

وزارت علوم تحقیقات و فناوری



دانشگاه دامغان

دانشکده شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی (گرایش معدنی)

سنتز، شناسایی و تعیین ساختار بلوری پلیمر کوئوردیناسیون جدیدی از Cd(II) با

لیگاند ۷،۴-فنانترولین

توسط:

فریبا زارع پور

استاد راهنما:

دکتر ربابه علیزاده

شهریور ماه ۱۳۹۲

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

وزارت علوم تحقیقات و فناوری

دانشگاه دامغان

دانشکده شیمی

پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه به عنوان بخشی
از فعالیت‌های تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

رشته‌ی:

شیمی (گرایش معدنی)

سنتز، شناسایی و تعیین ساختار بلوری پلیمر کوئوردیناسیون جدیدی از Cd(II) با

لیگاند ۷،۴-فنانترولین

توسط:

فریبا زارع پور

استاد راهنما:

دکتر ربابه علیزاده

شهریور ماه ۱۳۹۲

تقدیم به پدر و مادر عزیزم،

دریای بی کران عشق که سراسر زندگی شان، درس ایثار و فداکاری است.

تقدیم به اساتید گرانقدر آنان که علم را به من آموختند

و تقدیم به برادران و خواهران عزیزم

دوستان همیشگی لحظه لحظه‌های زندگی‌ام

سپاس‌گزاری:

سپاس مخصوص خدایی است که داشتن او جبران همه‌ی نداشته‌های من است.

با سپاس از سه وجود مقدس:

آنان که ناتوان شدند تا ما به توانایی برسیم

پدرانمان

موهایشان سپید شد تا ما روسفید شویم

مادرانمان

و عاشقانه سوختند تا گرمابخش وجود ما و روشن‌گر راهمان باشند

استادانمان

از استاد بزرگوارم سرکار خانم دکتر ربابه علیزاده که به عنوان استاد راهنما، سرپرستی این پروژه را به بهترین شکل ممکن بر عهده داشتند و با راهنمایی‌های ارزشمندشان راه‌گشای اینجانب بوده‌اند صمیمانه تشکر و قدردانی می‌کنم و برای ایشان و خانواده‌های محترمشان آرزوی توفیقات روزافزون همراه با سلامتی و سعادت می‌نمایم.

از اساتید محترم مدعو آقای دکتر سید جواد معافی و آقای دکتر غلامحسین گریوانی به دلیل زحمت قرائت پایان‌نامه و حضور در جلسه دفاعیه کمال تشکر را دارم.

از آقای دکتر سید احمد نبوی امری نماینده محترم تحصیلات تکمیلی که در جلسه

دفاع بنده حضور داشتند نیز متشکرم.

چکیده:

سنتز، شناسایی و تعیین ساختار بلوری پلیمر کوئوردیناسیون جدیدی از Cd(II) با

لیگاند ۷،۴-فنانترولین

توسط:

فربیا زارع پور

یک کمپلکس جدید از کادمیم (II)، $[Cd(4,7-phen)I_2]_n$ ، از واکنش CdI_2 با ۷،۴-فنانترولین [phen] در متانول سنتز شد، که یک پلیمر کوئوردیناسیونی می‌باشد و به وسیله روش‌های آنالیز عنصری، طیف بینی 1H IR، ^{13}C NMR، NMR، نشر فلورسانس، آنالیز TGA و پراش پرتو - X از تک بلور شناسایی شد. کمپلکس در گروه فضایی $P2_1/n$ از سیستم مونوکلینیک متبلور شده که شامل چهار مولکول در سلول واحد است. ابعاد سلول واحد برای این کمپلکس برابر $a = 8.5057(6) \text{ \AA}$ ، $b = 13.0181(7) \text{ \AA}$ ، $c = 12.3364(10) \text{ \AA}$ ، $\beta = 94.222(6)^\circ$ می‌باشد. عدد کوئوردیناسیون کادمیم (II) در این کمپلکس برابر چهار و شکل هندسی اطراف Cd^{2+} در کمپلکس، چهاروجهی انحراف یافته است.

واژگان کلیدی: کمپلکس کادمیم(II)، ۷،۴-فنانترولین، پلیمرهای کوئوردیناسیون.

