



مدرسارن شریف

فصل اول

«کریستالوگرافی»

مقدمه

محورهای اصلی علم و مهندسی مواد را می‌توان در ۴ بخش زیر خلاصه کرد:

۱- فرآیند ۲- ساختار ۳- خواص ۴- کارآیی

در واقع علم و مهندسی مواد ارتباط این ۴ عنصر را جستجو و بررسی می‌کند. در علم و مهندسی مواد به این نکته توجه می‌شود که اغلب خواص مواد علاوه بر ترکیب شیمیایی به ساختار درونی آن‌ها نیز بستگی دارد. در واقع با اطلاع از ترکیب شیمیایی یک آلیاژ نمی‌توان در مورد خواص آن اظهار نظر قطعی کرد، زیرا باید ویژگی‌های ساختاری آن نیز مشخص باشد.

به طور خلاصه، ساختار یک ماده به نحوه‌ی چینش اجزای درونی آن مرتبط است. بسته به ابعاد جزء سازنده‌ی درونی ماده، می‌توان سطوح مختلف ساختاری را برای هر ماده تعریف کرد. جدول زیر سطوح مختلف ساختاری مواد را نشان می‌دهد.

مقیاس (m)	مشخصه‌ی ساختاری
10^{-15}	ساختار هسته‌ای
10^{-10}	ساختار اتمی
10^{-9}	ساختار کریستالی یا شیشه‌ای
10^{-9}	ساختار محلول جامدها و ترکیبات
10^{-8}	ساختار دانه و مرزدانه‌ها
10^{-7} تا 10^{-3}	اندازه و شکل دانه‌ها و فازها
10^{-5} تا 10^{-2}	تجمع دانه‌ها و فازها
10^{-3} تا 10^3	سازه‌ی مهندسی

محدوده‌ی قابل کنترل برای تغییر خواص

محدوده‌ی قابل کنترل برای تغییر خواص ماده در جدول مشخص شده است. همان طور که ملاحظه می‌شود، کوچک‌ترین واحد ساختاری قابل کنترل برای تغییر در خواص، ساختار کریستالی یا شیشه‌ای (نحوه‌ی چیده‌شدن اتم‌ها در یک کریستال یا در یک ماده‌ی آمورف) است. ساختار هسته‌ای و ساختار اتمی، اگرچه خواص ذاتی و بنیادی مواد را توضیح می‌دهند، اما قابل کنترل برای بشر نیستند.

نکته ۱: خواص مواد را از نظر حساسیت به ریزساختار، می‌توان به دو دسته تقسیم کرد:

۱- خواص غیرحساس به ریزساختار: برخی از خواص مانند دانسیته، مدول یانگ، ضریب انبساط حرارتی و گرمای ویژه‌ی مواد تقریباً مستقل از ریزساختار ماده است. برای مثال دانسیته و مدول یانگ آهن خالص، فولاد کم‌کربن، فولاد پرکربن، فولادهای کم‌آلیاژی و فولادهای پرآلیاژی به ترتیب در محدوده‌ی $7/8 - 7/9 \text{ gr/cm}^3$ و $215 - 203 \text{ GPa}$ است.

۲- خواص حساس به ریزساختار: برخی خواص مانند استحکام تسلیم، استحکام کششی، شکل‌پذیری، چقرمگی شکست، استحکام خستگی و استحکام خزشی به شدت تابع تاریخچه‌ی عملیات حرارتی و یا مکانیکی آن‌هاست و در نتیجه شدیداً تابع ریزساختار هستند. در واقع در این موارد، با داشتن ترکیب شیمیایی نمی‌توان خواص ماده را حدس زد.



ساختار اتمی و پیوندهای بین اتمی

۱- ساختار اتمی

ساختار اتم متشکل از پروتون و نوترون در هسته و الکترون‌های در حال حرکت به دور هسته است. پروتون و الکترون هر دو از نظر الکتریکی باردار هستند. بار پروتون مثبت و بار الکترون منفی و مقدار آن در هر دو مورد برابر 1.6×10^{-19} است. اتم‌ها در حالت عادی خنثی هستند. در اینجا به چند تعریف مقدماتی اشاره می‌شود:

۱- عدد اتمی: (Z) تعداد پروتون‌های اتم

۲- عدد جرمی: (A) مجموع تعداد پروتون‌ها و نوترون‌ها در هسته ($A=Z+N$) که در آن؛ N تعداد نوترون‌ها، Z عدد اتمی و A عدد جرمی ایزوتوپ‌های یک عنصر دارای عدد اتمی یکسان اما تعداد نوترون‌ها متفاوت هستند.

۳- عدد آواگادرو (N_A): یک مول از هر ماده، 6.02×10^{23} اتم (عدد آواگادرو) دارد.

۲- ساختار الکترونی

در اینجا تنها به ذکر چند نکته‌ی مهم در این مورد می‌پردازیم:

۱- **والانس (n)**: به تعداد الکترون‌های لایه آخر (لایه‌های S و P آخر) والانس گفته می‌شود که نقش تعیین‌کننده‌ای در خواص شیمیایی ماده دارند، زیرا الکترون‌های لایه‌ی آخر در واکنش‌های شیمیایی و پیوند برقرار کردن با دیگر اتم‌ها شرکت می‌کنند. براساس تعداد الکترون‌های لایه‌های S و P آخر می‌توان عناصر را به ۴ دسته تقسیم کرد:

n	۱، ۲، ۳	۴	۵، ۶، ۷	۸
نوع عنصر	فلز	شبه فلز	نافلز	گاز خنثی

نکته ۲: معمولاً اتم‌ها حین واکنش شیمیایی و برقراری پیوند اتمی تلاش دارند که به آرایش گاز پایدار برسند.

۲- **الکترونگاتیویته:** معیاری برای تمایل به جذب الکترون است. فلزات تمایل زیادی به از دست دادن الکترون دارند و در نتیجه الکتروپوزیتر هستند. نافلزات تمایل زیادی به جذب الکترون دارند و در نتیجه الکترون‌گاتیو هستند.

