



Crystalline Structures

جامعة ساوة

كلية التقنية الهندسية

قسم التبريد والتكييف

المرحلة/الاولى

CRYSTALLINE STRUCTURES

3. البلورات السداسية المغلقة (HCP) Hexagonal-Closed-Packed

يحتوي هيكل HCP على ثلاث طبقات من الذرات. في كل طبقة علوية وسفلية هناك ست ذرات على الأركان تترتب بهيئة شكل سداسي، وذرة واحدة في المنتصف. أما في الطبقة الوسطى من البلورة فهناك ثلاث ذرات داخلية، كما هو موضح في الشكل أدناه. أمثلة للمواد الخاصة بهذا النوع: البريليوم، الكاديوم، المغنسيوم، الزنك.

هناك بعض المعادن التي تخضع لتغيير في بنيتها عند درجات حرارة مختلفة. فمعدن الحديد على سبيل المثال يأخذ تركيب BCC في درجة حرارة الغرفة، وعندما يسخن المعدن ويصل إلى درجة حرارة 910 درجة مئوية، تعيد الذرات ترتيب نفسها فيصبح تركيبه FCC. لكن إذا تم تسخين المعدن إلى درجة حرارة أعلى تبلغ 1400 درجة مئوية، فإن الذرات تعيد ترتيب نفسها مرة أخرى إلى تركيب BCC وهذه الظاهرة تسمى **التأصل Allotropy**.

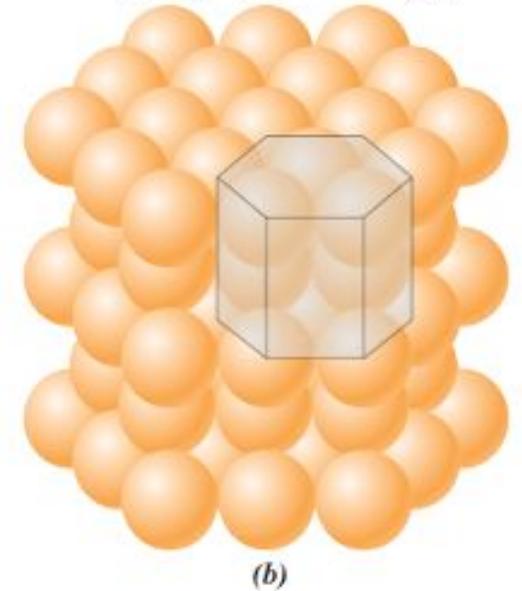
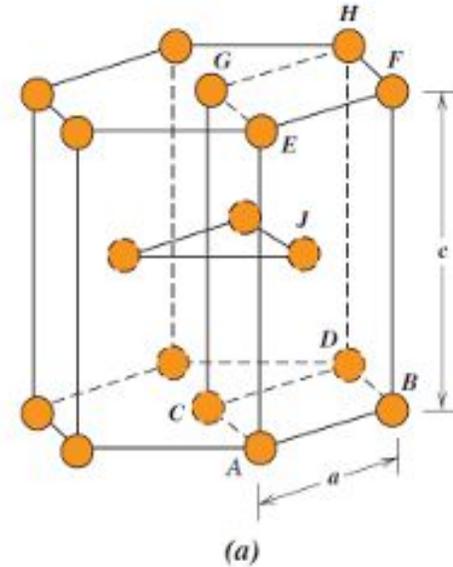
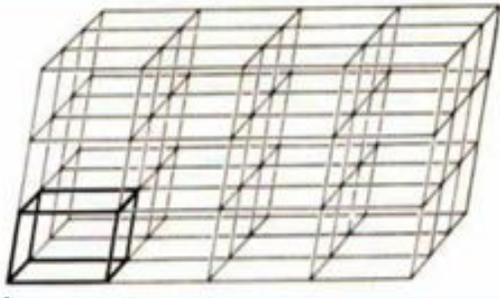


Figure 3.4 For the hexagonal close-packed crystal structure, (a) a reduced-sphere unit cell (a and c represent the short and long edge lengths, respectively), and (b) an aggregate of many atoms.

CALCULATION OF NUMBER OF ATOMS IN CRYSTALLINE STRUCTURES



إن لجميع المعادن وسبائكها تركيباً بلورياً كما ذكرنا سابقاً، حيث يتم إعادة ترتيب الذرات في أشكال منظمة تسمى بالبنية البلورية (الشبكة البلورية) (Crystal Lattice). وتتكون هذه الشبكة من مجموعة أخرى أصغر من الذرات تسمى كل واحدة منها **خلية الوحدة** كما هو موضح في الشكل المجاور.

