**دانشکده مهندسی نساجی – دانشگاه صنعتی اصفهان**

# ساختمان فیزیکی الیاف

دکتر مصطفی یوسفی

# Crystal

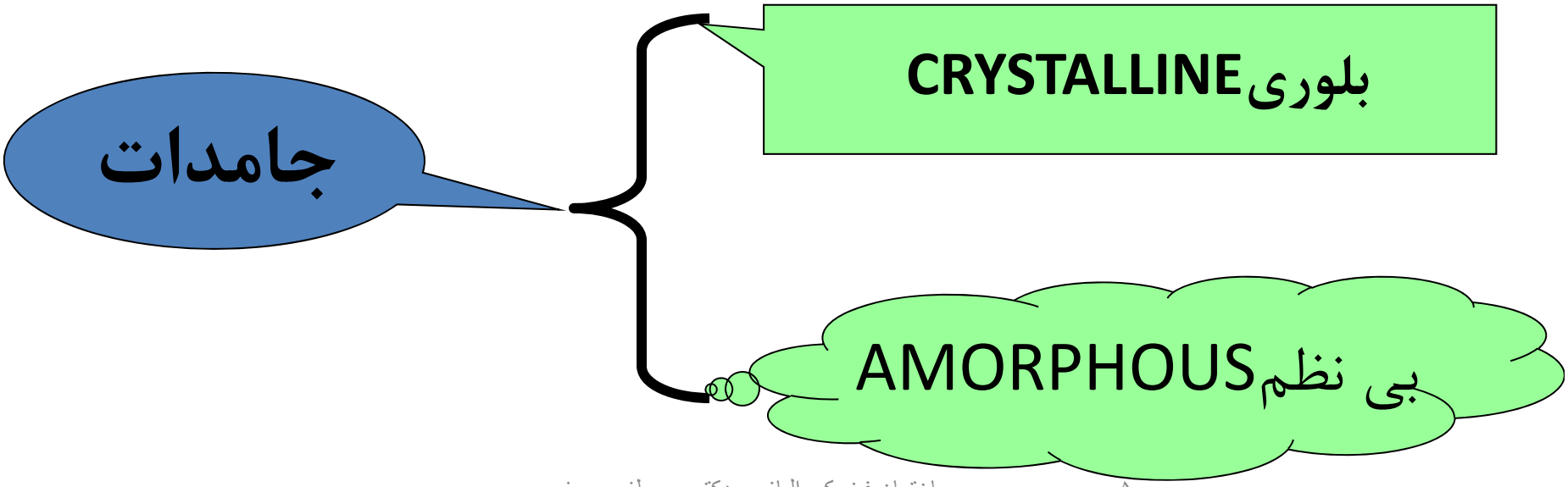
# شناخت ساختار مواد بلوری وپراش اشعه ا یکس
# X-RAY DIFFRACTION

# هندسه بلورها
# CRYSTALS GEOMETERY

- شبکه نقاط
- سیستمهای بلوری
- اندیسهای صفحات و جهات
- روابط بین فواصل صفحه ها و اندیسها

# تعاریف

- مواد بلوری: قرار گیری اتمها درفضا دارای نظم دوره ای تکرار شونده می باشند.
- مواد بی نظم: قرار گیری اتمها درفضا تصادفی (شانسی) است.



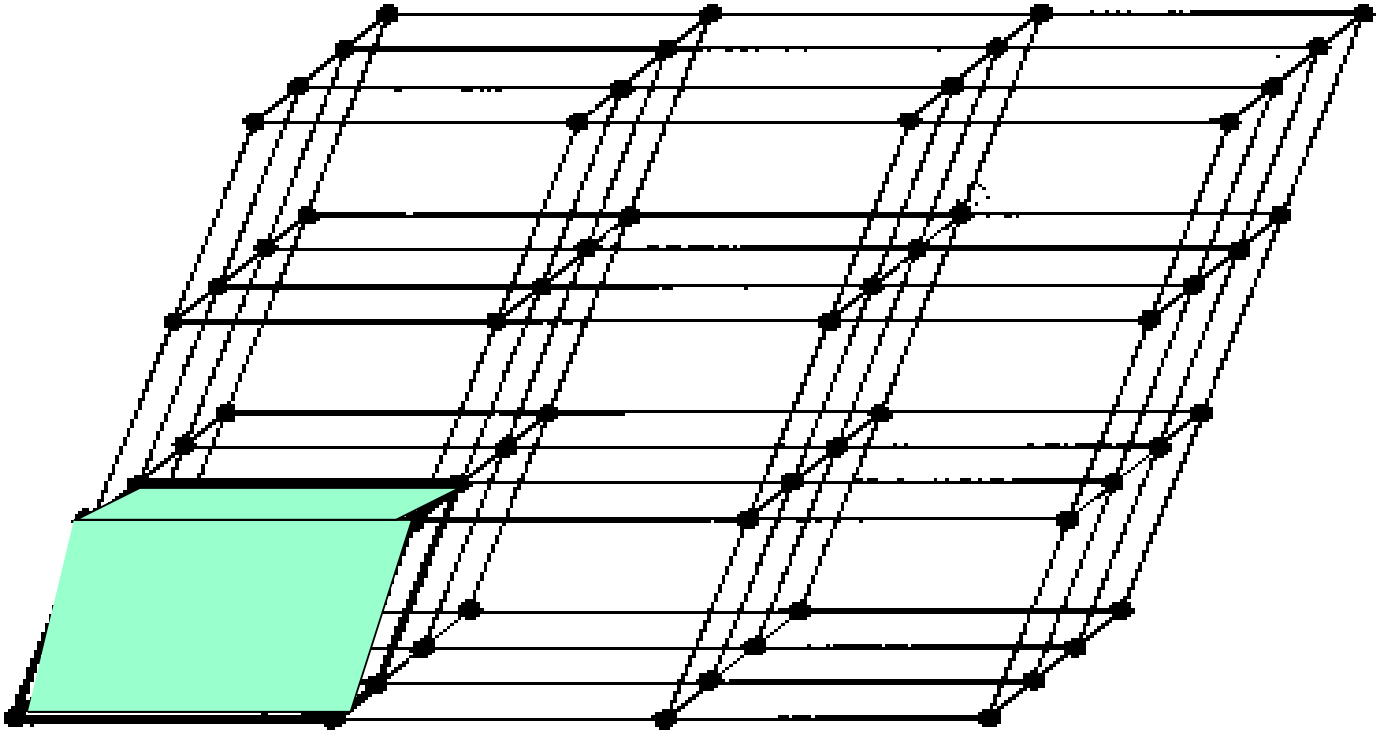
# برای بیان هندسه بلورها CRYSTAL GEOMETERY
# شبکه نقاط تعریف می گردد .

