

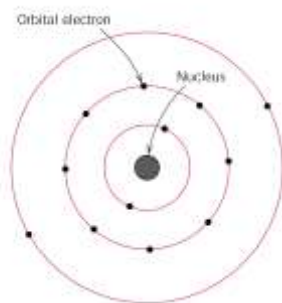
آشنایی با خواص فیزیکی مواد

۱-۱. مقدمه

خواص یک جسم را می توان به دو دسته مکانیکی و فیزیکی تقسیم کرد. خواص مکانیکی عکس العمل یک جسم در مقابل اعمال نیرو یا تنش است. خواص مکانیکی نه تنها تعیین کننده دوام و عمر یک جسم است ، بلکه شکل پذیری یک جسم را نیز تعیین می کند. منظور از خواص فیزیکی رفتار الکتریکی ، نوری ، مغناطیسی ، حرارتی ، الاستیکی و شیمیایی است. خواص فیزیکی وابستگی زیادی به ساختار میکروسکوپی و فرآیند تولید جسم دارد. خواص یک ماده تحت تاثیر ساختمان اتمی آن است و برای این که ساختمان اتمی یک ماده درک شود، باید ساختمان الکترونی ، نیروهای پیوند بین اتم ها و ترتیب قرار گرفتن اتم های سازنده جسم در فضا مورد بررسی قرار گیرد.

ساختار اتمی مواد

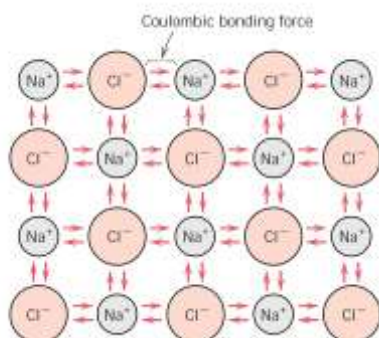
مطابق با مدل اتمی بور، الکترون ها با بار منفی به دور هسته که متشکل از پروتون ها با بار مثبت و نوترون های خنثی است، در مدارهای مشخص می چرخند (شکل ۱-۱). هر یک از این مدارها دارای ظرفیت و انرژی مشخصی است. به تعداد الکترون های دور هسته یک اتم، عدد اتمی و به الکترون های لایه خارجی، الکترون های ظرفیت گفته می شود. بسیاری از خواص عناصر نظیر هدایت الکتریکی، خواص نوری، مغناطیسی، مکانیکی و نوع اتصال اتم ها متناسب با ساختار الکترونی، خصوصاً الکترون های لایه ظرفیت است.



شکل ۱-۱. مدل اتمی بورو

پیوندهای اتمی

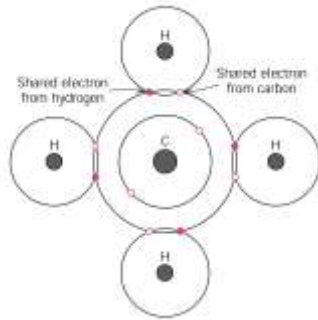
به طور کلی سه گونه اصلی پیوند اتمی وجود دارد. پیوند یونی ، پیوند کووالانسی ، پیوند فلزی
پیوند یونی : این پیوند غالباً بین دو عنصر فلزی و غیر فلزی ایجاد می شود. عنصر فلزی الکترون های لایه ظرفیت خود را از دست می دهد تا به صورت یک یون با بار مثبت درآید و بالعکس عنصر غیر فلزی الکترون های رقیب را جذب می کند و یک یون منفی ایجاد می کند. در این حالت دو عنصر فلزی و غیر فلزی به ترتیب با خالی کردن الکترون ظرفیت و تکمیل کردن آن به ترکیب پایدار عناصر نجیب در می آیند (شکل ۱-۲).



شکل ۱-۲. نمایش شماتیک پیوند یونی در نمک طعام.

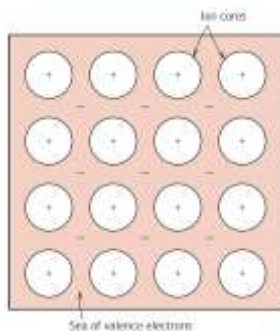
پیوند کووالانسی یا اشتراکی : پیوندی است که از به اشتراک گذاشتن الکترون های لایه آخر اتم های شرکت کننده در پیوند ایجاد می گردد که بدین ترتیب اتم ها به ساختار الکترونی پایدارتر می رسند (شکل ۱-۳).

قوی، سخت و با نقطه ذوب بالا باشد و یا بسیار ضعیف با نقطه ذوب پایین نظیر بیسموت باشد. ساختارهای پلیمری با زنجیره‌های طولیل کربن دارای چنین پیوندی است.



شکل ۳-۱. نمایش شماتیک پیوند کووالانسی در مولکول متان.

