



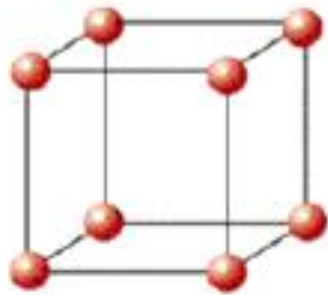
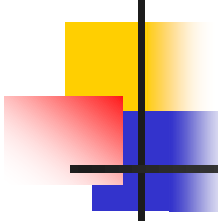
## ادامه فصل اول

---

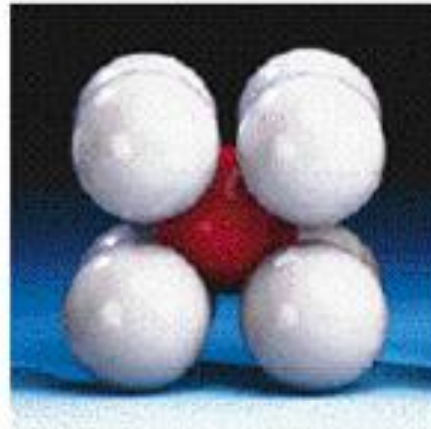
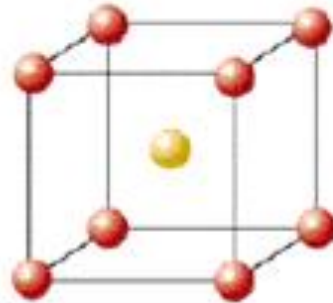
۱- انواع شبکه های سه بعدی - شبکه های مکعبی

۲- انواع شبکه های سه بعدی - شش گوشه یا هگزاگونال

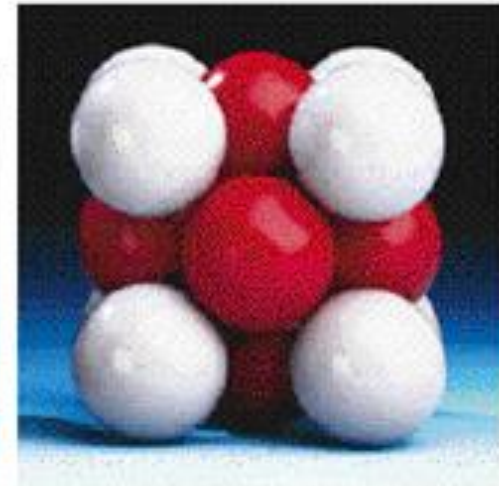
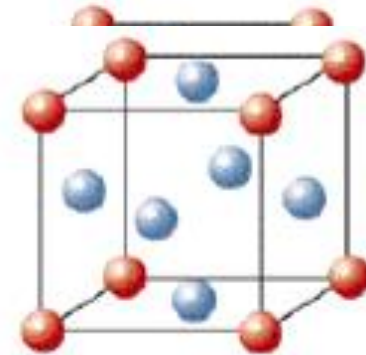
# یادآوری: نمایی دیگر از سه شبکه در دستگاه مکعبی



simple cubic



body-centered cubic



face-centered cubic

## شبکه های مکعبی

همانگونه که قبلا گفته شد:

در دستگاه مکعبی سه شبکه وجود دارد: شبکه مکعبی ساده (sc)، شبکه مکعبی مرکز حجمی (bcc) و شبکه مکعبی مرکز سطحی (fcc)، مشخصه های سه شبکه مکعبی در جدول ۲ خلاصه شده است. یاخته بسیط شبکه bcc در شکل ۹، و بردارهای انتقال بسیط آن در شکل ۱۰ نشان داده شده اند. بردارهای انتقال بسیط شبکه fcc در شکل ۱۱ نشان داده شده اند. یاخته های بسیط، بنا بر تعریف، تنها یک نقطه شبکه ای دارند، ولی یاخته قراردادی bcc حاوی دو نقطه شبکه ای است، و یاخته قراردادی fcc چهار نقطه شبکه ای دارد.