## شبکه ها LATTICES

- با سه دسته صفحا ت موازی و با فا صله مسا وی فضارا تقسیم کنید. از برخورد صفحات خطوط و از بر خورد خطوط نقاطی بدست می آید که به آن شبکه نقاط می گویند.
- مجاورین تمام نقا ط یکسانند.
- هر اتم بااین نقاط ارتباط معینی خواهد داشت.

شبکه نقطه ای Point lattice

# شبکه نقاط

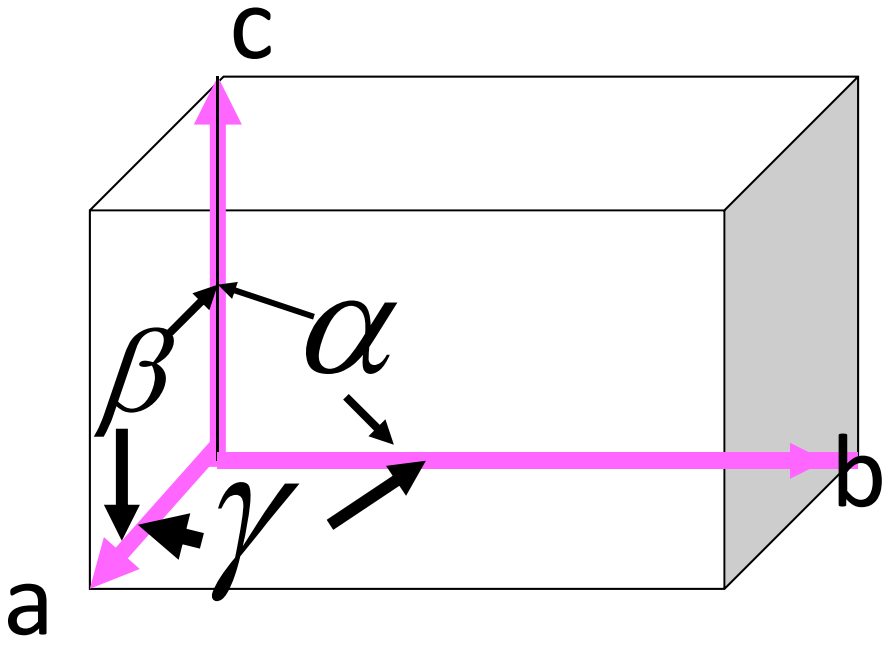


**POINT LATTICE**

# سلول واحد یا UNIT CELL

- سلول واحد (یکی از شش وجهی ها) ساختار شبکه نقطه ای را مشخص میکند.

**محورهای بلوری**

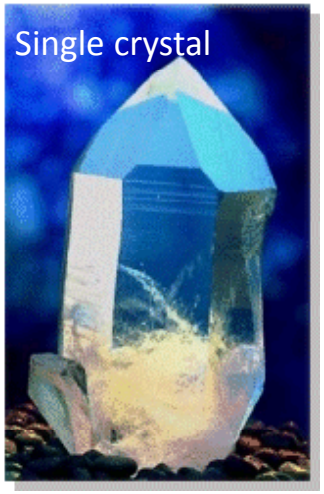


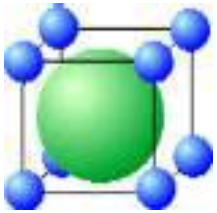

$$\vec{a}\ ,\ \vec{b}\ ,\ \vec{c}$$

**ثابتهاي شبكه**

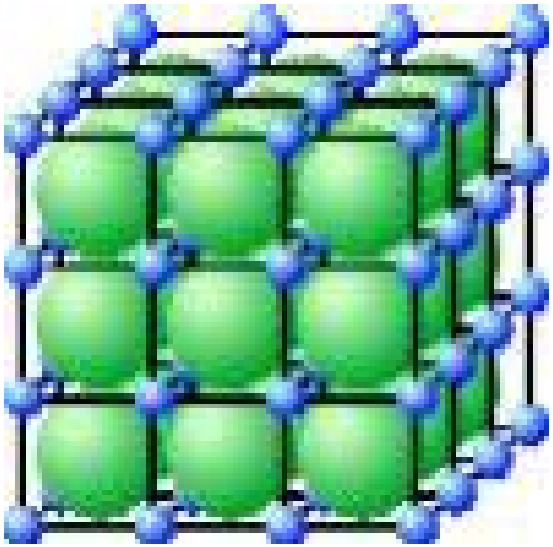
$$\vec{a},\vec{b},\vec{c},\alpha,\beta,\gamma$$