۳- **جدول تناوبی:** براساس آرایش الکترونی تمام عناصر در یک جدول تناوبی آرایش یافته‌اند. در واقع جدول تناوبی راهنمای مناسبی برای اطلاع از خواص شیمیایی عناصر مختلف است.

نکته ۳: از آن جایی که عناصر موجود در هر گروه، تعداد الکترون والانس برابر دارند؛ بنابراین قابل انتظار است که دارای خواص شیمیایی و فیزیکی یکسان باشند.

پیوندهای بین اتمی

تمام مواد از قرار گرفتن اتم‌ها در کنار هم تشکیل شده‌اند. برای درک برخی خواص مواد، نیاز به مطالعه‌ی نحوه‌ی پیوند بین اتم‌ها داریم. در این قسمت به بررسی مختصر نیروهایی که موجب نگه داشته شدن اتم‌ها در کنار هم می‌شود (پیوندهای بین اتمی) پرداخته شده است. اتم‌ها به دو صورت با همدیگر پیوند دارند:

۱- پیوندهای اولیه (اصلی): این پیوندها شامل پیوندهای یونی، کووالانسی و فلزی هستند و به طور کلی پیوندهایی قوی هستند.

۲- پیوندهای ثانویه (فرعی): این پیوندها شامل پیوندهای واندروالس و هیدروژنی هستند که نسبتاً ضعیف هستند. در این پیوندها انتقال و اشتراک الکترون وجود ندارد. البته قابل ذکر است که پیوندهای بین اتمی موجود در برخی موارد ممکن است خالص نباشد و ترکیبی از پیوندهای فوق باشد.

پیوندهای اولیه

۱- پیوند فلزی

این نوع پیوند در فلزات و آلیاژهای آن‌ها یافت می‌شود.

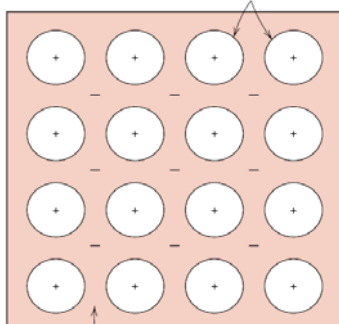
مهم‌ترین مشخصه ساختار الکترونی فلزات؛ دارا بودن الکترون آزاد است. (این الکترون‌ها تعلق خاص به هسته ندارند).

مدلی که برای تشریح پیوند فلزی ارائه شده است بر اساس مدل «دریای الکترون آزاد» است. در این مدل، دریایی از الکترون‌های آزاد که تعلق خاص به یک اتم ندارند، در نظر گرفته می‌شوند و الکترون‌های غیروالانس باقیمانده و هسته‌ی اتم، تشکیل هسته‌های یونی را می‌دهند. هسته‌های یونی دارای بار خالص مثبت هستند و در این دریای الکترون شناورند.

عامل اتصال اتم‌ها در پیوند فلزی، جاذبه‌ی بین الکترون‌های آزاد و هسته‌ی یونی با بار مثبت است.

ماهیت پیوند فلزی، غیرجهت‌دار است.

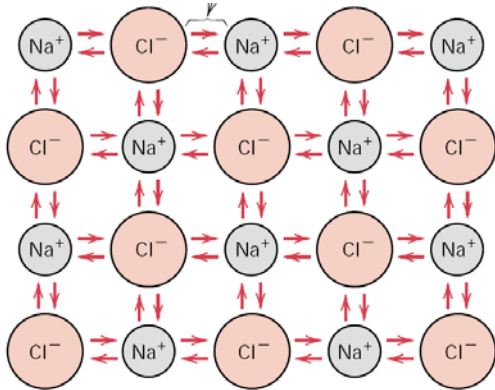
هسته‌های یون



دریای الکترون‌های آزاد

به کمک این مدل می‌توان برخی خواص فلزات را توضیح داد:
 الف - فلزات رسانای خوب الکتریسیته هستند. ماده‌ای رسانای خوب الکتریسیته است که بتواند با کمترین مقدار پتانسیل اعمالی، حامل‌های بار الکتریکی (الکترون و یا یون) را از خود عبور دهد. مواد فلزی به علت دارا بودن الکترون‌های آزاد، به نیروی محرکه‌ی کمی برای انتقال جریان نیاز دارند.
 ب - فلزات دارای شکل‌پذیری خوبی هستند. این امر با توجه به مکانیزم‌های تغییر فرم و غیرجهت‌دار بودن ماهیت پیوند فلزی قابل توضیح است.

۲- پیوند یونی



این نوع پیوند در ترکیباتی یافت می‌شود که متشکل از یک عنصر الکترونگاتیو و یک عنصر الکتروپوزیتیو باشند.

پیوند اتمی حاکم در بسیاری از سرامیک‌ها، یونی است.

پیوند یونی براساس انتقال و دادوستد الکترون است.

در این پیوند، عنصر فلزی با دادن الکترون‌های لایه ظرفیت خود به عنصر نافلز موجب می‌شود تا هر دو عنصر به آرایش گاز پایدار که در NaCl است، برسد و فلز به یون مثبت (کاتیون) و نافلز به یون منفی (آنیون) تبدیل می‌شود. یک مثال کلاسیک در شکل رو به‌رو به طور شماتیک نشان داده شده است (پیوند یونی در NaCl).

عامل پیوند، جاذبه الکترواستاتیکی بین یون مثبت و یون منفی است.

ماهیت پیوند یونی، غیرجهت‌دار است. یعنی مقدار پیوند در تمام جهات اطراف یک اتم یکسان است.

برخی خواص مواد با پیوند یونی:

الف - مواد با پیوند یونی، رسانایی الکتریکی خوبی ندارند. در این مواد عامل رسانایی، حرکت یون‌هاست (الکترون آزاد وجود ندارد). از آن جایی که اندازه‌ی بزرگ‌تر یون‌ها و نیروی دافعه‌ی بین بارهای هم‌نام مانع حرکت آزادانه‌ی یون‌ها می‌شود، این مواد رسانایی خوبی ندارند.