فهرست مطالب

۱	فصل اول: مقدمه.....
۲	۲-۱- بلورها و اشعه ایکس
۲	۳-۱- بلورشناسی.....
۴	۴-۱- مواد بلوری
۵	۵-۱- ساختمان داخلی بلورها.....
۶	۶-۱- قوانین اصلی بلورشناسی
۶	۶-۱-۱- اصل ثابت بودن زوایای دو سطحی.....
۶	۶-۱-۲- اصل تقارن
۶	۷-۱- هفت سیستم بلورشناسی
۷	۸-۱- شبکه‌های بلوری.....
۹	۹-۱- مهندسی بلور.....
۹	۱۰-۱- پیوند هیدروژنی.....
۱۰	۱۱-۱- برهمکنش $\pi-\pi$
۱۱	۱۲-۱- شیمی ابر مولکولی.....
۱۲	۱۳-۱- شیمی میهمان و میزبان.....
۱۳	۱۴-۱- چهارچوب‌های آلی- فلزی.....
۱۷	۱۵-۱- ویژگی‌های چهارچوب‌های آلی- فلزی.....
۱۸	۱۶-۱- پلیمرهای کوئوردیناسیون
۲۱	۱۷-۱- ترکیبات هتروسیکل
۲۲	۱۸-۱- برخی از خصوصیات مشتقات فنانترولین
۲۲	۱۹-۲- نقش لیگاند ۷،۴- فنانترولین در ایجاد پلیمر کوئوردیناسیون
۲۷	۲۰-۱- عناصر گروه IIB.....
۲۷	۲۱-۱- ساختار و برهمکنش‌های موجود در ترکیبات d^{10}
۲۷	۲۲-۱- برخی کمپلکس‌های تهیه شده با لیگاند ۷،۴- فنانترولین.....
۳۲	۲۳-۱- هدف از پایان نامه
۳۳	فصل دوم: تجربی.....
۳۴	۱-۲- مواد و دستگاه‌های مورد استفاده.....
۳۴	۱-۲-۱- مواد مورد استفاده.....
۳۴	۱-۲-۲- دستگاه‌های مورد استفاده.....
۳۵	۲-۲- روش سنتز کمپلکس $[\text{Cd}(4,7\text{-phen})\text{I}_2]$
۳۵	۳-۲- نتایج آنالیزها و اطلاعات داده‌های طیفی $[\text{Cd}(4,7\text{-phen})\text{I}_2]$

۳۷ فصل سوم: بحث و نتیجه‌گیری
۳۸ ۱-۳- ویژگی سنتزی کمپلکس‌های کادمیم(II)
۳۸ ۲-۳- تهیه و شناسایی اولیه پلیمر کوئوردیناسیونی [Cd(4,7-phen)I ₂]
۳۸ ۳-۳- نتایج نقطه‌ی ذوب و داده‌های تجزیه عنصری
۳۹ ۴-۳- طیف IR کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]
۴۲ ۵-۳- بررسی طیف ¹ H NMR کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]
۴۵ ۶-۳- بررسی طیف ¹³ C NMR کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂] _n
۴۷ ۷-۳- بررسی طیف UV-Vis کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]
۴۹ ۸-۳- بررسی طیف بینی فلئورسانس پلیمر کوئوردیناسیون [Cd(4,7-phen)I ₂]
۵۰ ۹-۳- آنالیز پراش پرتو-X از تک بلور کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]
۵۸ ۱۰-۳- بررسی حرارتی کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]
۵۸ ۱-۱۰-۳- خواص حرارتی کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]
۵۹ ۱۱-۳- نتیجه‌گیری
۶۱ مراجع
۷۲ پیوست

فهرست جداول

جدول ۱-۱: مشخصات هفت سیستم تبلور	۷
جدول ۱-۳: نتایج آنالیز عنصری کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]	۳۹
جدول ۲-۳: داده‌های بلوری کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]	۵۴
جدول ۳-۳: طول پیوندها (Å) در [Cd(4,7-phen)I ₂]	۵۴
جدول ۴-۳: زاویه‌های پیوندی (Å) در کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]	۵۵
جدول ۵-۳: زاویه‌های پیچشی (Å) در کمپلکس [Cd(4,7-phen)I ₂]	۵۵
جدول ۶-۳: انواع برهم کنش‌های π - π در پلیمر کوئوردیناسیونی [Cd(4,7-phen)I ₂]	۵۵
جدول ۷-۳: برهم کنش π -حلقه در پلیمر کوئوردیناسیونی [Cd(4,7-phen)I ₂]	۵۷

فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱: درجات مختلف نظم در مواد مختلف..... ۴
- شکل ۱-۲: چگونگی قرارگیری اتم‌ها در یک تک بلور..... ۴
- شکل ۱-۳: سلول واحد سیستم‌ها و پارامترهای آن..... ۵
- شکل ۱-۴: چهارده شبکه براوه..... ۸
- شکل ۱-۵: شمایی از برهمکنش $\pi-\pi$ وجه به وجه..... ۱۰
- شکل ۱-۶: اجزای تشکیل دهنده چهارچوب‌های فلزی-آلی..... ۱۴
- شکل ۱-۷: چرخ‌های پره دار مربعی که در آنها رنگ مشکی نشانگر اتم کربن، رنگ قرمز نشانگر اتم اکسیژن و فضای ارغوانی و طلایی رنگ نشانگر موقعیت قرارگیری فلز است..... ۱۵
- شکل ۱-۸: واحدهای ساختاری ثانویه معدنی (SBUs) که معمولاً در کمپلکس‌های فلزی کربوکسیلات وجود دارند، شامل (a) چرخ‌های پره دار مربعی با دو موقعیت لیگاند انتهایی، (b) کلاستر هشت وجهی بر پایه استات مس، (c) منشور مثلثی سه تایی با مراکز اکسو. واحدهای ساختاری ثانویه با اتصال به اتم‌های کربن گونه‌های کربوکسیلات در چهارچوب‌های فلزی-آلی قرار می‌گیرند. بطور مثال واحدهای ساختاری ثانویه آلی شامل باز-های مزدوج (e, d) و (f) هستند. فلزات با کره‌های آبی، کربن با کره‌های سیاه، اکسیژن با کره‌های قرمز و نیتروژن با کره‌های سبز رنگ نشان داده شده است..... ۱۶
- شکل ۱-۹: ساختار آبی پروس $Fe_4[Fe(CN)_6]_3 \cdot xH_2O$ ۱۹
- شکل ۱-۱۰: ابعاد شبکه‌های آلی-فلزی..... ۲۰
- شکل ۱-۱۱: ساختار مونومر $[CoCl_2(4,7-phen)]_n$ ۲۳
- شکل ۱-۱۲: ساختار مونومر $[CoBr_2(4,7-phen)]_n$ ۲۴
- شکل ۱-۱۳: ساختار تک بعدی زیگزاگی $[CoCl_2(4,7-phen)]_n$ به واسطه برهمکنش‌های $\pi-\pi$ ۲۴
- شکل ۱-۱۴: مونومر $[Cd(NO_3)_2(4,7-phen)(H_2O)]_n$ ۲۵
- شکل ۱-۱۵: مونومر $[Zn(NO_3)_2(4,7-phen)(H_2O)]_n$ ۲۶
- شکل ۱-۱۶: برهمکنش $\pi-\pi$ بین دو مارپیچ مجاور در $[Cd(NO_3)_2(4,7-phen)(H_2O)]_n$ ۲۶
- شکل ۱-۱۷: خود تجمعی یون‌های Cu(II) با لیگاند ۷،۴-فنانترویلین..... ۲۸
- شکل ۱-۱۸: زنجیره تک بعدی دارای کاتیون فعال s شکل $[Cu(4,7-phen)(H_2O)_3]_n^{2n+1}$ ۲۸
- شکل ۱-۱۹: زنجیره سه تایی $[Cu(4,7-phen)(H_2O)_2](ClO_4)_2 \cdot (4,7-phen)_2$ ۲۹
- شکل ۱-۲۰: برهمکنش‌های $\pi-\pi$ استاکینگ در کمپلکس $[Cu(4,7-phen)(H_2O)_3]_n^{2n+1}$ ۲۹
- شکل ۱-۲۱: ساختار Y-انحراف یافته کمپلکس $[Cu_3(phen)_4(PPh_3)](BF_4)_3 \cdot 2THF$ ۳۰
- شکل ۱-۲۲: شمایی از اولین و دومین لایه کوئوردیناسیون در یک گونه هشت وجهی..... ۳۰
- شکل ۱-۲۳: نمایش شبکه دو بعدی پیوند هیدروژنی در $[Co(MeCN)_2(H_2O)_4(ClO_4)] \cdot (4,7-phen)_2$ ۳۱
- شکل ۱-۲۴: شبکه سه بعدی حاصل از پیوند هیدروژنی در $[Co(MeCN)_2(H_2O)_4(ClO_4)] \cdot (4,7-phen)_2$ ۳۲
- شکل ۱-۱: شمایی واکنش تشکیل پلیمر کوئوردیناسیونی $[Cd(phen)I_2]$ ۲۸
- شکل ۲-۲: شکل ظاهری ساختار بلوری $[Cd(4,7-phen)I_2]$ (توسط میکروسکوپ نوری پلاریزان)..... ۳۶
- شکل ۳-۱: طیف IR لیگاند ۷،۴-فنانترویلین..... ۴۰