تمام شبکه را میتوان با یک انتقال P.a , Q.b, R.c به دست آورد. (P, Q, R اعداد صحیح اند)

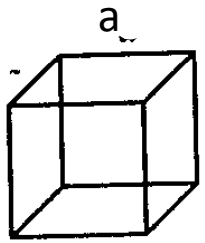
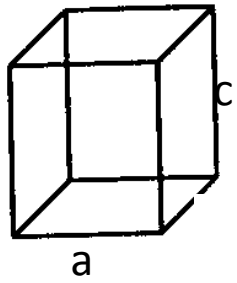
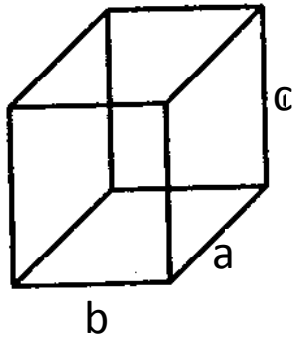
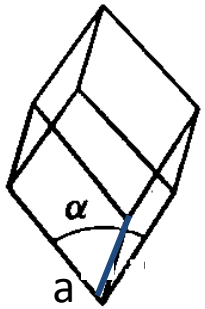
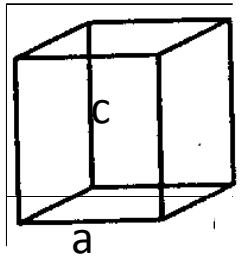
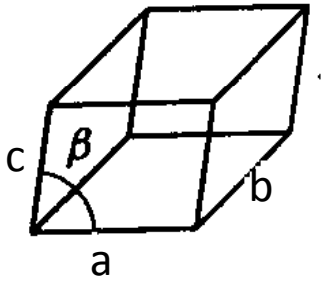
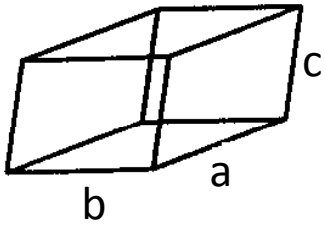


CsCl Unit cell (Å)



# هفت سیستم بلوری
# Seven crystal Systems

| System | Axial lengths and angles | Unit cell |
|---|---|---|
| Cubic | a=b=c<br>$\alpha=\beta=\gamma=90^o$ |  |
| Tetragonal | a=b≠c<br>$\alpha=\beta=\gamma=90^o$ |  |
| Orthorhombic | a≠b≠c<br>$\alpha=\beta=\gamma=90^o$ |  |
| Rhombohedral | a=b=c<br>$\alpha=\beta=\gamma\neq90^o$ |  |
| Hexagonal | a=b≠c<br>$\alpha=\beta=90^o$<br>$\gamma=120^o$ |  |
| Monoclinic | a≠b≠c<br>$\alpha=\gamma=90^o\neq\beta$ |  |
| Triclinic | a≠b≠c<br>$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90^o$ |  |

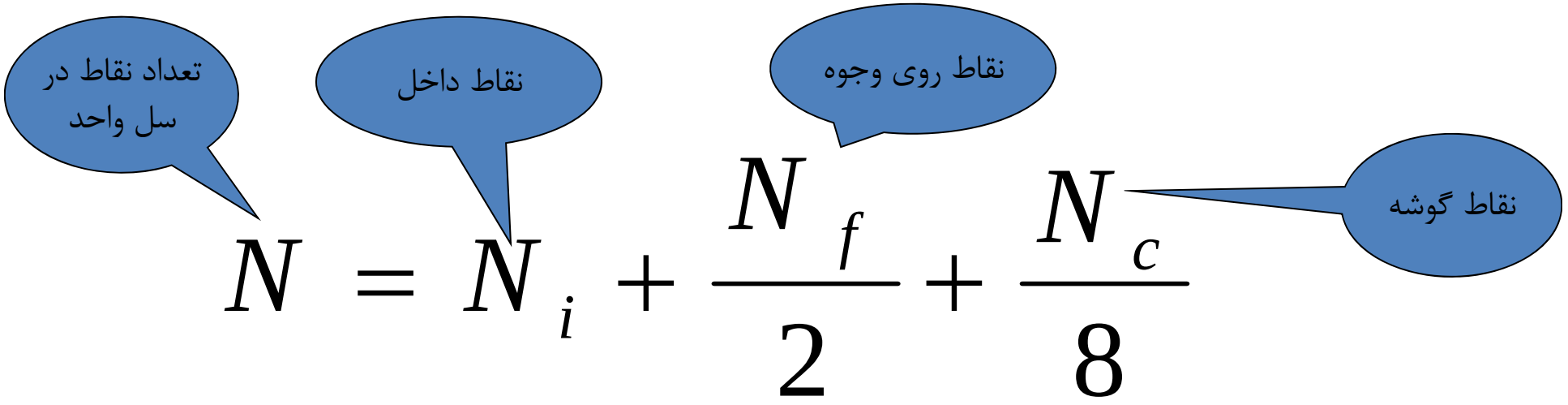
# شبکه های براویس

# BRAVAIS LATTICES

- بسته به مقا دیر ثابتهای شبکه فقط هفت صورت یا سیستم میتوان داشت **CUBIC,** .
**TETRAGONAL,ORTHORHOMBIC, RHOMBOHEDRAL, HEXAGONAL, MONOCLINIC, TRICLINIC**

