تذکر: نتیجه‌ی به‌دست آمده در این مثال که براساس، فرض کردن اتم‌ها به‌صورت کره‌های سخت (کره‌هایی با شعاع ثابت) به‌دست آمده است تنها به ساختار کریستالی، و چینش هندسه اتم‌ها بستگی دارد و مستقل از پارامتر شبکه و در نتیجه نوع اتم است. اما در فلزات واقعی؛ اتم‌ها را نمی‌توان این‌گونه فرض کرد. برای مثال برای محاسبه‌ی تغییرات حجمی حین گرم کردن آهن خالص از ساختار bcc با $a_{\circ}=0.2910$ به ساختار fcc با $a_{\circ}=0.3647$ در دمای 910 °c داریم:

$$\frac{\Delta V}{V}=\frac{2(0.2910)^3-(0.3647)^3}{(0.2910)^3}\ 100=-1.54\%$$

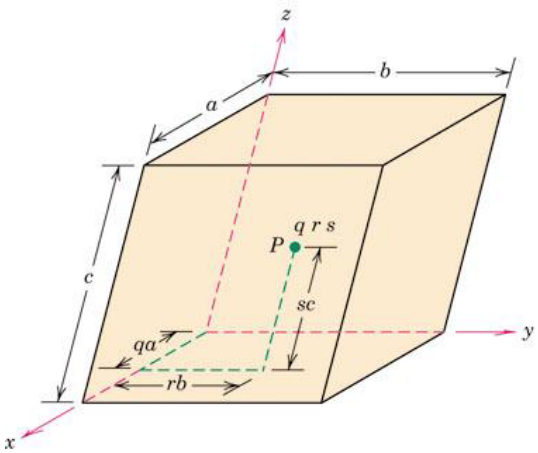
این مقدار با مقدار واقعی تغییر حجم تطابق خوبی دارد.

۳-۱۲-نقطه، جهت و صفحه در شبکه‌های کریستالی:

وقتی که با مواد بلوری سروکار داریم، غالبا نیاز است که به یک نقطه‌ی خاص درون سلول واحد، یک جهت بلوری یا بعضی از صفحات بلوری اتم‌ها اشاره کنیم.

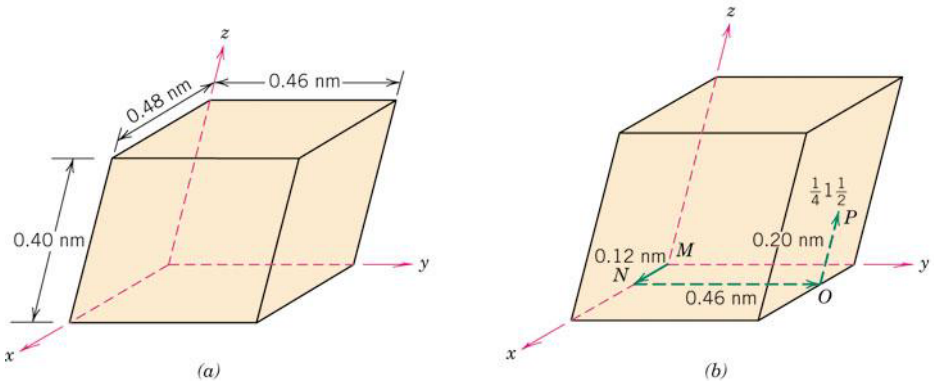
۳-۱۲-۱-مختصات نقطه

موقعیت هر نقطه درون سلول واحد می‌تواند با مختصات آن به صورت کسرهایی از طول لبه‌های سلول واحد (یعنی با a، b و c) تعیین می‌شود. برای نشان دادن این مطلب، سلول واحد و نقطه‌ی P با مختصات عمومی q، r و s را در نظر بگیرید (شکل ۱۶) که q کسری از طول a در امتداد محور x. r کسری از طول b در امتداد محور y و s کسری از طول c در امتداد محور z است. بنابراین، موقعیت P با استفاده از مختصات q r s با مقادیر کم‌تر یا مساوی یک، تعیین می‌شود. علاوه بر این، بر طبق قرارداد، این اعداد با کاما یا علامت دیگری از هم جدا نمی‌شوند.



شکل۱۶- روش تعیین q r s برای نقطه P درون سلول واحد. مختصات q (که به صورت کسری است) مربوط به فاصله‌ی qa در امتداد محور x است که a طول لبه‌ی سلول واحد است. مختصات r و s نیز به روش مشابه برای محورهای y و z تعیین می‌شوند.

