بسم الله الرحمن الرحیم

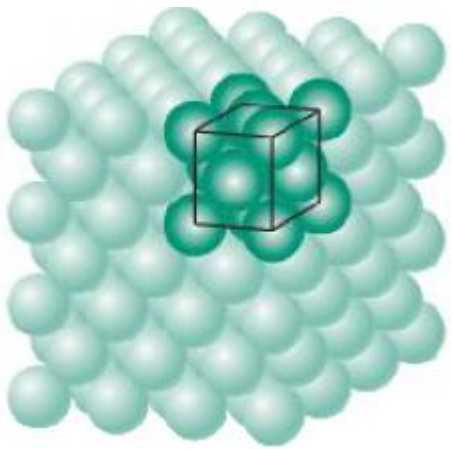
فیزیک حالت جامد ۱

فیزیک حالت جامد

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.

بلور چیست؟

به مواد 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 می‌گویند.



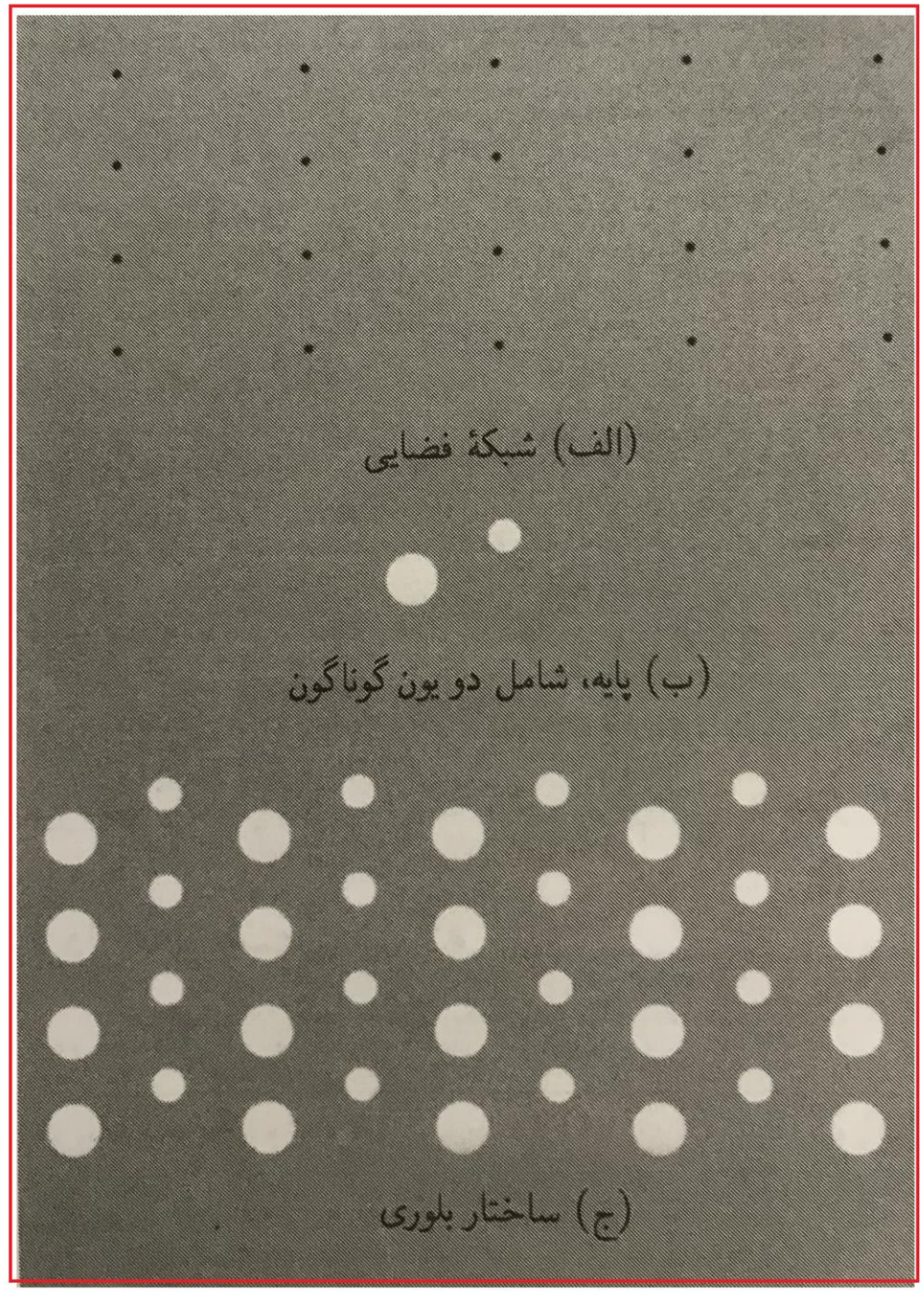
Crystal

شبکه

- بلورها از آرایه ای دوره ای از اتم ها یا گروهی از اتم ها ساخته شده اند.

- بلور ایده آل از تکرار بی پایان گروه های همانندی از اتم ها به وجود می آید. هر گروه را یک پایه مینامند. مجموعه نقطه های ریاضی که پایه به آنها متصل است را شبکه می نامند.

- شبکه آرایش سه بعدی از نقاط ریاضی است که پایه به آنها متصل می شود.


(الف) شبکهٔ فضایی
(ب) پایه، شامل دو یون گوناگون
(ج) ساختار بلوری

شبکه را می توان در سه بعد با سه بردار انتقال a_1، a_2، a_3 تعریف کرد

به گونه ای که آرایش اتم ها از دید هر نقطه r و هر نقطه r'

که به اندازه مضرب های درستی از a ها نسبت به r انتقال یافته باشد یکسان به نظر آید.

