



ادامه فصل اول

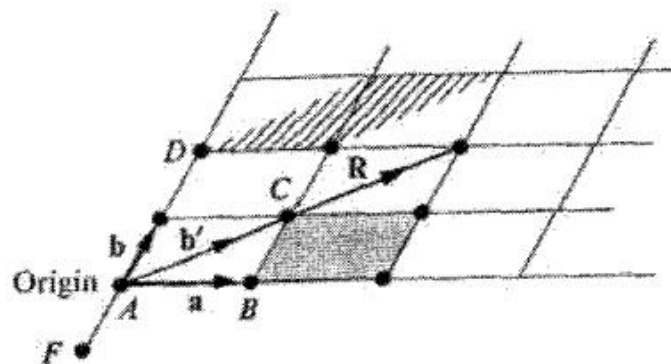
۱- یاخته واحد

۲- یاخته های بسیط و غیر بسیط

۳- یاخته بسیط ویگنر- سایتز

۴- انواع شبکه های براوه و سیستم بلوری در سه بعد

۵- شبکه های مکعبی



شکل ۱-۳ بردارهای پایه شبکه هستند. بردارهای a و b' تشکیل سری دیگری از بردارهای پایه را می دهند. نواحی سایه دار و هاشورزده به ترتیب یاخته ها واحد متناظر با اولین و دومین سری بردارهای پایه را نشان می دهند.

یاخته واحد

سطح متوازی الاضلاعی که اضلاعش بردارهای a و b باشند یاخته واحد شبکه نامیده می شوند (شکل ۳-۱). اگر چنین یاخته ای توسط تمام بردارهای شبکه انتقال یابد، مساحت کل شبکه را یک بار و فقط یک بار می پوشاند. این یاخته واحد معمولاً کوچک ترین سطحی است که می تواند چنین پوششی را تولید کند. بنابراین شبکه را می توان به عنوان ترکیبی از تعداد بسیاری از یاخته های واحد معادل در نظر گرفت که پهلو به پهلو در کنار یک دیگر مانند نقش موزاییک چیده شده اند.

به همان دلیلی که برای بردارهای پایه ذکر شد، برای یک شبکه نیز انتخاب یاخته واحد منحصر به فرد نیست. بنابراین متوازی الاضلاعی که توسط بردارهای a و b' ساخته می شود (شکل ۳-۱) نیز به عنوان یک یاخته واحد قابل قبول است. بار دیگر متذکر می شویم که ملاک انتخاب یاخته واحد، فقط سهولت آن است.

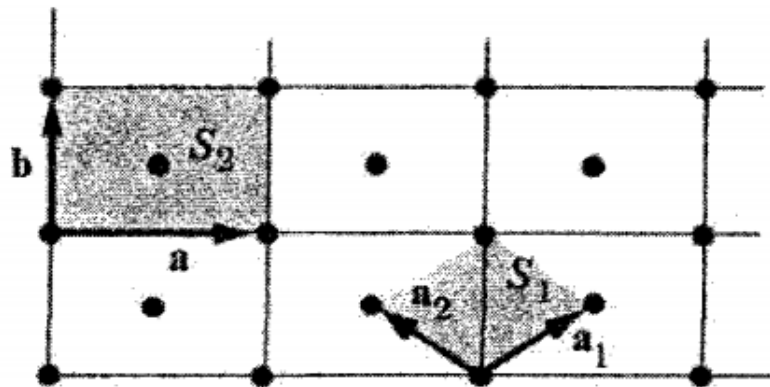
چند نکته در خصوص یاخته ها

(i) تمام یاخته های واحد مساحت های یک سانی دارند. بنابراین یاخته ای که توسط a و b ساخته می شود دارای مساحت $S = |a \times b|$ است، در حالی که یاخته ای که توسط مدارهای a و b' ساخته می شود مساحت $S' = |a \times b'| = |a \times (a + b)| = |a \times b| = S$ را دارد (از نتیجه $a \times a = 0$ استفاده شده است). بنابراین گرچه شکل بخصوصی از یاخته واحد منحصر به فرد نیست ولی مساحت آن منحصر به فرد است.

(ii) برای اینکه بدانیم چند نقطه ی شبکه متعلق به یک یاخته واحد است می توانیم به شکل ۱-۳ مراجعه کنیم. یاخته واحدی که از $a \times b$ شکل می گیرد، چهار نقطه در چهار گوش اش دارد ولی هر کدام از این نقاط بین چهار یاخته مجاور مشترک است. بنابراین هر یاخته واحد تنها یک نقطه شبکه دارد.