مثال: برای سلول واحد نشان داده شده در شکل زیر (a)، موقعیت نقطه‌ی با مختصات $1\frac{1}{4}1\frac{1}{2}$ را تعیین کنید.

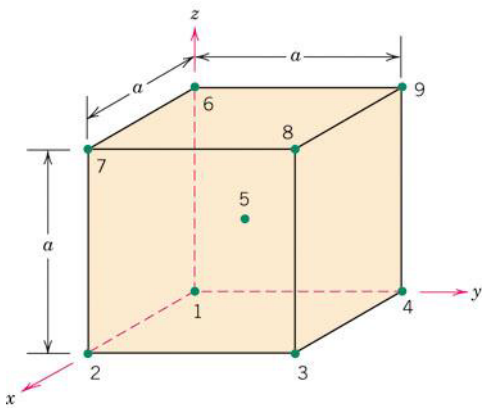


حل

از شکل (a) طول‌های لبه‌های این سلول واحد عبارتند از a=۰٫۴۸nm، b=۰٫۴۶nm و c=۰٫۴nm. علاوه بر این، با توجه به مباحث بالا، کسرهای طول عبارتند از: $q=\frac{1}{4}$، $r=1$ و $s=\frac{1}{2}$. بنابراین، همانطور که در شکل (b) نشان داده شده است، ابتدا از مبداء سلول واحد (نقطه M) به اندازه $qa=\frac{1}{4}(0.48nm)=0.12nm$ واحد در طول محور x (به نقطه N) حرکت می‌کنیم. متشابها، $rb=(1)(0.46nm)=0.46nm$ به موازات محور y از نقطه N به نقطه O می‌رویم. نهایتا، همانطور که در شکل (b) مشاهده می‌شود، از این موقعیت به اندازه $sc=\frac{1}{2}(0.40nm)=0.20nm$ در امتداد محور z به نقطه P می‌رویم. این نقطه P مربوط به مختصات $1\frac{1}{4}1\frac{1}{2}$ است.

مثال: مختصات تمام موقعیت‌های اتمی سلول واحد BCC را تعیین کنید.

حل: برای سلول واحد BCC شکل ۱۷، مختصات موقعیت اتمی به محل‌های مرکزهای تمام اتم‌ها در سلول واحد، یعنی هشت اتم در گوشه‌ها و اتم مرکزی مربوط می‌شود. این موقعیت‌ها در شکل زیر نشان داده و نام‌گذاری شده‌اند.



شکل۱۷- نقاط مادی موجود در شبکه‌ی BCC

مختصات نقطه برای موقعیت شماره ۱، ۰۰۰ است. این موقعیت در مبداء سیستم مختصات قرار دارد و کسر طول سلول واحد در امتداد محورهای x، y و z، به ترتیب ۰a، ۰a و ۰a است. علاوه بر این، برای موقعیت شماره ۲، از آنجا که این نقطه به اندازه یک طول یال سلول واحد در امتداد محور x قرار دارد، کسر طول‌های آن به ترتیب a، ۰a و ۰a است که مختصات نقطه‌ای ۱۰۰ برای آن به دست می‌آید. جدول زیر کسر طول یال سلول واحد در امتداد محورهای x، y و z و مختصات نقطه‌ای مربوطه‌ی ۹ نقطه‌ی روی تصویر بالا را نشان می‌دهد.

۳-۱۲-۲-اندیس میلر جهات

الف ـ سیستم‌های غیر هگزاگونالی

برای یافتن اندیس‌میلر جهات مراحل زیر را باید طی کرد:

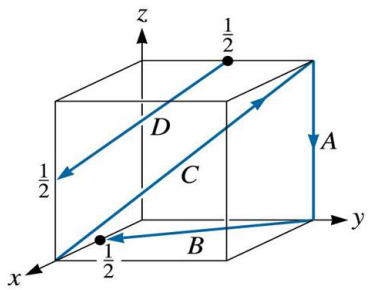
الف ـ یک دستگاه مختصاتی oxyz دلخواه راست‌گرد انتخاب می‌کنیم.

ب ـ مختصات نقطه‌ی انتهای بردار جهت را از مختصات نقطه‌ی ابتدا کم می‌کنیم.

پ ـ در صورتی که اعداد حاصله عدد کسری باشند آن‌ها را به کوچک‌ترین عدد صحیح تبدیل می‌کنیم.

ت ـ اعداد به‌دست آمده را در علامت کروشه [ ] قرار می‌دهیم.

مثال: در شکل زیر اندیس‌میلر جهات نشان داده شده را تعیین کنید:



حل:

جهت A:

$$\vec{A} = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{vmatrix}$$

پس اندیس‌میلر جهت A به صورت $[00\bar{1}]$ است.