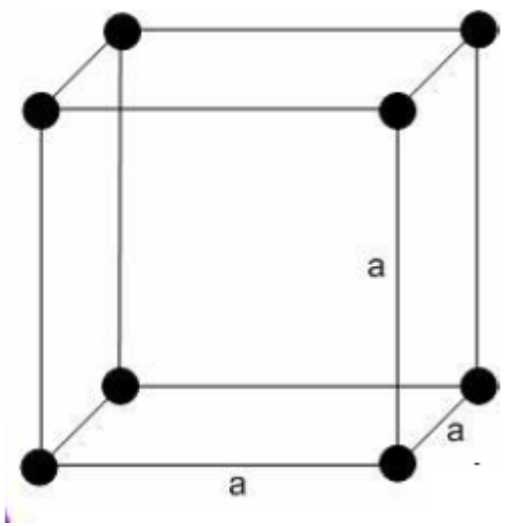
$$r' = r + u_1 a_1 + u_2 a_2 + u_3 a_3$$

$$T = u_1 a_1 + u_2 a_2 + u_3 a_3$$

بردار انتقال

سلول واحد

- از آن جایی که ساختار های بلورین از کنار هم قرار گرفتن اتم ها در کنار هم به صورت منظم و تکرار شونده به دست می آیند، 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 می شود.



- تعریف Unit cell کوچک ترین واحد یک ساختار کریستالی که از تکرار آن کل ساختار ایجاد شود و کل خواص ساختار را درخود حفظ کند.

بردارهای انتقال بسیط شبکه ⟸ $a_3 ، a_2 ، a_1$

- **بردارهای انتقال بسیط شبکه را برای تعریف محورهای بلور به کار می بریم که این محورها سه یال مجاور متوازی السوح بسیط (یاخته بسیط) را تشکیل می دهند.**

- هیچ یاخته ای را با حجم کمتر از $a_1 \cdot a_2 \times a_3$ نمی توان به صورت سنگ بنای بلور به کار برد.

⇦متوازی السطوحی که محورهای بسیط a_1 ، a_2 و a_3 تعریف می کنند یاخته بسیط (سلول واحد) نام دارد.

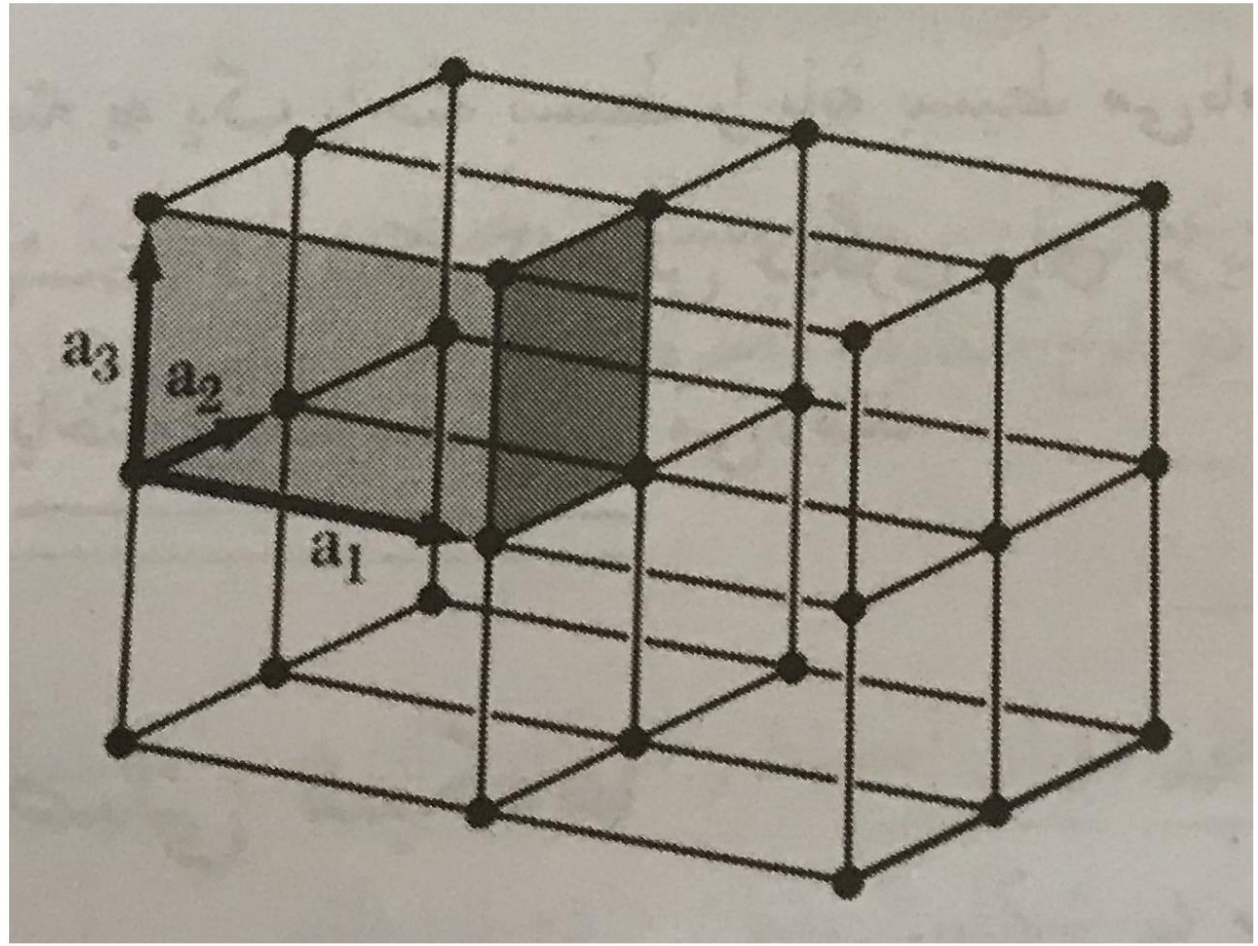
⇦ یاخته بسیط نوعی یاخته یکه (واحد) است.

⇦ یاخته بسیط یاخته ای با حجم کمینه است.

⇦ یاخته بسیط با تکرار عمل های انتقال بلور همه فضا را پر می کند.

⇦ a_1 ، a_2 و a_3 را اغلب با a ، b و c نشان می دهند.

