

دانشگاه شاهرود
پایه

بلورشناسی

(رشته مهندسی مواد و متالورژی)

دکتر سیترا اسماعیلی

امروزه کتاب‌خوانی و علم‌آموزی، نه تنها یک وظیفه‌ی ملی، که یک واجب دینی است.

مقام معظم رهبری

در عصر حاضر یکی از شاخصه‌های ارزیابی رشد، توسعه و پیشرفت فرهنگی هر کشوری میزان تولید کتاب، مطالعه و کتاب‌خوانی مردم آن مرز و بوم است. ایران اسلامی نیز از دیرباز تاکنون با داشتن تمدنی چندهزارساله و مراکز متعدد علمی، فرهنگی، کتابخانه‌های معتبر، علما و دانشمندان بزرگ با آثار ارزشمند تاریخی، سرآمد دولت‌ها و ملت‌های دیگر بوده و در عرصه‌ی فرهنگ و تمدن جهانی به‌سان خورشیدی تابناک همچنان می‌درخشد و با فرزندان نیک‌نهاد خویش هنرنمایی می‌کند. چه کسی است که در دنیا با دانشمندان فرزانه و نام‌آور ایرانی همچون ابوعلی سینا، ابوریحان بیرونی، فارابی، خوارزمی و ... همچنین شاعران برجسته‌ای نظیر فردوسی، سعدی، مولوی، حافظ و ... آشنا نباشد و در مقابل عظمت آنها سر تعظیم فرود نیاورد. تمامی این افتخارات ارزشمند، برگرفته از میزان عشق و علاقه فراوان ملت ما به فراگیری علم و دانش از طریق خواندن و مطالعه منابع و کتاب‌های گوناگون است. به شکرانه‌ی الهی، تاریخ و گذشته ما، همیشه درخشان و پر بار است. ولی اکنون در این زمینه در چه جایگاهی قرار داریم؟ آمار و ارقام ارائه‌شده از سوی مجامع و سازمان‌های فرهنگی در مورد سرانه‌ی مطالعه‌ی هر ایرانی، برایمان چندان امیدوارکننده نمی‌باشد و رهبر معظم انقلاب اسلامی نیز از این وضعیت بارها اظهار گله و ناخشنودی نموده‌اند.

کتاب، دروازه‌ای به سوی گستره‌ی دانش و معرفت است و کتاب خوب، یکی از بهترین ابزارهای کمال بشری است. همه‌ی دستاوردهای بشر در سراسر عمر جهان، تا آنجا که قابل کتابت بوده است، در میان دست‌نوشته‌هایی است که انسان‌ها پدید آورده و می‌آورند. در این مجموعه‌ی بی‌نظیر، تعالیم الهی، درس‌های پیامبران به بشر، و همچنین علوم مختلفی است که سعادت بشر بدون آگاهی از آنها امکان‌پذیر نیست. کسی که با دنیای زیبا و زندگی‌بخش کتاب ارتباط ندارد بی‌شک از مهم‌ترین دستاورد انسانی و نیز از بیشترین معارف الهی و بشری محروم است. با این دیدگاه، به‌روشنی می‌توان ارزش و مفهوم رمزی عمیق در این حقیقت تاریخی را دریافت که اولین خطاب خداوند متعال به پیامبر گرامی اسلام (ص) این است که «بخوان!» و در اولین

سوره‌ای که بر آن فرستاده‌ی عظیم‌الشان خداوند، فرود آمده، نام «قلم» به تجلیل یاد شده‌است: «اقْرَأْ وَ رَبُّكَ الْأَكْرَمُ. الَّذِي عَلَّمَ بِالْقَلَمِ» در اهمیت عنصر کتاب برای تکامل جامعه‌ی انسانی، همین بس که تمامی ادیان آسمانی و رجال بزرگ تاریخ بشری، از طریق کتاب جاودانه مانده‌اند.

دانشگاه پیام‌نور با گستره‌ی جغرافیایی ایران‌شمول خود با هدف آموزش برای همه، همه‌جا و همه‌وقت، به‌عنوان دانشگاهی کتاب‌محور در نظام آموزش عالی کشورمان، افتخار دارد جایگاه اندیشه‌سازی و خردورزی بخش عظیمی از جوانان جویای علم این مرز و بوم باشد. تلاش فراوانی در ایام طولانی فعالیت این دانشگاه انجام پذیرفته تا با بهره‌گیری از تجربه‌های گرانقدر استادان و صاحب‌نظران برجسته کشورمان، کتاب‌ها و منابع آموزشی درسی شاخص و خودآموز تولید شود. در آینده هم، این مهم با هدف ارتقای سطح علمی، روزآمدی و توجه بیشتر به نیازهای مخاطبان دانشگاه پیام‌نور با جدیت ادامه خواهد داشت. به‌طور قطع استفاده از نظرات استادان، صاحب‌نظران و دانشجویان محترم، ما را در انجام این وظیفه‌ی مهم و خطیر یاری‌رسان خواهد بود. پیشاپیش از تمامی عزیزانی که با نقد، تصحیح و پیشنهادهای خود ما را در انجام این وظیفه‌ی خطیر یاری می‌رسانند، سپاسگزاری می‌نماییم. لازم است از تمامی اندیشمندانی که تاکنون دانشگاه پیام‌نور را منزلگاه اندیشه‌سازی خود دانسته و ما را در تولید کتاب و محتوای آموزشی درسی یاری نموده‌اند، صمیمانه قدردانی گردد. موفقیت و بهروزی تمامی دانشجویان و دانش‌پژوهان عزیز آرزوی همیشگی ما است.

