	1	1	1
مقلوب	1/1	1/1	1/1
کوچکترین نسبت	1	1	1
اندیس میلر (111)			



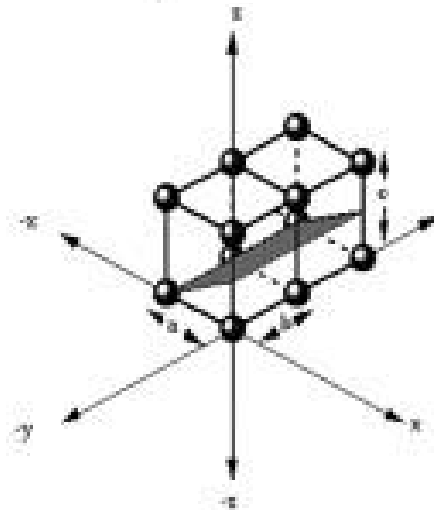
مختصات	X	Y	Z
مختصات رئوس	1/2	1	1
مقلوب	1/(1/2)	1/1	1/1
کوچکترین نسبت	2	1	1
اندیس میلر (211)			



اندیس های میلر – مثال ها

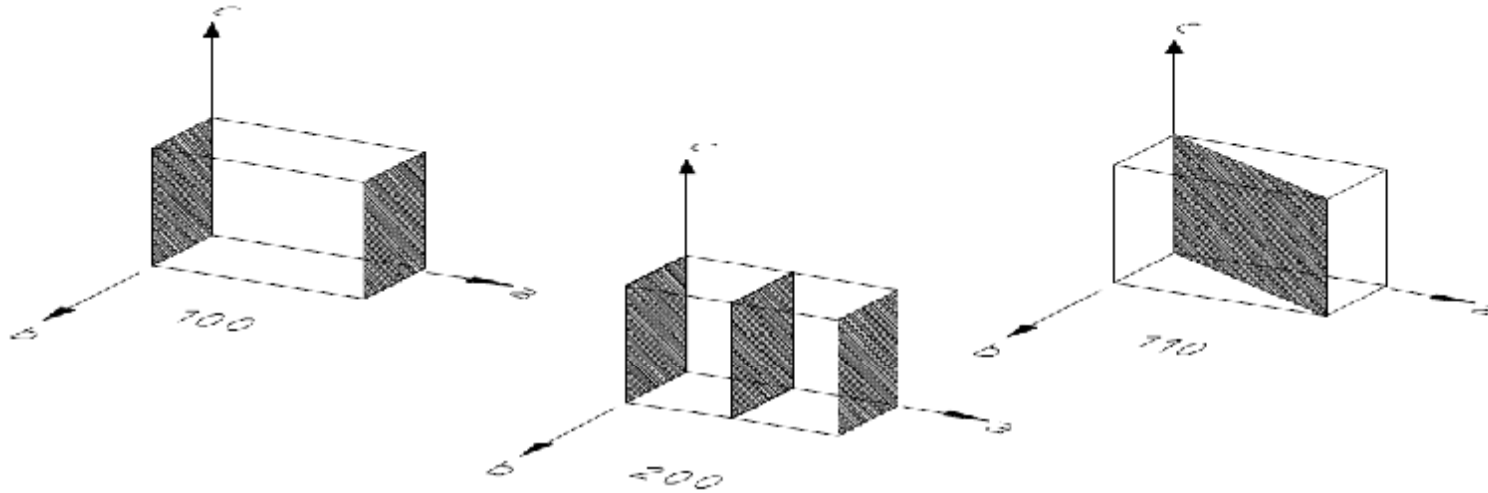


محاور	a	b	c
قطب عمودی صفحه	1	∞	$\frac{1}{2}$
مقلوب	1/1	1/ ∞	1/($\frac{1}{2}$)
کوچکترین نسبت	1	0	2
اندیس میلر (102)			

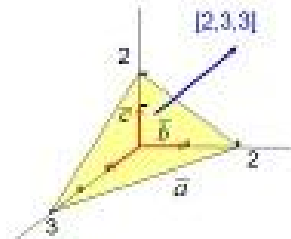


محاور	a	b	c
قطب عمودی صفحه	-1	∞	$\frac{1}{2}$
مقلوب	1/-1	1/ ∞	1/($\frac{1}{2}$)
کوچکترین نسبت	-1	0	2
اندیس میلر (T02)			