پیوند فلزی: پیوندی است که به فلزات تعلق دارد. در این پیوند الکترون‌های ظرفیت به هیچ اتم خاصی تعلق ندارد و یک دریای الکترونی را ایجاد می‌نماید. این دریا در واقع یک بستر چسبناک با بار منفی است (شکل ۴-۱). هسته‌های مثبت باقی مانده از اتم‌ها در این بستر الکترونی غوطه ور می‌شوند و به علت تفاوت بارها، یک پیوند قوی را ایجاد می‌نمایند. الکترون‌های متحرک عامل ایجاد هدایت الکتریکی و حرارتی در فلزات است. یون‌های مثبت نیز می‌توانند بدون شکستن پیوند، درون ساختمان اتمی حرکت کنند. این پدیده مبنای قابلیت شکل پذیری فلزات بدون گسستن پیوندها و شکست می‌گردد که از آن می‌توان به عنوان مهمترین تمایز فلزات از سرامیک‌ها یاد کرد. اصول شکل دهی فلزات بر این واقعیت استوار است.



شکل ۴-۱. نمایش شماتیک پیوند فلزی در فلزات.

نحوه قرارگیری اتم‌ها در ماده و ساختار کریستالی

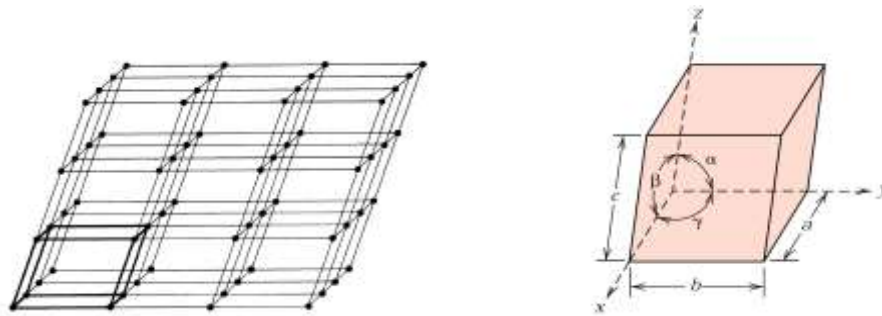
ویژگی‌های مواد علاوه بر ساختار اتمی و نوع پیوند به نحوه قرارگیری اتم‌ها در ماده نیز بستگی دارد. از این منظر مواد به سه ساختار مولکولی، کریستالی و بی‌شکل (آمورف) تقسیم می‌شود. در ساختار مولکولی، تعداد معینی از اتم‌ها با پیوندهای غالباً کووالانسی به هم متصل شده و واحدهای مولکولی توسط پیوندهای ضعیف ثانویه (فرعی) نظیر واندروالس به یکدیگر متصل می‌شود. آب نمونه‌ای از ساختار مولکولی است.

در ساختار کریستالی، اتم‌ها در یک شبکه منظم قرار دارند. شبکه اتمی از تکرار واحدهای کوچکی به نام سلول واحد ساخته شده است. فلزات و برخی از سرامیک‌ها دارای ساختار بلورین هستند. در ساختارهای آمورف نظیر شیشه به عنوان یک ماده سرامیکی، ممکن است که اتم‌ها دارای نوعی نظم محلی باشند، اما نظم تکرار پذیری در کل ساختار ندارند.

۲-۱. ساختمان شبکه‌های بلوری

مشخصات سلول واحد

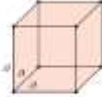
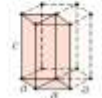
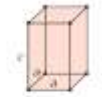
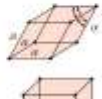
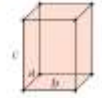
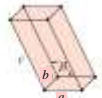
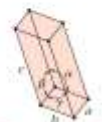
یک شبکه کریستالی دارای نظم داخلی و تکرار پذیر اتم‌ها در فضا است که در سرتاسر شبکه قابل تعمیم است. به واحدهای کوچک کریستالی، سلول واحد گفته می‌شود. سلول واحد مانند آجرهایی است که از چینش آنها بر روی یکدیگر، ساختار یک ماده بلوری شکل می‌گیرد. سلول واحد دارای سه جهت است که در هر جهت دارای ابعاد (a,b,c) و زوایای مشخص (α, β, γ) است. به عبارتی سلول واحد با ابعاد و زوایای مشخصی تعریف می‌گردد که به آنها در اصطلاح پارامترهای شبکه یا ثوابت شبکه گفته می‌شود و به صورت نمایش { a, b, c, α, β, γ } داده می‌شود. در شکل ۵-۱ یک سلول واحد به همراه ثوابت شبکه آن و همچنین نحوه چیده شدن سلول-های واحد بر روی یکدیگر و ایجاد یک بلور نشان داده شده است.



شکل ۵-۱. یک سلول واحد به همراه ثوابت شبکه آن $\{ a, b, c, \alpha, \beta, \gamma \}$ (الف). نحوه قرارگیری سلول‌های واحد بر روی یکدیگر و ایجاد یک بلور (ب).