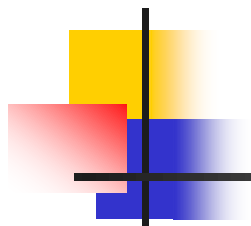
یاخته های بسیط و غیر بسیط

یاخته واحدی که در بالا راجع به آن بحث شد، یاخته ی بسیط نامیده می شود. گاهی اوقات راحت تر است که با یاخته واحد بزرگ تری که تقارن شبکه را واضح تر نشان می دهد کار کرد. این ایده در شبکه ی براوه شکل (۱-۴) نمایان است. واضح است که بردارهای a_1 و a_2 را می توان به عنوان بردارهای پایه انتخاب کرد که در این صورت یاخته واحد متوازی الاضلاع S_1 است. در عین حال می توان شبکه را به صورت مجموعه ای از مستطیل هایی در نظر گرفت که در کنار هم چیده شده اند، به طوری که بردارهای a و b به عنوان اضلاع یکی از این مستطیل ها باشد. در این صورت یاخته واحد سطح S_2 است که توسط این بردارها ساخته می شود. این یاخته علاوه بر نقاطی که در گوشه هایش دارد یک نقطه نیز در مرکز دارد. این یاخته یک یاخته غیر بسیط است.



شکل ۱-۴ سطح S_1 یک یاخته واحد بسیط و سطح S_2 یک یاخته واحد غیر بسیط است

دلیل انتخاب یاخته غیر بسیط



دلیل این که یاخته غیر بسیط S_7 انتخاب شده، این است که تقارن مستطیل واضح تر نمایان است. گرچه تقارن در یاخته بسیط S_1 نیز وجود دارد (باید این طور باشد زیرا هر دو به یک شبکه مربوط اند) گاهی این تقارن واضح نیست.

لازم است به نکات زیر توجه کرد.

(i) مساحت یاخته ی غیر بسیط مضرب درستی از مساحت یک یاخته ی بسیط است. در شکل (۱-۴) این ضریب ۲ است.

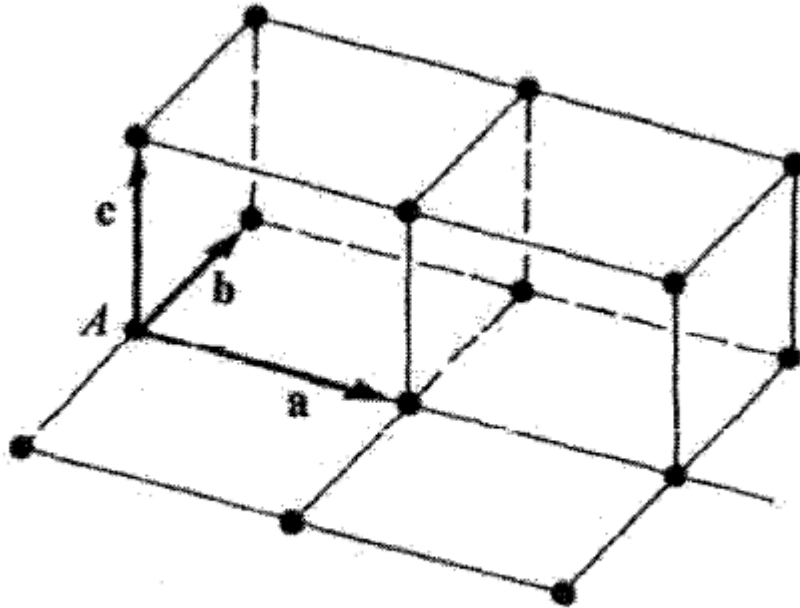
(ii) ارتباطی بین یاخته های غیر بسیط و شبکه های غیر براوه نیست. اولی مربوط است به انتخاب خاصی (که یک چیز اختیاری است) از بردارهای پایه ی یک شبکه براوه است؛ در حالی که دومی مربوط به واقعیت فیزیکی مکان های نامعادل است.

حالت سه بعدی

تمام مطالبی را که قبلاً در یک یا دو بعد بیان شد می توان به سه بعد نیز تعمیم داد. در این حالت بردارهای شبکه سه بعدی هستند و با رابطه ی زیر بیان می شوند:

$$R_n = n_1 a + n_2 b + n_3 c \quad (1-2)$$

سه بردار a و b و c در یک صفحه واقع نیستند و نقطه ای از شبکه را به نقاط همسایه نزدیکش وصل می کند (شکل ۱-۵)، n_1 و n_2 و n_3 اعداد درستی مانند 0 و ± 1 و ± 2 و... هستند و مقادیر آن ها به نقطه شبکه



شکل ۱-۵ یک شبکه سه بعدی. بردارهای a و b و c بردارهای پایه اند.

یاخته بسیط در سه بعد

بردارهای سه گانه a و b و c بردارهای پایه هستند و متوازی السطوحی که اضلاعش را این بردارها تشکیل می دهند، یک یاخته واحد است. مجدداً یادآوری می کنیم: اگر چه یاخته های بسیط حجم های مساوی دارند، یاخته بسیط منحصر به فرد نیست. هم چنین گاهی ساده تر است که با یک یاخته غیر بسیط کار کرد که نقاطی اضافه در داخل یا در سطوح خود دارد. شبکه های غیر براوه در سه بعد نیز وجود دارند که از تقاطع دو یا چند شبکه براوه ساخته می شوند .