ب - مواد با پیوند یونی شکل‌پذیری خوبی ندارند. این امر با توجه به مکانیزم تغییر فرم و قرارگرفتن بارهای هم‌نام در کنار هم و ایجاد نیروی دافعه بین آن‌ها حین تغییر فرم قابل توضیح است.

کج مثال ۱: در بلور فلورین (CaF_2) کلیواژ در صفحه (۱۱۱) قرار دارد، زیرا:

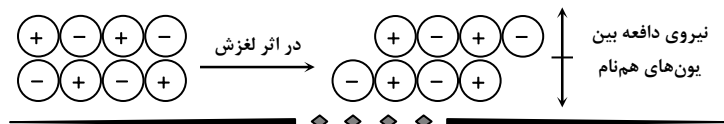
(۱) در این صفحه نیروی ضعیف واندروالس نیروی جاذبه را تشکیل می‌دهد.

(۲) فاصله در بین صفحات (۱۱۱) بیشتر از فاصله در صفحات دیگر می‌باشد.

(۳) تراکم اتم‌ها در روی این صفحه کمتر می‌باشد.

(۴) در این سطح یون‌های هم‌نام در مقابل یکدیگر قرار می‌گیرند و یکدیگر را دفع می‌کنند.

پاسخ: گزینه «۴» ساختمان بلوری فلورین (CaF_2) به صورت شبکه FCC است. در شبکه FCC صفحات لغزش اصلی صفحات (۱۱۱) است و در جهت $\langle 110 \rangle$ لغزش می‌کند. صفحات (۱۱۱) که متراکم‌ترین صفحات شبکه FCC است دارای کمترین فاصله نسبت به هم هستند و همچنین در بلور CaF_2 اتم‌ها به صورت پیوند یونی با هم ارتباط دارند که در اثر لغزش باعث می‌شود، یون‌های هم‌نام در این صفحات مقابل هم قرار گرفته و شکست کلیواژ رخ دهد.



۳- پیوند کووالانسی

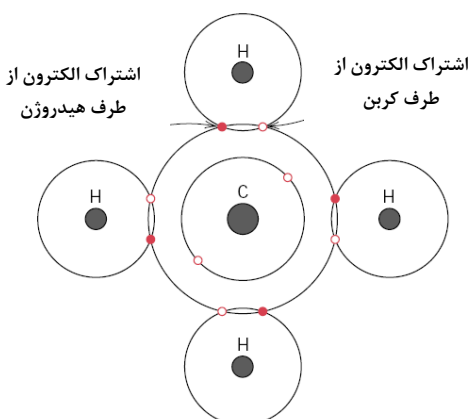
پیوند کووالانسی به شکل خالص در الماس، سیلیکون و ژرمانیوم یافت می‌شود.

پیوند کووالانسی پیوند اتمی حاکم در سرامیک‌های سیلیکاتی و شیشه‌هاست.

پیوند اتمی برخی فلزات با نقطه ذوب بالا (تنگستن، مولیبدن، تانتالم و ...) علاوه بر پیوند فلزی، ماهیت کووالانسی نیز دارد.

پیوند کووالانسی در پلیمرها نیز وجود دارد.

پیوند کووالانسی براساس شراکت الکترون است. در این پیوند نزدیک شدن دو هسته موجب ایجاد یک اوربیتال الکترونی جدید شامل الکترون‌های به شراکت گذاشته شده می‌شود. در این حالت الکترون‌های به اشتراک گذاشته شده را می‌توان متعلق به هر دو اتم دانست. شکل رو به‌رو به طور شماتیک نحوه‌ی پیوند کووالانسی در CH_4 را نشان می‌دهد.



یکی از مهم‌ترین مشخصه‌های پیوند کووالانسی جهت‌دار بودن آن است. به علت نامتقارن بودن شکل اوربیتال‌ها، قدرت پیوند بین اتمی در تمام جهات یکسان نیست.



برخی ویژگی‌های مواد با پیوند کووالانسی عبارتند از:

الف - مواد با پیوند کووالانسی عایق خوب الکتریسیته هستند. این مواد به علت فقدان الکترون آزاد و ذرات یونی رسانای الکتریسیته نیستند.

ب - مواد کووالانسی به علت ماهیت جهت‌دار بودن پیوندشان شکل‌پذیری ضعیفی دارند.

در واقع تغییر فرم این مواد مستلزم تغییر در زاویه‌ی پیوندی آن‌هاست و تغییر در زاویه پیوندی یعنی شکست پیوند کووالانسی.

۴- پیوندهای ترکیبی (هیبریدی)

در بسیاری از مواد، پیوندهای بین اتمی ترکیبی از پیوندهای اولیه یا ثانویه است.

پیوند اتمی موجود در ترکیبات بین فلزی، ترکیبی از پیوند فلزی و پیوند یونی است. هرچه اختلاف الکترونگاتیویته دو فلز بیشتر باشد، سهم پیوند یونی بیشتر است.

پیوند اتمی موجود در سرامیک‌ها، ترکیبی از پیوند یونی و کووالانسی است. سهم پیوند کووالانسی در سرامیک‌ها را می‌توان به صورت رابطه‌ی زیر بیان کرد:

$$\text{سهم پیوند کووالانسی} = \exp \left[-\frac{0.25 \Delta E}{\Delta E} \right]$$

که در آن ΔE ؛ اختلاف الکترونگاتیویته است. هرچه ΔE کمتر باشد، سهم پیوند کووالانسی بیشتر خواهد بود.

نوع پیوند در بسیاری از مواد مولکولی، ترکیبی از پیوند کووالانسی و پیوندهای ثانویه (واندروالسی و هیدروژنی) است.