◀ پس از گزینش محورهای بلور ، پایه ساختار بلور را می توان مشخص کرد.


a_3
a_2
a_1

⇦ در یک بلور معین پایه ها از نظر ترکیب ، آرایش و سمتگیری یکسان اند.

⇦ تعداد اتم های پایه ممکن است یک یا بیشتر باشد.

⇦ مکان مرکز اتم ام پایه نسبت به نقطه شبکه ای وابسته به آن به صورت زیر است.

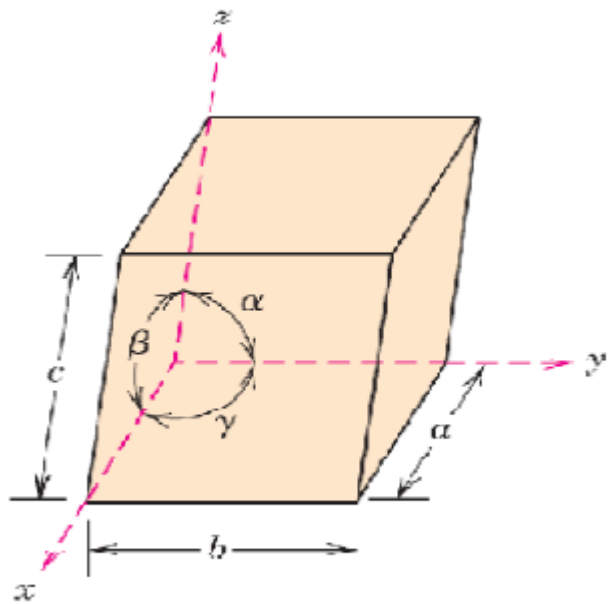
$$\boldsymbol{r}_j = x_j \boldsymbol{a_1} + y_j \boldsymbol{a_2} + z_j \boldsymbol{a_3}$$

⇦ معمولا مبدا به گونه ای در نظر گرفته می شود که

$$0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$$

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 ۶ پارامتر توصیف می شود که عبارتند از:



a, b, c

α, β, γ

The angles (α, β, γ) and lengths (a, b, c) used to define the size and shape of a unit cell are the **unit cell parameters** (the 'lattice parameters')

ساختارهای بلوری

- مکعبی یا کوبیک
- تتراگونال
- هگزاگونال
- تری گونال
- اورتورومبیک
- مونوکلینیک
- تری کلینیک

نام گذاری

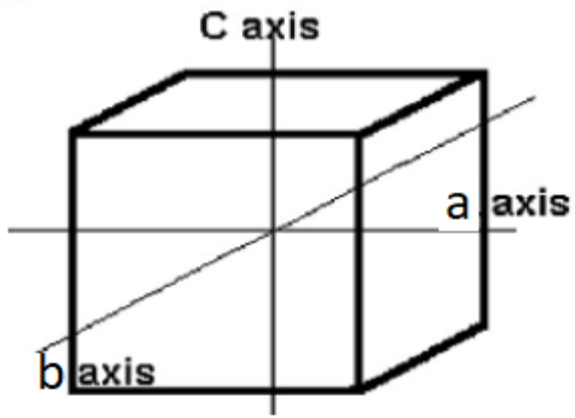
ارتباط بین پارامترهای شبکه

شکل هندسی سلول واحد

انواع یاخته (سلول) واحد

- یاخته بسیط
- یاخته قراردادی

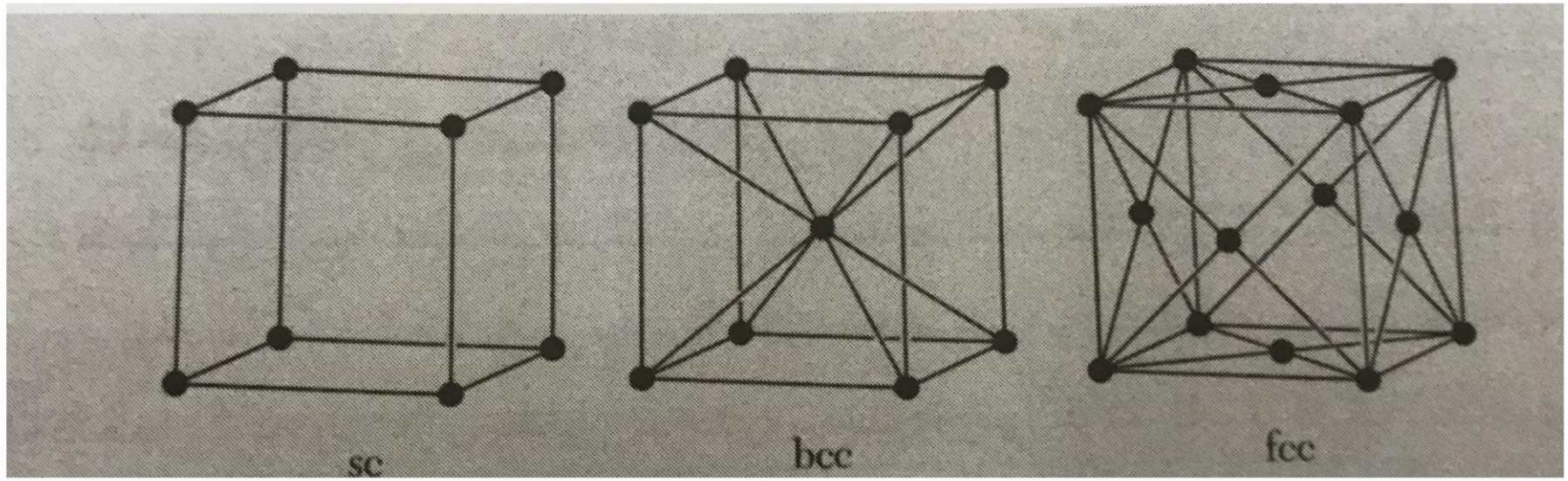
سلول واحد مکعبی



- اولین و ساده ترین سیستم تبلور
- دارای سه محور با طول یکسان
- زوایای محورها با یکدیگر: ۹۰ درجه
- کانی های معروف: الماس، طلای طبیعی، نقره طبیعی