هفت سیستم تبلور

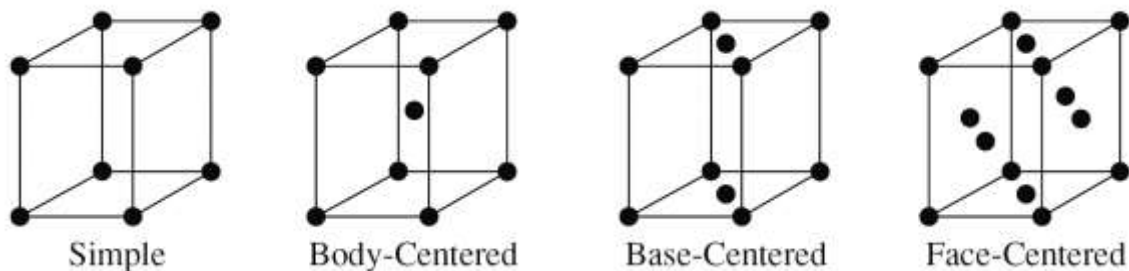
با دادن مقادیر مختلف به طول‌ها و زوایای یک سلول واحد، تنها می‌توان هفت نوع سلول واحد با پارامترهای شبکه مختلف ساخت. که به آنها هفت سیستم تبلور گفته می‌شود. این هفت سیستم تبلور با پارامترهای شبکه آنها، در جدول ۱-۲ آمده است.

Crystal System	Axial Relationships	Interaxial Angles	Unit Cell Geometry
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Rhombohedral	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

جدول ۱-۲. شکل و مشخصات هفت سیستم اصلی تبلور.

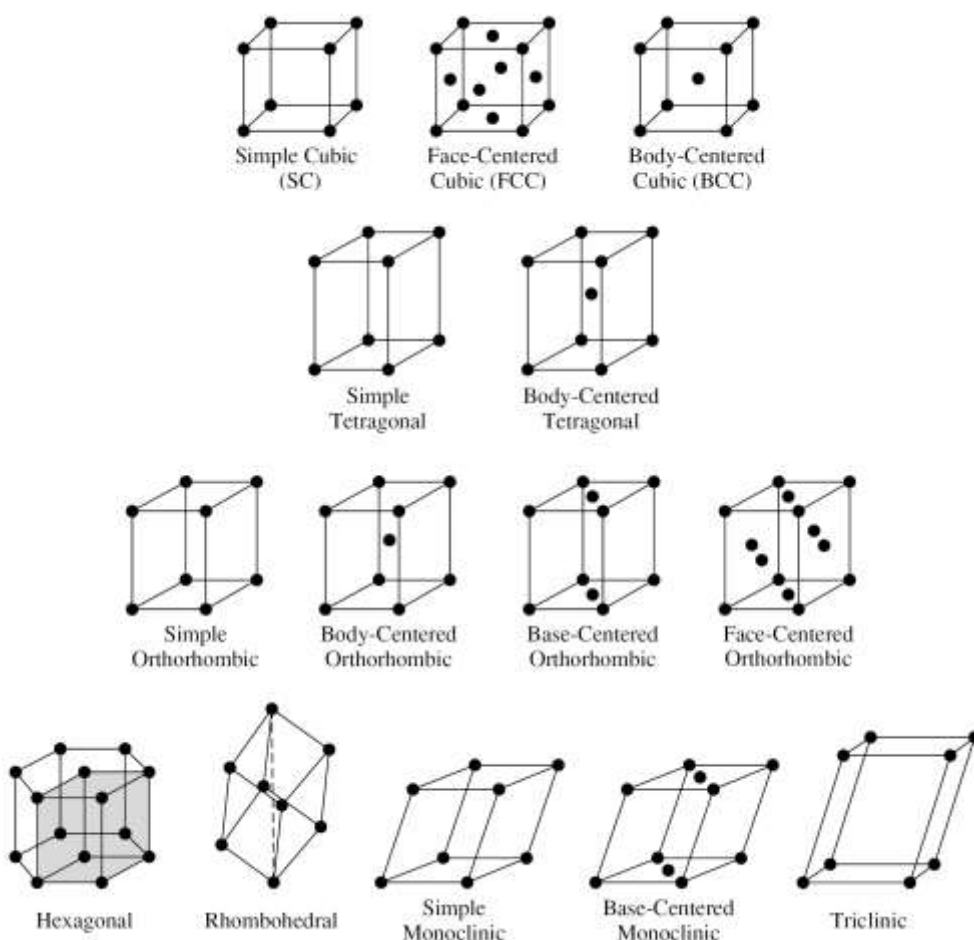
چهارده شبکه براوه

در هفت سیستم تبلور، اتم‌ها در گوشه‌های یک سلول واحد قرار دارند. براوه نشان داد که اتم‌ها علاوه بر موقعیت گوشه‌ها، می‌توانند در موقعیت‌های دیگری در سلول واحد قرار گیرند به طوری که با حفظ دو شرط سیستم‌های تبلور، یک بلور ساخته شود. به طور کلی هر سیستم تبلور بستگی به نحوه مختلف آرایش اتم‌ها بر روی آن می‌تواند ۴ حالت مختلف داشته باشد که عبارت است از حالت ساده (P)، مرکز پر (I) (Body-centered)، قاعده مرکز پر (C) (Base-centered) و وجوه مرکز پر (F) (Face-centered). هر یک از این ساختار را با حروف مخفف ذکر شده نشان می‌دهند. نحوه پر شدن اتم‌ها در سلول واحد در هر یک از حالات چهار گانه بالا در شکل ۱-۶ نشان داده شده است.