انرژی پیوندی

منحنی تغییرات نیروی بین اتمی (انرژی پتانسیل) بر حسب فاصله‌ی بین اتمی

اصول پیوند اتمی را می‌توان با در نظر گرفتن اندرکنش دو اتم ایزوله که از فاصله‌ای دور به هم نزدیک می‌شوند، درک کرد. در فواصل دور، اندرکنش‌ها قابل صرف نظر کردن است. با نزدیک شدن دو اتم به هم، دو نوع نیروی بین اتمی (جاذبه و دافعه) بین آن‌ها شکل می‌گیرد. مقدار آن‌ها تابعی از فاصله‌ی بین اتمی است. شکل رو به‌رو تغییرات نیروی جاذبه، دافعه و نیروی خالص بین دو اتم بر حسب فاصله را نشان می‌دهد.

منشأ نیروی جاذبه، بستگی به نوع پیوند اتمی دارد و به طور کلی ناشی از نیروی بین مراکز با بار مثبت و منفی است. منشأ نیروی دافعه، هم‌پوشانی الکترون‌های لایه‌ی آخر است که با هر چه بیشتر نزدیک شدن دو اتم، مقدار آن افزایش می‌یابد. نیروی خالص بین دو اتم مجموع این دو نیرو است، $(F_N = F_A + F_R)$ ، (هنگامی که $F_N = 0$ است، اتم‌ها در فاصله $r = r_0$ در حالت تعادل قرار دارند).

منحنی تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب فاصله بین اتمی

انرژی پتانسیل بین دو اتم به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر به نیروی بین اتمی مرتبط

$$E = -\int F dr$$

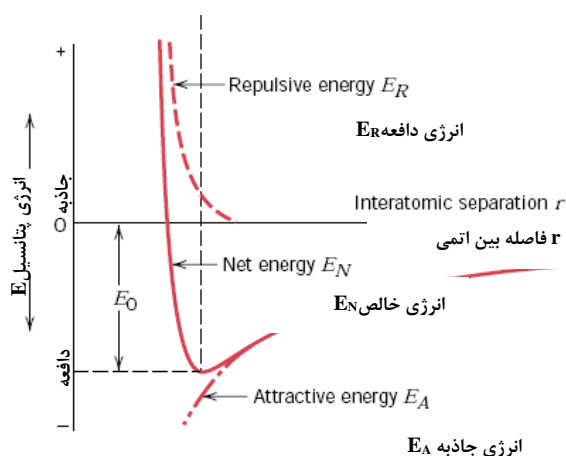
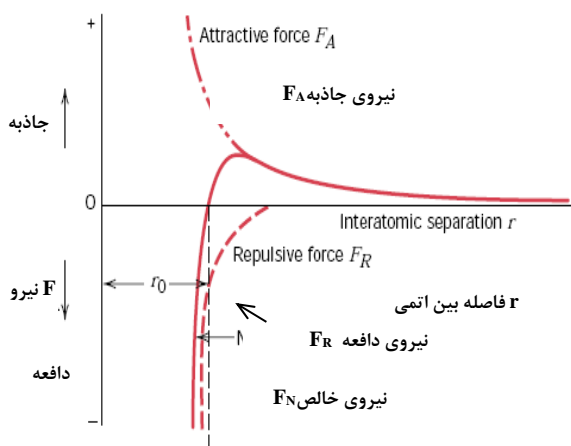
می‌شود: شکل رو به‌رو تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب فاصله را نشان می‌دهد.

مهمترین مشخصه‌ی منحنی انرژی فاصله، نقطه مینیمم آن است. انرژی متناظر با فاصله‌ی تعادلی r_0 انرژی پیوند (E_0) است.

انرژی پیوندی (E_0) حداقل انرژی مورد نیاز برای جدا کردن و یا شکستن پیوند است. انرژی پیوندی تابع نوع پیوند بین اتمی است.

نکته ۴: برخی خواص مواد وابسته به انرژی پیوندی و شکل منحنی انرژی

فاصله عبارت است از:



نوع پیوند	انرژی پیوندی (KJ)
یونی	۶۲۵-۱۵۵۰
کووالانسی	۵۲۰-۱۲۵۰
فلزی	۱۰۰-۸۰۰
واندروالسی	< ۴۰

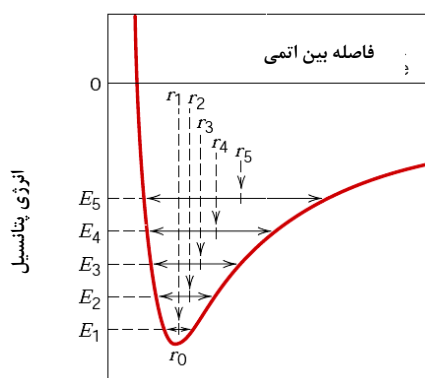
۱- هرچه انرژی پیوندی بیشتر باشد، دمای ذوب بیشتر است.

۲- در مقیاس اتمی، مقدار مدول یانگ تابعی از مقاومت پیوند اتمی در برابر تغییر فاصله‌ی تعادلی اتم‌هاست. در واقع مدول یانگ متناسب است با شیب نمودار نیروی بین اتمی - فاصله در نقطه‌ی r_0 :

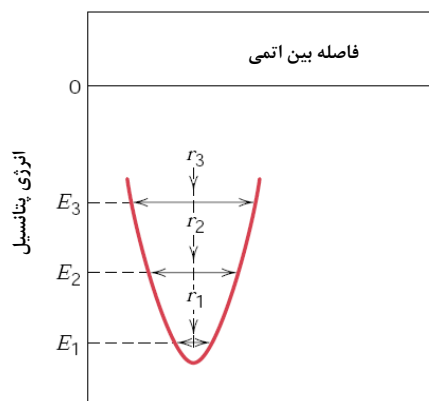
$$E\alpha\left[\frac{df}{dr}\right]_{r=r_0}$$

۳- ضریب انبساط حرارتی (α): وابسته به شکل منحنی انرژی فاصله است. هرچه مقاومت پیوند اتمی در برابر تغییر فاصله‌ی بین اتمی در اثر تغییر دما بیشتر باشد، ضریب انبساط حرارتی کمتر خواهد بود. انبساط حرارتی ناشی از انحنای نامتقارن قسمت پایین منحنی انرژی فاصله است. در صورتی که منحنی متقارن باشد با افزایش دما؛ فاصله تعادلی ثابت می‌ماند (یعنی $a = 0$). ولی هر چه منحنی نامتقارن‌تر باشد با افزایش دما فاصله‌ی تعادلی و در نتیجه α افزایش می‌یابد.