دانشگاه پیام‌نور

فهرست مطالب کتاب

یازده

پیشگفتار

فصل اول: مطالعه بلورها

۱

هدف کلی

۱

هدف‌های یادگیری

۱

مقدمه

۲

۱-۱ بلورشناسی

۲

۱-۱-۱ تعریف ماده بلوری یا کریستالی

۲

۲-۱ تاریخچه بلورشناسی

۳

۳-۱ قانون کولمب

۴

۴-۱ تشکیل کریستال‌ها

۵

۱-۴-۱ تشکیل کریستال از محلول مواد

۶

۲-۴-۱ تشکیل کریستال از حالت مذاب

۶

۳-۴-۱ تشکیل کریستال از فاز بخار

۶

۵-۱ ساختمان داخلی بلورها

۷

۱-۵-۱ مشخصات واحد شبکه

۸

۲-۵-۱ مختصات نقطه

۸

۶-۱ سیستم‌های بلوری

۹

۱-۶-۱ شبکه‌های چهارده گانه برآوه

۱۰

۷-۱ طرز قرار گرفتن اتم‌ها (یون‌ها، مولکول‌ها) درون یک واحد شبکه

۱۱

۱-۷-۱ شبکه ساده یا ابتدایی

۱۱

۲-۷-۱ شبکه با قاعده مرکزدار

۱۲

۳-۷-۱ شبکه مرکزدار

۱۲

۴-۷-۱ شبکه با سطوح مرکزدار

۱۳

۸-۱ شبکه‌های مکعبی

۱۵

۱۵	۱-۸-۱ شبکه مکعبی ساده
۱۶	۲-۸-۱ شبکه مکعبی مرکزدار (BCC)
۱۷	۳-۸-۱ شبکه مکعبی با سطوح مرکزدار (FCC)
۱۹	۹-۱ عدد همسایگی
۱۹	۱۰-۱ حفره‌های بین‌اتمی در شبکه مکعبی
۲۰	۱-۱۰-۱ حفره‌های بین‌اتمی در شبکه FCC
۲۱	۲-۱۰-۱ حفره‌های بین‌اتمی در شبکه BCC
۲۲	۱۱-۱ سیستم‌های مکعبی ترکیبات
۲۲	۱-۱۱-۱ نوع اول، ترکیبات AX
۲۶	۲-۱۱-۱ نوع دوم: ترکیبات AX_2
۲۶	۳-۱۱-۱ نوع سوم: ترکیبات AX_3
۲۷	۱۲-۱ شبکه الماسی
۲۸	۱۳-۱ ساختار هگزاگونال متراکم
۲۹	۱۴-۱ چگالی تئوریک
۳۱	۱-۱۴-۱ جهت‌های درون شبکه
۳۱	۲-۱۴-۱ مراحل تعیین اندیس میلر یک جهت در سلول واحد مکعبی
۳۲	۳-۱۴-۱ نکات مهم در مورد اندیس میلر جهت‌ها
۳۵	۱۵-۱ صفحات بلوری
۳۵	۱-۱۵-۱ اندیس‌های میلر
۳۶	۲-۱۵-۱ تعیین اندیس میلر صفحات
۴۱	۱۶-۱ صفحات و جهت‌ها در شبکه هگزاگونال
۴۶	۱۷-۱ تکرار صفحات اتمی
۴۷	۱۸-۱ فاصله بین صفحات کریستالی
۴۹	۱۹-۱ چگالی خطی و صفحه‌ای
۵۱	۱-۱۹-۱ محاسبه مساحت صفحه (۱۱۱)
۵۳	خلاصه فصل اول
۵۴	تمرین‌های فصل اول
۵۷	خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل اول
۵۹	فصل دوم: تقارن در بلورها
۵۹	هدف کلی
۵۹	هدف‌های یادگیری
۶۰	مقدمه
۶۱	۱-۲ انواع تقارن
۶۲	۲-۲ انعکاس یا صفحه تقارن
۶۳	۳-۲ محور تقارن
۶۶	۴-۲ مرکز تقارن