یاخته بسیط شبکه

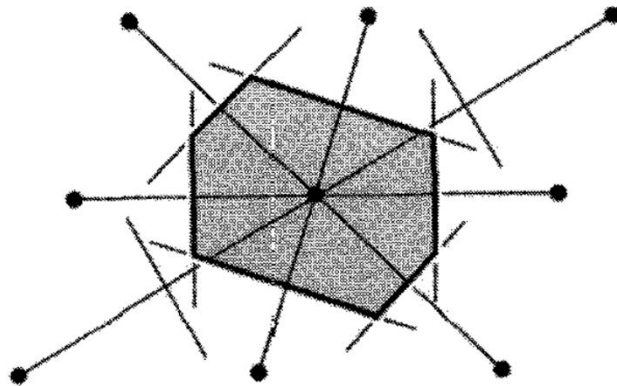
- حجم و سطحی که توسط بردارهای انتقال بسیط در سه یا دو بعد ایجاد میشود یاخته بسیط می نامند.
- **حجم یاخته** بسیط برابر است با:

$$v = \left| \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) \right|$$

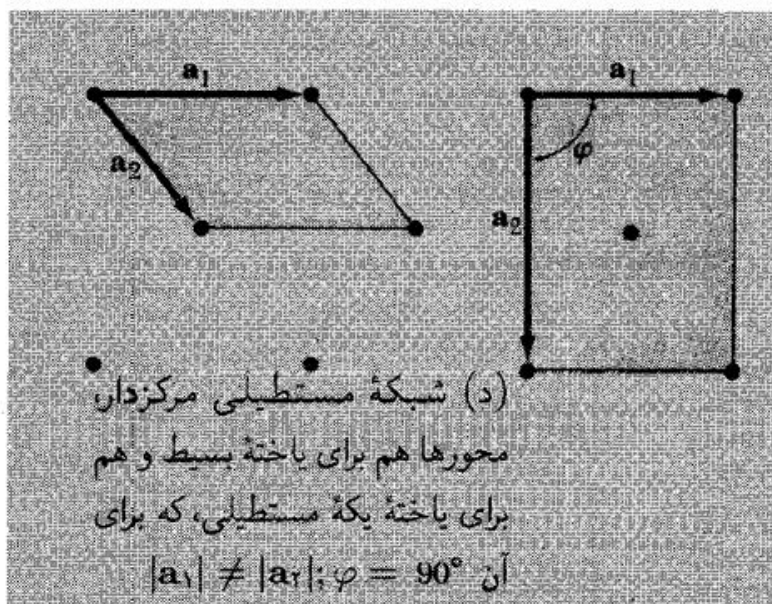
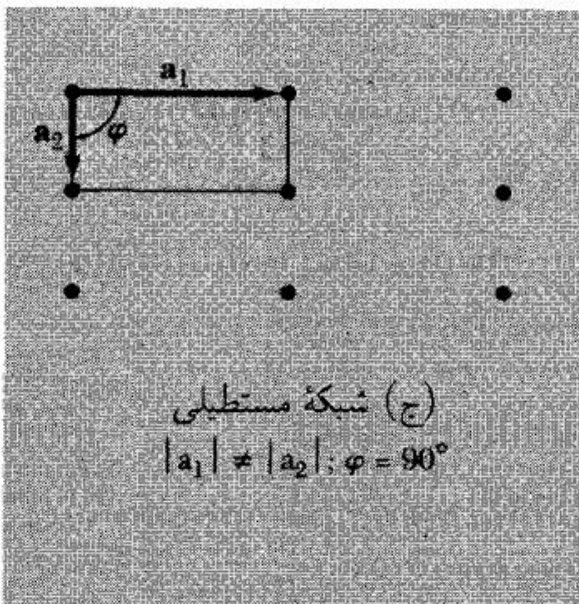
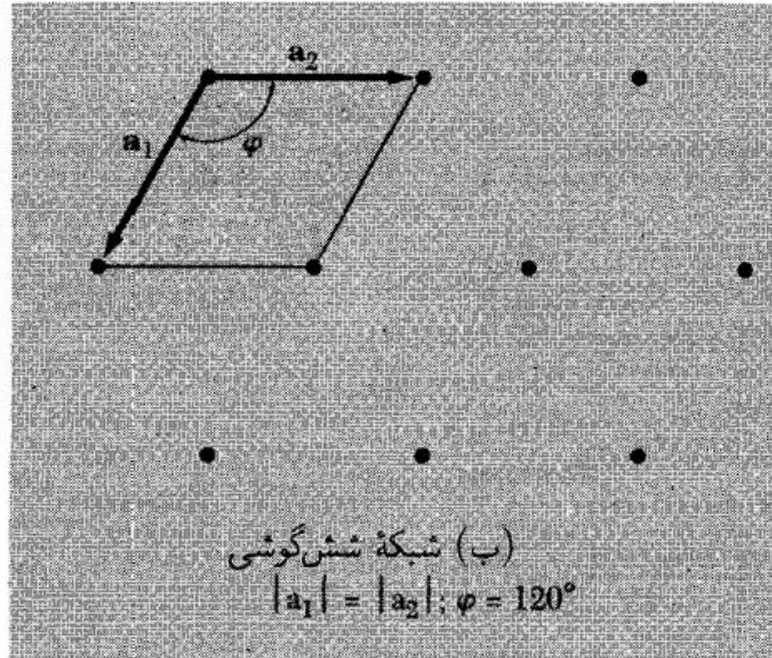
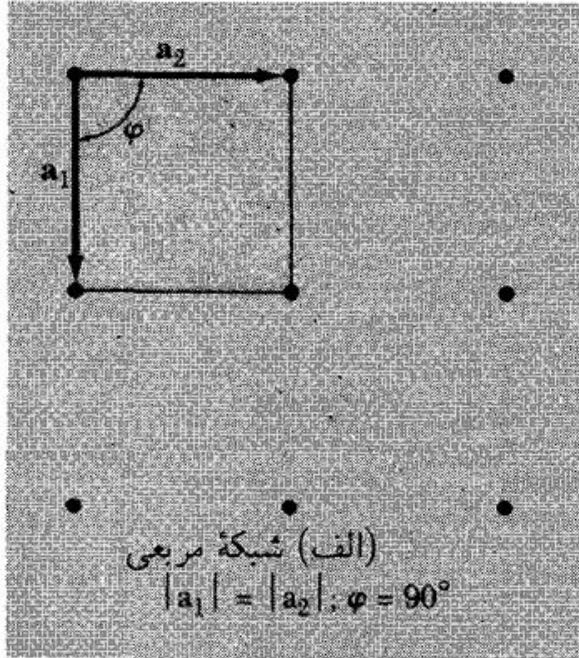
- **نقاط شبکه در گوشه های یاخته** بسیط قرار می گیرد