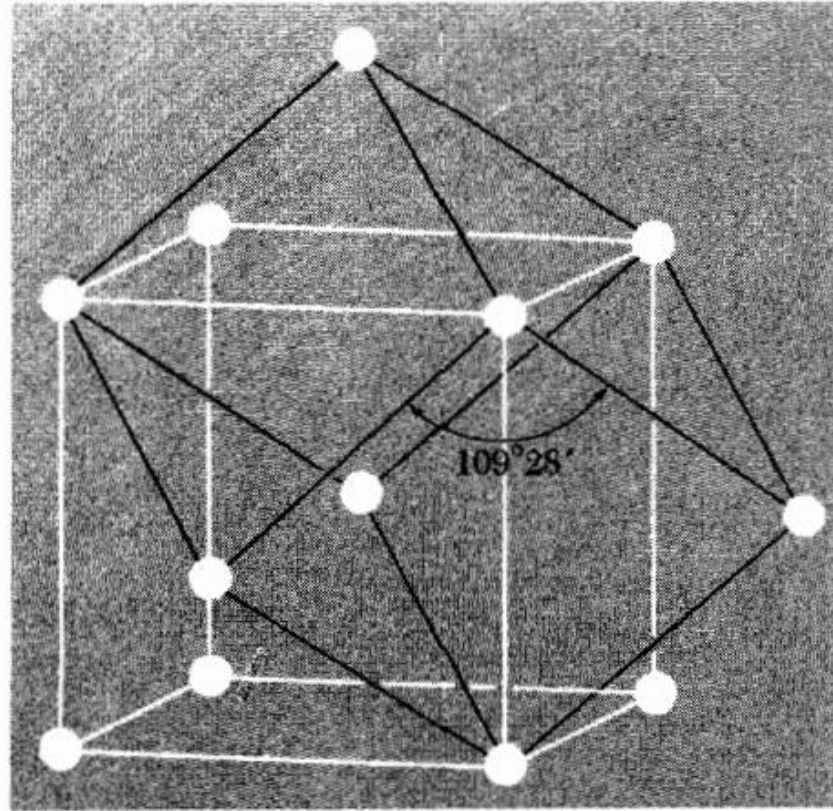
جدول ۲. مشخصات شبکه‌های مکعبی\*

مرکز سطحی	مرکز حجمی	ساده	
$a^3$	$a^3$	$a^3$	حجم یاخته قراردادی
۴	۲	۱	تعداد نقطه‌های شبکه‌ای در هر یاخته
$\frac{1}{4}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$	$a^3$	حجم یاخته بسیط
$4/a^3$	$2/a^3$	$1/a^3$	تعداد نقطه‌های شبکه‌ای در واحد حجم
۱۲	۸	۶	تعداد همسایه‌های اول
$a/2^{1/2} = 0,707a$	$3^{1/2}a/2 = 0,866a$	$a$	فاصله تا همسایه اول
۶	۶	۱۲	تعداد همسایه‌های دوم
$a$	$a$	$2^{1/2}a$	فاصله تا همسایه دوم
$\frac{1}{6}\pi\sqrt{2}$	$\frac{1}{8}\pi\sqrt{3}$	$\frac{1}{6}\pi$	کسر انباشتگی*
$= 0,740$	$= 0,680$	$= 0,524$	

\* کسر انباشتگی برابر است با مقدار بیشینه کسری از حجم که امکان دارد با کره‌های سخت پر شود.

یاخته قرار دادی همان یاخته غیر بسیط است.

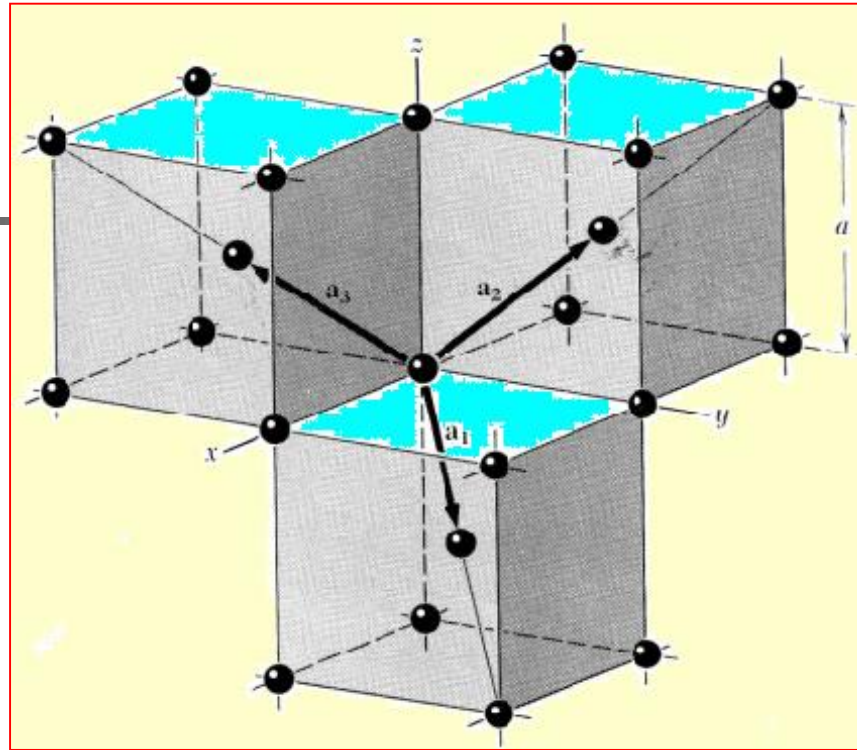
## یاخته بسیط BCC



شکل ۹. شبکه مکعبی مرکزحجمی که یاخته‌ای بسیط را نشان می‌دهد. این یاخته بسیط، لوزی‌رخی است با یال  $\frac{1}{2}\sqrt{3}a$  که زاویه بین یالهای مجاورش  $109^{\circ}28'$  است.

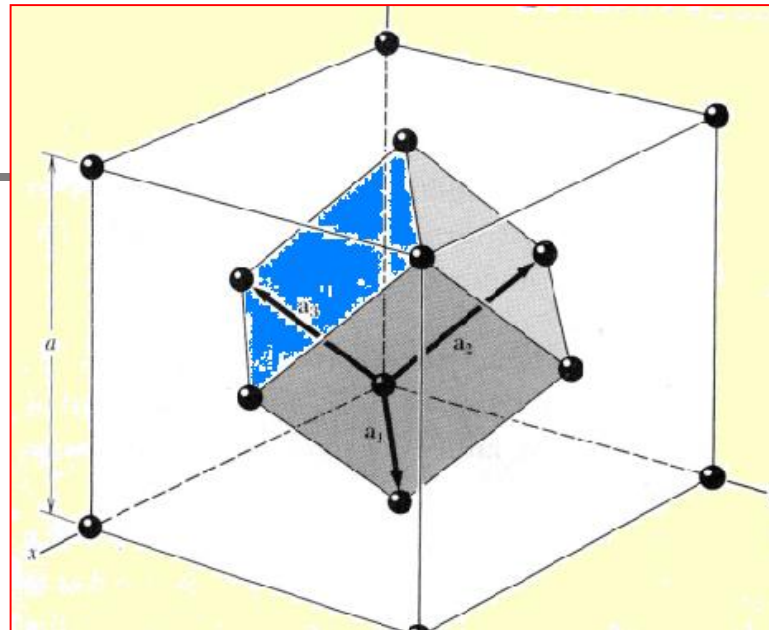
**مساله:** با استفاده از اطلاعات اسلاید بعدی (شکل ۱۰) بزرگی یال و زاویه بین یالها را بدست آورید