شکل زیر تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب فاصله بین اتمی را نشان می‌دهد. نمودار شکل یک منحنی نامتقارن است. همانطور که ملاحظه می‌شود، فاصله‌ی بین اتمی با افزایش دما افزایش می‌یابد. با حرارت دادن، فاصله‌ی تعادلی بین اتمی از r_0 به r_1 ، r_2 ، r_3 ، r_4 و به همین ترتیب تا r_5 افزایش می‌یابد.



شکل زیر نمودار یک منحنی متقارن است که با افزایش دما، فاصله‌ی تعادلی اتم‌ها تغییر نمی‌کند و بنابراین ضریب انبساط حرارتی برابر صفر است.



نکته ۵: به طور کلی با افزایش انرژی پیوندی، دمای ذوب و مدول یانگ افزایش می‌یابد و ضریب انبساط حرارتی کاهش می‌یابد.

مثال ۲: ضریب انبساط طولی مواد در رابطه با افزایش درجه حرارت بستگی به

- (۱) انرژی پیوند بین اتم‌ها و ترمودینامیک تولید جاهای خالی در رابطه با درجه حرارت دارد.
- (۲) انرژی پیوند بین اتم‌ها در رابطه با درجه حرارت دارد.
- (۳) ترمودینامیک تولید جاهای خالی در رابطه با درجه حرارت دارد.
- (۴) تغییر سطوح انرژی الکترون در رابطه با نوسان اتم‌ها با درجه حرارت دارد.

پاسخ: گزینه «۲» ضریب انبساط طولی مواد به انرژی پیوند بین اتم‌ها در رابطه با درجه حرارت دارد. هر چه انرژی پیوند بین اتم‌ها بیشتر، چاه انرژی پیوند متقارن‌تر بوده و در نتیجه ضریب انبساط طولی کمتر خواهد بود.



ساختار کریستالی مواد

مواد را از نظر نظم اتمی می‌توان به سه دسته تقسیم کرد:

۱- مواد بی‌نظم: مثل گازها

۲- مواد بانظم بلند دامنه (کریستال): در این مواد (کریستال‌ها)، اتم‌ها در فاصله‌های طولانی اتمی دارای نظم تکرارشونده یا آرایش پریودی هستند. در واقع طی انجماد، اتم‌ها خود را در یک الگوی سه‌بعدی تکرارشونده آرایش می‌دهند به صورتی که هر اتم با نزدیک‌ترین اتم همسایه پیوند دارد. در این مواد، عدد همسایگی برای اتم‌های بالک در سرتاسر کریستال حفظ می‌شود.

۳- مواد با نظم کم دامنه (آمورف): در این مواد، نظم اتمی تا چند فاصله‌ی اتمی حفظ می‌شود و عدد همسایگی متغیر است.

یکی از روش‌های تهیه مواد آمورف فلزی، سریع سرد کردن مذاب آن‌ها با سرعت‌هایی در حدود $10^6 \frac{K}{sec}$ است. در این سرعت‌های بالای انجماد، اتم‌ها فرصت کافی برای آرایش منظم در موقعیت‌های مشخص اتمی را ندارند.

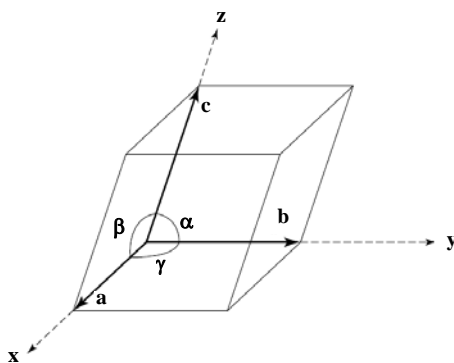
نکته ۶: در بحث زیر، اتم‌ها یا یون‌ها به صورت کره‌های جامد با قطر مشخص در نظر گرفته می‌شوند.

در توصیف ساختارهای کریستالی از کوچکترین جزء تکرارشونده (سلول واحد) استفاده می‌شود.

سیستم‌های بلوری (سیستم‌های تبلور)

از آنجا که ساختارهای بلوری مختلفی وجود دارند، گاهی راحت‌تر است که آن‌ها را بر مبنای شکل سلول واحد و یا آرایش اتمی گروه‌بندی کنیم. این روش فقط بر پایه‌ی هندسه‌ی سلول واحد یعنی شکل سلول واحد (متوازی‌السطوح) و بدون توجه به موقعیت اتم‌ها در نظر گرفته می‌شود. به گونه‌ای که مبدا در یکی از گوشه‌های سلول واحد و با جهات X، Y و Z سلول واحد است. در این روش یک سیستم مختصاتی بر روی یکی از سه لبه‌ی متوازی‌السطوح مجاور مبدأ منطبق می‌گردد. شکل هندسی یک سلول واحد از محورهای مختصات X، Y و Z به طور کامل توسط ۶ پارامتر تعیین می‌شود:

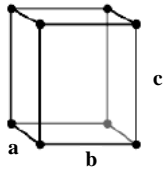
- ۱- طول بردار در امتداد محور X (a)
- ۲- طول بردار در امتداد محور Y (b)
- ۳- طول بردار در امتداد محور Z (c)
- ۴- زاویه‌ی بین بردار a و c (α)
- ۵- زاویه‌ی بین بردار a و b (β)
- ۶- زاویه‌ی بین بردار a و b (γ)



بر این اساس هفت تلفیق احتمالی از a، b، c، α ، β و γ وجود دارد که هر کدام یک از مکعبی، تتراگونال، هگزاگونال، اورتورومبیک، رومبوهدرال، مونوکلینیک و تری کلینیک. ارتباط پارامترهای شبکه و نمای کلی از سلول واحد برای هر یک از این سیستم‌ها در شکل مقابل آورده شده است. این سیستم‌ها نحوه قرارگیری اتم‌ها در سلول واحد را در نظر نمی‌گیرند. در صورتی که نحوه قرارگیری اتم‌ها در سلول واحد را در نظر بگیریم، ۱۴ حالت قرارگیری اتم‌ها در سلول واحد وجود خواهد آمد. به این ۱۴ حالت، ۱۴ شبکه‌ی براوه گفته می‌شود.