- ترتیب دیگری از نقاط میتوانند شرط شبکه ها را برآورند .براویاس در یافت که فقط ۱۴ صورت دارند. این ۱۴ صورت را شبکه های براویس می گویند.

# تعداد نقطه ها (اتم های) هر سلول واحد

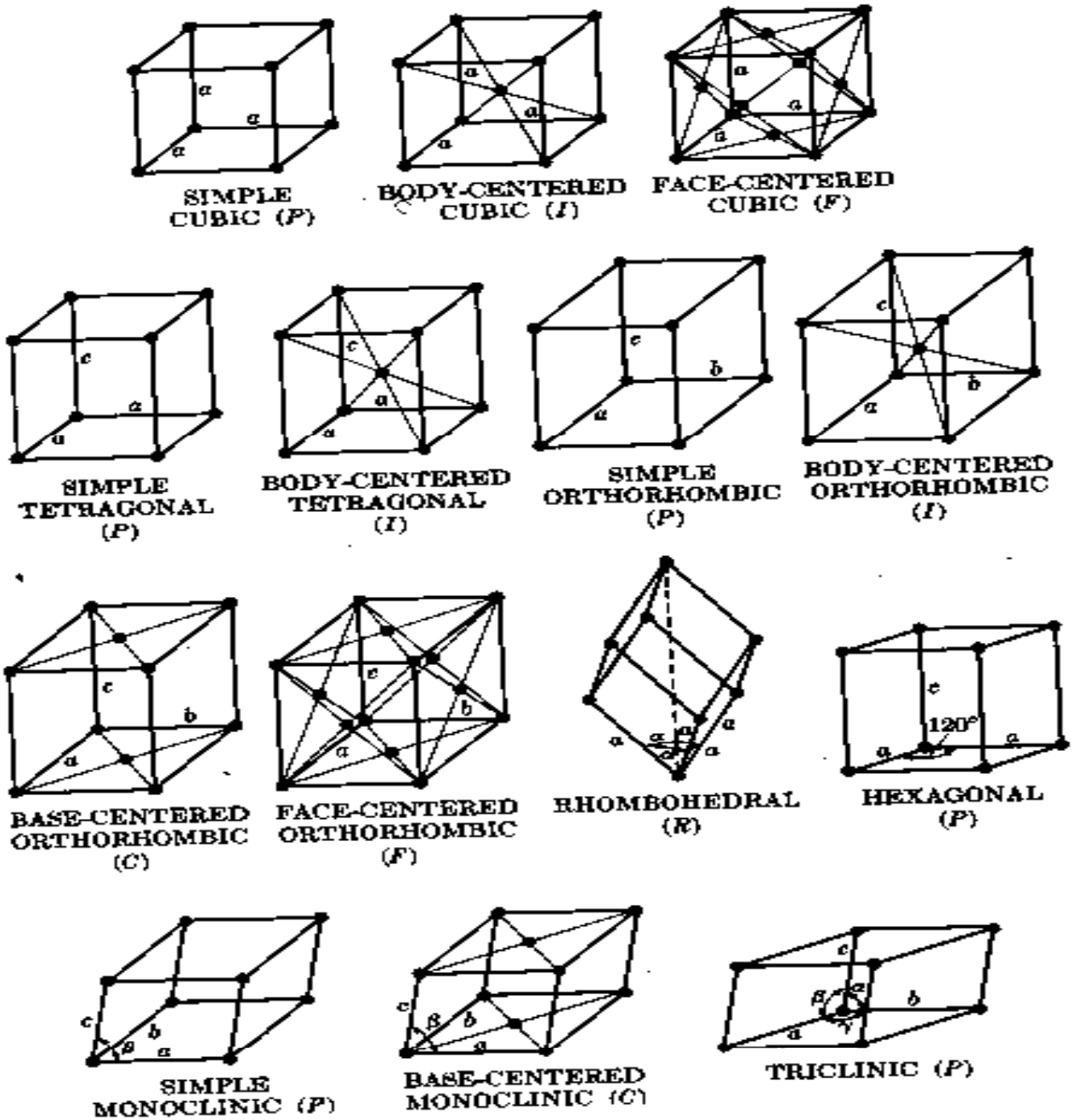


## Crystal Systems and Bravais Lattices

(The symbol $\neq$ means that equality is not required by symmetry. Accidental equality may occur, as shown by an example in Sec. 2–4.)