## بردارهای پایه یاخته بسیط BCC



شکل ۱۰. بردارهای انتقال بسیط شبکه مکعبی مرکزجسمی؛ این بردارها نقطه شبکه‌ای واقع در مبدأ را به نقطه‌های شبکه‌ای واقع در مراکز حجم وصل می‌کنند. یاخته بسیط با کامل کردن یک لوزی رخ روی این سه بردار به دست می‌آید. بردارهای انتقال بسیط برحسب یال مکعب،  $a$ ، عبارت‌اند از  $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{4}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$ ،  $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{4}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$  و  $\mathbf{a}_3 = \frac{1}{4}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$  در اینجا  $\hat{x}$ ،  $\hat{y}$  و  $\hat{z}$  بردارهای یکه دکارتی‌اند.

## بردارهای پایه یاخته بسیط FCC

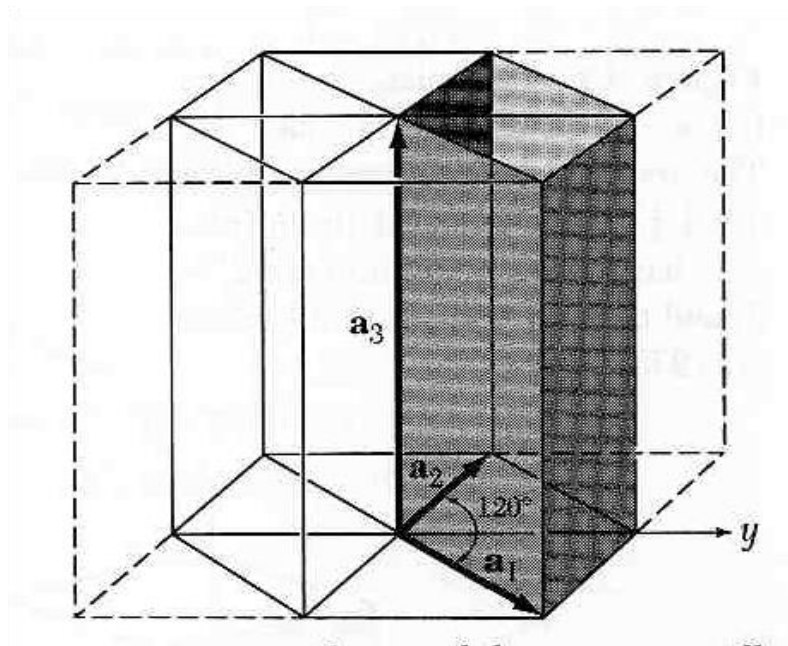


شکل ۱۱. یاخته بسیط لوزی رخ بلور مکعبی مرکزسطحی. بردارهای انتقال بسیط  $a_1$ ،  $a_2$ ، و  $a_3$  نقطه شبکه‌ای واقع در مبدأ را به نقطه‌های شبکه‌ای در مراکز وجوه وصل می‌کنند. بردارهای بسیطی که رسم شده‌اند، عبارت‌اند از  $a_3 = \frac{1}{4}a(\hat{z} + \hat{x})$ ،  $a_2 = \frac{1}{4}a(\hat{y} + \hat{z})$ ،  $a_1 = \frac{1}{4}a(\hat{x} + \hat{y})$ . زاویه بین محورها برابر است با  $60^\circ$ .

**مساله:** با استفاده از اطلاعات شکل فوق، بزرگی یال و زاویه بین یالها را بدست آورید.



## انواع شبکه های سه بعدی - شش گوشه یا هگزاگونال



شکل ۱۲. رابطه بین یاخته بسیط در دستگاه شش گوشه (خطهای پررنگ) و منشوری با تقارن شش گوشه. در اینجا  $a_1 = a_2 \neq a_3$ .