۶۶	۵-۲ ترکیب محور تقارن و مرکز تقارن
۶۸	۶-۲ ترکیب محور تقارن و سطح تقارن
۶۸	۷-۲ تقارن انتقالی انعکاسی
۶۹	۸-۲ تقارن انتقالی دورانی
۷۰	۹-۲ شناسایی بلورها از روی تقارن آنها
۷۱	خلاصه فصل دوم
۷۲	تمرین‌های فصل دوم
۷۳	خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل دوم
۷۵	فصل سوم: تصویر استریوگرافیک بلورها
۷۵	هدف کلی
۷۵	هدف‌های یادگیری
۷۶	مقدمه
۷۶	۱-۳ تصویر استریوگرافیک
۸۲	۲-۳ شبکه ولف
۸۳	۳-۳ اندازه‌گیری زوایا با استفاده از شبکه ولف
۸۳	۴-۳ پیدا کردن اثر یک قطب
۸۶	۵-۳ چرخش قطب‌ها حول محورها
۸۸	۶-۳ تصاویر استاندارد
۹۱	۷-۳ صفحات هم منطقه
۹۲	۸-۳ تعیین اندیس‌های میلر یک قطب مجهول
۹۳	۹-۳ اندیس‌گذاری صفحات در تصویر استریوگرافیک
۹۷	خلاصه فصل سوم
۹۸	تمرین‌های فصل سوم
۹۸	خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل سوم
۱۰۱	فصل چهارم: کریستالوگرافی به وسیله پرتو ایکس
۱۰۱	هدف کلی
۱۰۱	هدف‌های یادگیری
۱۰۱	مقدمه
۱۰۲	۱-۴ تابش الکترومغناطیس
۱۰۵	۲-۴ طیف پیوسته
۱۰۸	۳-۴ طیف مشخصه
۱۱۴	۴-۴ جذب
۱۱۹	۵-۴ پدیده اوژه
۱۲۰	۶-۴ فیلترها
۱۲۲	۷-۴ تولید پرتو ایکس

۱۲۴	۸-۴ آشکارسازی پرتو ایکس
۱۲۵	۹-۴ تفرق پرتو ایکس
۱۲۷	۱۰-۴ تفاوت بین انعکاس نور و تفرق پرتو ایکس
۱۲۷	۱۱-۴ روش‌های تفرق
۱۲۷	۴-۱۱-۱ روش لاوله
۱۳۱	۴-۱۱-۲ روش بلور چرخان
۱۳۲	۴-۱۱-۳ روش پودر
۱۳۴	۴-۱۲ تجزیه کیفی مواد: روش دبای شرر
۱۳۷	۴-۱۳ طرز تهیه نمونه برای روش دبای شرر
۱۳۸	۴-۱۳-۱ نصب نمونه و فیلم در داخل محفظه دوربین
۱۳۸	۴-۱۴ خواندن فیلم
۱۴۰	۴-۱۵ تفرق سنجی
۱۴۱	۴-۱۶ پراکندگی توسط یک واحد شبکه
۱۴۳	۴-۱۶-۱ محاسبه فاکتور ساختمانی برای شبکه مکعبی ساده
۱۴۴	۴-۱۶-۲ محاسبه فاکتور ساختمانی برای شبکه مکعبی مرکزدار (BCC)
۱۴۵	۴-۱۶-۳ محاسبه فاکتور ساختمانی برای شبکه با قاعده‌های مرکزدار
۱۴۵	۴-۱۶-۴ محاسبه فاکتور ساختمانی برای شبکه مکعبی با سطوح مرکزدار (FCC)
۱۴۹	خلاصه فصل چهارم
۱۵۰	تمرین‌های فصل چهارم
۱۵۲	خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل چهارم

فصل پنجم: روش‌های نوین آنالیز مواد کریستالی

۱۵۵	هدف کلی
۱۵۵	هدف‌های یادگیری
۱۵۵	مقدمه
۱۵۶	۵-۱ میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM)
۱۵۷	۵-۱-۱ لنزهای الکترومغناطیسی
۱۶۰	۵-۱-۲ جایگاه نمونه
۱۶۱	۵-۱-۳ آماده‌سازی نمونه
۱۶۵	۵-۲ مدهای تصویر
۱۶۵	۵-۳ میکروسکوپ الکترونی روبشی
۱۶۶	۵-۳-۱ ابزار به‌کار رفته در میکروسکوپ الکترونی روبشی
۱۶۹	۵-۳-۲ درهم‌کنش‌های الکترون با نمونه
۱۷۰	۵-۳-۳ تشکیل کنتراست
۱۷۴	۵-۴ میکروسکوپ با پروب روبشی (SPM)
۱۷۴	۵-۴-۱ ابزار
۱۷۵	۵-۴-۲ میکروسکوپ روبشی تونلی (STM)