اندیس های میلر



اندیس های میلر در یک نگاه

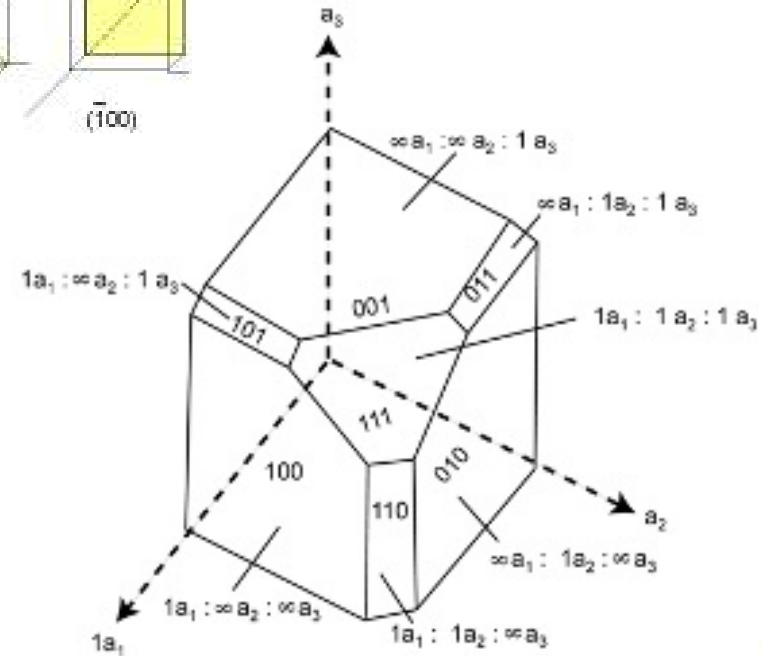
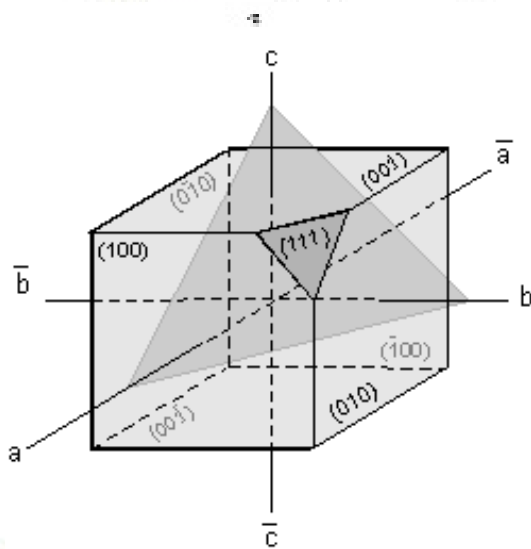
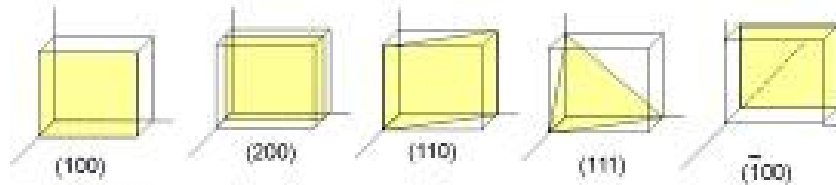