- شکل ۳-۲: طیف IR پلیمر کوئوردیناسیونی $[Cd(4,7-phen)I_2]_n$ ۴۱
- شکل ۳-۳: انواع هیدروژن موجود در لیگاند ۷،۴- فنانترولین ۴۲
- شکل ۳-۴: طیف 1H NMR لیگاند ۷،۴- فنانترولین ۴۳
- شکل ۳-۵: طیف 1H NMR پلیمر کوئوردیناسیونی $[Cd(4,7-phen)I_2]_n$ ۴۴
- شکل ۳-۶: انواع هیدروژن موجود در لیگاند ۷،۴- فنانترولین ۴۵
- شکل ۳-۷: طیف ^{13}C NMR لیگاند ۷،۴- فنانترولین ۴۵
- شکل ۳-۸: طیف ^{13}C NMR کمپلکس $[Cd(4,7-phen)I_2]_n$ ۴۶
- شکل ۳-۹: طیف ^{13}C NMR کمپلکس $[Cd(4,7-phen)I_2]_n$ ۴۷
- شکل ۳-۱۰: طیف جذبی (UV) لیگاند فنانترولین و پلیمر کوئوردیناسیونی $[Cd(4,7-phen)I_2]_n$ ۴۸
- شکل ۳-۱۱: طیف فلورسانس لیگاند ۷،۴- فنانترولین (خطوط بریده) و پلیمر کوئوردیناسیون $[Cd(4,7-phen)I_2]_n$ (خطوط پر) ۵۰
- شکل ۳-۱۲: ساختار بلوری پلیمر کوئوردیناسیونی $[Cd(4,7-phen)I_2]_n$ ۵۲
- شکل ۳-۱۳: نمودار انباشتگی پلیمر کوئوردیناسیونی $[Cd(phen)I_2]_n$ ۵۳
- شکل ۳-۱۳: نمودار انباشتگی پلیمر کوئوردیناسیونی $[Cd(phen)I_2]_n$ ۵۳
- شکل ۳-۱۴: نمایش برهم کنش $\pi-\pi$ کمپلکس $[Cd(phen)I_2]$ ۵۶
- شکل ۳-۱۵: نمایش برهم کنش π -حلقه در کمپلکس $[Cd(phen)I_2]$ ۵۷
- شکل ۳-۱۶: نمودار TGA مربوط به کمپلکس $[Cd(phen)I_2]$ ۵۸
- شکل ۳-۱۷: مراحل تجزیه گرمایی مربوط به $[Cd(phen)I_2]$ ۵۹

فصل اول

مقدمه

۱-۱- مقدمه‌ای بر بلور شناسی

بلورها با شکل‌های ظاهری جالب خود همواره مورد توجه بوده‌اند، حدس زده می‌شود که برخی از قواعد افلاطونی مربوط به مواد جامد از بررسی شکل بلورها الهام گرفته شده باشد. شاید بتوان گفت که این بلورها بودند که ارشمیدس را به مطالعه قواعد حاکم بر مواد جامد برانگیخت. از طرف دیگر تصور می‌شود که هندسه طبیعی بلورهای چند وجهی و تقارن آن‌ها تا حدی در خلق معماری تجلی یافته و تندیس‌های بی‌شمار، دست ساخته‌های بدلی و تزئینی از بلورها شکل گرفته باشند و اگر این ادعاها درست پنداشته شوند، آنگاه می‌توان بلورها را منشأ الهام در علم هندسه دانست.