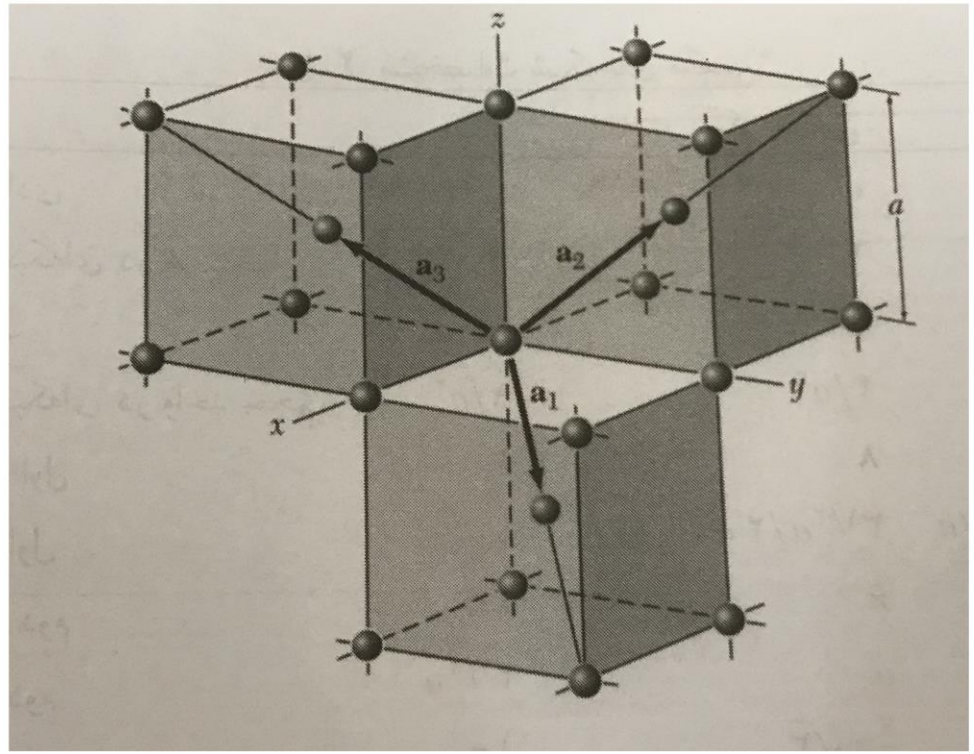
$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90$$

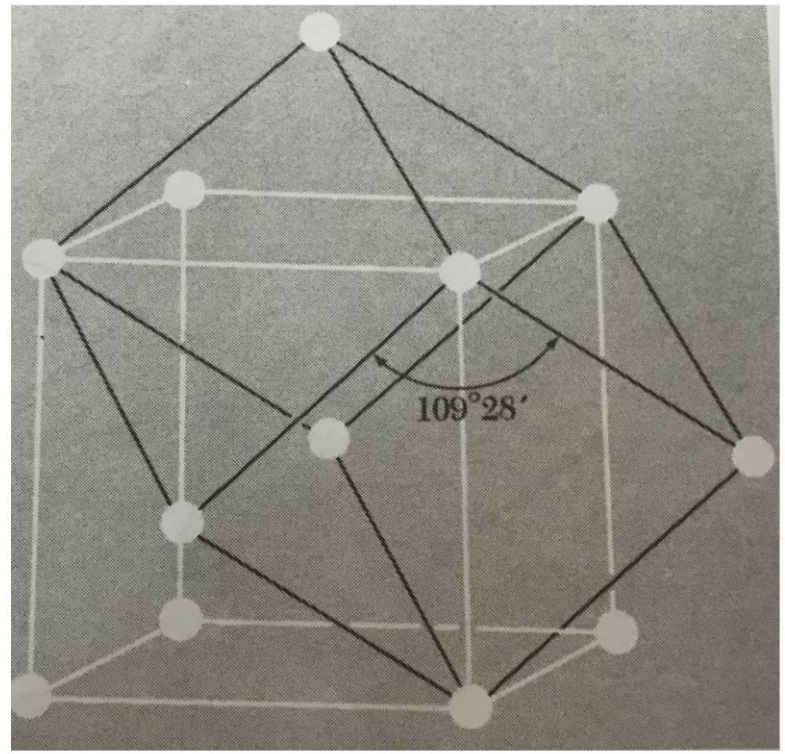


. شبکه‌های فضایی مکعبی. یاخته‌های نشان‌داده‌شده، یاخته‌های قراردادی‌اند.