۱۷۸	۵-۵ میکروسکوپ با نیروی اتمی (AFM)
۱۸۰	خلاصه فصل پنجم
۱۸۱	تمرین‌های فصل پنجم
۱۸۲	خودآزمایی چهارگزینه‌ای فصل پنجم
۱۸۵	فصل ششم: نرم‌افزار اکسپرت
۱۸۵	هدف کلی
۱۸۵	هدف‌های یادگیری
۱۸۶	مقدمه
۱۸۶	۶-۱ صفحات
۱۸۷	۶-۲ نوار ابزارها
۱۸۸	۶-۲-۱ نوار ابزار منو
۱۸۹	۶-۲-۲ نوار ابزار استاندارد
۱۸۹	۶-۲-۳ بسته ابزار
۱۹۱	۶-۲-۴ نوار ابزار XRD
۱۹۳	۶-۲-۵ نوار ابزار الگو
۱۹۴	۶-۲-۶ نوار ابزار نمایش
۱۹۵	۶-۲-۷ نوار ابزار ناوبری
۱۹۵	۶-۳ نصب داده‌های اصلی روی نرم‌افزار
۱۹۶	۶-۴ نمایش داده‌ها و قدم‌های اصلی
۱۹۶	۶-۴-۱ بازکردن داده‌ها
۱۹۸	۶-۴-۲ طریقه زوم کردن در گرافیک اصلی
۱۹۹	۶-۵ مقایسه چند صفحه با هم
۲۰۰	۶-۶ عملیات «جستجو نظیر پیداکردن»
۲۰۰	۶-۶-۱ مشخص کردن زمینه
۲۰۱	۶-۶-۲ جستجوی پیک‌ها
۲۰۲	۶-۶-۳ پیداکردن الگوی مرجع از فایل تفرق پودر
۲۰۳	۶-۶-۴ شیمی
۲۰۶	۶-۶-۵ جداسازی $K\alpha_2$ (اختیاری)
۲۰۷	خلاصه فصل ششم
۲۰۸	تمرین‌های فصل ششم
۲۰۹	واژه‌نامه فارسی - انگلیسی
۲۱۳	واژه‌نامه انگلیسی - فارسی
۲۱۷	خودآزمایی تکمیلی
۲۲۱	پاسخ‌نامه
۲۲۳	منابع

پیشگفتار

کریستالوگرافی از دروس پایه رشته‌های مهندسی مواد و زمین‌شناسی به‌شمار می‌آید که به بررسی ساختمان بلورها می‌پردازد و فراگیری شایسته این درس برای دانشجویان این رشته از اهمیت خاصی برخوردار است. از آنجا که ساختمان درونی یک فلز، تعیین‌کننده خواص آن است، به‌منظور درک و ارزیابی بهتر خواص مواد، لازم است با ساختار داخلی آن‌ها آشنا شویم.

در کتاب حاضر، مبانی بلورشناسی تبیین می‌شود و درکی صحیح از مفهوم بلور و نحوه تشکیل اولیه بلورها، سیستم‌های بلوری، شبکه‌های چهارده‌گانه براوه و اندیس‌گذاری‌های میلر حاصل‌گشته، پس از آشنایی با انواع تقارن در بلورها و تصاویر استریوگرافیک، مبانی بلورشناسی با اشعه ایکس تشریح می‌گردد. سپس به‌صورت کاربردی، نحوه شناسایی بلورها از طریق انجام آزمایش با پرتو ایکس به تفصیل بیان می‌شود. در این زمینه، با بیان مثال‌ها و عنوان مسائل گوناگون در آخر هر فصل، درکی عمیق‌تر از علم بلورشناسی بیان می‌شود.

در این کتاب سعی بر آن است که اصول بلورشناسی با زبانی ساده به جامعه علمی دانشجویان تقدیم گردد تا علاوه بر شناخت مباحث تئوری، از طریق آشنایی با نرم‌افزاری ساده، به‌صورت عملی نیز از نزدیک شاهد کاربرد آموخته‌های خود باشند و این امر را می‌توان نقطه قوت کتاب به‌شمار آورد.

در پایان پس از سپاس از ایزد منان، کتاب را خالصانه به مادر و پدر مهربانم، همسر بسیار عزیزم و فرزندان دلبندم تقدیم می‌نمایم.

فصل اول

مطالعه بلورها

هدف کلی

پس از مطالعه این فصل، دانشجویان با تعریف کریستال و خواص آن، ساختمان داخلی کریستال، شبکه چهارده گانه برآوه، ثابت های شبکه فضایی، سیستم های تبلور و نام گذاری از راه میلر آشنا خواهند شد.