شکل ۶-۱. موقعیت های مختلف قرار گرفتن اتم ها در سلول واحد شبکه های براوه.

با این وجود تنها ۱۴ شبکه کریستالی معروف به ۱۴ شبکه براوه وجود دارد؛ در صورتی که طبیعی است انتظار داشته باشیم که ۲۸ شبکه وجود داشته باشد. در واقع با تکرار برخی از شبکه های براوه در فضا، شبکه براوه دیگری ایجاد می شود؛ از این رو دو شبکه معادل شده و یکی از شبکه ها بایستی حذف گردد



شکل ۷-۱. ۱۴ شبکه براوه در سیستم های مختلف

شبکه براوه و ساختارهای کریستالی

هر چند ساختارهای کریستالی از تکرار و کنارهم قرار گرفتن شبکه های براوه به عنوان آجرهای اولیه ساخته شده اند، اما اتم های ساختارهای کریستالی علاوه بر موقعیت های اتمی شبکه براوه (حالات I, C, P, F) می توانند موقعیت های مختلف دیگری را نیز در درون سلول واحد اشغال کنند. به عبارتی موقعیت های اتمی شبکه براوه، کل فضای یک سلول واحد را پر نمی کند، به طوری که در خلل و فرج آنها، فضای کافی برای قرار گیری اتم های دیگر باقی می ماند.

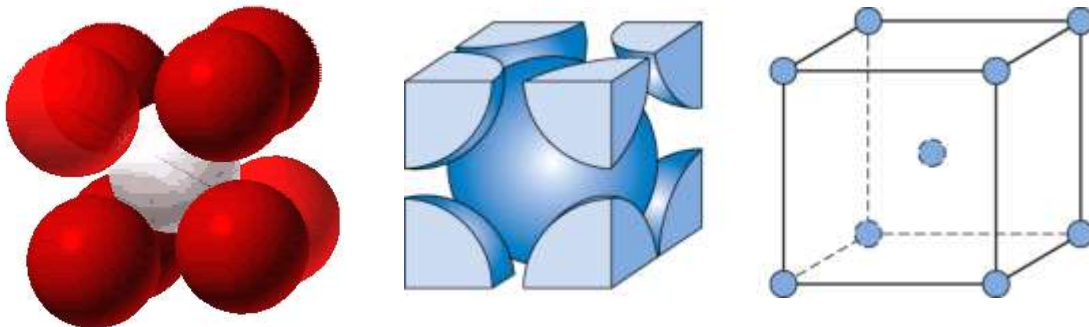
۳-۱. ساختار بلوری فلزات و مشخصات کریستالی آنها

مقدمه

فلزات غالباً در سه ساختار کریستالی مکعب مرکز پر (^۱BCC)، مکعب وجوه مرکز پر (^۲FCC) و هگزاگونال فشرده (^۳HCP) متبلور می‌شوند. در این بخش پس از معرفی سه ساختار اصلی فلزات به بررسی کلیه مشخصات کریستالی آنها می‌پردازیم.

ساختار کریستالی مکعب مرکز پر (BCC)

این ساختار کریستالی یکی از فرم‌های شبکه برآه است. این ساختار از قرار دادن هشت اتم در گوشه‌ها و یک اتم در مرکز یک سلول واحد مکعبی، ساخته شده است. ساختار کریستالی BCC در شکل ۸-۱ نشان داده شده است.

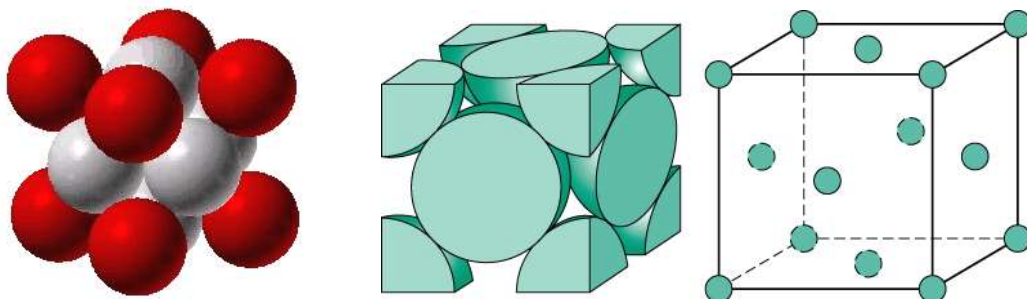


شکل ۸-۱. ساختار کریستالی BCC و نحوه قرار گیری اتم‌ها در سلول واحد.

