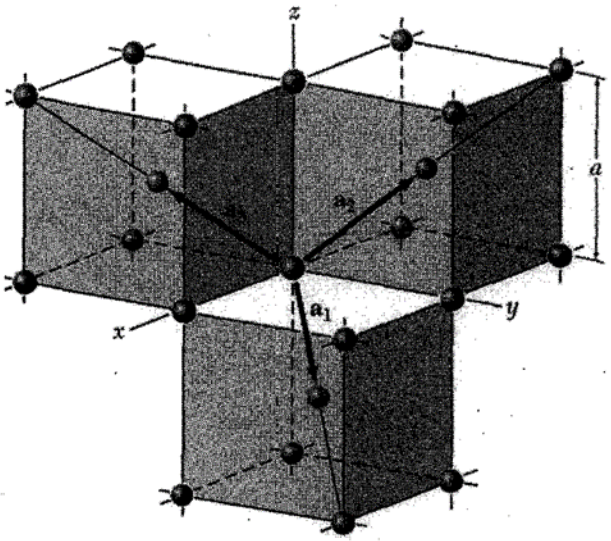
مسائل فصل اول

ساختارهای بلوری و نیروهای بین اتمی

۱. **زوایای چهاروجهی.** زاویهٔ بین پیوندهای چهاروجهی الماس، همان‌گونه که در شکل ۱۰ نشان داده شده، برابر با زاویهٔ بین اقطار اصلی مکعب است. با استفاده از آنالیز برداری مقدماتی مقدار این زاویه را پیدا کنید.



شکل ۱۰. بردارهای انتقال بسیط شبکهٔ مکعبی مرکزحجمی؛ این بردارها نقطهٔ شبکه‌ای واقع در مبدأ را به نقطه‌های شبکه‌ای واقع در مراکز حجم وصل می‌کنند. یاختهٔ بسیط با کامل‌کردن یک لوزی‌رخ روی این سه بردار به‌دست می‌آید. بردارهای انتقال بسیط برحسب یال مکعب، a، عبارت‌اند از $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{y}}-\hat{\mathbf{z}})$، $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a(-\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{y}}+\hat{\mathbf{z}})z$، $\mathbf{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}}-\hat{\mathbf{y}}+\hat{\mathbf{z}})$ در اینجا $\hat{\mathbf{x}}$، $\hat{\mathbf{y}}$، و $\hat{\mathbf{z}}$ بردارهای یکهٔ دکارتی‌اند.

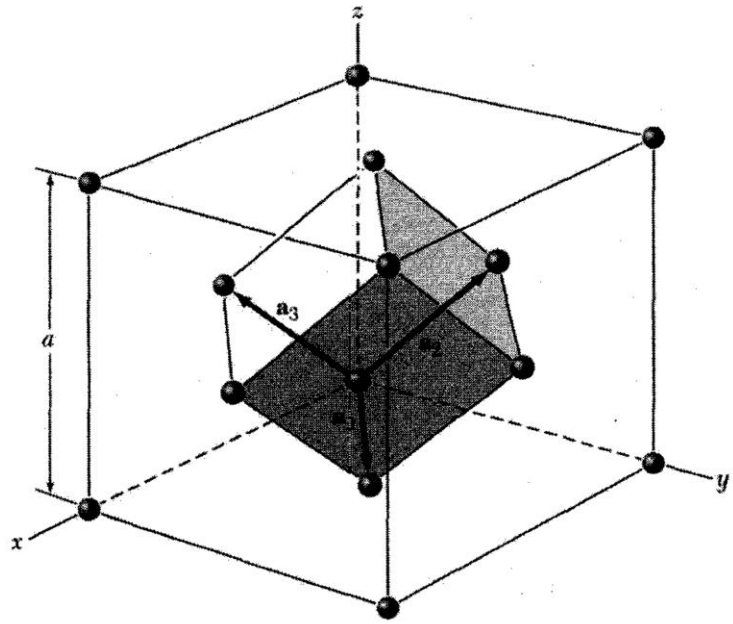
بردارهای $\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$ و $\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ در جهت قطرهای حجمی مکعب هستند. با توجه به حاصلضرب نرده ای این دو بردار:

$$\vec{a}_1 . \vec{a}_2 = |\vec{a}_1||\vec{a}_2| cos\theta \rightarrow cos\theta = -\frac{1}{3}$$