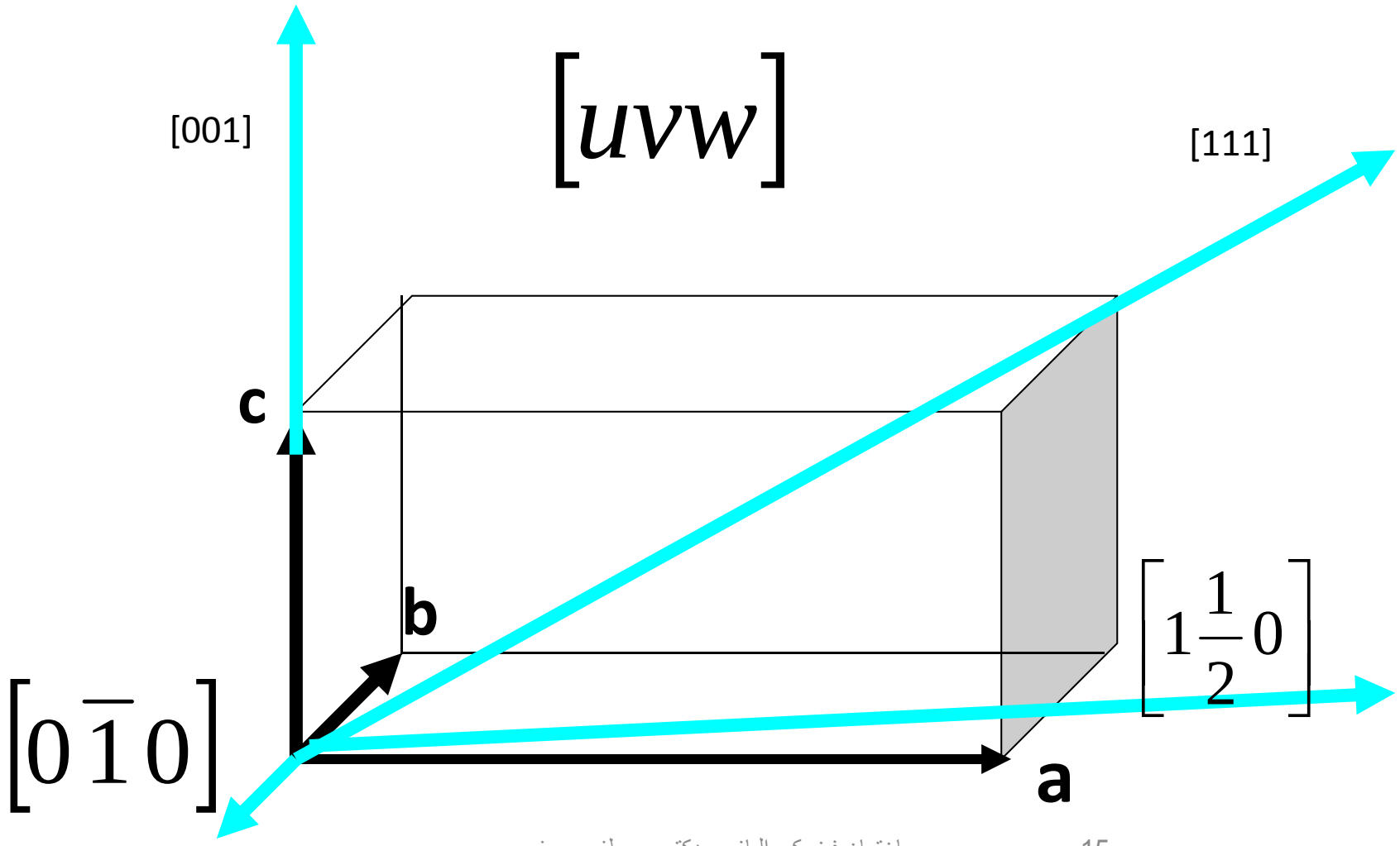
| System | Axial lengths and angles | Bravais lattice | Lattice symbol |
|---|---|---|---|
| Cubic | Three equal axes at right angles<br>$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | Simple<br>Body-centered<br>Face-centered | P<br>I<br>F |
| Tetragonal | Three axes at right angles, two equal<br>$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | Simple<br>Body-centered | P<br>I |
| Orthorhombic | Three unequal axes at right angles<br>$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | Simple<br>Body-centered<br>Base-centered<br>Face-centered | P<br>I<br>C<br>F |
| Rhombohedral* | Three equal axes, equally inclined<br>$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ | Simple | R |
| Hexagonal | Two equal coplanar axes at 120°,<br>third axis at right angles<br>$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ | Simple | P |
| Monoclinic | Three unequal axes,<br>one pair not at right angles<br>$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ | Simple<br>Base-centered | P<br>C |
| Triclinic | Three unequal axes, unequally inclined<br>and none at right angles<br>$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ | Simple | P |

* Also called trigonal.