این شبکه دارای دو اتم است. یک اتم ($1 = 8 \times 1/8$) در موقعیت $(0, 0, 0)$ و یک اتم در موقعیت $(1/2, 1/2, 1/2)$ قرار گرفته است. توجه داشته باشید که یک مکعب، ابعاد برابر در هر سه جهت دارد.

ساختار کریستالی مکعب وجوه مرکز پر (FCC)

این ساختار کریستالی نیز یکی از فرم‌های شبکه برآه است که در آن اتم‌ها گوشه‌ها و مراکز وجوه یک سلول مکعب را پر کرده‌اند. این شبکه دارای ۴ اتم است. یک اتم ($1 = 8 \times 1/8$) در موقعیت $(0, 0, 0)$ و ۳ اتم در موقعیت‌های $(1/2, 1/2, 0)$; $(1/2, 0, 1/2)$; $(0, 1/2, 1/2)$ قرار گرفته است. اتم‌ها در این مکعب به گونه‌ای قرار گرفته‌اند که در سطح کاملاً بر هم مماس هستند. ساختار کریستالی FCC در شکل ۹-۱ نشان داده شده است.



شکل ۹-۱. ساختار کریستالی FCC و نحوه چینش اتم‌ها در آن.

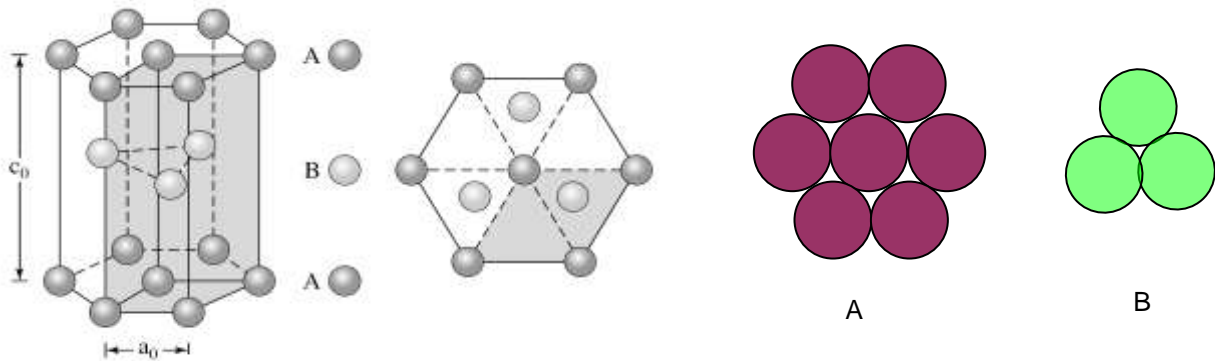
^۱Body- centered cubic

^۲Face- centered cubic

^۳ Hexagonal closed-packed

ساختار کریستالی هگزاگونال فشرده (HCP)

در شبکه‌های براوه، ساختار هگزاگونال ساده توصیف شده است. اما در فلزات، هگزاگونال به صورت متراکم (فشرده) متبلور می‌شود. تعداد اتم‌ها را می‌توان به این نحو محاسبه کرد: ۱۲ اتم در گوشه که هر کدام به شش سلول واحد تعلق دارند، دو اتم در سطوح قاعده که به دو سلول تعلق دارد و سه اتم که در درون آن قرار گرفته است، مجموعاً ۶ اتم را نشان می‌دهد.



شکل ۱۰-۱. نمایشی از ساختار کریستالی HCP و نحوه چینش اتم‌ها.

جهت کریستالی در ساختارهای مکعبی

جهت کریستالی یکی از مشخصات مهم کریستالی است که به صورت بردار اتصال دهنده دو موقعیت اتمی مختلف در ساختار کریستالی تعریف می‌گردد. جهت کریستالی از مشخصات کلی زیر پیروی می‌کند.

۱- بردار جهت با سه مشخصه $(U) a_0, (V) b_0, (W) c_0$ تعریف می‌گردد که به ترتیب عبارت است از تصویر بردار بر روی محورهای $a(x), b(y), c(z)$.

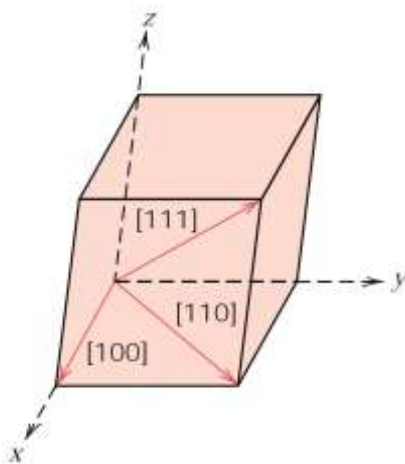
۲- اندیس بردار جهت در واقع از تفاضل مولفه‌های موقعیت انتها و ابتدا به دست می‌آید.

۳- اندیس بردار جهت به صورت کوچکترین اعداد صحیح ممکن نمایش داده می‌شود. به این منظور مولفه‌های آن در اعداد صحیح مناسب ضرب یا تقسیم می‌گردد.

۴- اندیس یک برادر در یک براکت قرار گرفته و بین مولفه‌های آن ویرگول قرار نمی‌گیرد. مانند: $[uvw] \Rightarrow [111]$.