یاخته بسیط ویگنر - سایتز

- **طریقه ساخت یاخته بسیط ویگنر - سایتز:**
- (۱) خطوطی رسم کنید که یک نقطه مفروض شبکه را به تمام **نقاط شبکه نزدیک** به آن متصل سازد؛
- (۲) در وسط این خطوط ، و **عمود** بر آنها ، خطوط یا صفحات جدیدی رسم کنید.
- (۳) **کوچکترین حجمی** که بدین ترتیب محاط می شود **یاخته بسیط ویگنر - سایتز** نام دارد.

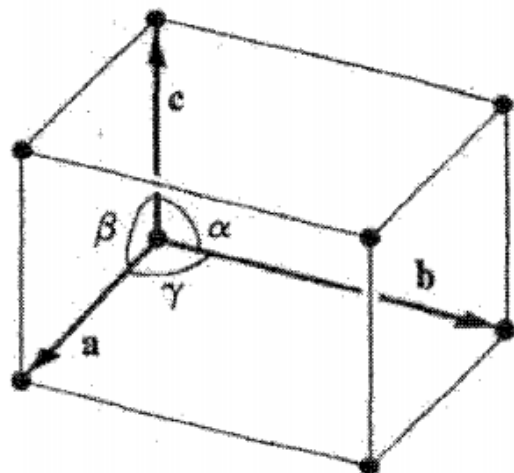


۴ شبکه براوه در دو بعد



۱۴ شبکه براوه و ۷ سیستم بلوری در سه بعد

در حالت سه بعدی تعداد شبکه های براوه چهارده تا است. تعداد شبکه های غیر براوه خیلی بیشتر (۲۳۰ عدد)، ولی باز هم متناهی است.



شکل ۱-۶ یاخته واحد که توسط طول بردارهای پایه a و b و c و همچنین زوایای بین این بردارها مشخص شده است.

چهارده شبکه (یا گروه بلوری) به هفت سیستم بلوری گروه بندی می شوند که هر کدام با شکل و تقارن یاخته واحد مشخص می شود. این سیستم ها، سه میلی^۱، تک میلی^۲، راست گوشه^۳، چهار گوشه^۴، مکعبی^۵، شش گوشه^۶، و سه گوشه^۷ نامیده می شوند. در هر حالت شبکه، متوازی

۱۴ شبکه براوه و γ سیستم بلوری در سه بعد

السطوحی است که اضلاعش a, b, c هستند. شکل (۷-۱) چهارده شبکه ی براوه و جدول (۱-۱) سیستم ها، شبکه ها و مقادیر مناسب برادرهای a, b, c و همین طور زوایای α, β, γ را نشان می دهد. شکل (۷-۱) و جدول (۱-۱) باید به دقت مطالعه گردند. ستون مربوط به اجزاء تقارن در جدول (۱-۱) به زودی مورد بحث قرار خواهد گرفت.