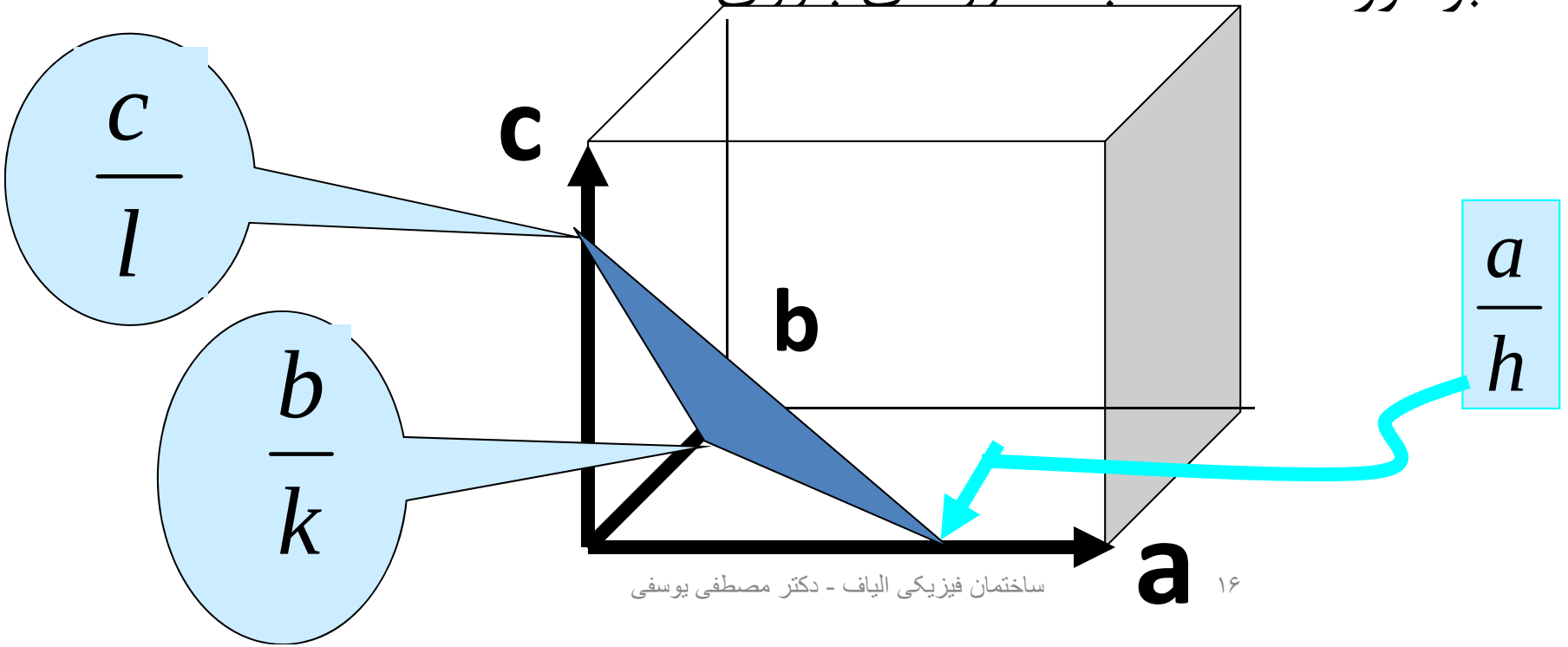

F The fourteen Bravais lattices.

# اندیس جهت: جهت بردار



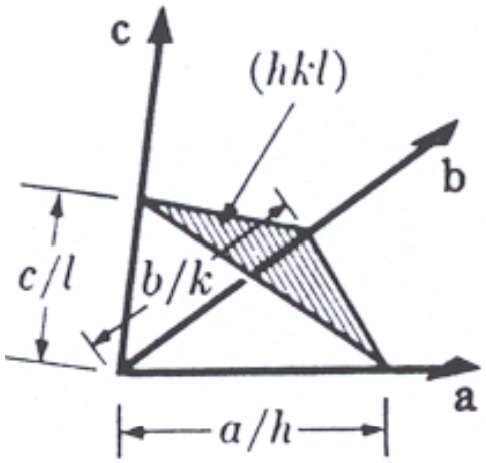
# اندیس میلر MILLER INDICES

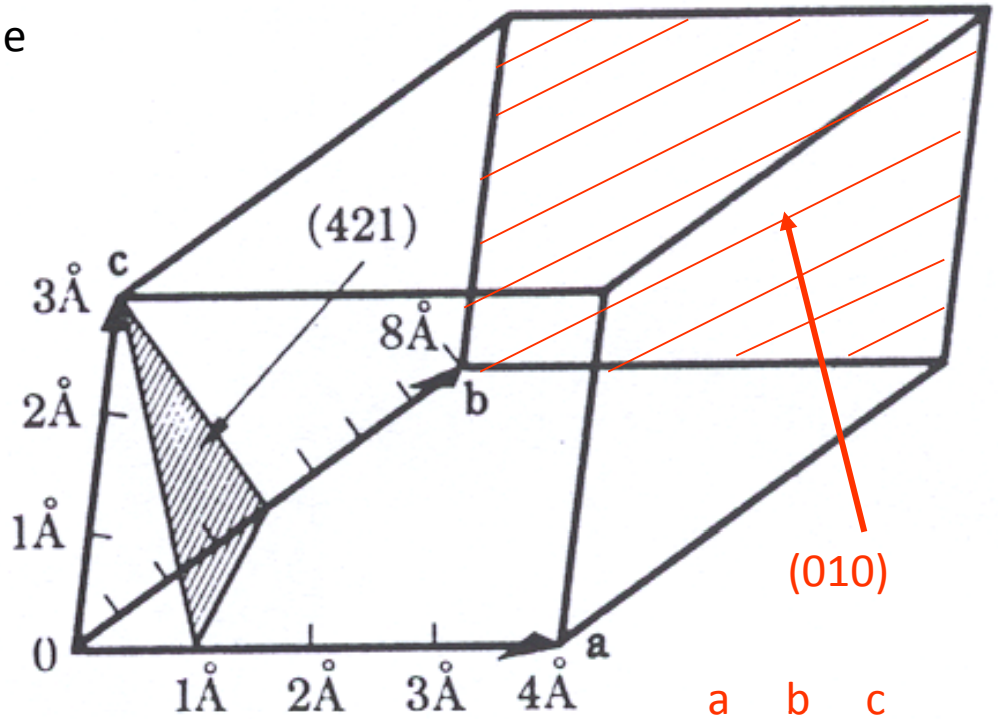
- برای نشان دادن چگونگی قرار گرفتن صفحات حاوی نقاط ازنشانگر میلر به صورت **(hkl)** استفاده میشود که h,k,l عبارتند از عکس مختصات کسری محل برخورد صفحات با محورهای بلوری .