تاریخ این شاخه از علوم را می‌توان به سه دوره تقسیم کرد:

الف- دوره‌های کهن (Classic)، یعنی از ارسطو (۳۸۴-۳۲۲ قبل از میلاد) تا ایسل^۱ (۱۷۹۰-۱۷۳۶) که در طول آن، به ویژه بعد از ۱۶۰۰ میلادی، بلور به عنوان یک هسته‌ی قابل توجه علمی مطرح بود، و کم‌کم به عنوان مشخصه بنیادی و با اهمیت به رسمیت شناخته شد. از آن زمان فرضیه‌هایی درباره ساختار بلور و نیز سرشت فیزیکی اجزای تشکیل دهنده آن ارائه شده است. بنابراین ساختار بلورها با مسئله شکل‌بندی مواد ارتباط تنگاتنگی پیدا کرد.

ب- از ۱۷۸۴ تا ۱۹۱۲ میلادی، یعنی از دوران هوی^۲ (۱۸۲۲-۱۷۴۳) تا دستیابی به ۲۳۰ گروه فضایی و کشف پراش پرتو X. در این سال‌ها جهان علم شاهد گسترش گروه‌های تقارن، نما و نظریه تناوبی در ساختار داخلی بلور بوده است.

پ- از ۱۹۱۲ تا زمان حاضر، تا پیش از کشف پرتو X در برخی از مراکز علمی شبکه فضایی تنها به عنوان یک مفهوم ریاضی ناب مورد توجه قرار می‌گرفت، اما پس از کشف پرتو X اهمیت فیزیکی آن‌ها کاملاً تایید شد. در ۸۰ سال گذشته بلورشناسی به ویژه شاخه هندسی آن در بسیاری جهات توسعه یافته است.

¹ Rome de L, Isle

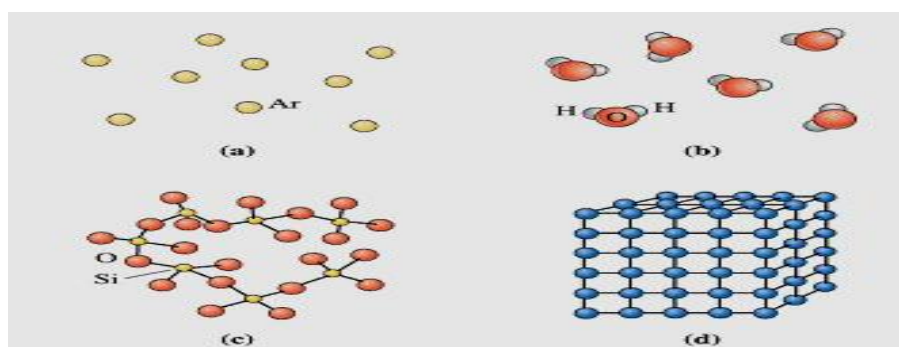
² Haüy

۱-۲- بلورها و اشعه ایکس

در سال ۱۹۱۲ میلادی امکان مطالعه ساختمان داخلی کریستال‌ها در مقیاس اتمی با کاربرد اشعه ایکس فراهم گردید. ماکس فون لاو^۱ نشان داد که کریستال‌ها، اشعه ایکس را به شکل منظمی متفرق می‌کنند. تفرق اشعه ایکس مشخص می‌کند که یک کریستال، شکل منظمی از اتم‌ها یا مولکول‌ها را در الگویی مرتب نشان می‌دهد و ذرات سازنده‌ی کریستال‌ها با تشکیل صفحاتی به صورت منظم بر روی یکدیگر قرار گرفته‌اند. امروزه از روش تفرق اشعه ایکس جهت بررسی خواص کریستال‌ها از جمله، میزان کریستالی بودن مواد، ساختار کریستالی، اندازه کریستال‌ها و پارامترهای شبکه‌ای استفاده می‌شود [۱]. همچنین با استفاده از اشعه ایکس، اندازه‌گیری فواصل بین صفحات کریستالی با دقت زیادی ممکن گردیده است [۲].