زاویه بین آنها برابر است با:

$$\theta = cos^{-1}\left(-\frac{1}{3}\right) = 109^0 28'$$

۲. شاخصهای صفحات. در شبکهٔ fcc صفحاتی را که نسبت به یاختهٔ مکعبی قراردادی با شاخصهای (۱۰۰) و (۰۰۱) مشخص شده‌اند، درنظر بگیرید. این صفحات نسبت به محورهای بسیط شکل ۱۱ چه شاخصهایی دارند؟



شکل ۱۱. یاختهٔ بسیط لوزی‌رخ بلور مکعبی مرکزسطحی. بردارهای انتقال بسیط $\mathbf{a}_1$، $\mathbf{a}_2$، و $\mathbf{a}_3$ نقطهٔ شبکه‌ای واقع در مبدأ را به نقطه‌های شبکه‌ای در مراکز وجوه وصل می‌کنند. بردارهای بسیطی که رسم شده‌اند، عبارت‌اند از $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}})$، $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$، $\mathbf{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{z}} + \hat{\mathbf{x}})$. زاویهٔ بین محورها برابر است با 60°.

برای شاخص گذاری صفحات بلوری:

الف- محل تقاطع صفحه را با محورهای a_1، a_2 و a_3 بر حسب ثابت های شبکه پیدا می کنیم.

ب- عددهای حاصل را وارونه می کنیم و آنها را به سه عدد درستی با همان نسبت ها، تقلیل می دهیم.

ج-معمولا کوچکترین سه عدد درست را اختیار و نتیجه را به صورت (hkl) نشان می دهیم.

صفحه (۱۰۰) عمود بر محور X است که محور a_1 را در $2a_1$ ، محور a_3 را در $2a_3$ قطع می کند و محور a_2 را قطع نمی کند(در بینهایت قطع می کند) بنابراین سه مرحله فوق را به صورت زیر پی می گیریم.

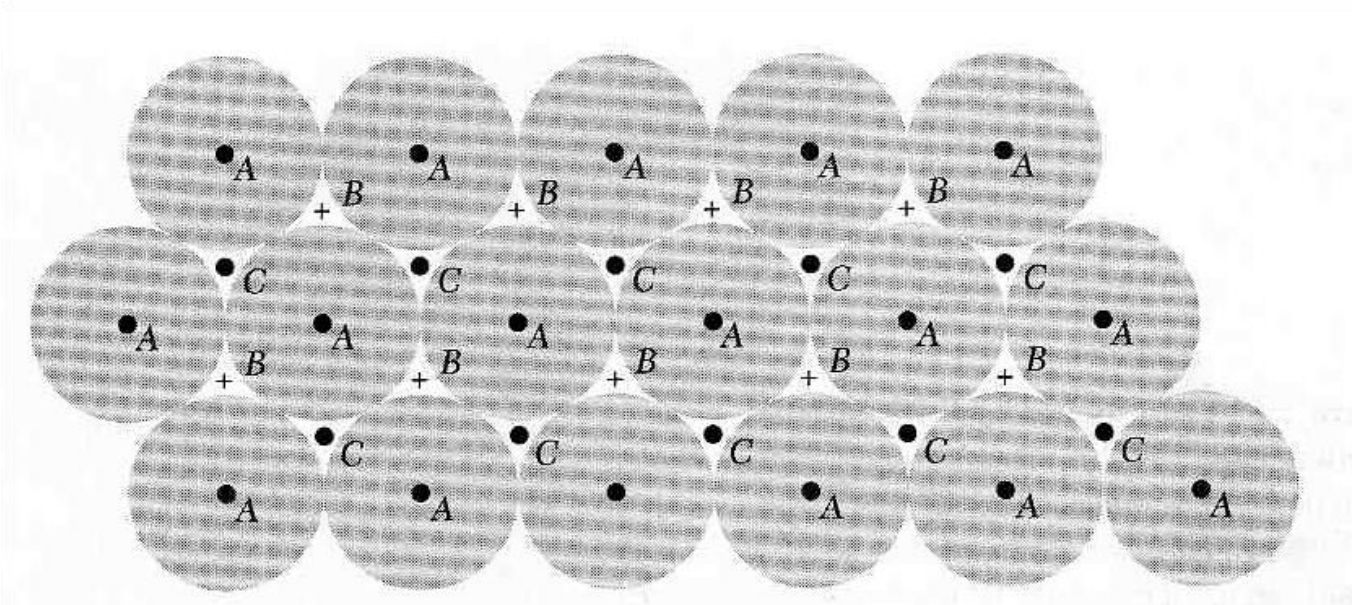
$$(2,\infty,2)\rightarrow(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})\rightarrow(1,0,1)$$