شبکه مرکز حجمی یا bcc

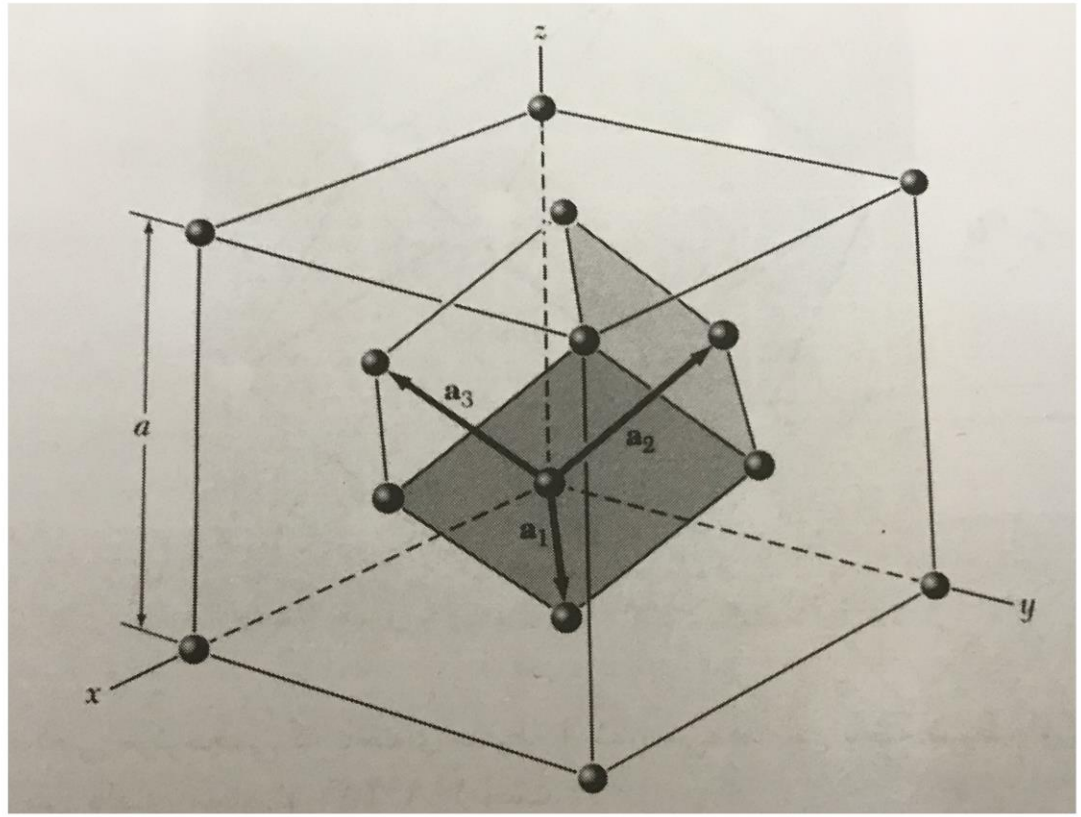


شکل ۱۰. بردارهای انتقال بسیط شبکهٔ مکعبی مرکزحجمی؛ این بردارها نقطهٔ شبکه‌ای واقع در مبدأ را به نقطه‌های شبکه‌ای واقع در مراکز حجم وصل می‌کنند. یاختهٔ بسیط با کامل‌کردن یک لوزی‌رخ روی این سه بردار به‌دست می‌آید. بردارهای انتقال بسیط برحسب یال مکعب، a، عبارت‌اند از $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{y}}-\hat{\mathbf{z}})z$،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



. شبکهٔ مکعبی مرکزحجمی که یاخته‌ای بسیط را نشان می‌دهد

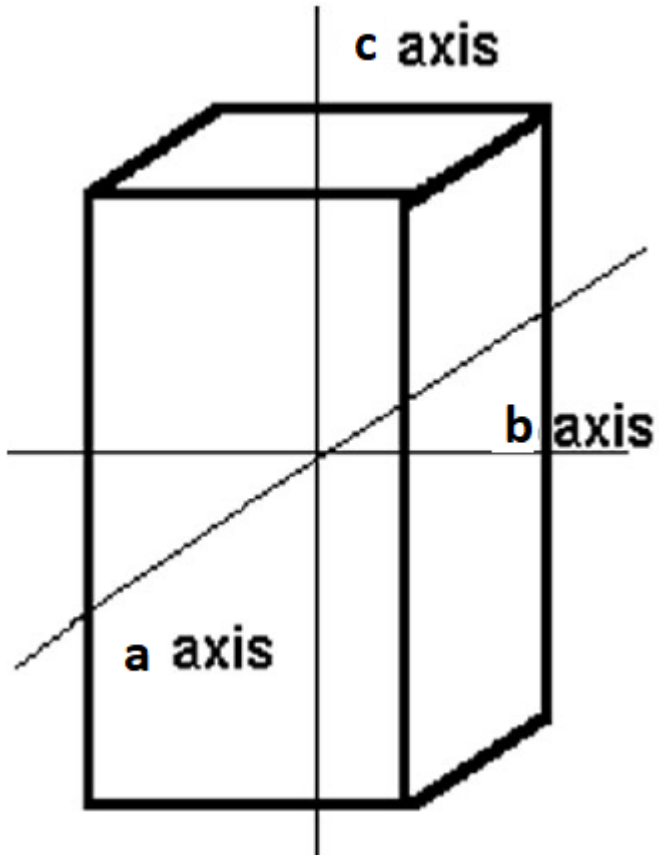
شبکه مرکز سطحی یا fcc



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

$$\mathbf{a}_1 = \tfrac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}),\quad \mathbf{a}_2 = \tfrac{1}{2}a(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}),\quad \mathbf{a}_3 = \tfrac{1}{2}a(\hat{\mathbf{z}} + \hat{\mathbf{x}});$$

سلول واحد تتراگونال

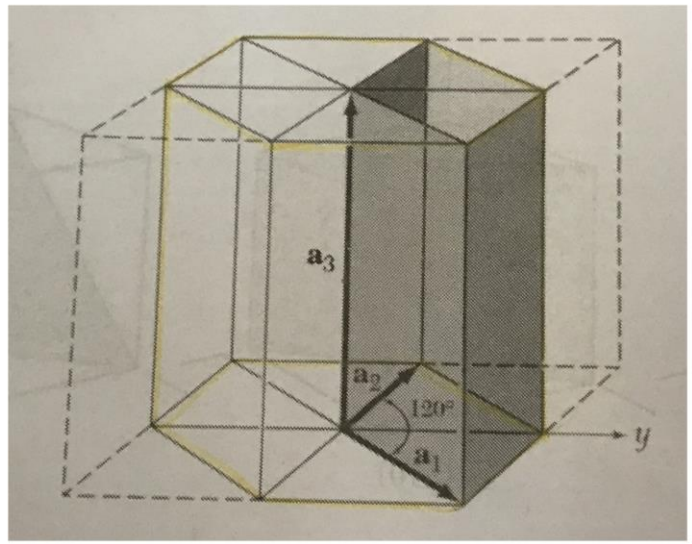


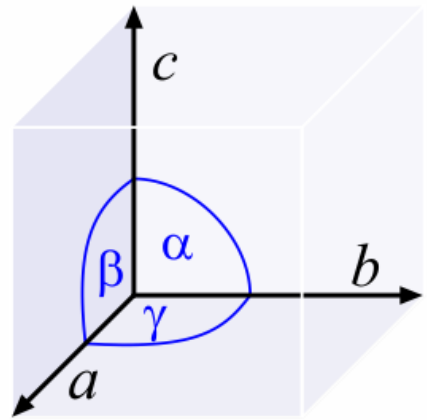
- دارای سه محور که محورهای a و b هم اندازه و محور c بلندتر از آن دو است.
- زوایای محورها با یکدیگر: ۹۰ درجه