هدف های یادگیری

- پس از مطالعه این فصل دانشجو باید بتواند:
۱. مواد بلوری و آمرف را از یکدیگر تشخیص دهد.
 ۲. سیستم های هفت گانه بلوری را شناسایی کند.
 ۳. شبکه های مکعبی ساده، مرکزدار و با وجه های مرکزدار را شرح دهد.
 ۴. صفحات و جهت ها درون شبکه را اندیس گذاری کند.
 ۵. فاکتور تراکم اتمی را برای شبکه های مکعبی به دست آورد.

مفاهیم جدید

- مواد بلوری
- واحد شبکه
- حفره های بین اتمی
- فاکتور تراکم اتمی
- مواد آمرف
- سیستم های بلوری
- عدد همسایگی
- دانه و مرزدانه
- شبکه های مکعبی
- اندیس های میلر

مقدمه

مواد جامد را می‌توان بر اساس نظم اتم‌ها یا یون‌های آن‌ها نسبت به یکدیگر دسته‌بندی کرد. مواد بلوری موادی هستند که در آن‌ها اتم‌ها در یک ردیف تکراری یا تناوبی در فواصل بزرگ اتمی قرار گرفته‌اند. به عبارت دیگر نظم دامنه بلند در آن‌ها وجود دارد. مطالعه بلورها در مهندسی مواد، به منظور درک بهتر واکنش‌های حاکم در عملیات متالورژیکی است. تعریف اصطلاحات و توضیح آن‌ها را می‌توان به عنوان آموزش الفبای مقدماتی این رشته دانست.

در این فصل ابتدا به تعریف بلورشناسی و مفاهیم بلور و آمرف می‌پردازیم. سپس با شبکه‌های مختلف بلوری و جزئیات ساختمان‌های بلوری فلزات و سرامیک‌ها، جهت‌ها و صفحات درون آن‌ها آشنا می‌شویم.

۱-۱ بلورشناسی

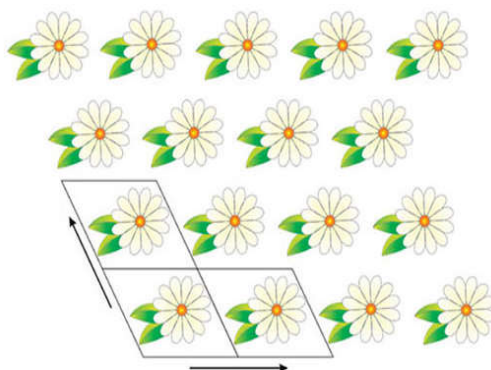
بلورشناسی علمی است که نحوه تشکیل، رشد، شکل ظاهری، وضعیت قرارگرفتن، آرایش اتم‌ها در درون بلور و خواص فیزیکی بلور را مورد بحث و مطالعه قرار می‌دهد. در این رابطه با تعریف زیر آشنا می‌شویم.

۱-۱-۱ تعریف ماده بلوری یا کریستالی

یک جامد همگن که در سه جهت فضایی، در امتدادی طولانی از نظر ساختار داخلی منظم باشد را بلور می‌گویند یا به عبارت دیگر مواد بلوری، موادی هستند که کوچک‌ترین واحد ساختمانی قابل تکرار داشته باشند. این مواد از تکرار کوچک‌ترین واحد ساختمان، واحد شبکه یا سلول اولیه^۱ تشکیل شده‌اند. مانند ABB در ردیف اول و AB در ردیف دوم مثال‌های زیر:

ABB ABB ABB
AB AB AB AB

یا برای مثال در شکل دو بعدی ۱-۱، می‌توان واحد شبکه‌ای را پیدا کرد که با تکرار پی‌درپی آن کل شکل پوشش داده شود.



شکل ۱-۱. شماتیک واحد شبکه

بر این اساس مواد به طور کلی به دو دسته بلوری^۱ و آمرف^۲ طبقه بندی می شوند. برخلاف مواد بلوری، مواد آمرف یا بی شکل هیچ گونه نظم خاصی ندارند. تمامی فلزات می توانند مثال خوبی برای مواد بلوری باشند و شیشه هم مثالی از یک ماده آمرف بشمار می آید.

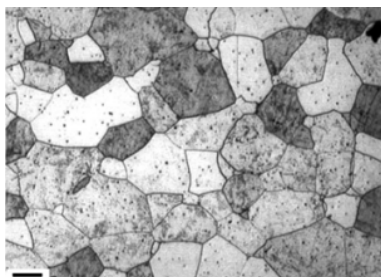
مواد بلوری خود به دو دسته تک بلور و چند بلور تقسیم بندی می شوند: تک بلور: ماده ای است که واحد شبکه یا سلول های اولیه در سرتاسر بلور در یک جهت به طور منظم چیده شده باشند.