همچنین برای صفحه (۰۰۱) که عمود بر محور Z است خواهیم داشت:

$$(\infty,2,2)\rightarrow(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})\rightarrow(0,1,1)$$

۳. ساختار hcp. نشان دهید که نسبت c/a برای ساختار تنگ‌چین شش‌گوشی ایده‌آل برابر است با $(\frac{۸}{۳})^{۱/۲} = ۱٫۶۳۳$. اگر c/a به‌طور قابل ملاحظه‌ای از این مقدار بزرگتر باشد، ساختار بلور را می‌توان به‌صورت صفحات تنگ‌چینی از اتمها پنداشت که به‌طور وازچین روی‌هم چیده شده‌اند.

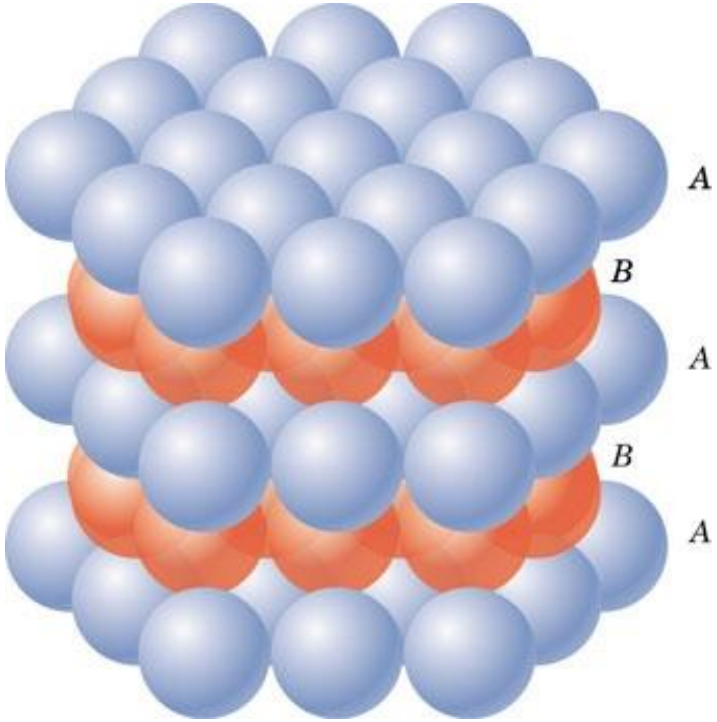
مکانیسم شکل گیری ساختارها ی تنگ پکیده

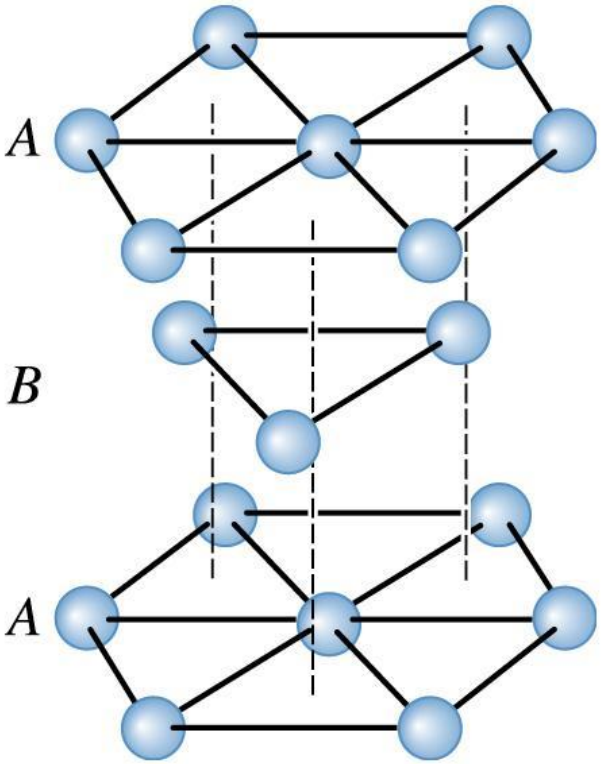


شکل ۱۹. یک لایهٔ تنگ‌چین از کره‌ها با مراکزی که در نقطه‌های A قرار دارند، نشان داده شده است. لایهٔ یکسان دوم کره‌ها را می‌توان به‌گونه‌ای