جهت B:

$$\vec{B} = \begin{vmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1/2 \\ -1 \\ 0 \end{vmatrix}$$

از آن‌جا که اعداد حاصله کسری هستند؛ آن‌ها را در کوچک‌ترین مضرب مشترک مخرج کسرها ضرب می‌کنیم؛ پس اعداد حاصله را در ۳ ضرب می‌کنیم؛ اندیس‌میلر جهت B به صورت $[2\ \bar{1}\ 0]$ است.

س اندیس‌میلر جهت AB به صورت $[\bar{1}\ 0\ 1]$ است.

جهت C:

$$\vec{A}=\begin{vmatrix}0\\1\\1\end{vmatrix}-\begin{vmatrix}1\\0\\0\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}-1\\1\\1\end{vmatrix}$$

پس اندیس‌میلر جهت C به صورت $[\bar{1}11]$ است.

جهت D:

$$E\begin{vmatrix}0\\0\\\frac{1}{3}\end{vmatrix},\ F\begin{vmatrix}1\\0\\\frac{2}{3}\end{vmatrix}\Rightarrow EF=\begin{vmatrix}1\\0\\\frac{1}{2}\end{vmatrix}-\begin{vmatrix}0\\\frac{1}{2}\\1\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1\\\frac{-1}{2}\\\frac{-1}{2}\end{vmatrix}$$

از آن‌جا که اعداد حاصله کسری هستند؛ آن‌ها را در کوچک‌ترین مضرب مشترک مخرج کسرها ضرب می‌کنیم؛ پس اعداد حاصله را در ۲ ضرب می‌کنیم؛ اندیس‌میلر جهت D به صورت $[2\ \bar{1}\ \bar{1}]$ است.

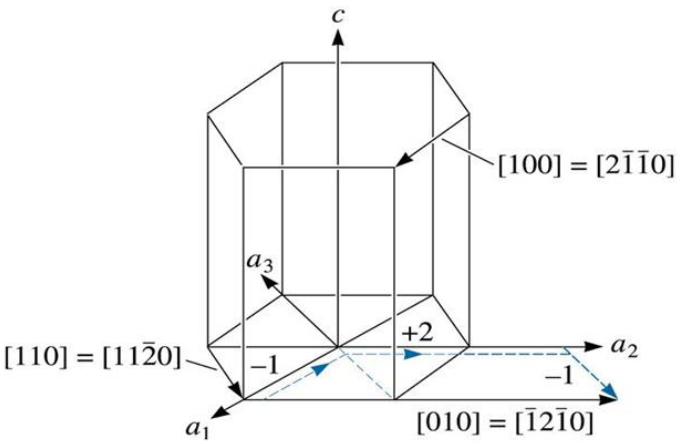
تذکر:

۱ـ جهت $[h\ k\ l]$ با جهت $[nh\ nk\ nl]$ (n صحیح و غیرصفر است) مشابه است.

۲-جهت $[h\ k\ l]$ با جهت $[\bar{h}\ \bar{k}\ \bar{l}]$ یکسان نیست. هرگز به سمت شرق رفتن مشابه به سمت غرب رفتن نیست!

ب- اندیس میلر سیستم‌های شش‌گوش

اندیس میلر سیستم‌های هگزاگونال را می‌توان به دو روش سه اندیس و چهار اندیسی بیان کرد. مسئله‌ای که در بلورهای دارای تقارن شش‌گوش وجود دارد این است که بعضی از جهت‌های بلوری معادل، اندیس‌های مشابهی ندارند. با استفاده از سیستم مختصات چهار محوری میلر-براویس می‌توان بر این مشکل غلبه کرد (شکل۱۸).



شکل۱۸ سیستم محورهای مختصات برای سلول واحد شش‌گوش (روش میلر-براویس) به همراه اندیس میلر سه‌تایی و چهارتایی چند جهت

هر سه محور a_1، a_2 و a_3 در یک صفحه (که صفحه پایه نامیده می‌شود) و بازاویه‌های ۱۲۰° نسبت به هم، قرار دارند. محور z بر این صفحه‌ی پایه عمود است. اندیس‌های جهت، که به روش توضیح داده شده در بالا به دست می‌آیند، با چهار اندیس مشخص می‌شوند و به صورت $[uvtw]$ نشان داده می‌شوند. سه اندیس اول تصویر جهت بر روی سه محور a_1، a_2 و a_3 در صفحه‌ی پایه است. در روش سه اندیسی محورهای a_1، a_2 و z را در نظر می‌گیریم.