حالت اول (تشخیص مولفه‌های یک جهت از روی بردار)

با توجه به نکات بالا به راحتی می‌توان اندیس‌های جهت را مطابق با شکل زیر به دست آورد. در این شکل جهت $[100]$ یعنی بردار که تصویر آن در راستای محور $a(x)$ یک واحد و در راستای محورهای دیگر صفر واحد است. یا به عبارتی به اندازه یک واحد در راستای محور a حرکت کرده اما حرکتی در امتدادهای محورهای دیگر نداشته است. جهت دیگر را نیز بر همین مبنا نام گذاری می‌گردد.

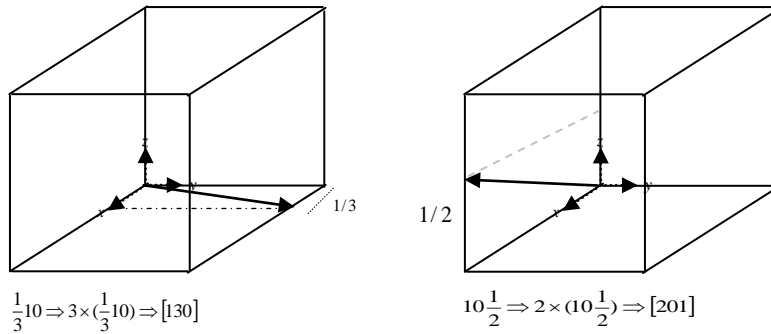


شکل ۱۱-۱. جهات کریستالی $[100], [110], [111]$ و $[111]$

❖ حالات خاص:

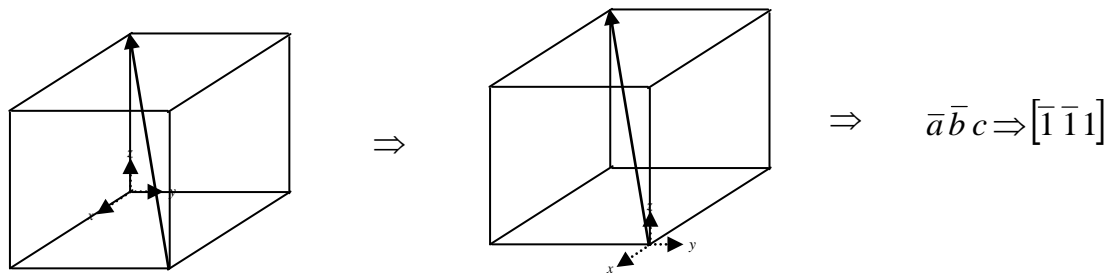
الف) اگر تصویر بردار بر امتداد محورهای اصلی یک عدد صحیح نباشد، در این صورت مولفه‌ها در کوچکترین مضرب مشترک مخرج آنها ضرب می‌شود.

مثال ۱-۱. اندیس جهات کریستالی زیر را مشخص نمایید.

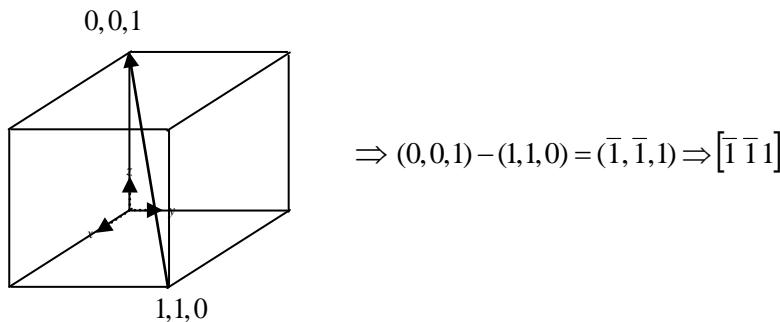


ب) اگر مبدأ آغاز یک جهت در مبدأ محور مختصات (0, 0, 0) نباشد، آنگاه ابتدا مبدأ محور مختصات با حفظ جهات به نقطه آغازین بردار منتقل می‌شود. مبدأ مختصات در راستای هر بردار که جابه جا شود، علامت مولفه مربوط به آن منفی می‌شود. سپس بردار خوانده می‌شود و علائم منفی بر روی اندیس‌های آن گذاشته می‌شود. به مثال ۱-۲ توجه کنید.

مثال ۱-۲. اندیس جهات کریستالی زیر را مشخص نمایید.