روی این لایه به موازات صفحهٔ شکل قرار داد که مراکز کره‌ها بالای نقاط B قرار گیرند. برای لایهٔ سوم دو گزینه وجود دارد. این لایه ممکن است بالای A یا بالای C قرار گیرد. اگر بالای A قرار گیرد، دنبالهٔ $ABABAB\ldots$ به‌وجود می‌آید و ساختار، تنگ‌چین شش‌گوشی می‌شود. اگر لایهٔ سوم روی C قرار گیرد، دنبالهٔ $ABCABCABC\ldots$ پدید می‌آید و ساختار، مکعبی مرکزسطحی می‌شود.

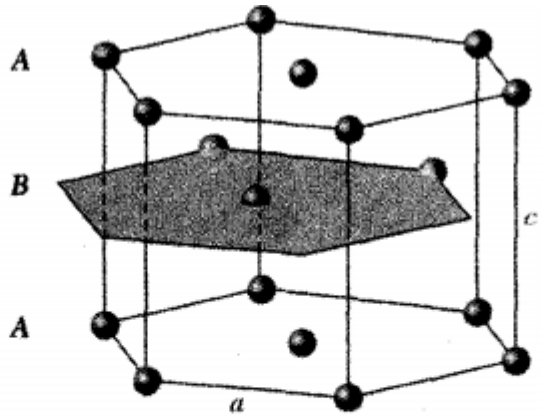
ساختار تنگ چین شش گوشی

Hexagonal Close-Packed Structure (hcp)



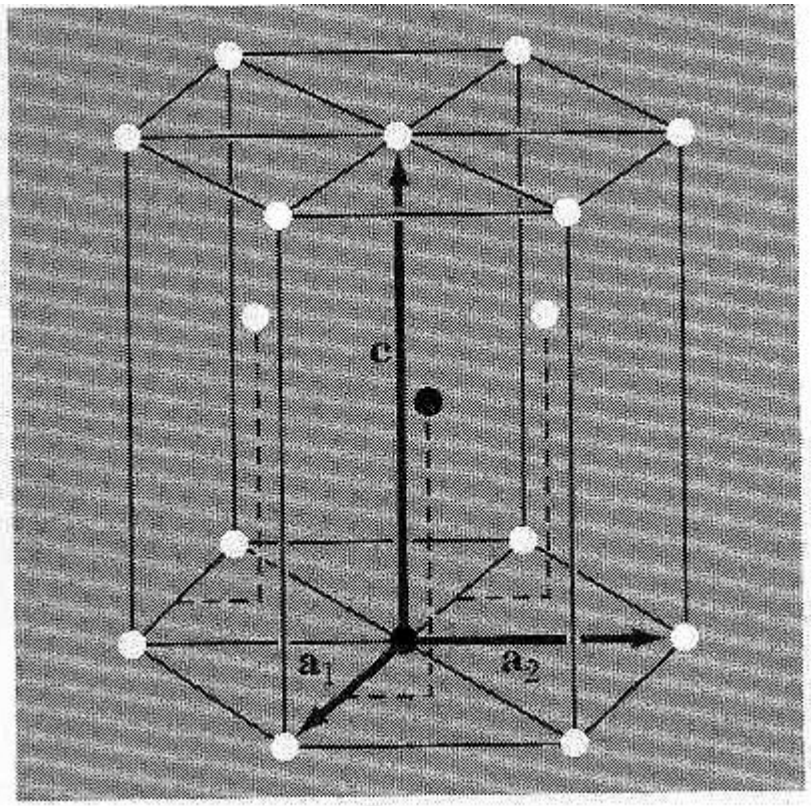


ساختار تنگ چین شش گوشی



شکل ۲۰. شبکهٔ فضایی، شش‌گوشی ساده است که به هر نقطهٔ شبکه‌ای آن پایه‌ای با دو اتم یکسان مربوط می‌شود. پارامترهای شبکهٔ a و c در شکل نشان داده شده‌اند.