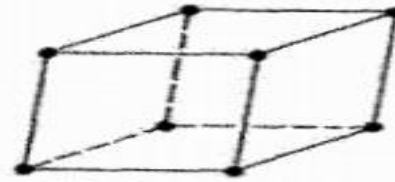
جدول ۱-۱ هفت سیستم بلوری که به چهارده شبکه براوه تقسیم می شوند

سیستم بلوری	شبکه براوه	مشخصه‌های یاخته واحد	مشخصه‌های عنصر تقارن
سه میلی (Triclinic)	ساده	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$	هیچ
تک میلی (Monoclinic)	ساده مرکز قاعده ای	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90 \neq \gamma$	یک محور چرخشی دوفولد
راست گوشه (Orthorhombic)	ساده- مرکز قاعده‌ای- مرکز حجمی- مرکز سطحی	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$	سه محور چرخشی عمود بر هم دوفولد
سه گوشه (Trigonal) (rhombohedral)	ساده	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90$	یک محور چرخشی سه فولد
چهار گوشه (Tetragonal)	ساده مرکز حجمی	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$	یک محور چرخشی چهار فولد
مکعبی (Cubic)	ساده مرکز سطحی- مرکز حجمی	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$	چهار محور چرخشی سه فولد (در امتداد قطرهای مکعب)
شش گوشه (Hexagonal)	ساده	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90, \gamma = 120$	یک محور چرخشی سه فولد

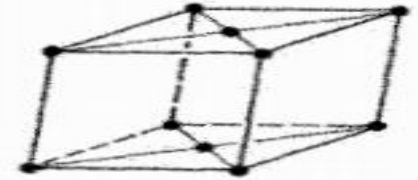
شکل ۱-۷: ۱۴ شبکه براوه که در ۷ سیستم بلوری طبقه بندی شده اند