# مساله

---

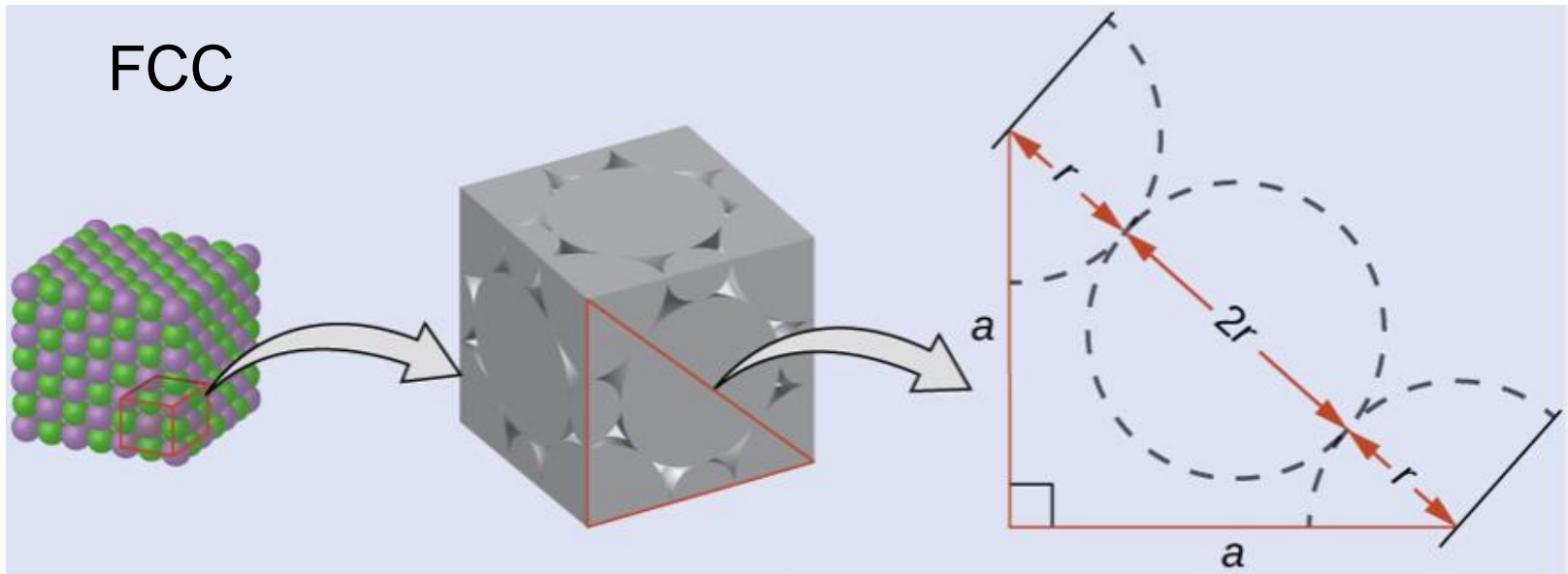
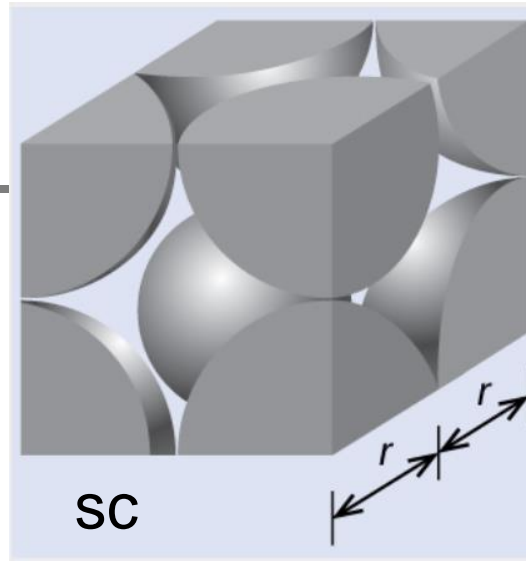
حجم ياخته بسيط انواع ساختارهاي مكعبى را بر حسب ابعاد مكعب قراردادى بدست آوريد.

## کسر انباشتگی

**تعریف:** کسر انباشتگی برابر است با مقدار بیشینه کسری از حجم که امکان دارد با کره های سخت پر شود.

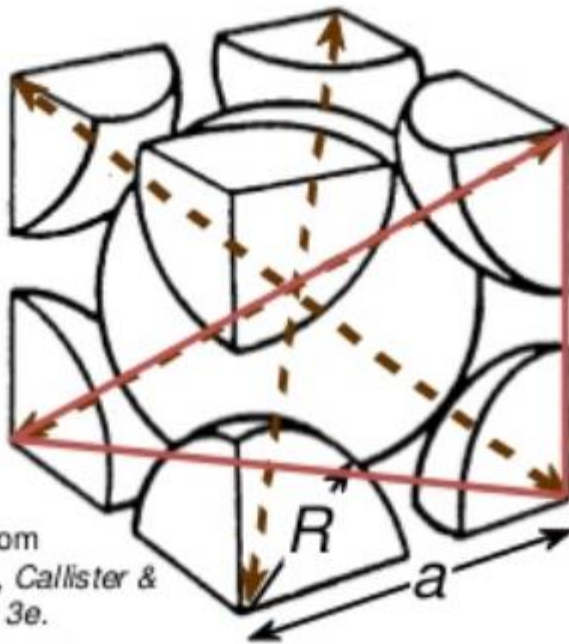
(حجم مکعب قراردادی)/(حجم اتمهای مربوط به یک مکعب قراردادی)=کسر انباشتگی

# مساله: محاسبه کسر انباشتگی در هر سه ساختار مکعبی

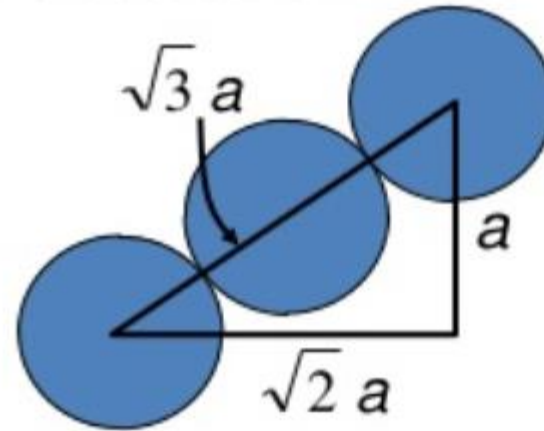


# Atomic Packing Factor: BCC

- APF for a body-centered cubic structure = 0.68



Adapted from Fig. 3.2(a), Callister & Rethwisch 3e.