# Miller Indices - hkl

Miller indices-the reciprocals of the fractional intercepts which the plane makes with crystallographic axes



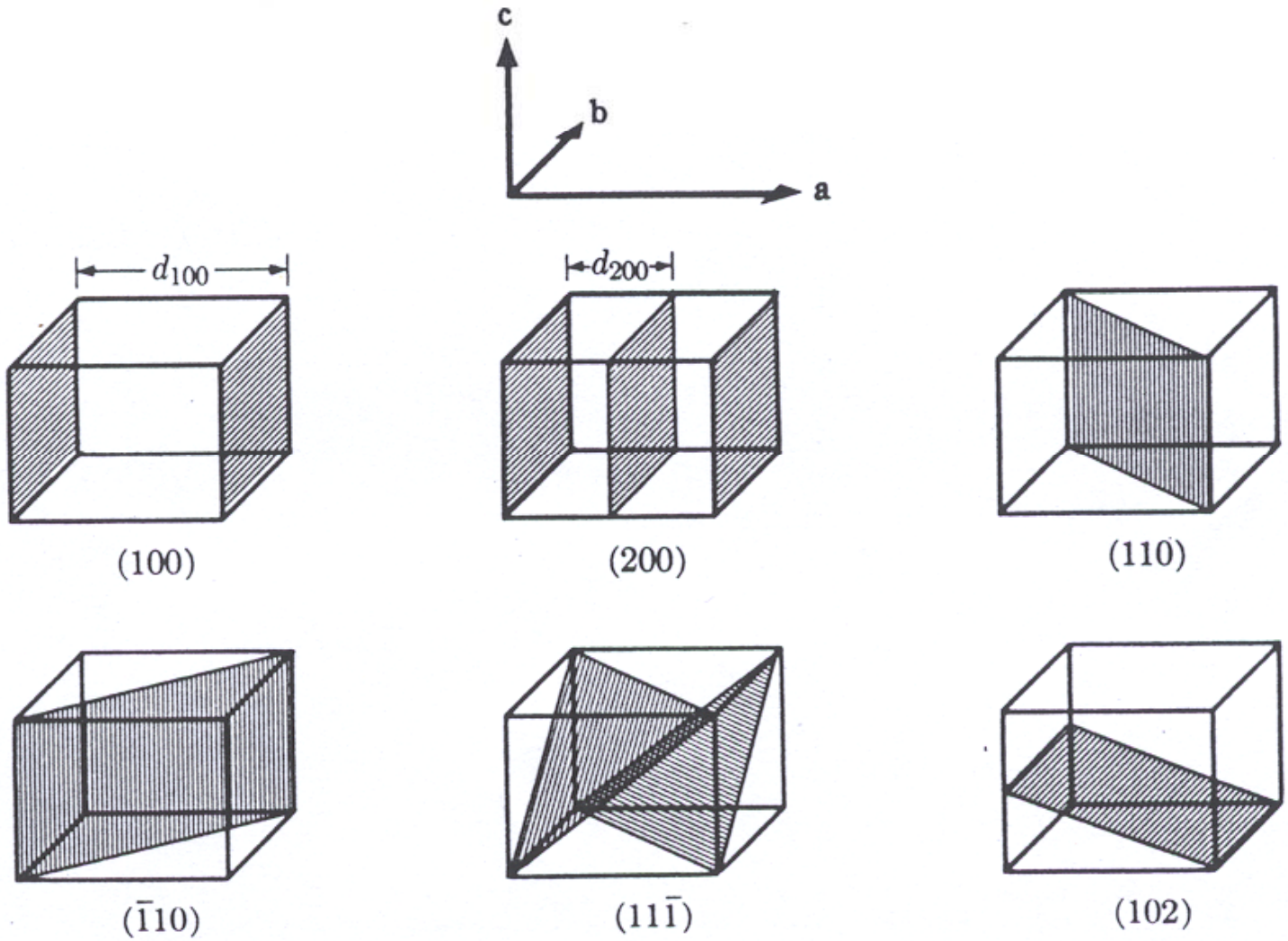

| | a | b | c |
|---|---|---|---|
| Axial length | 4Å | 8Å | 3Å |
| Intercept lengths | 1Å | 4Å | 3Å |
| Fractional intercepts | ¼ | ½ | 1 |
| Miller indices | 4 | 2 | 1 |
| | h | k | l |

| a | b | c |
|---|---|---|
| 4Å | 8Å | 3Å |
| ∞ | 8Å | ∞ |
| ∞/4 | 1 | ∞/3 |
| 0 | 1 | 0 |
| h | k | l |

# مثال اندیس میلر

- طول محورها: a=4 A, b=8 A, c=3 A
- مختصات محل تقاطع :
- **a** at 1 A, **b** at 4A , **c** at 3 A
- محل تقاطع کسری:
- 1/4 , 4/8, 3/3
- 1/4 , 1/2, 1
- 4 2 1 معکوس
- Miller indices **(421)**

# فاصله بین صفحات Spacings



# فاصله بین صفحات

- موازی با هر صفحه در یک شبکه تعدادی صفحه موازی و متساوی الفاصله وجود دارد که یکی از آنها از مرکز میگذرد. اندیس میلر مربوط به نزدیکترین صفحه به مرکز مختصات است و صفحات در سلهای واحد دیگر را در بر میگیرد .فا صله این صفحات با هم به صورت $d_{hkl}$ نشان داده میشود .