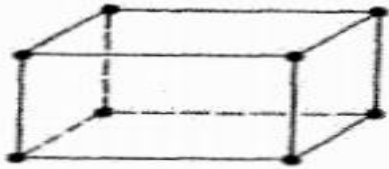
Triclinic



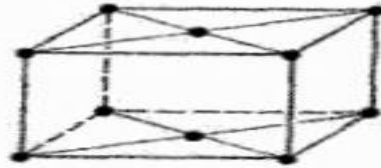
Simple monoclinic



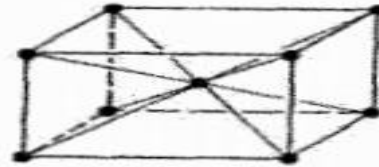
Base-centered monoclinic



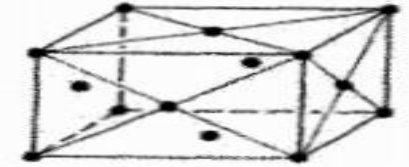
Simple orthorhombic



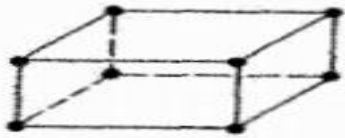
Base-centered orthorhombic



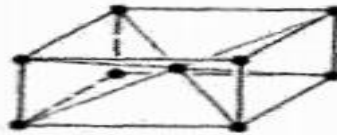
Body-centered orthorhombic



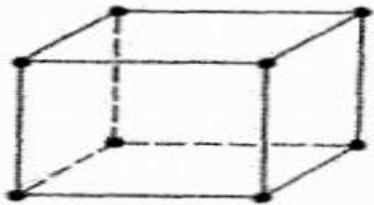
Face-centered orthorhombic



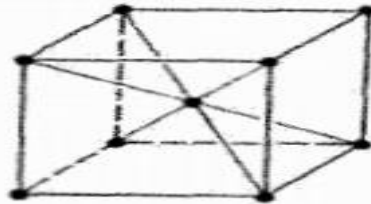
Simple tetragonal



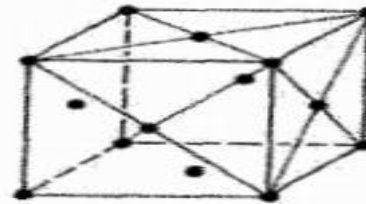
Body-centered tetragonal



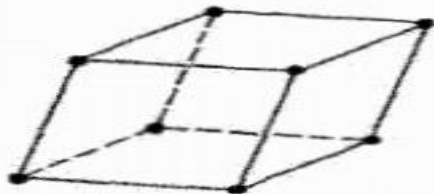
Simple cubic



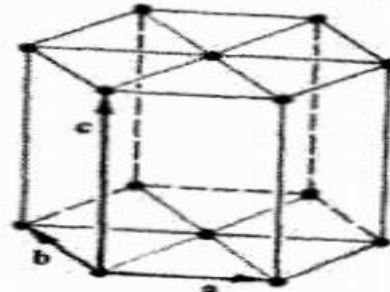
Body-centered cubic



Face-centered cubic



Trigonal

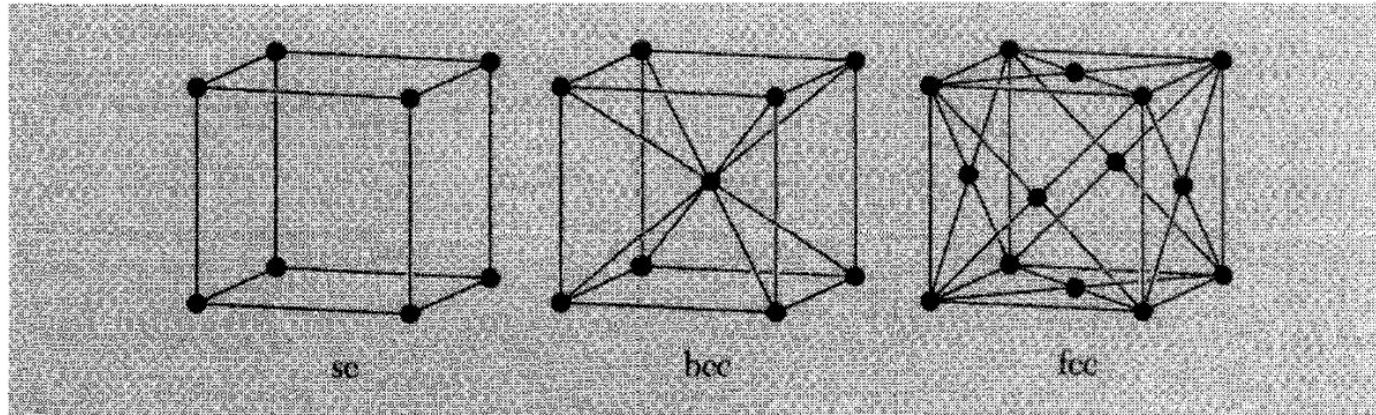


Hexagonal

چند نکته مهم در مورد شبکه های مکعبی

شبکه‌ی مکعبی ساده فقط نقاطی در رئوسش دارد، شبکه‌ی مرکز حجمی یک نقطه‌ی اضافه در مرکز یاخته و شبکه‌ی مرکز سطحی شش نقطه اضافه، (یکی در هر وجهش) دارد. مجدداً یاد آور می‌شویم که در تمام شبکه‌های غیر ساده، یاخته‌های واحد غیر بسیط هستند.

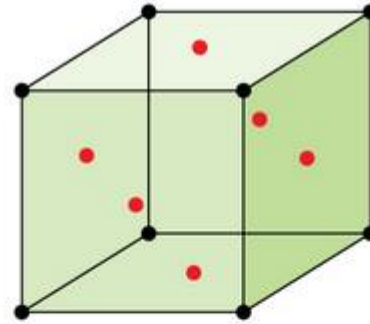
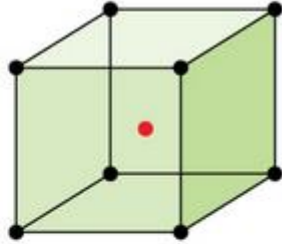
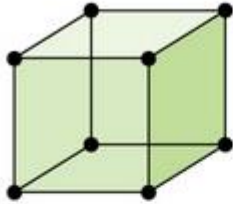
سیستمی که بیش از سایر سیستم‌ها در این کتاب مورد مطالعه قرار می‌گیرد سیستم مکعبی به ویژه سیستم‌های مکعبی مرکز سطحی (fcc) و مرکز حجمی (bcc) می‌باشند. سیستم شش گوشه نیز گاه گاهی مورد توجه قرار می‌گیرد.



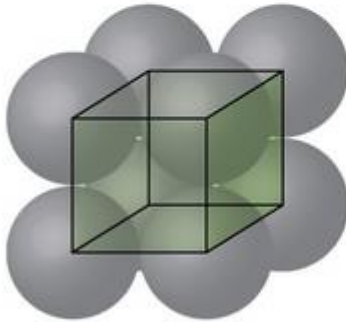
شکل ۸. شبکه‌های فضایی مکعبی. یاخته‌های نشان داده شده، یاخته‌های قراردادی‌اند.