$$a = b < c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90$$

سلول واحد هگزاگونال



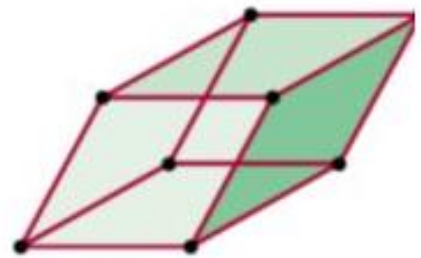


$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90° \quad \gamma = 120°$$

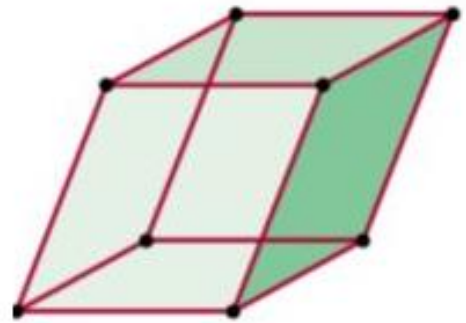
دیگر سلول های واحد

رومبوهدرال



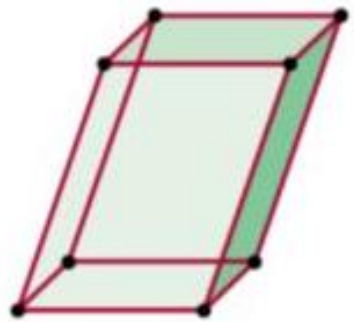
Rhombohedral
$a = b = c$
$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$

تری کلینیک



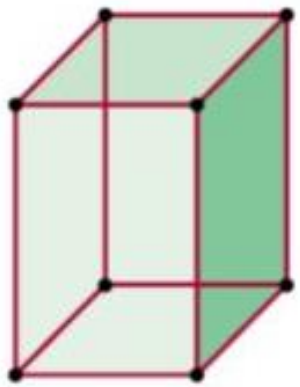
Triclinic
$a \neq b \neq c$
$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$

مونوکلینیک

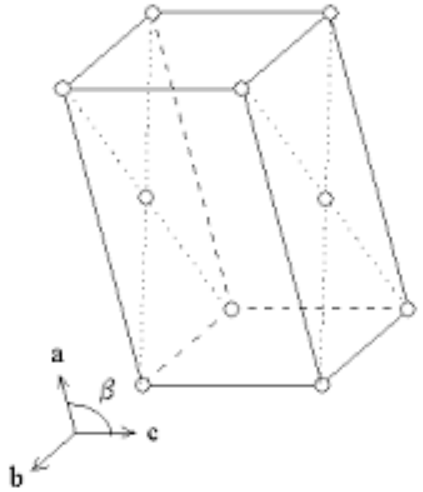


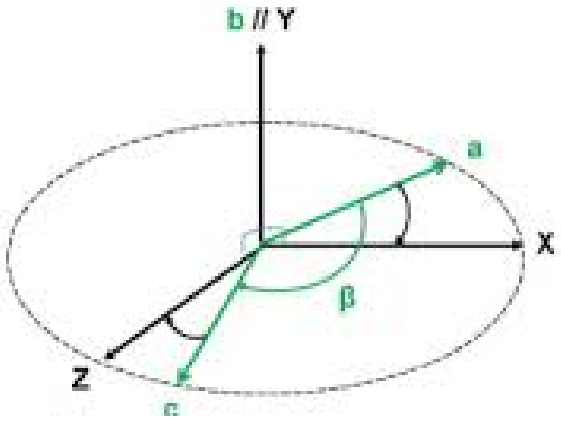
Monoclinic
$a \neq b \neq c$
$\alpha = \gamma = 90°, \beta \neq 90°$

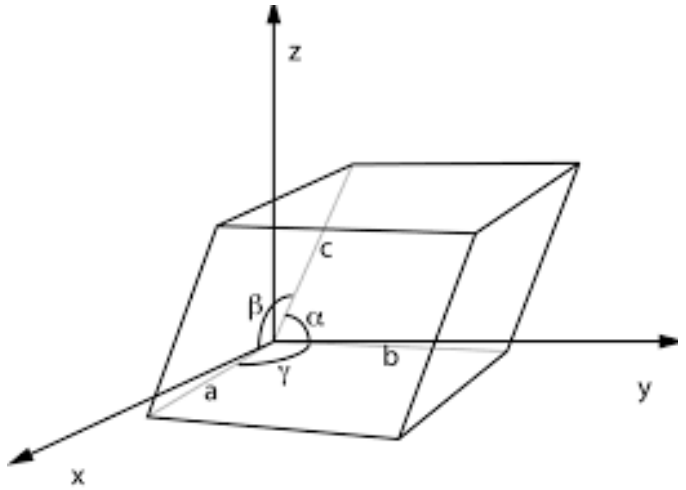
اورتورومبیک

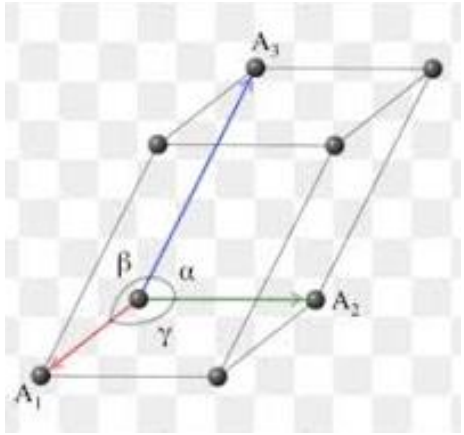


Orthorhombic
$a \neq b \neq c$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