مشخصات هفت سیستم بلوری و شکل هندسی آن‌ها

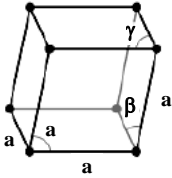
سیستم بلوری	ارتباط پارامترهای شبکه	زوایای بین محورها	شکل هندسی سلول واحد
مکعبی	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
تتراگونال	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	



$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$a \neq b \neq c$$

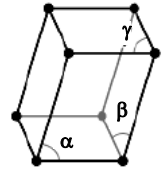
اورتورومبیک



$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

$$a = b = c$$

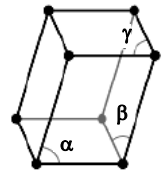
رومبوهدرال (تری گونال)



$$\beta = \gamma = 90^\circ \neq \alpha$$

$$a \neq b \neq c$$

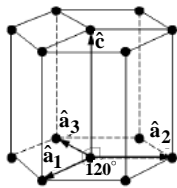
مونوکلینیک



$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

$$a \neq b \neq c$$

تری کلینیک



$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

$$a = b \neq c$$

هگزاگونال

مثال ۳: تعداد نقاط مادی سازنده سلول اولیه یک شبکه مونوکلینیک با قواعد مرکزدار چند عدد می باشد؟

(۴) شش عدد

(۳) چهار عدد

(۲) دو عدد

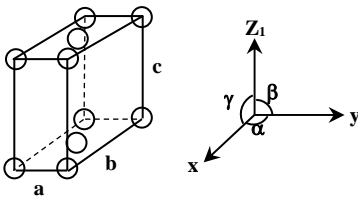
(۱) یک عدد

پاسخ: گزینه «۲» مشخصات شبکه مونوکلینیک عبارت است از:

$$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$

شبکه مونوکلینیک یک شبکه مکعبی با قاعده‌های مرکزدار است:

$$\text{تعداد اتم در این شبکه} = 8 \times \frac{1}{8} + 2 \times \frac{1}{2} = 2$$



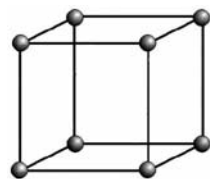
ساختار کریستالی فلزات

در این قسمت ساختارهای کریستالی مهم در فلزات، مواد یونی و مواد کووالانسی توضیح داده می شود.

ساختار کریستالی مکعب ساده (SC)

اگرچه این ساختار در فلزات مهندسی وجود ندارد اما به علت سادگی ابتدا به بحث در مورد این نوع شبکه پرداخته می شود. شکل رو به رو ساختار کریستالی مکعبی ساده را نشان می دهد.

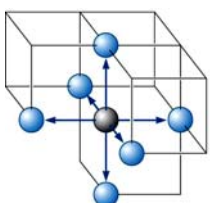
به فاصله‌ی مرکز تا مرکز اتم‌های روی ضلع مکعب در ساختارهای مکعبی، پارامتر شبکه گفته می شود (a_0). اتم‌ها در گوشه‌های یک مکعب قرار دارند و موقعیت آنها عبارت است از: $(0, 0, 0)$

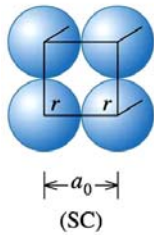


مشخصه‌های مهم شبکه کریستالی SC

$$\text{الف - تعداد اتم به ازای واحد شبکه} = 8 \times \frac{1}{8} = 1 \text{ (N)}$$

تذکر ۱: سهم هر اتم گوشه در یک سلول واحد مکعبی $\frac{1}{8}$ است.





ب - عدد کئوردیناسیون (همسایگی): تعداد نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه با فاصله‌ی یکسان تا هر اتم در شبکه را عدد کئوردیناسیون گویند. $C.N(SC) = 6$ (شکل رو به‌رو)
 پ - ارتباط بین پارامتر شبکه (a_0) و شعاع اتمی (r): برای پیدا کردن ارتباط a_0 و r فرض می‌شود اتم‌ها در متراکم‌ترین جهت برهم مماس‌اند. در شبکه SC متراکم‌ترین جهت، جهت ضلع مکعب است. پس $a_0 = 2r$

کج مثال ۴: اگر فاصله متوسط جاهای خالی در یک کریستال مکعبی ساده برابر $100a$ ($a =$ ثابت شبکه) باشد نسبت تعداد جاهای خالی به تعداد اتم در این کریستال برابر کدام است؟

- (۱) 10^{-6} (۲) 10^{-3} (۳) 10^{-2} (۴) 10^{-8}

پاسخ: گزینه «۳» از آن جایی که در شبکه مکعبی ساده (S.C) هر a (ثابت شبکه) نشان‌دهنده یک اتم است. لذا اگر فاصله متوسط جای خالی در این شبکه برابر با $100a$ باشد، آنگاه به ازای هر 100 اتم یک جای خالی اتمی وجود دارد. یا به عبارت دیگر:

$n = 100$ تعداد اتم در 100 سلول واحد از شبکه S.C $\rightarrow n = 1$ تعداد اتم در هر سلول واحد از شبکه S.C

$$N = 1 \Rightarrow \frac{\text{تعداد جای خالی}}{\text{تعداد کل اتم‌ها}} = \frac{N}{n} = \frac{1}{100} = 10^{-2}$$

کج مثال ۵: با اضافه شدن یک جای خالی به داخل حجم مساوی از کریستال‌های مکعبی، بیشترین تغییرات حجمی در کدام یک حاصل می‌شود؟
 (۱) مکعبی مرکزدار (۲) مکعبی ساده (۳) مکعبی وجوه مرکزدار (۴) در هر سه یکسان است.