چند بلور: ماده ای است که واحدهای شبکه در چند جهت چیده شده باشند. به محدوده ای که واحدهای شبکه در یک جهت چیده شده اند، یک دانه گفته می شود. به این ترتیب چند بلور شامل چند دانه و تک بلور تنها شامل یک دانه است. در چند بلور مرز بین هر دانه که مرز دانه نامیده می شود که در زیر میکروسکوپ به صورت خطوط تیره رنگی قابل مشاهده است. (شکل های ۱-۲ و ۱-۳)

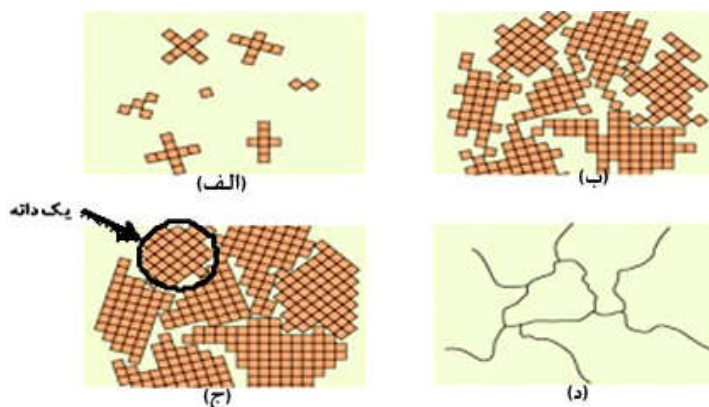
۲-۱ تاریخچه بلورشناسی

لغت بلور یا کریستال از کلمه یونانی کریستالوز گرفته شده که به معنی شکل یافته در حالت سرد می باشد. بلورشناسی به دو صورت بلورشناسی هندسی و بلورشناسی با اشعه

ایکس انجام می‌شود. کاربرد بلورشناسی هندسی در زمین‌شناسی و کاربرد بلورشناسی با اشعه ایکس در متالورژی، فیزیک، شیمی، کانی‌شناسی و داروسازی می‌باشد.



شکل ۱-۲. ساختار میکروسکوپی یک فلز چند بلوری



شکل ۱-۳. مراحل مختلف انجماد یک ماده چند بلوری، شبکه‌های مکعبی بیانگر واحدهای شبکه می‌باشند. (الف) جوانه‌زنی بلورهای کوچک (ب) رشد بلورها، مسدود شدن بعضی از دانه‌ها که در مجاورت یکدیگر می‌باشند را نشان می‌دهد. (ج) کامل شدن انجماد و شکل‌گیری دانه‌های منظم. (د) ساختار دانه آشکار شده زیر میکروسکوپ: خطوط سیاه، مرزهای دانه می‌باشند.

۱-۳ قانون کولمب^۱

به‌طور کلی در بین ذرات سازنده‌ی مواد (اتم‌ها، یون‌ها و...) نیروهای جاذبه و دافعه وجود دارد. برای مثال نیروی کولمبی (F_c) که سبب جذب ذرات به‌دلیل وجود بارهای غیرهمنام می‌گردد:

$$F_c = \frac{kqq'}{a^2}$$

که در این رابطه k ثابت نیروی کولمبی، q و q' بار دو ذره و a فاصله بین آنها می‌باشد. نیروی دافعه (F_r) معمولاً بین میدان‌های الکترونی دو اتم مجاور به وجود می‌آید و عامل چرخش و توزیع بار الکترون‌ها در امتداد شعاع اتم می‌باشد. این نیرو را با رابطه زیر نشان می‌دهند:

$$F_r = \frac{nb}{a^{n+1}}$$

در این رابطه نیز n و b اعداد ثابت و a فاصله بین دو ذره می‌باشد. با وجود دو نیروی جاذبه و دافعه فوق، فاصله بین ذرات سازنده مواد به اندازه‌ای است که برآیند این دو نیرو در این فاصله صفر می‌شود. با مساوی قرار دادن آنها، $F_r = F_c$ ، می‌توان مقدار a که فاصله تعادلی است را محاسبه نمود. در این فاصله انرژی اتصال بین ذرات نیز کمترین مقدار خواهد شد. تعادل نیروهای موجود در بین ذرات سازنده هر ماده در فاصله معینی برقرار می‌باشد. این فاصله به خصوصیات فیزیکی آن ماده بستگی دارد و به فاصله تعادلی معروف می‌باشد. چون ذرات سازنده یک ماده از نظر فیزیکی یک نوع هستند، لذا در سه بعد با فاصله‌ای منظم و یکسان که فاصله تعادلی است تکرار می‌شوند. اشکال هندسی منظم که به نام بلور یا کریستال در مقیاس بزرگ در طبیعت دیده می‌شوند، در حقیقت از کنار هم قرار گرفتن واحدهای بسیار کوچک و منظم شکل می‌گیرند.