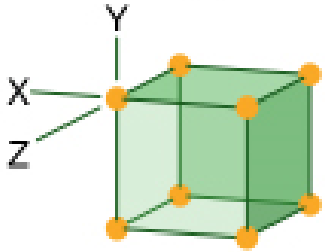

a
β
c
b


b // Y
a
X
β
Z
c

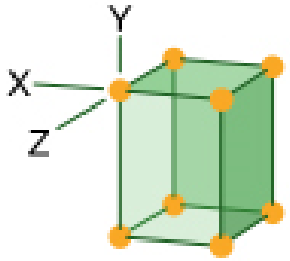

z
c
β
α
γ
b
a
y
x


A3
β
α
A2
γ
A1

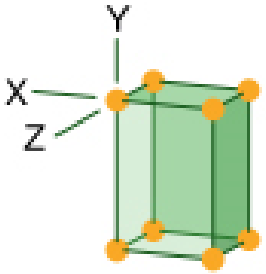
The seven primitive crystal systems



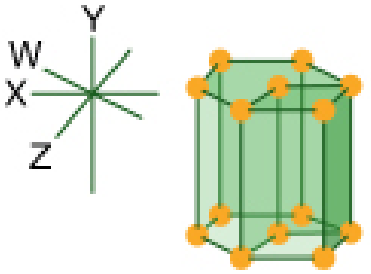
Isometric (or cubic)
All three axes are equal in length, and all are perpendicular to one another.



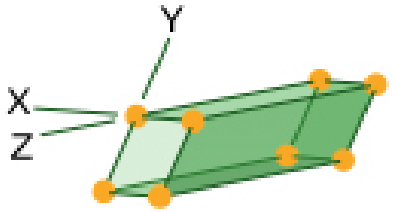
Tetragonal
Two of the three axes are equal in length, and all three axes are perpendicular to one another.



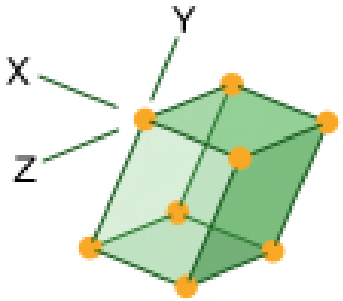
Orthorhombic
All three axes are unequal in length, and all are perpendicular to one another.



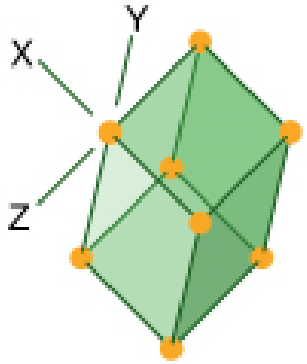
Hexagonal
Of four axes, three are of equal length, are separated by equal angles, and lie in the same plane. The fourth axis is perpendicular to the plane of the other three axes. Hexagonal cells have lattice points in each of the two six-sided faces.



Triclinic
All three axes are unequal in length, and none is perpendicular to another.



Monoclinic
All three axes are unequal in length, and two axes are perpendicular to each other.



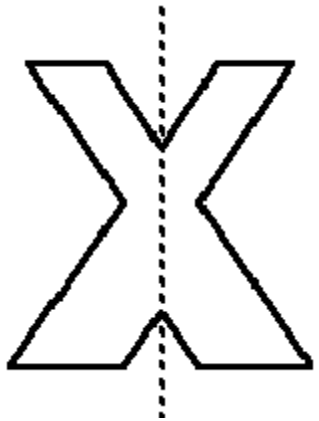
Rhombohedral (or trigonal)*
All three axes are of equal length, and none of the axes is perpendicular to another, but the crystal faces all have the same size and shape.

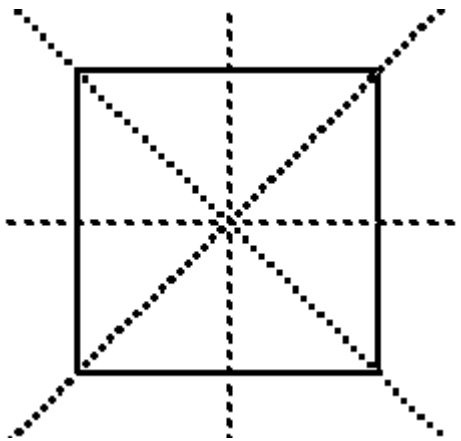
تقارن

- **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. که به دلیل اثر عوامل و یا عناصر تقارنی است.**

⇦ شبکه های بلوری را می توان توسط انتقال های شبکه ای T و عملهای تقارنی مختلف دیگر بر خودشان برگردانید یا نگاشت.

عناصر تقارن





- محور تقارن
- سطح تقارن
- مرکز تقارن

محور تقارن

محورهای دوران یکتایه، دوتایه، سه تایه، چهارتایه و شش تایه متناظر با دوران های 2π ، $\frac{2\pi}{2}$ ، $\frac{2\pi}{3}$ ، $\frac{2\pi}{4}$ ، $\frac{2\pi}{6}$ رادیان و مضرب های درستی از آنها شبکه را بر خودشان بر می گردانند.