$$3a, 2b, 2c$$

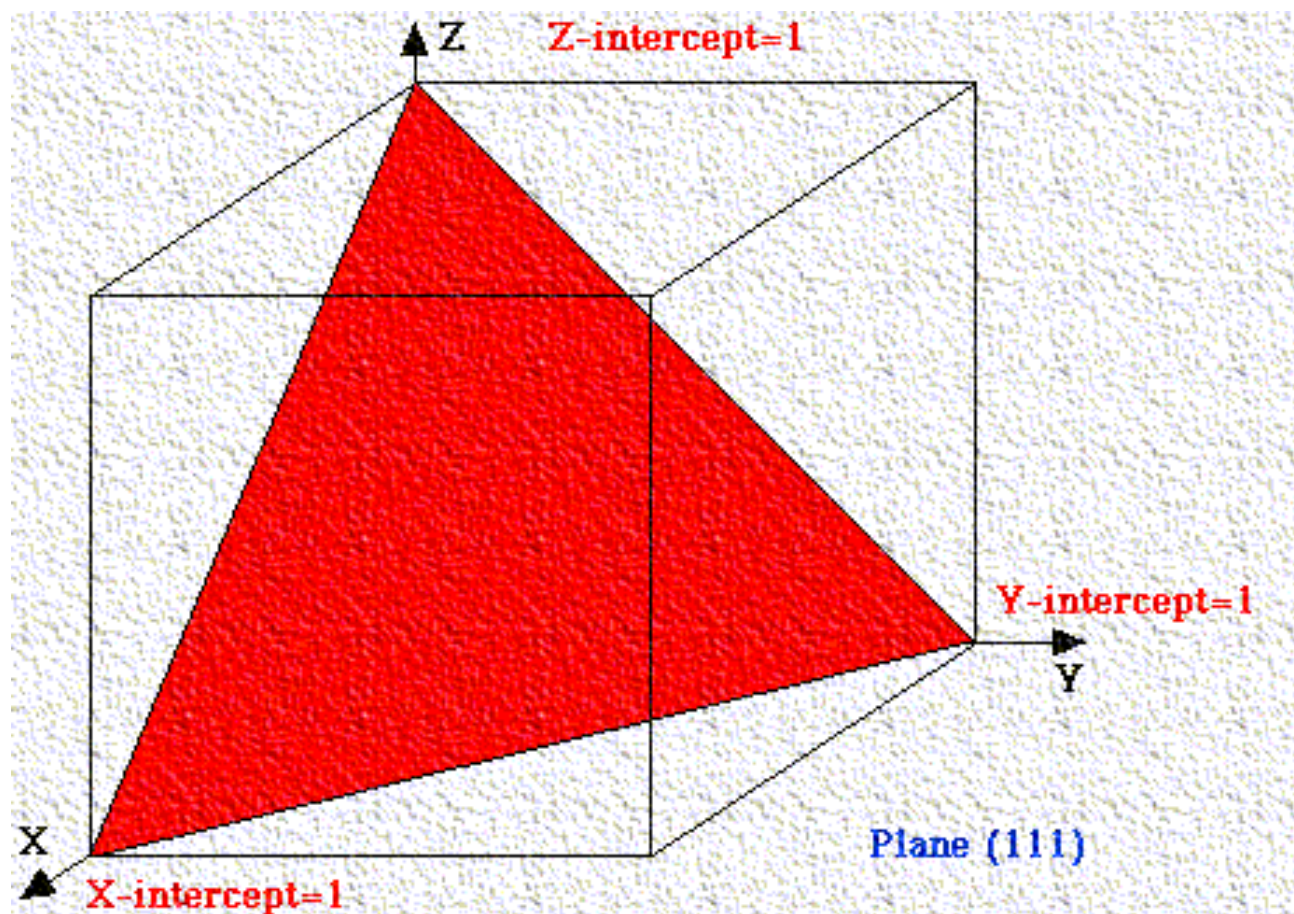
$$\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$[2,3,3]$$

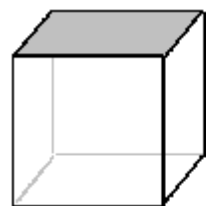
مقطع مجزوم را در این نقاط جل می کنند
 کسره های معکوس این سه عدد
 اندیس برای (2,3,3)
 اندیس جهت



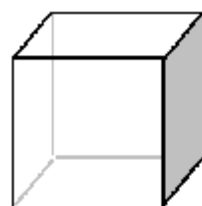
انیمیشن اندیس های میلر صفحات مختلف



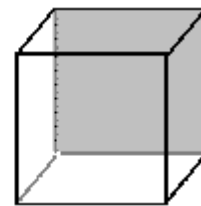
اندیس های میلر صفحات مختلف یک بلور کوبیک



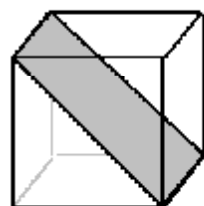
(001)



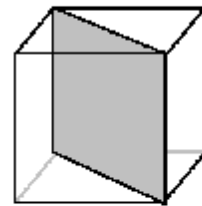
(100)



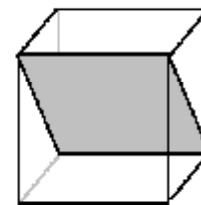
(010)



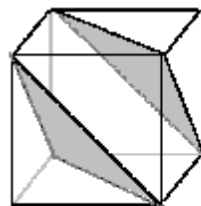
(101)



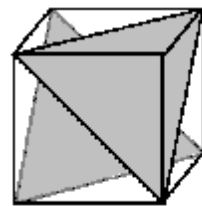
(110)



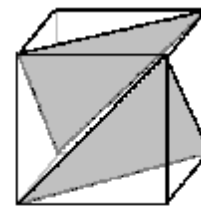
(011)



(111)



($\bar{1}11$)



($1\bar{1}1$)