cubic structures

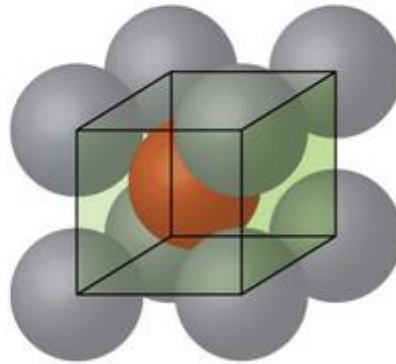
Lattice point locations



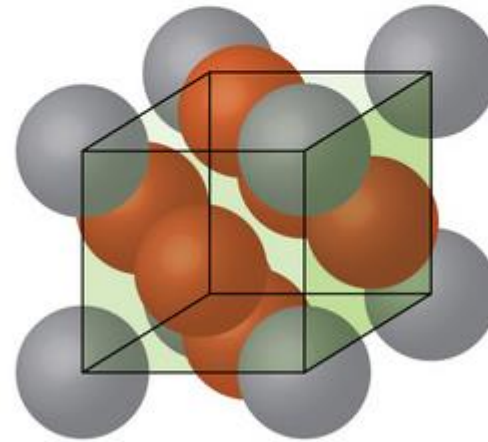
Cubic unit cells



Simple cubic



Body-centered cubic

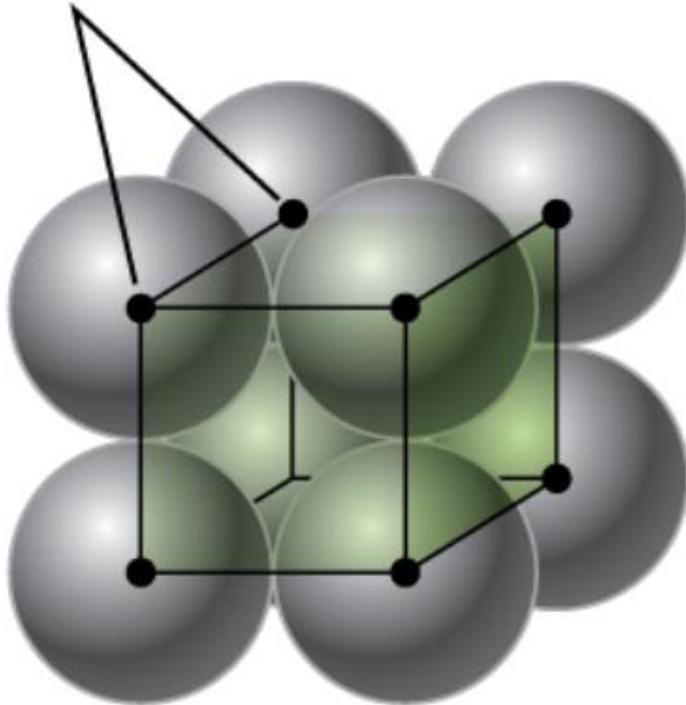


Face-centered cubic

Figure 5. Cubic unit cells of metals show (in the upper figures) the locations of lattice points and (in the lower figures) metal atoms located in the unit cell.

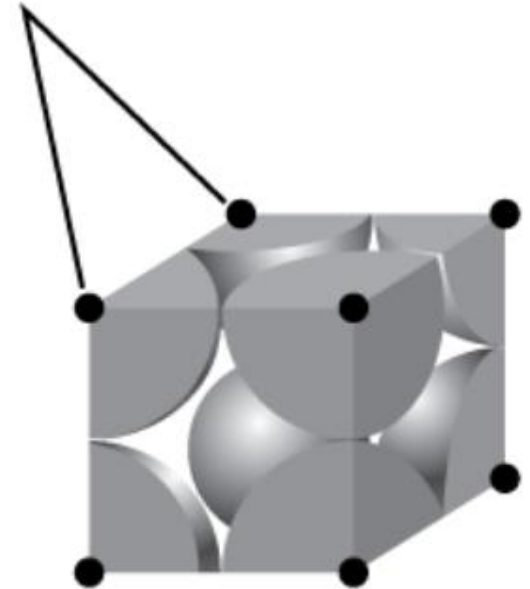
1- simple cubic

Lattice points



Simple cubic lattice cell

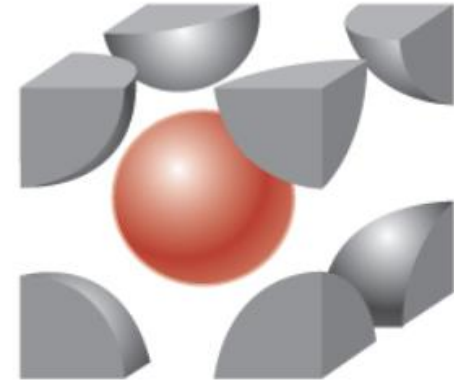
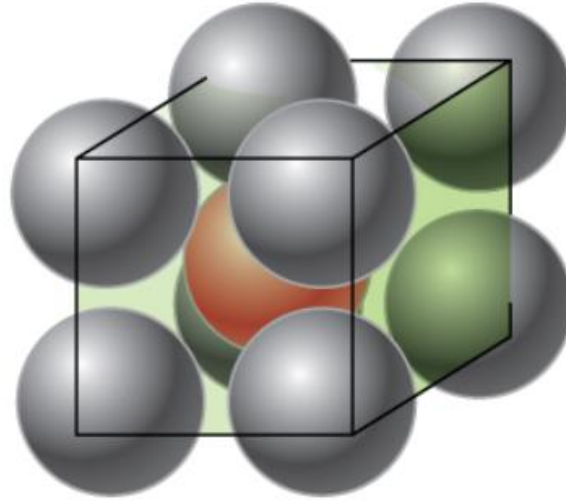
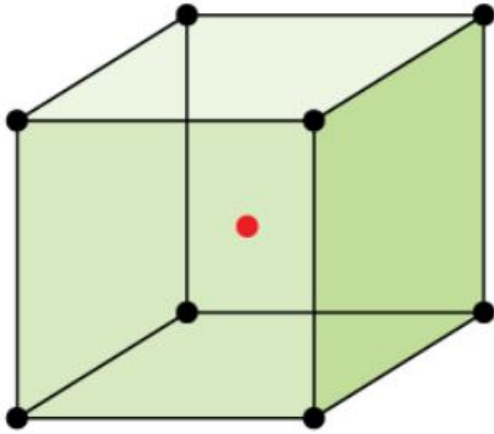
Lattice points



8 corners

Figure 4. A simple cubic lattice unit cell contains one-eighth of an atom at each of its eight corners, so it contains one atom total.