اندیس این بردار را می‌توان با استفاده از اصل دوم تعیین جهت کریستالی نیز به صورت زیر مشخص کرد:



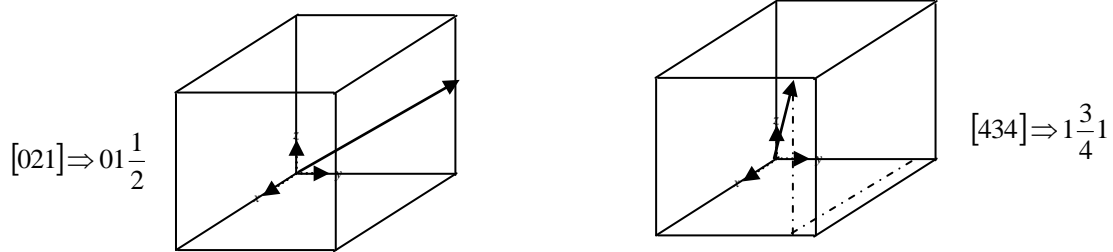
حالت دوم (رسم یک جهت از روی اندیس‌های آن)

ساده ترین حالت وقتی است که اندیس‌ها مثبت و کوچکتر از یک باشد (صفر و یک). در این حالت به ازای مقدار اندیس‌ها از مبدأ مختصات به سمت محورهای مختصات حرکت می‌کنیم. به عنوان مثال برای رسم جهت $[111]$ ، از مبدأ به اندازه یک واحد در جهت محور x ، سپس یک واحد در جهت محور y و نهایتاً یک واحد در جهت محور z حرکت کرده و سپس مبدأ را به مقصد به صورت برداری وصل می‌نماییم.

❖ حالات خاص:

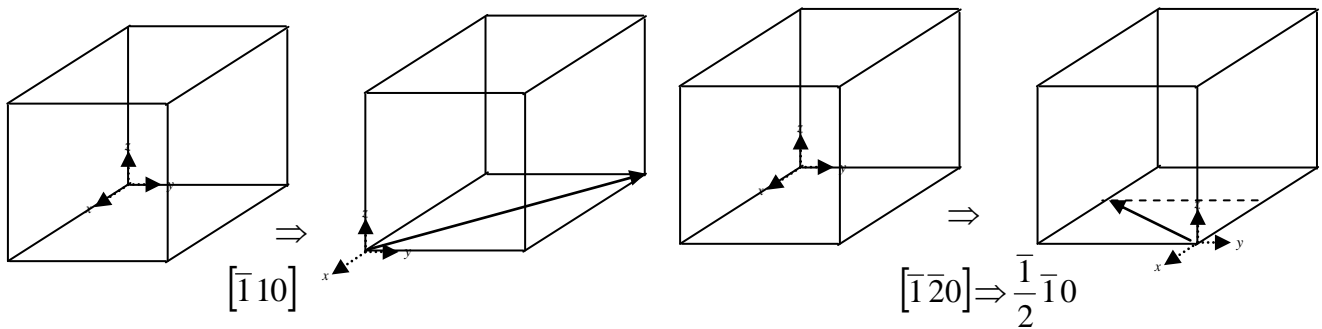
الف) اگر در بین اندیس‌ها، اندیس یا اندیس‌هایی بزرگتر از یک باشد، ابتدا تمامی اندیس‌ها به بزرگترین اندیس تقسیم می‌شود. سپس بردار رسم می‌گردد.

مثال ۳-۱. مطلوبست تعیین جهات کریستالی $[012]$, $[434]$.



ب) اگر جهت کریستالی دارای اندیس یا اندیس‌های منفی بود، در این صورت برای رسم هر جهت ابتدا مبدا مختصات را در راستای جهات منفی منتقل کرده و سپس جهت را مشخص نمایید. به مثال‌های زیر توجه کنید:

مثال ۴-۱. مطلوبست تعیین جهات کریستالی $[\bar{1}10]$ و $[\bar{1}20]$



صفحات کریستالی در ساختارهای مکعبی

به منظور اندیس‌گذاری و تعیین مشخصات صفحات کریستالی از روشی به نام میلر استفاده می‌شود که اندیس صفحات به افتخار او اندیس‌های میلر نام نهاده شده است. جهت تعیین اندیس یک صفحه مراحل زیر را دنبال نمایید:

۱- محل تقاطع صفحات را با محورهای X, Y, Z به دست آورید. چنانچه صفحه موازی یک محور بود محل تقاطع بی‌نهایت می‌شود.

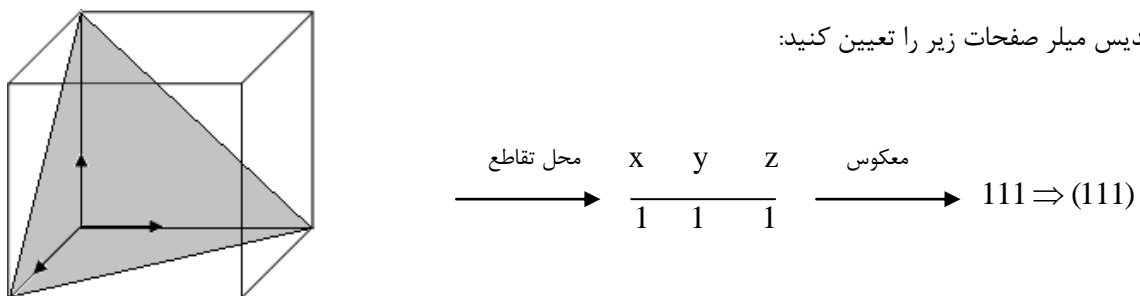
۲- این اعداد را معکوس کنید.