محور تقارن درجه ۲، ۳، ۴ و ۶

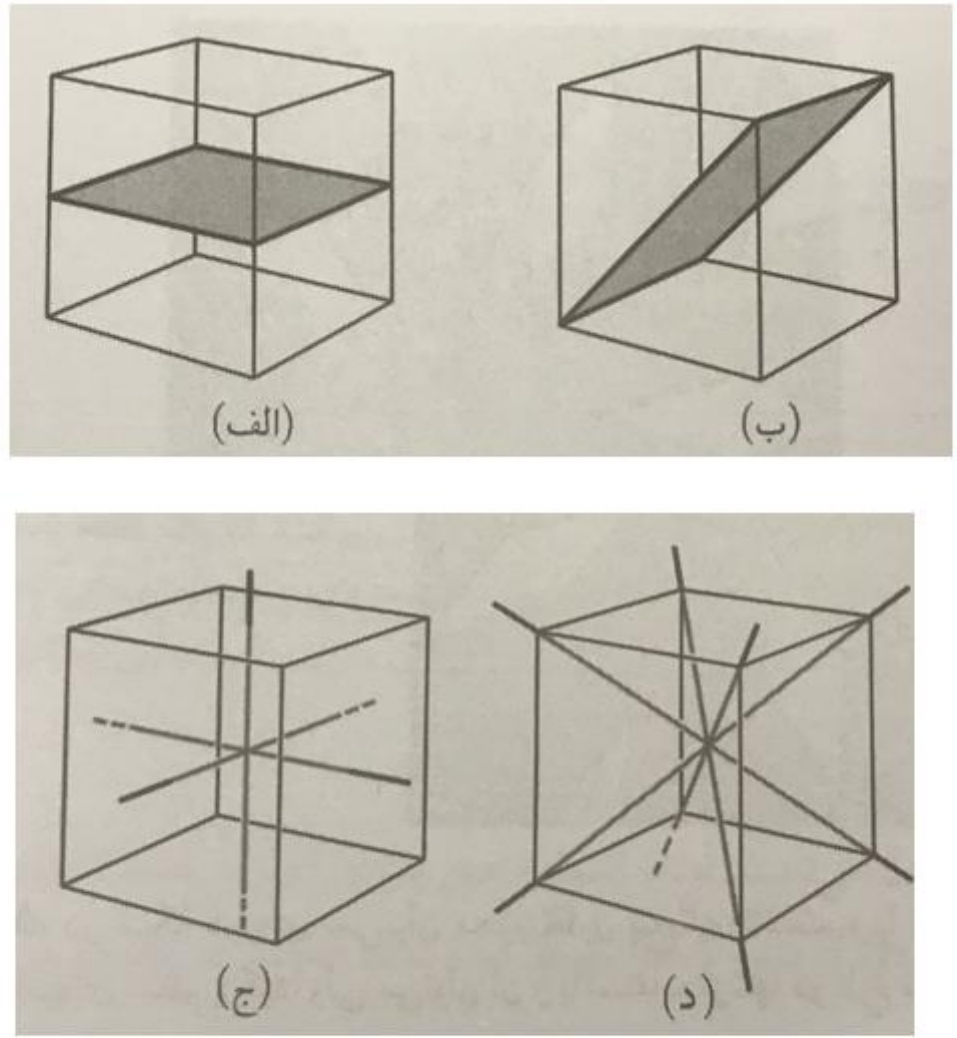
این محورهای دوران را به ترتیب با علامت های ۱، ۲،۳، ۴ و ۶ نشان می دهند.

سطح تقارن

- سطح تقارن را می توان مانند آینه ای در نظر گرفت که تصویر اجسام را نسبت به سطح خود قرینه نشان می دهد.

مرکز تقارن

- 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 ۱۸۰ درجه قرینه آن قرار دارند.



(الف) صفحهٔ تقارن موازی با وجوه مکعب. (ب) صفحهٔ تقارن قطری در مکعب. (ج) سه محور چهارتایهٔ
د) چهار محور سه‌تایهٔ مکعب.

سیستم های تبلور و عناصر تقارن

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

شبکه براوه

براوه ثابت کرد که با اضافه شدن نقاط ی به مرکزسلول و یا به مرکز بعضی از سطوح آن،

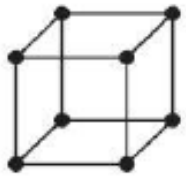
هفت سلول جدید ایجاد می شود که با هفت سلول اولیه جمعاً ۱۴ شبکه موسوم به شبکه های

براوه به وجود می آید. مثلاً اگر به مرکز یک سلول واحد مکعبی ساده یک اتم اضافه شود، شبکه مکعبی مرکزدار،

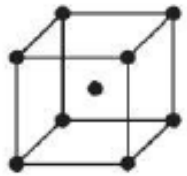
اگر در مرکز هریک از سطوح جانبی یک اتم قرار گیرد، شبکه مکعبی سطوح مرکزدار ایجاد می شود

۱۴ شبکه براوه

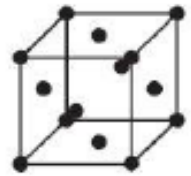
The 14 Crystal (Bravais) Lattices



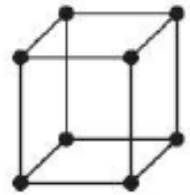
Simple cubic



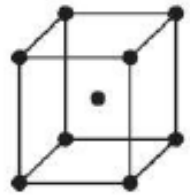
Body-centered cubic



Face-centered cubic

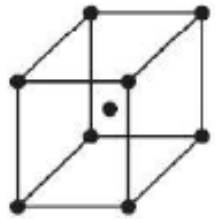


Simple tetragonal

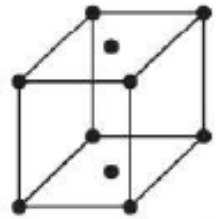


Body-centered tetragonal

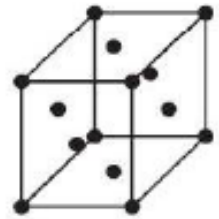
Simple orthorhombic



Body-centered orthorhombic

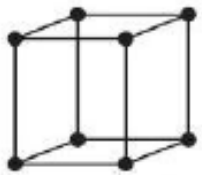


Base-centered orthorhombic

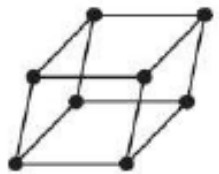


Face-centered orthorhombic

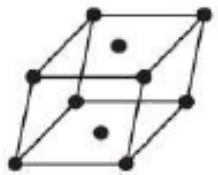
Rhombohedral



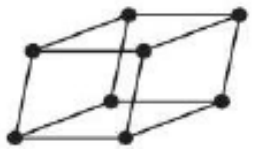
Hexagonal



Simple monoclinic



Base-centered monoclinic



Triclinic