ساختار تنگ چین شش گوشی

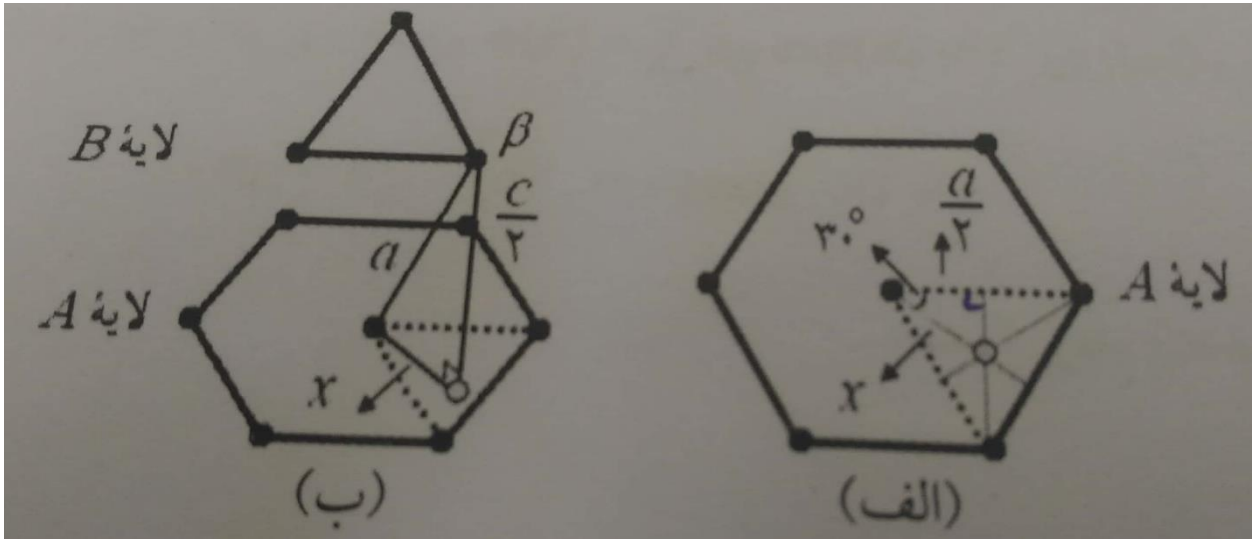


شکل ۲۱. در یاختهٔ بسیط، $a_۱ = a_۲$ و زاویهٔ بین آنها ۱۲۰° است. محور c (یا $\mathbf{a}_۳$) بر صفحهٔ $\mathbf{a}_۱$ و $\mathbf{a}_۲$ عمود است. در ساختار ایده‌آل hcp، $c = ۱٫۶۳۳a$. دو اتم مربوط به یک پایه در شکل با دایره‌های سیاه نشان داده شده‌اند. یکی از اتمهای پایه در مبدأ و اتم دیگر در $\frac{۲}{۳}\frac{۱}{۳}\frac{۱}{۲}$، یعنی در مکان $\mathbf{r} = \frac{۲}{۳}\mathbf{a}_۱ + \frac{۱}{۳}\mathbf{a}_۲ + \frac{۱}{۲}\mathbf{a}_۳$، قرار دارد.

بنا به شکل های ۱۹ و ۲۹، در ساختار hcp اگر فاصله بین اتم های همسایه را a و فاصله دو صفحه A را c فرض کنیم، فاصله صفحات A و B ، c/2 خواهد بود.

صفحه پایه(لایه A) در شکل (الف) نشان داده شده است. در هر یک از مثلث های متساوی الا ضلاع، فاصله نقطه مرکزی مثلث از راس ها برابر است با:

$$cos30 = \frac{\frac{a}{2}}{x} \rightarrow x = \frac{\frac{a}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$



در شکل (ب) دو لایه A و B از ساختار hcp نشان داده شده است. اتم β در لایه B در همسایگی با سه اتم از لایه A و در بالای مثلث حاصل از این سه اتم قرار دارد. فاصله بین هر اتم از لایه B با هر اتم از لایه A نیز a است. بنابراین می توان نوشت:

$$a^2 = (\frac{c}{2})^2 + x^2 \rightarrow a^2 = (\frac{c}{2})^2 + (\frac{a}{\sqrt{3}})^2 \rightarrow \left(\frac{c}{a}\right) = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$