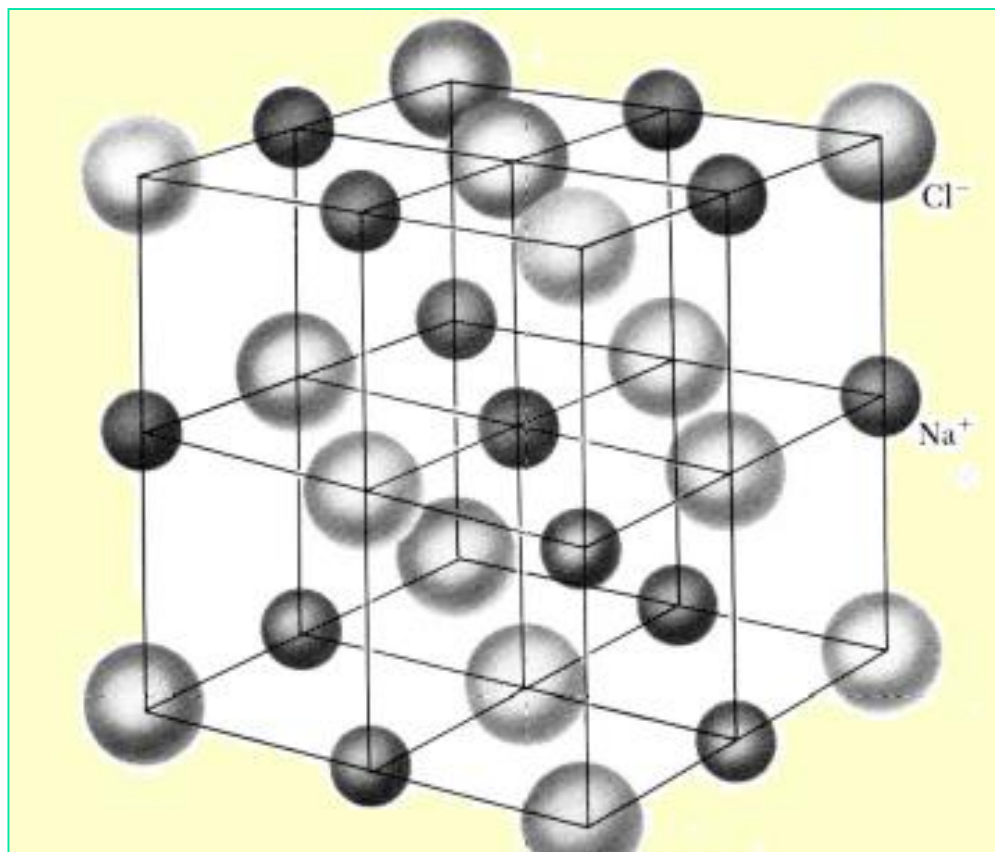


Close-packed directions:  
length =  $4R = \sqrt{3} a$

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

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

# ساختارهای بلوری ساده – ساختار سدیم کلرید



■ ساختار بلوری سدیم کلرید

پایه یک یون  $\text{Cl}^-$  در  $\frac{1}{2}$  و یک یون  $\text{Na}^+$  در  $\frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}$  دارد

# ساختار سدیم کلرید

ساختار سدیم کلرید، NaCl، در شکل‌های ۱۵ و ۱۶ نشان داده شده است. شبکه مکعبی مرکزسطحی است. پایه شامل یک یون  $\text{Na}^+$  و یک یون  $\text{Cl}^-$  است که به اندازه نصف قطر اصلی مکعب از هم فاصله دارند. در هر مکعب یک چهار واحد NaCl وجود دارد، و مکانهای آنها عبارت‌اند از