الذرات التي تنتمي إلى خلية الوحدة تسمى بالذرات الأساسية، ويختلف عددها من تركيب بلوري إلى آخر، ويمكن معرفة هذا العدد من المعادلة التالية:

$$N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8}$$

N_i = the number of interior atoms

N_f = the number of face atoms

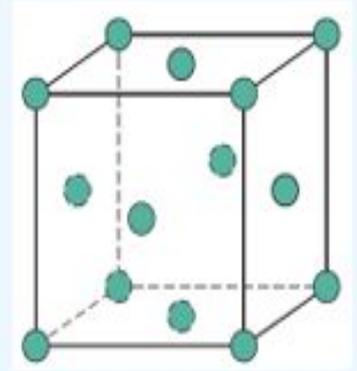
N_c = the number of corner atoms

- الذرة الداخلية تحسب بالكامل.
- الذرة السطحية مشتركة بين بلورتين لذلك تقسم على 2.
- أما الذرة التي في الزاوية (أركان المكعب) فهي مشتركة بين 8 بلورات فتقسم على 8.

- **FCC** البلورات المكعبة سطحية الذرة

For the FCC crystal structure, there are eight corner atoms ($N_c = 8$), six face atoms ($N_f = 6$), and no interior atoms ($N_i = 0$). Thus, from Equation 3.2,

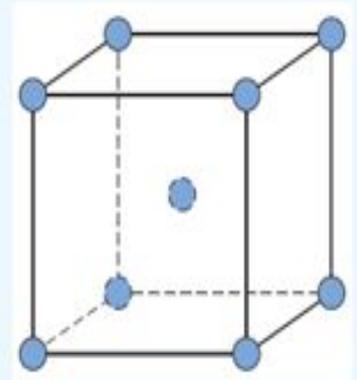
$$N = 0 + \frac{6}{2} + \frac{8}{8} = 4$$



- **BCC** البلورات المكعبة وسطية الذرة

Each BCC unit cell has eight corner atoms and a single center atom, which is wholly contained within its cell; therefore, from Equation 3.2, the number of atoms per BCC unit cell is

$$\begin{aligned} N &= N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8} \\ &= 1 + 0 + \frac{8}{8} = 2 \end{aligned}$$



- **HCP** البلورات السداسية المغلقة

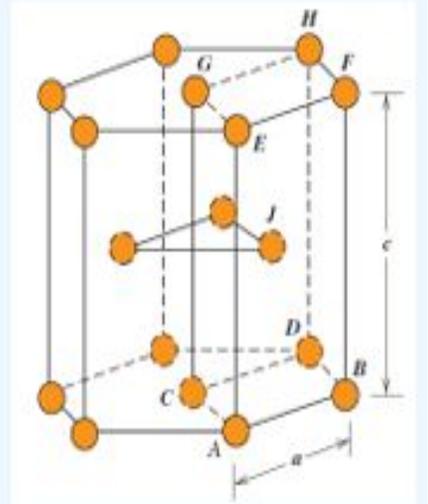
In order to compute the number of atoms per unit cell for the HCP crystal structure, Equation 3.2 is modified to read as follows:

$$N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{6} \quad (3.5)$$

That is, one-sixth of each corner atom is assigned to a unit cell (instead of 8 as with the cubic structure). Because for HCP there are 6 corner atoms in each of the top and bottom faces (for a total of 12 corner atoms), 2 face center atoms (one from each of the top and bottom faces), and 3 midplane interior atoms, the value of N for HCP is found, using Equation 3.5, to be

$$N = 3 + \frac{2}{2} + \frac{12}{6} = 6$$

Thus, 6 atoms are assigned to each unit cell.



APF – ATOMIC PACKING FACTOR

$$APF = \frac{V_S}{V_C}$$

عامل الرص الذري

يمثل هذا العامل نسبة حجم جميع الذرات في خلية الوحدة إلى حجم الخلية بأكملها.

V_S = حجم جميع الذرات في خلية الوحدة (= عدد الذرات × حجم الكرة).

V_C = حجم خلية الوحدة.

مثال: أثبت أن عامل الرص الذري APF لبلورة ذات تركيب من نوع FCC يساوي 0.74.