۱-۳- بلورشناسی

در حالت کلی ماده در سه حالت مختلف جامد، مایع و گاز قرار دارد. در این حالت‌ها، ماده سه حالت کلی نظم را می‌تواند به خود بگیرد. آرایش بی‌نظم، آرایش منظم در برد کوتاه^۲ و آرایش منظم در برد بلند^۳. شکل ۱-۱ ساختارهای اتمی و یونی مواد با درجه نظم مختلف را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود شکل a ساختار بی‌نظم، شکل b و c ساختارهای منظم در برد کوتاه و شکل d ساختار در برد بلند را نشان می‌دهند [۲].



شکل ۱-۱ درجات مختلف نظم در مواد مختلف [۲]

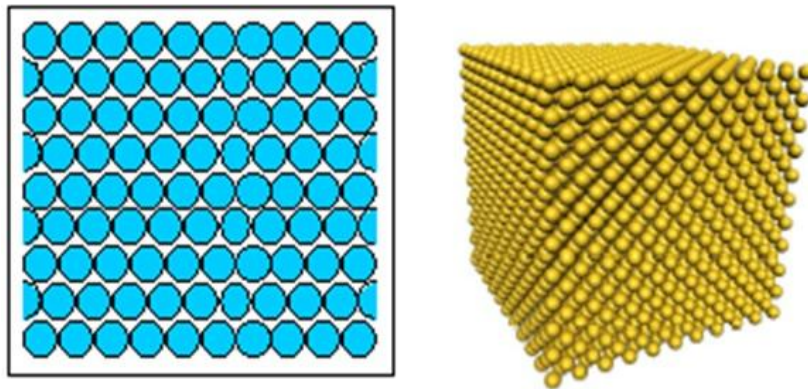
¹ Max von Laue

² Short Range Order or SRO

³ Long-Range Order or LRO

۴-۱- مواد بلور

جامد بلوری شکل جامدی از ماده است که در آن اتمها یا مولکولها در یک طرح تکرار شونده معین در سه بعد مرتب شده‌اند. در واقع در بلورها اتمها با الگویی که در سه بعد تکرار می‌شود، کنار هم قرار می‌گیرند. به این آرایش منظم سلول واحد گفته می‌شود. علاوه بر مشخص بودن شکل هندسی، خواص آنیزوتروپی^۱ (تفاوت خواص در جهات مختلف بلورها) و تقارن از خصوصیات دیگر بلورها است. مواد بلوری به دو دسته مواد تک بلور و چندبلور تقسیم می‌شود. تک بلور ساختار اتمی دارد که به طور منظم در کل حجم تکرار می‌شود. تک بلورها در بهترین حالت ممکن هستند و درجه نظم بالایی دارند و تکرار هندسی منظم آنها در تمامی حجم ماده دیده می‌شود. شکل ۱-۲ چگونگی قرارگیری اتمها در یک تک بلور را نشان می‌دهد [۳].



شکل ۱-۲ چگونگی قرارگیری اتمها در یک تک بلور [۳]

جامد چند بلوری ماده‌ای است که از کنار هم قرار گرفتن تعداد زیادی تک بلور متفاوت به نام کریستالیت یا دانه ایجاد شده است.

شایان توجه است که نمی‌توان ساختاری ساخت و ادعا کرد این ساختار یک کریستال کامل است. عیوب کریستالی، عیوب حرارتی و ناخالصی‌ها از جمله عیوبی هستند که نظم کریستالی را کاهش می‌دهند. یک کریستال کامل کاملاً مات است و این در حالی است که با تغییر میزان

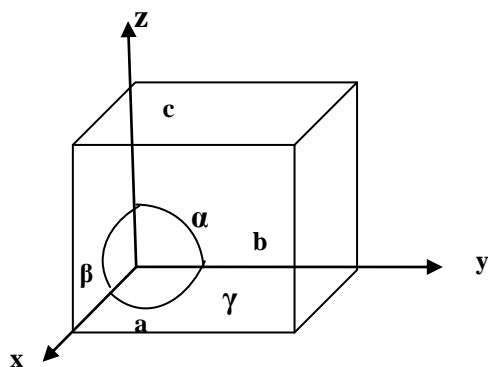
¹ Anisotropic properties

فصل اول: مقدمه

کریستالی، شفافیت کریستال تغییر می‌کند. همچنین تقارن نیز از پارامترهای مهم یک کریستال است که تاثیر فراوانی در خواص ماده دارد [۳,۴].