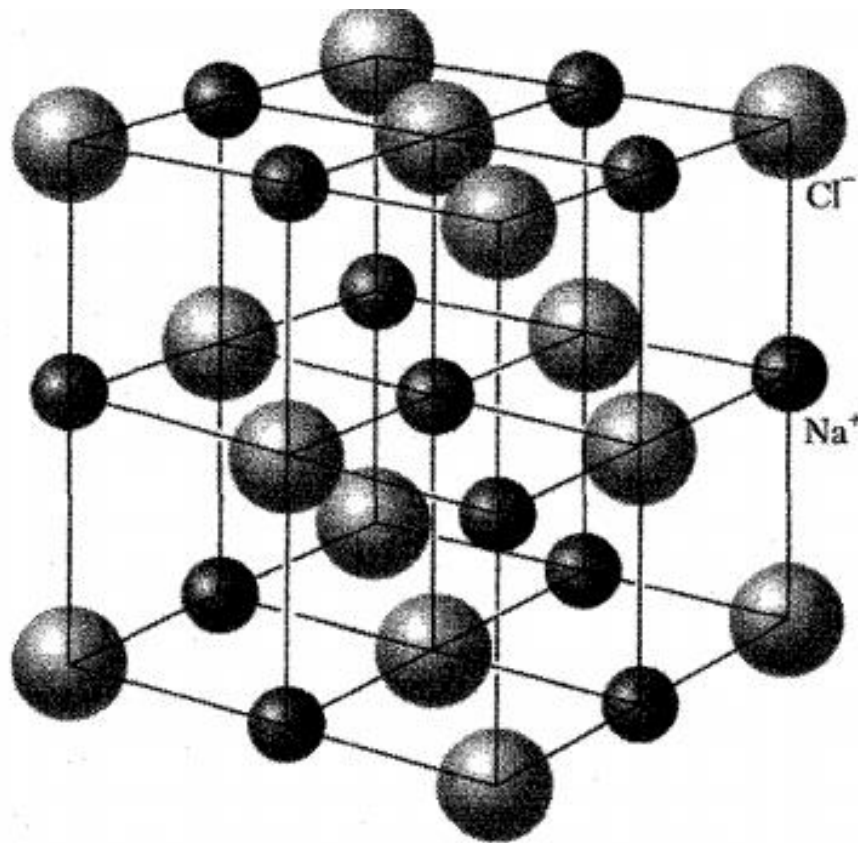


هر اتم، شش همسایه اول از نوع مخالف دارد. برخی بلورهایی که آرایش NaCl دارند، در جدول بعدی آمده‌اند. یال مکعب،  $a$ ، برحسب آنگستروم داده شده است؛  $1\text{\AA} \equiv 10^{-8}\text{cm} \equiv 10^{-10}\text{m}$ .

سایر بلورهایی که دارای ساختار NaCl هستند:

$a$	بلور	$a$	بلور
۵٫۷۷ $\text{\AA}$	AgBr	۴٫۰۸ $\text{\AA}$	LiH
۵٫۹۲	PbS	۴٫۲۰	MgO
۶٫۲۹	KCl	۴٫۴۳	MnO
۶٫۵۹	KBr	۵٫۶۳	NaCl

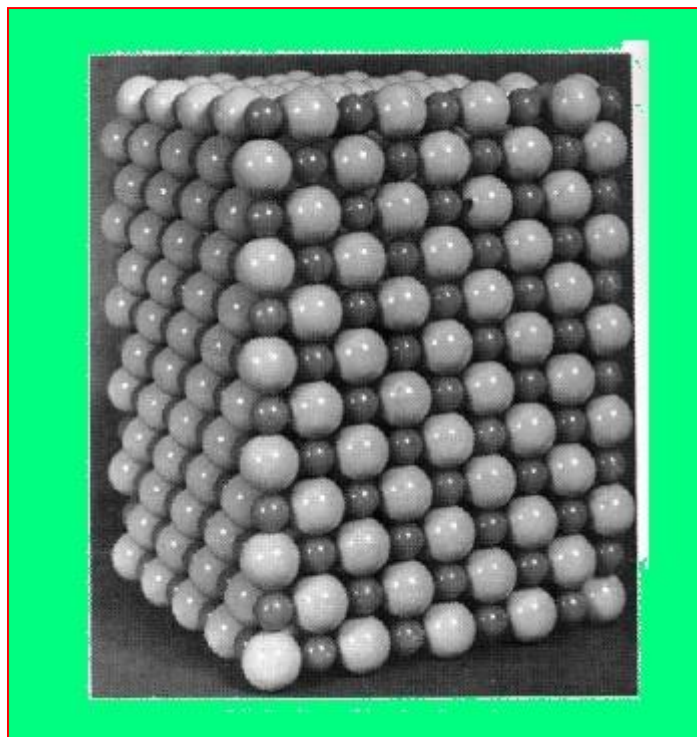
# ساختار سدیم کلرید



شکل ۱۵. ساختار بلوری سدیم کلرید را می‌توان با قراردادن یونهای  $\text{Cl}^-$  و  $\text{Na}^+$  به‌طور یک در میان روی نقاط شبکه‌ای یک شبکه مکعبی ساده بنا کرد. در این بلور هر یون با شش همسایه اول با بار مخالف احاطه شده است. شبکه فضایی fcc است و پایه یک یون  $\text{Cl}^-$  در  $000$  و یک یون  $\text{Na}^+$  در  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$  دارد. این شکل یک یاخته مکعبی قراردادی را نشان می‌دهد. در اینجا، برای روشنتر شدن آرایش فضایی، قطرهای یونی نسبت به ابعاد یاخته کوچکتر نشان داده شده‌اند.



# مدل سدیم کلرید



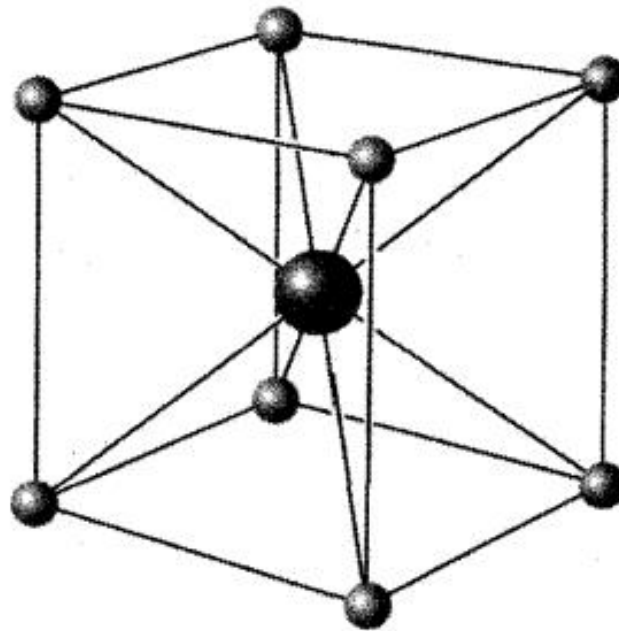
شکل ۱۶. مدل سدیم کلرید. یونهای سدیم از یونهای کلر کوچکترند.