پاسخ: گزینه «۲» چون جای خالی در کریستال‌ها در مواضع اصلی اتمی قرار می‌گیرد لذا در کریستال‌هایی بیشترین تغییر حجم را ایجاد خواهد کرد که به ازای یک واحد شبکه، کمترین تعداد اتم را در مواضع اصلی داشته باشد، داریم:

$2 =$ تعداد اتم در هر واحد شبکه‌ی BCC

$1 =$ تعداد اتم در هر واحد شبکه‌ی SC

$4 =$ تعداد اتم در هر واحد شبکه‌ی FCC

لذا با افزوده شدن یک جای خالی بیشترین تغییر حجم در کریستال‌هایی با ساختار مکعبی ساده ایجاد خواهد شد.

ت - فاکتور تراکم اتمی (APF): درصدی از فضای شبکه کریستالی است که توسط اتم اشغال شده است و از تقسیم حجم اتم‌های سلول واحد بر حجم سلول واحد به دست می‌آید.

$$APF = \frac{\text{حجم اتم‌های سلول واحد}}{\text{حجم سلول واحد}} = \frac{\text{حجم اتم} \times \text{تعداد اتم به ازای سلول واحد}}{\text{حجم سلول واحد}} \times 100 = \frac{N \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\text{حجم سلول واحد}} \times 100$$

$$(APF)_{SC} = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(a_0)^3} = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(2r)^3} = 0.52$$

فاکتور تراکم اتمی برای شبکه‌ی مکعبی ساده به صورت مقابل است:

کج مثال ۶: ضریب فشردگی شبکه پریکلاس (MgO) چقدر است؟ (فرض شود شعاع یونی اکسیژن 2\AA و منیزیم 1\AA و مقدار $\pi \approx 3$ باشد)
 (۱) 0.67 (۲) 0.83 (۳) 0.78 (۴) 0.73

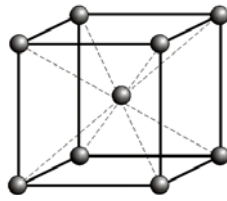
پاسخ: گزینه «۱» با دانستن این مطلب که ساختار MgO شبیه به ساختار NaCl است (یعنی شبکه MgO از ۴ اتم Mg در رئوس و مرکز وجه‌ها و ۴ اتم اکسیژن در مرکز ضلع‌ها و مرکز سلول تشکیل شده است). داریم:

$$a = 2(R_{Mg} + R_O) = 2(1 + 2) = 6(\text{\AA}) \Rightarrow V = a^3 = (6)^3 = 216(\text{\AA}^3)$$

$$PF = \frac{\text{حجم اتم‌ها در شبکه}}{\text{حجم واحد شبکه}} = \frac{4 \left[\frac{4}{3} \pi R_{Mg}^3 \right] + 4 \left[\frac{4}{3} \pi R_O^3 \right]}{V} \Rightarrow PF = \frac{16 \pi [(1)^3 + (2)^3]}{216} = \frac{144}{216} \approx 0.67$$

ساختر مکعبی مرکز پر (BCC)

شکل رو بهرو ساختر BCC را نشان می‌دهد.



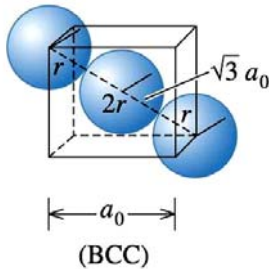
۸ اتم در گوشه‌های مکعب و ۱ اتم در مرکز مکعب - موقعیت اتم‌ها: $(0, 0, 0)$ و $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ برخی فلزات دارای ساختر bcc: آهن در دمای اتاق، Cr، V، Mo، W و Ti در دمای بالا.

مشخصه‌های مهم شبکه‌ی BCC

الف - تعداد اتم به ازای واحد شبکه: $N_{bcc} = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

ب- عدد کثوردیناسیون (همسایگی): $C.N_{bcc} = 8$

پ- ارتباط بین پارامتر شبکه (a_0) و شعاع اتمی (r) : برای دست آوردن ارتباط a_0 و r فرض می‌شود اتم‌ها در جهت قطر اصلی مکعب برهم مماس‌اند. $\sqrt{3}a_0 = 4r$



ت - فاکتور تراکم اتمی (APF):

$$APF_{bcc} = \frac{N \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a_0^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(\frac{4}{\sqrt{3}}r)^3} = 0.68$$

مثال ۷: اگر شعاع اتمی فلزی با شبکه کریستالی BCC برابر $2\sqrt{3} \times 10^{-10} \text{ m}$ باشد، اندازه ثابت شبکه a آن چقدر است؟

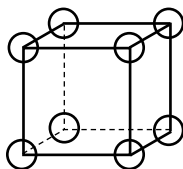
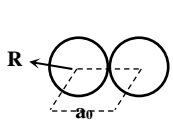
$8 \times 10^{-10} \text{ m}$ (۴)

$6 \times 10^{-10} \text{ m}$ (۳)

$2\sqrt{3} \times 10^{-10} \text{ m}$ (۲)

$3\sqrt{2} \times 10^{-10} \text{ m}$ (۱)

پاسخ: گزینه «۴» در فلزات عمدتاً سه نوع شبکه بلوری: ۱- BCC (مکعب مرکز پر) ۲- FCC (مکعب با وجوه مرکز پر) ۳- HCP (هگزاگونال) وجود دارد. قابل ذکر است که شبکه مکعبی ساده نیز جزء شبکه بلوری مواد به شمار می‌رود ولی به ندرت در فلزات مشاهده می‌شود. شبکه مکعبی ساده (SC): این شبکه دارای ۸ اتم در ۸ گوشه مکعب است که $\frac{1}{8}$ از هر اتم به یک مکعب تعلق دارد.



$a_0 =$ ثابت شبکه

$8 \times \frac{1}{8} = 1$ تعداد اتم‌ها

شعاع اتمی = R

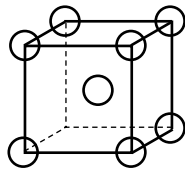
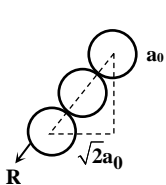
$a_0 = 2R$

عدد همسایگی = CN

$CN = 6$

عدد همسایگی عبارت است از تعداد اتم که در اطراف یک اتم قرار دارند.