۱-۵- ساختمان داخلی بلورها

یک بلور در جهات مختلف دارای خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوتی است (آنیزوتروپ). به عبارت دیگر در جهات مختلف میزان انتقال گرما و الکتریسته در آن متفاوت و در یک جهت خاص، یکسان است (ایزوتروپ). جامد همگن بلوری در سه بعد از نظر ساختمان داخلی منظم است و ذرات سازنده در اثر تعادلی که ناشی از صفر شدن برآیند نیروهای جاذبه (بین ذرات غیر هم نام) و دافعه (بین ذرات هم نام) است، منظم در کنار هم قرار گرفته‌اند، در این حالت کمترین انرژی داخلی بر شبکه حکم فرما خواهد بود. کوچکترین واحد تکرار شونده در شبکه، سلول واحد نامیده می‌شود که بوسیله سه ثابت شبکه a و b و c (طول محوره‌های اصلی) و زاویه‌های α ، β و γ ، که این محورها را از یکدیگر جدا می‌کنند، مشخص می‌شود. بنا به تعریف زاویه α بین محوره‌های اصلی b و c ، زاویه β بین محوره‌های a و c و زاویه γ بین محوره‌های a و b می‌باشد (شکل ۱-۳).



شکل ۱-۳ سلول واحد، سیستم‌ها و پارامترهای آن [۵]

با تغییر مقادیر طول بردارها و زاویای بین آن‌ها می‌توان اشکال مختلفی را تعریف نمود.

۱-۶- قوانین اصلی بلورشناسی

هنگام مطالعه بلورها چند اصل مهم وجود دارند که مهمترین آنها عبارتند از:

۱-۶-۱- اصل ثابت بودن زوایای دو سطحی

ساختمان شبکه‌ای بلورها متأثر از ترکیب شیمیایی آنهاست. لذا در بلورهای یک ماده شیمیایی معین، موقعیت سطوح شبکه‌ها ثابت و مخصوص به همان ماده است. یعنی در بلورهای یک ماده شیمیایی معین، زاویه بین هر دو سطح خارجی بلور در تمام بلورهای آن ماده ثابت است.

۱-۶-۲- اصل تقارن

اجسام متبلور که دارای یک سیستم تبلور هستند، تقارن دارند. البته نوع و میزان تقارن به سیستم تبلور آن بستگی دارد. تقارن یکی از خصوصیات اصلی بلورها و عبارت است از: تکرار اجزای شبیه و نظیر در یک بلور، هنگام دوران بلور حول عناصر تقارن. به اجزای متقارن و نقاط هندسی که نسبت به آنها تکرار، انطباق یا جانشینی اجزا صورت می‌گیرد، عناصر تقارن می‌گویند [۶,۷].

۱-۷- هفت سیستم بلور شناسی

مواد متبلور می‌توانند در طبیعت فقط به هفت شکل آراستگی اتمی حاصل نمایند. به عبارت دیگر سلول‌های اولیه می‌توانند هفت حالت به خود بگیرند که بیشتر از این هفت حالت امکان پذیر نخواهد بود [۸]. جهت بررسی دقیق‌تر باید بلور را به صورت سه بعدی آنالیز کرد. شکل زیر سلول‌های واحد هفت نوع شبکه بلوری در حالت سه بعدی را نشان می‌دهد [۴]. مشخصات هر شبکه همراه با نام آن‌ها در جدول ۱-۱ آورده شده است.

فصل اول: مقدمه

جدول ۱-۱ مشخصات هفت سیستم بلوری

مکعبی	Cubic	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
تتراگونال	Tetragonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
اورتورومبیک	Orthorhombic	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
رومبوهدرال (تری گونال)	Rhombohedral (Trigonal)	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
هگزاگونال (تری گونال)	Hexagonal (Trigonal)	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
مونوکلینیک	Monoclinic	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
تری کلینیک	Triclinic	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