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

**cubic**

**tetragonal**

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2(a^2/c^2)}}$$

# Plane Spacings for Seven Crystal Systems

*Cubic:*
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

*Tetragonal:*
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

*Hexagonal:*
$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2}$$

*Rhombohedral:*
$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)\sin^2\alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2\alpha - \cos\alpha)}{a^2(1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha)}$$

*Orthorhombic:*
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

*Monoclinic:*
$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2\sin^2\beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl\cos\beta}{ac}\right)$$

*Triclinic:*
$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2}(S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl)$$

# محاسبه جرم مخصوص بلور

وزن اتمی تمام اتم ها در سل واحد

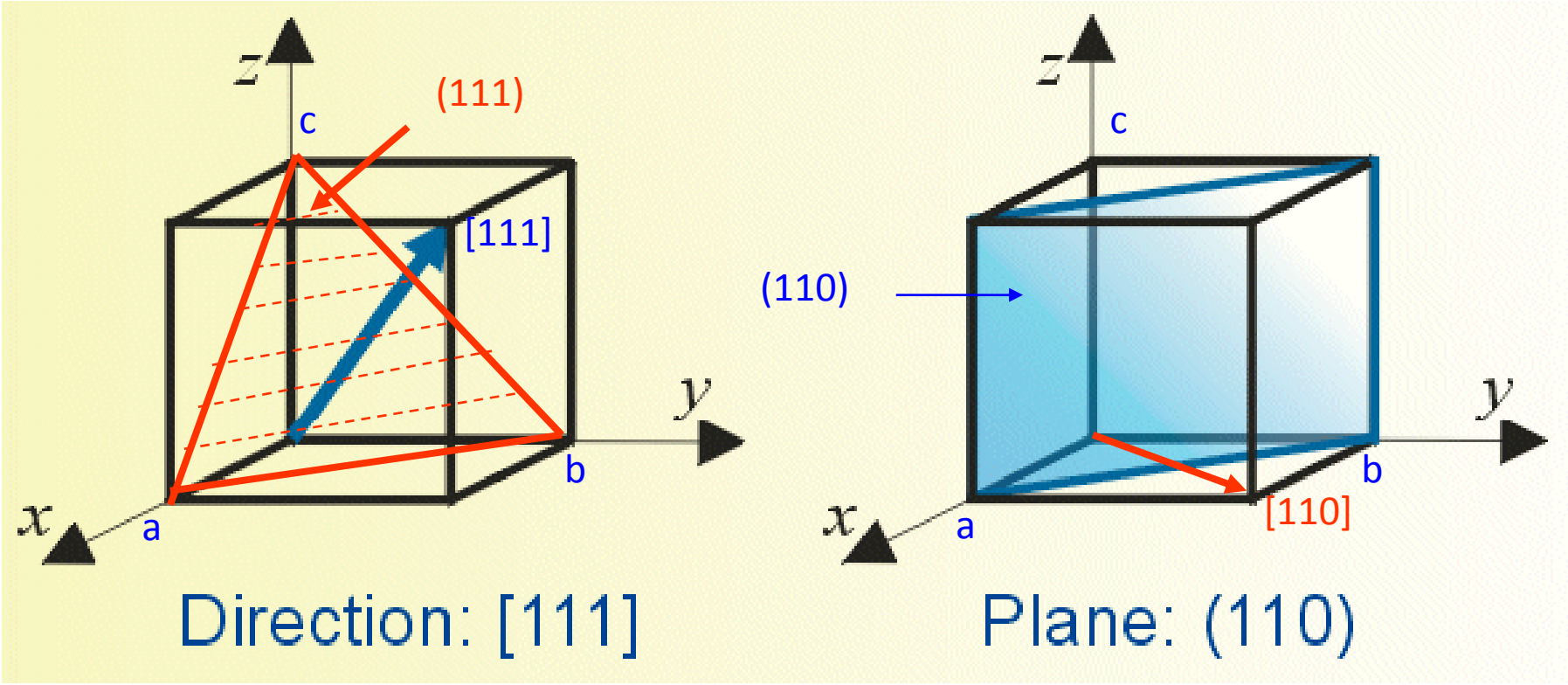
$$\rho_c = \frac{\sum \frac{A}{N}}{V}$$

عدد آووگادرو

حجم سل واحد

$$\rho_c(G/CM^3) = \frac{1.66042 \times \sum A}{V'(angs^3)}$$

# Indexing of Planes and Directions




a direction [uvw]
a set of equivalent
directions <uvw>
<100>:[100],[010],[001]
[100],[010] and [001]

a plane (hkl)
a set of equivalent
planes {hkl}
{110}:(101),(011),(110)
(101),(101),(101),etc.