شبکه مکعبی مرکز پر (BCC): این شبکه دارای ۸ اتم در ۸ گوشه مکعب و یک اتم در مرکز مکعب است.

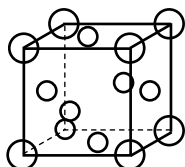
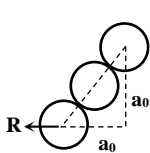


تعداد اتم‌ها $= 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

$(4R)^2 = a_0^2 + (\sqrt{2}a_0)^2 \rightarrow a_0 = \frac{4}{\sqrt{3}}R$

$CN = 8$

شبکه مکعبی با وجوه مرکز پر (FCC): این شبکه دارای ۸ اتم در گوشه‌های مکعب و ۶ اتم در مرکز وجه مکعب است.

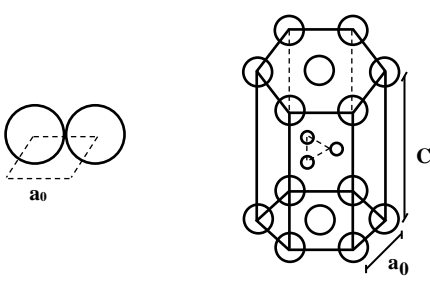


تعداد اتم‌ها $= 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$

$(4R)^2 = a_0^2 + a_0^2 \rightarrow a_0 = 2\sqrt{2}R$

$CN = 12$

شبکه هگزاگونال (HCP): یک شبکه شش ضلعی دارای ۶ اتم در شش گوشه دو قاعده، ۲ اتم در مرکز دو قاعده و ۳ اتم در درون شبکه است.



$$2 \times (6 \times \frac{1}{6}) + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$$

$$a_0 = 2R$$

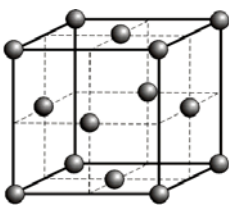
$$\frac{C}{a_0} = \sqrt{\frac{8}{3}} \rightarrow C = 1/\sqrt{3} a_0$$

$$CN = 12$$

شبهه BCC، $R = 0.238 \times 10^{-10} \text{ m}$ ، $a_0 = ?$

BCC در شبهه $a_0 = \frac{4}{\sqrt{3}} R \rightarrow a_0 = \frac{4}{\sqrt{3}} \times 2\sqrt{3} \times 10^{-10} \rightarrow a_0 = 8 \times 10^{-10} \text{ m}$

ساختار مکعبی وجوه مرکزدار FCC



شکل رو به‌رو ساختار FCC را نشان می‌دهد.

۸ اتم در گوشه‌های مکعب و ۶ اتم در وجوه مکعب

موقعیت اتم‌ها $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ، $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ ، $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ، $(0, 0, 0)$

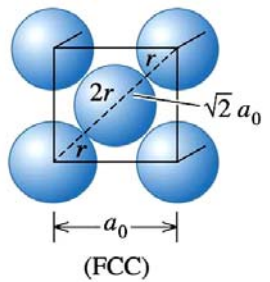
برخی فلزات دارای ساختار FCC: Cu، Au، Ag، Ni، Pb، Al و آهن در دمای بالای (910°C)

مثال ۸: نحوه به وجود آمدن شبکه‌های F.C.C بر اثر انتقال یک نقطه مادی به این قرار می‌باشد:

- ۱) از انتقال یک نقطه مادی در جهت محورهای رومبوهدرال و زاویه 60° درجه
- ۲) از انتقال یک نقطه مادی در سه جهت مکعبی و زاویه 90° درجه
- ۳) از انتقال یک نقطه مادی در سه جهت عمود بر هم a و b و c
- ۴) از یک انتقال نقطه مادی به سوی نقاط $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ، $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$

پاسخ: گزینه «۱» در اثر انتقال مبدأ در سه جهت عمود بر هم به اندازه a (ضلع مکعب)، شبکه مکعب ساده حاصل می‌شود در حالی که اگر مبدأ به اندازه نصف قطر مربع جانبی در سه جهت که زاویه بین آن‌ها 60° درجه است انتقال یابد، شبکه F.C.C به دست می‌آید.

مشخصه‌های ساختار FCC



الف - تعداد اتم به ازای واحد شبکه: $N_{fcc} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$

(تذکر: سهم هر اتم واقع بر وجوه مکعب در یک سلول واحد $\frac{1}{2}$ است)

ب - عدد کئوردیناسیون (همسایگی): $C.N_{FCC} = 12$

پ - ارتباط بین پارامتر شبکه (a_0) و شعاع اتمی (r): برای به دست آوردن ارتباط a_0 و r فرض می‌شود اتم‌ها در جهت قطر فرعی مکعب برهم مماس‌اند. $\sqrt{2}a_0 = 4r$

ت - فاکتور تراکم اتمی (APF): $APF_{fcc} = \frac{N \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a_0^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(2\sqrt{2}r)^3} = 0.74$

مثال ۹: در یک ورق نازک طلا به ضخامت 8 mm و مساحت 400 mm^2 چند واحد شبکه وجود دارد؟ (طلا FCC و شعاع اتمی آن $\sqrt{2}A^\circ$ است.)

- (۱) 5×10^{12} (۲) 12×10^{14} (۳) 5×10^{20} (۴) 12×10^8

پاسخ: گزینه «۳» برای تعیین تعداد واحدهای شبکه، حجم صفحه را بر حجم واحد شبکه تقسیم می‌کنیم: حجم واحد شبکه FCC:

$V_{cu} = a^3 = (\frac{4r}{\sqrt{2}})^3 = (\frac{4 \times \sqrt{2} \times 10^{-7} \text{ mm}}{\sqrt{2}})^3 = 64 \times 10^{-21} \text{ mm}^3$