در سال ۱۹۱۲ میلادی امکان مطالعه ساختمان داخلی کریستال‌ها در مقیاس اتمی با کاربرد پرتو ایکس فراهم گردید. پراکندگی پرتو ایکس توسط کریستال‌ها نشان داد که ذرات سازنده کریستال‌ها متشکل از صفحاتی است که به طور منظم بر روی هم قرار دارند. امروزه با استفاده از اشعه ایکس، اندازه‌گیری فواصل بین صفحات کریستالی با دقت بسیار بالا ممکن شده است.

۴-۱ تشکیل کریستال‌ها

کریستال‌ها معمولاً از حالت‌های محلول، مذاب و بخار مواد شکل می‌گیرند. در حالت‌های ذکر شده، اتم‌ها نامنظم می‌باشند و با تغییر درجه حرارت، فشار یا غلظت اتم‌ها در آرایشی منظم به هم مربوط شده و شکل کریستال‌ها را می‌سازند.

۱-۴-۱ تشکیل کریستال از محلول مواد

به عنوان مثال اگر محلول آب نمک بر اثر حرارت آب آن تبخیر گردد، به نقطه‌ای می‌رسد که دیگر محلول پایدار نبوده و نمک طعام جامد از محلول رسوب می‌کند. حال اگر سرعت تبخیر آب بسیار کم باشد، بلورهای درشتی از نمک ایجاد می‌شود. اگر سرعت تبخیر سریع باشد، کریستال‌ها ریز می‌شوند. اگر ماده‌ای را در حلالی حل کنیم، با پایین آوردن درجه حرارت محلول فوق اشباع شده، امکان رسوب جامد پیش می‌آید. با افزایش فشار، رسیدن محلول به حالت فوق اشباع تسریع می‌شود و به کمک این دو عامل، فاز جامد از مایع رسوب می‌کند.

۱-۴-۲ تشکیل کریستال از حالت مذاب

هنگامی که ذرات یک ماده (اتم‌ها) در حالت مذاب آزادانه حرکت می‌کنند، با سرد شدن در درجه حرارتی که نقطه انجماد ماده است، اتم‌ها در فاصله‌ای مشخص در بلور به طور منظم در کنار هم متوقف شده و شکل کریستال ماده را به خود می‌گیرند و با سرد شدن جامد (کریستال) فاصله ذرات نیز به طور یکنواخت کم می‌شود.

برای مثال سنگ‌های آذرین از مواد مذاب آتش‌فشان‌ها ناشی می‌شود که هم‌زمان با سرد شدن مواد مذاب مختلف در آتش‌فشان، کنار هم جمع شده و بلورهای مختلف را تشکیل می‌دهند.

۱-۴-۳ تشکیل کریستال از فاز بخار

ذرات بخار با سرد شدن به هم نزدیک شده و با از دست دادن انرژی داخلی، فاصله بین آن‌ها کم می‌شود تا حدی که با فاصله مورد نیاز جهت تشکیل یک واحد کریستالی نزدیک می‌شوند و در درجه حرارت مشخص ذرات بخار به بلورهای جامد تبدیل می‌شوند. برای مثال می‌توان به کریستال‌های برف اشاره کرد که از سرد شدن بخار آب موجود در هوا فرم می‌گیرند.

تهیه کریستال‌ها به طور مصنوعی با استفاده از سه روش فوق بسیار معمول است. اما اگر شرایط انجماد ماده به صورتی باشد که اتم‌ها فرصت آرایش گرفتن نداشته باشند، فرم ایجاد شده نظم‌ی نداشته و بدون شکل هندسی خواهد بود. در این صورت ماده آمorf

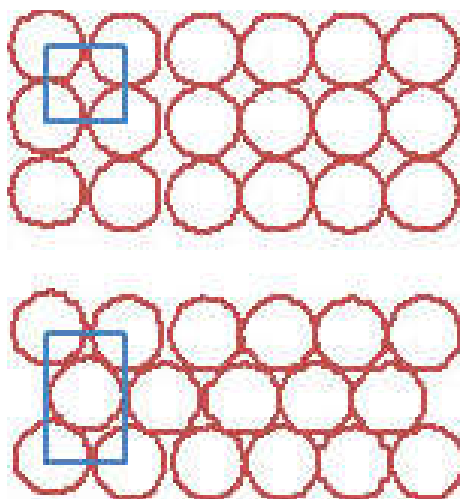
یا بی شکل نامیده می شود، مانند شیشه ها. باید در نظر داشت این پدیده می تواند از خصوصیات خود ماده باشد و هرگونه سرد شدن باز هم منجر به آمرف شدن ماده گردد.