2- Body-centered cubic



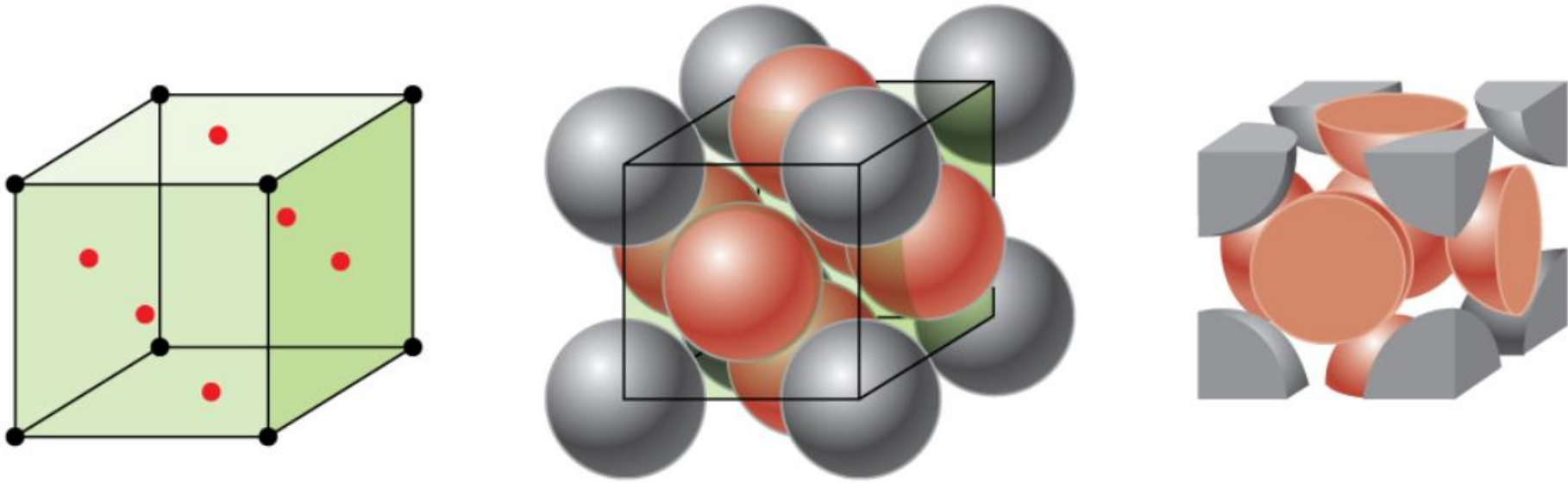
Body-centered cubic structure

Figure 6. In a body-centered cubic structure, atoms in a specific layer do not touch each other. Each atom touches four atoms in the layer above it and four atoms in the layer below it.

Atoms in BCC arrangements are much more efficiently packed than in a simple cubic structure, occupying about 68% of the total volume.

Isomorphous metals with a BCC structure include K, Ba, Cr, Mo, W, and Fe at room temperature. (Elements or compounds that crystallize with the same structure are said to be **isomorphous**.)

3- Face-centered cubic

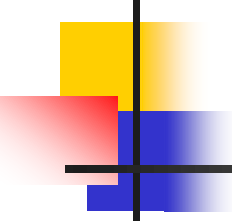


Face-centered cubic structure

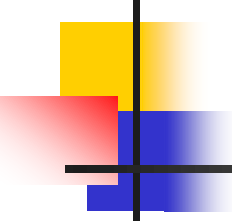
Figure 7. A face-centered cubic solid has atoms at the corners and, as the name implies, at the centers of the faces of its unit cells.

Atoms in an FCC arrangement are packed as closely together as possible, with atoms occupying 74% of the volume. This structure is also called **cubic closest packing (CCP)**.

Cubic Crystal Structures

- 
- ❖ The simplest crystal conceptually is the so-called simple cubic structure, where the atoms lie on a grid: layers of rows and columns.
 - ❖ Simple cubic crystals are rather rare, but many crystals form body-centered-cubic or face-centered-cubic structures, which can be viewed as simple cubic grids with an extra atom at the center of each cube or each face of a cube, respectively.

What crystal will form?

- 
- Simple cubic crystals with only one element are rare, mostly because they're floppy and tend to distort.
 - Body-centered cubic (bcc) packings of atoms tend to be most stable near the melting point because the atoms have room to vibrate (important at high temperatures):
 - face-centered cubic (fcc) crystals are common among metals at low temperatures because the atoms pack well.