۱-۸- شبکه‌های بلوری

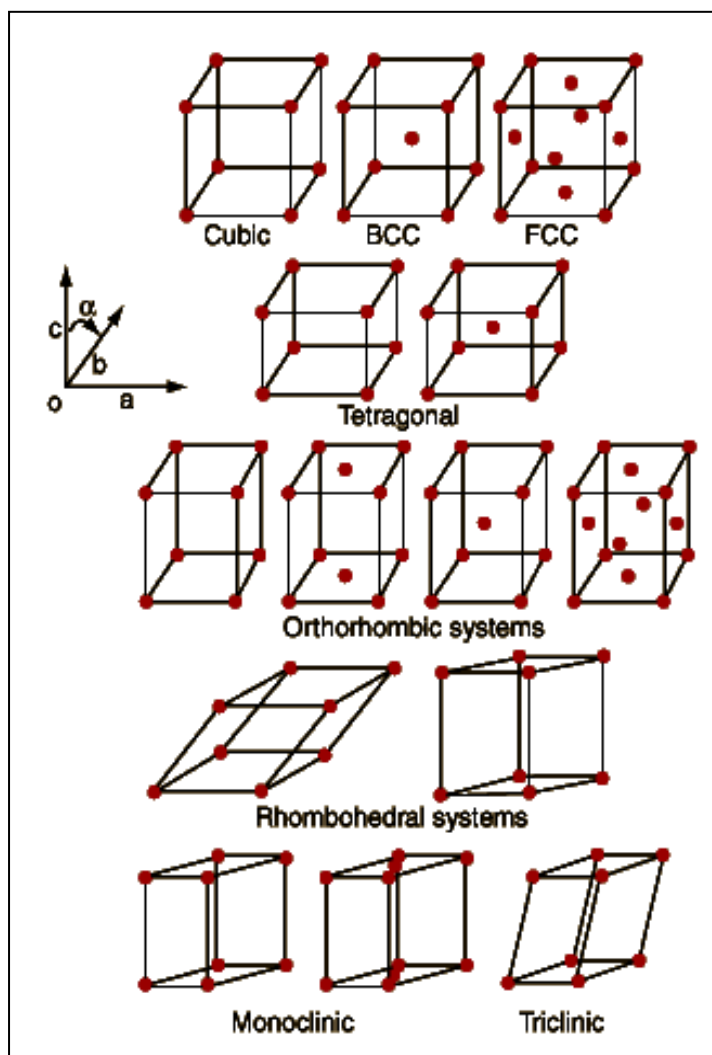
در کریستالوگرافی تنها خواص هندسی بلور مورد توجه قرار می‌گیرند، بنابراین محل هر اتم یا مولکول با یک نقطه هندسی در محل تعادلی آن اتم یا مولکول نشان داده می‌شود. شبکه بلوری دسته نامحدودی از نقاط در فضا است که در مکان‌های مشخص به شکل تناوبی تکرار می‌شوند. با قرار دادن یک اتم، گروه‌هایی از اتم‌ها یا مولکول‌ها در نقاط شبکه بلوری، یک ساختار بلوری به دست می‌آید. به هر اتم، گروه اتمی یا مولکولی که در نقاط دیگر تکرار می‌شود پایه^۱ اطلاق می‌گردد. شبکه نیز دسته‌ای از نقاط در فضا است که هر نقطه محیط متشابهی دارد. ساده‌ترین واحد بلور همانطور که بیان شد، سلول واحد نامیده می‌شود. فضا از تکرار سلول‌های واحد پر

¹ Basis

² Lattice

فصل اول: مقدمه

می‌شود و شبکه را پدید می‌آورد. شبکه‌های بلوری به دو دسته معروف شبکه‌های براوه و شبکه‌های غیر براوه تقسیم می‌شوند. شبکه براوه (شکل ۱-۴) دسته نامحدودی از نقاط مجزا با جهت‌گیری و ترتیب که دقیقاً مشابه به نظر می‌رسند است و از هر نقطه‌ای که آن را نگاه می‌کنیم انگار در همان نقطه اول قرار گرفته‌ایم. در شبکه‌های براوه همه اتم‌ها از یک نوع و همه نقاط شبکه معادل هم هستند. در شبکه‌های غیر براوه نه تنها ترتیب بلکه جهت‌گیری‌ها متفاوت است، به عبارت دیگر در شبکه‌های غیر براوه چند نوع اتم قرار دارد که برخی مکان‌های شبکه با هم متمایزند. در واقع شبکه‌های غیر براوه تلفیق دو یا چند شبکه براوه هستند [۴, ۹].



شکل ۱-۴ چهارده شبکه براوه [۴]