۵-۱ ساختمان داخلی بلورها

در تشکیل بلورها گفته شد که اتم ها در فواصلی منظم از یکدیگر یعنی شرایطی که برآیند نیروهای جاذبه و دافعه بین آن ها صفر می شود، قرار می گیرند. واحدی که بدین ترتیب ساخته می شود و شکل هندسی خاصی دارد را واحد شبکه^۱ می نامیم. برای مثال در شکل ۴-۱ دو نوع شبکه را در نظر می گیریم. اتم ها به شکل دایره و واحد شبکه آن ها با چهارضلعی ها نشان داده شده اند. از تکرار هر چهارضلعی، کل بلور ساخته می شود. ابعاد این اشکال هندسی حدود آنگستروم است:

$$1A^{\circ} = 10^{-8} cm$$

معمولاً واحد شبکه به طور نامحدود تکرار می شود. اگر نقطه ای را به عنوان مبدأ در نظر بگیریم ملاحظه می شود که با تکرار این نقطه و رعایت فواصل مساوی در سه جهت شکل کریستال ساخته می شود.



شکل ۴-۱. مثالی شماتیک از واحدهای شبکه

۱-۵-۱ مشخصات واحد شبکه

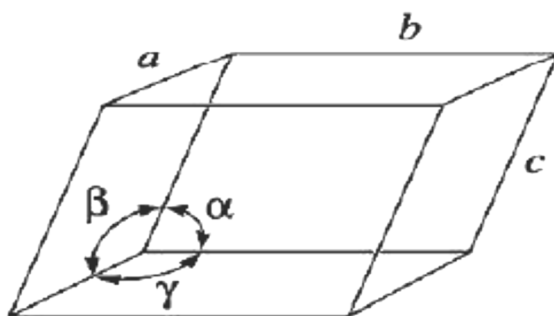
هر شکل هندسی را با سه بعد و سه زاویه می‌توان مشخص کرد. الزامی نیست که سه محور بر هم عمود باشند.

α : زاویه بین c و b

β : زاویه بین a و c

γ : زاویه بین a و b

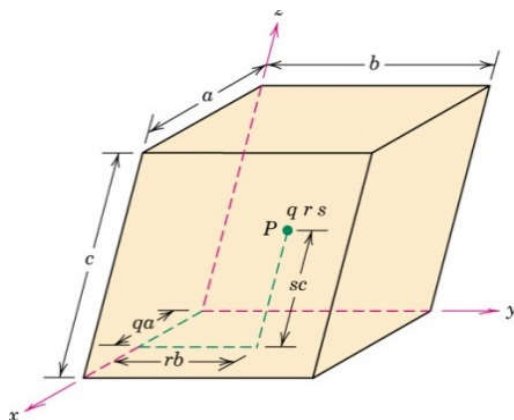
این فواصل و زوایا را ثابت‌های شبکه یا پارامترهای شبکه^۱ می‌نامیم (شکل ۱-۵).
(یعنی α, β, γ و a, b, c)



شکل ۱-۵. نمایش پارامترهای شبکه‌ای در یک واحد شبکه

۱-۵-۲ مختصات نقطه

موقعیت هر نقطه درون یک واحد شبکه را می‌توان به صورت مختصات آن برحسب ضرایب کسری از طول اضلاع واحد شبکه (یعنی a, b, c) مشخص کرد. برای نشان دادن آن، واحد شبکه و نقطه P درون آن را که در شکل ۱-۶ نشان داده شده است، در نظر بگیرید. می‌توانیم موقعیت P را برحسب مختصات تعمیم یافته q, r, s مشخص کنیم به طوری که q کسری از طول a در امتداد محور x ، r کسری از طول b در امتداد محور y و s نیز به همین ترتیب می‌باشد. بنابراین، موقعیت P با استفاده از مختصات qrs با مقادیری که معادل یا کمتر از واحد است مشخص می‌شود. به علاوه نباید از کاما یا دیگر علامت‌های جداسازی استفاده کنیم.



شکل ۶-۱. روش محاسبه مختصات q, r, s برای نقطه P درون یک واحد شبکه

۶-۱ سیستم‌های بلوری^۱

سیستم‌های بلوری مبنای تقسیم‌بندی بلورها هستند. چون واحدهای شبکه مختلفی داریم، سیستم‌های بلوری متفاوتی به وجود آمده‌است. هفت نوع سیستم بلوری که در شکل ۷-۱ نشان داده شده‌اند، عبارتند از:

۱) Cubic : $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

مکعب

۲) Tetragonal : $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

مکعب مستطیل مربع‌القاعده

۳) Orthorhombic: $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
 ۴) Trigonal (Rhombohedral) $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

شش‌وجهی با سطوح لوزی مساوی

۵) Hexagonal: $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$

دارای دو قاعده شش‌گوش است.