# بلورهای طبیعی سرب سولفید مشابه ساختار سدیم کلرید

- بلورهای طبیعی سرب سولفید،  $PbS$ ، که دارای ساختار بلوری  $NaCl$  اند.



# ساختار سزیم کلرید



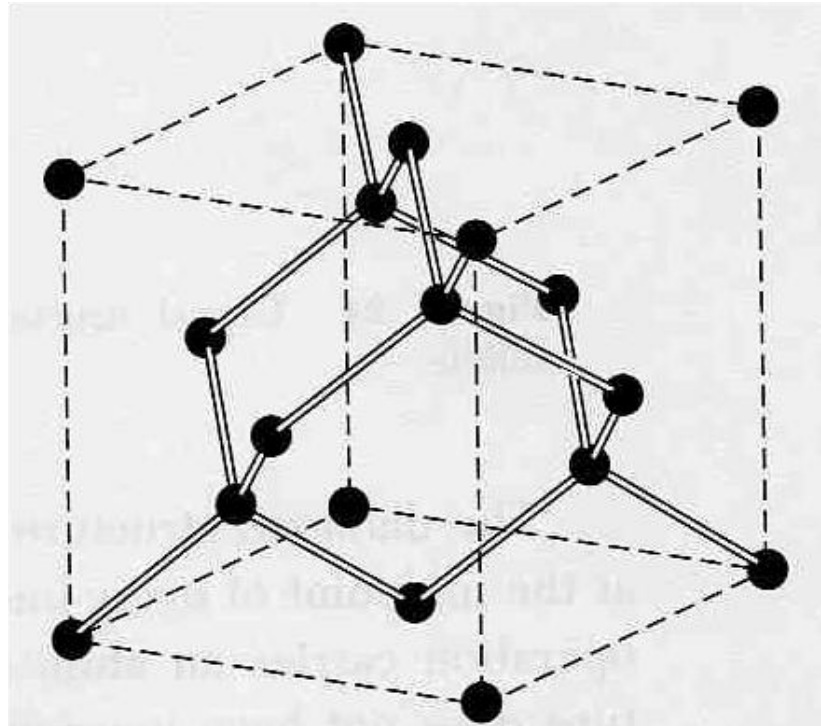
شکل ۱۸. ساختار بلوری سزیم کلرید. شبکه فضایی مکعبی ساده است و پایه یک یون  $\text{Cs}^+$  در  $\circ\circ\circ$  و یک یون  $\text{Cl}^-$  در  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$  دارد.

## ساختار سزیم کلرید

ساختار سزیم کلرید در شکل ۱۸ نشان داده شده است. در هر یاخته بسیط یک مولکول وجود دارد که اتمهای آن در گوشه‌ها،  $000$ ، و در مراکز،  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ ، شبکه فضایی مکعبی ساده قرار دارند. هر اتم را می‌توان در مرکز مکعبی از اتمهای نوع مخالف در نظر گرفت، بنابراین تعداد همسایه‌های اول، یا عدد هم‌ارایی، برابر هشت است.

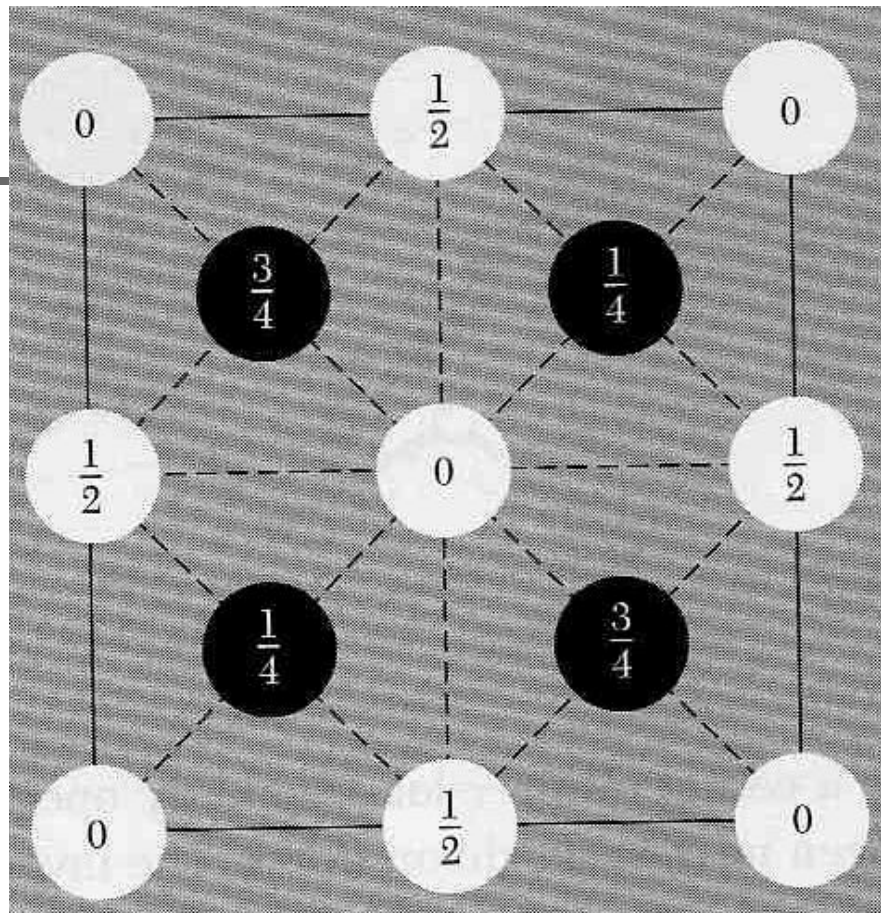
$a$	بلور	$a$	بلور
$3,29 \text{ \AA}$	LiHg	$2,70 \text{ \AA}$	BeCu
$3,87$	$\text{NH}_4\text{Cl}$	$2,88$	AlNi
$3,97$	TlBr	$2,94$	CuZn (برنج بتا)
$4,11$	CsCl	$2,99$	CuPd
$4,20$	TlI	$3,28$	AgMg