الحل:

$$V_S = 4 \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right) = \frac{16}{3} \pi R^3$$

(1) نحسب حجم جميع الذرات في الخلية الواحدة (هناك 4 ذرات في تركيب FCC)؟

(2) حجم الخلية الواحدة V_C هو a^3

(3) نحسب قيمة معامل الرص

$$APF = \frac{V_S}{V_C} = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{(2R\sqrt{2})^3} = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{8 * 2R^3\sqrt{2}} = 0.74$$

مثال: احسب عامل الرص الذري APF لبلورة ذات تركيب من نوع BCC.

الحل:

(1) نحسب حجم جميع الذرات في الخلية الواحدة (هناك ذرتان في تركيب BCC)؟

(2) حجم الخلية الواحدة V_C هو a^3

$$APF = \frac{V_S}{V_C} = \frac{2 * \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{\frac{8}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\frac{8}{3} \pi R^3}{\frac{64R^3}{3\sqrt{3}}} = 0.68$$

(3) نحسب قيمة معامل الرص

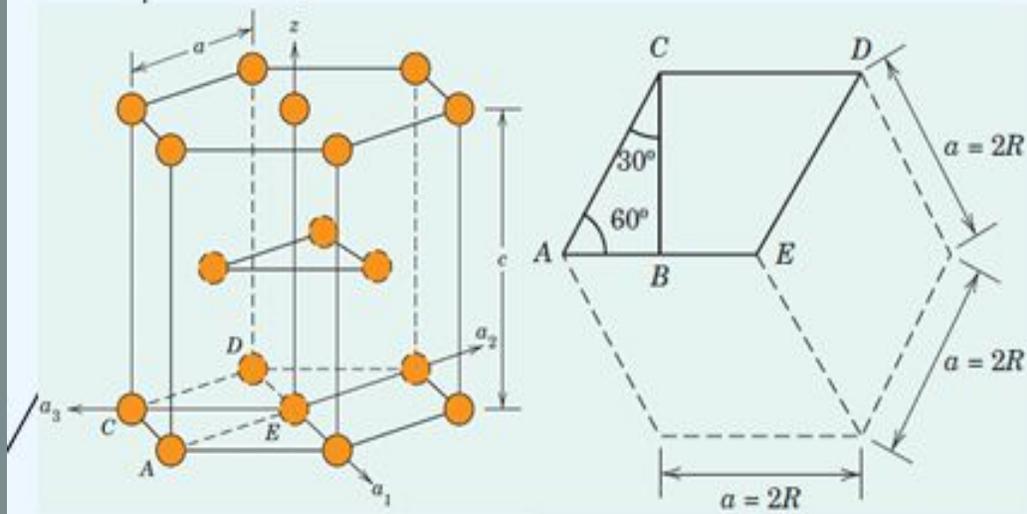
مثال: احسب عامل الرص الذري APF لبلورة ذات تركيب من نوع HCP.

الحل:

(1) نحسب حجم جميع الذرات في الخلية الواحدة (هناك 6 ذرات في تركيب HCP)؟

(2) حجم الخلية الواحدة V_C هو $\left(\frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 c\right)$

$$c = \sqrt{\frac{8}{3}} a$$



$$APF = \frac{V_S}{V_C} = \frac{6 * \frac{4}{3} \pi R^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 c} = \frac{8\pi R^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 * \sqrt{\frac{8}{3}} a}$$

$$APF = \frac{8\pi R^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2} (2R)^2 * \sqrt{\frac{8}{3}} (2R)} = 0.74$$

DENSITY COMPUTATION

حساب الكثافة الذرية

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

n = number of atoms associated with each unit cell عدد الذرات في خلية الوحدة

A = atomic weight الوزن الذري

V_C = volume of the unit cell حجم الخلية

N_A = Avogadro's number (6.022×10^{23} atoms/mol)

Example

Copper has an atomic radius of 0.128 nm, an FCC crystal structure, and an atomic weight of 63.5 g/mol. Compute its theoretical density, and compare the answer with its measured density.

المطلوب حساب كثافة معدن النحاس

$n = 4$ (FCC structure)

$$R = 0.128 \text{ nm} = 0.128 * 10^{-7} \text{ cm}, \quad V_C = a^3 = (2R\sqrt{2})^3 = 16\sqrt{2}R^3$$

$$\rho = \frac{4(\text{atom/cell}) * 63.5(\text{g/mol})}{\left[\frac{16\sqrt{2}(0.128 * 10^{-7} \text{ cm})^3}{\text{cell}} \right] * 6.022 * 10^{23} \frac{\text{atom}}{\text{mol}}} = 8.89 \text{ g/cm}^3$$