# ساختار الماسی



شکل ۲۳. ساختار بلور الماس که در آن آرایش پیوند چهاروجهی نشان داده شده است.

# ساختار الماسی



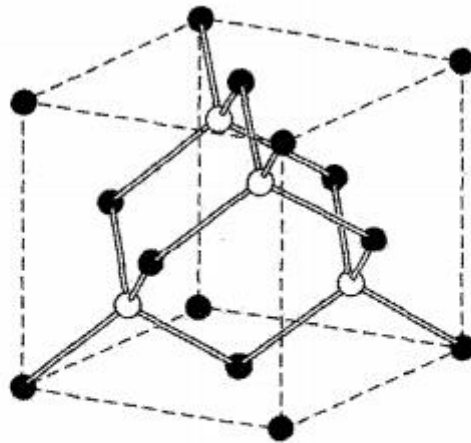
ارتفاع اتم دوم در هر پایه به اندازه یک چهارم از اتم اول در پایه بیشتر است

شکل ۲۲. تصویر مکان اتمها در یاخته مکعبی ساختار الماسی روی یک وجه مکعب. کسرها ارتفاع از قاعده را برحسب طول یال مکعب مشخص می‌کنند. نقطه‌های  $0$  و  $\frac{1}{4}$  روی شبکه fcc واقعند؛ و آنهایی که در  $\frac{1}{4}$  و  $\frac{3}{4}$  قرار دارند، روی شبکه مشابهی واقعند که در امتداد قطر اصلی مکعب به اندازه  $\frac{1}{4}$  طولش جابه‌جا شده است. یا یک شبکه فضایی fcc، پایه شامل دو اتم یکسان در  $000$  و  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$  است.



# ساختار مکعبی روی سولفید (بلند روی)

ساختار الماسی را می‌توان به صورت دو ساختار fcc در نظر گرفت، که نسبت به یکدیگر به اندازه یک چهارم قطر اصلی جابه‌جا شده‌اند. ساختار مکعبی روی سولفید (بلند روی)، همان‌گونه که در شکل ۲۴ نشان داده شده است، از قراردادن اتمهای Zn روی یک شبکه fcc و اتمهای S روی شبکه fcc دیگر نتیجه می‌شود. یاخته قراردادی مکعب است.



شکل ۲۴. ساختار بلوری روی سولفید مکعبی.



# مقایسه ساختار مکعبی روی سولفید و ساختار الماسی

ساختار الماسی در وسط هر خطی که اتمهای همسایه اول را به هم وصل می‌کند، یک عمل تقارنی مرکز وارون‌سازی دارد. عمل وارون‌سازی، اتم واقع در  $\mathbf{r}$  را به اتم واقع در  $-\mathbf{r}$  می‌برد. ساختار ZnS مکعبی دارای عمل وارون‌سازی نیست. مثالهایی از ساختار روی سولفید مکعبی عبارت‌اند از

$a$	بلور	$a$	بلور
$5,65\text{\AA}$	ZnSe	$4,35\text{\AA}$	SiC
5,65	GaAs	5,41	ZnS
5,66	AlAs	5,45	AlP
6,46	InSb	5,45	GaP

جدول ۱-۲ ساختار و ابعاد یاخته ی تعدادی از عناصر و ترکیب ها

عنصر	ساختار	$a(\text{Å})$	$c(\text{Å})$				
Al	fcc	۴/۰۴	-	Na	bcc	۴/۲۸	-
Be	hcp	۲/۲۷	۳/۵۹	Zn	hcp	۲/۶۶	۴/۹۴
Ca	fcc	۵/۵۶	-	LiH	سدیم کلراید	۴/۰۸	-
C	الماسی	۳/۵۶	-	NaCl	سدیم کلراید	۵/۶۳	-
Cr	bcc	۲/۸۸	-	AgBr	سدیم کلراید	۵/۷۷	-
Co	hcp	۲/۵۱	۴/۰۷	Mno	سدیم کلراید	۴/۴۳	-
Cu	fcc	۳/۶۱	-	CsCl	سزیم کلراید	۴/۱۱	-
Ge	الماسی	۵/۶۵	-	TlBr	سزیم کلراید	۳/۹۷	-
Au	fcc	۴/۰۷	-	CuZn(-brass) $\beta$	سزیم کلراید	۲/۹۴	-
Fe	bcc	۲/۸۶	-	Cuf	سولفید روی	۴/۲۶	-
Pt	fcc	۳/۹۲	-	AgI	سولفید روی	۶/۴۷	-
Si	الماسی	۵/۴۳	-	ZnS	سولفید روی	۵/۴۱	-
Ag	fcc	۴/۰۸	-	CdS	سولفید روی	۵/۸۲	-