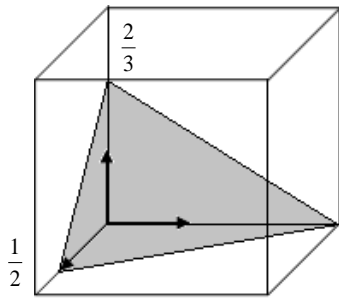
نکته: معکوس عدد بی‌نهایت صفر است. هر اندیس صفر به این معنی است که صفحه با آن جهت کریستالی موازی است.

۳- اعداد به دست آمده اگر کسری بود در کوچکترین مضرب مشترک مخرج کسرها باید ضرب شود تا از حالت کسری خارج گردد.

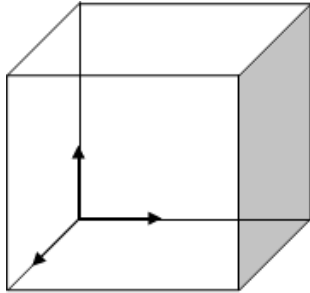
۴- اندیس میلر در یک پرانتز به صورت (hkl) به ترتیب تقاطع با محورهای X, Y, Z نمایش داده می‌شود.

مثال ۵-۱. اندیس میلر صفحات زیر را تعیین کنید:





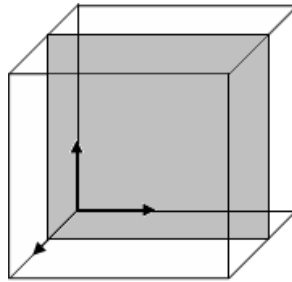
$$\xrightarrow{\text{محل تقاطع}} \begin{matrix} x & y & z \\ 1/2 & 1 & 2/3 \end{matrix} \xrightarrow{\text{معکوس}} 2 \ 1 \ \frac{3}{2} \Rightarrow (423)$$



$$\xrightarrow{\text{محل تقاطع}} \begin{matrix} x & y & z \\ \infty & 1 & \infty \end{matrix} \xrightarrow{\text{معکوس}} 010 \Rightarrow (010)$$

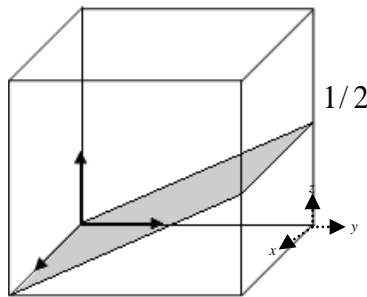
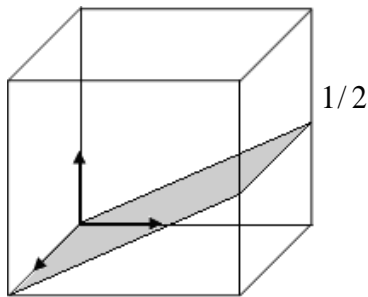
جهت رسم یک صفحه کریستالی کافی است در عکس مسیر بالا حرکت کرد. به عنوان مثال صفحه (200) را رسم نمایید.

$$(200) \Rightarrow \frac{1}{2} \ \infty \ \infty$$



❖ حالات خاص:

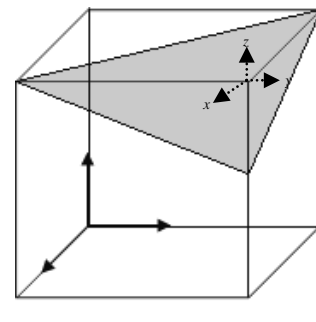
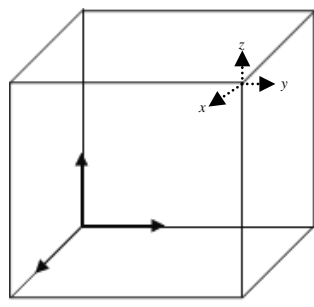
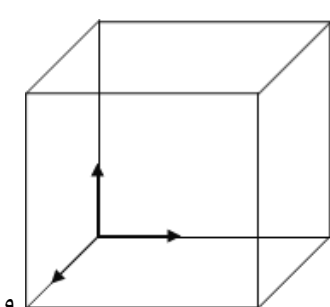
جهت تعیین اندیس صفحاتی که از مبداء مختصات می‌گذرد، باید ابتدا مکان مبداء را انتقال داد به نحوی که به سهولت محل تقاطعها خوانده شود. به ازای انتقال مبداء در هر جهت، اندیس میلر جهت مربوطه منفی می‌شود. به مثال زیر توجه کنید:



$$\infty \ \bar{1} \ \frac{1}{2} \Rightarrow 0\bar{1}2 \Rightarrow (0\bar{1}2)$$

صفحه‌ای که یکی از اندیس‌های آن صفر است، با بردار بکه آن جهت سیستم مختصاتی موازی است. به عنوان نمونه در مثال بالا اندیس h صفحه مربوطه صفر است؛ بنابراین این صفحه به موازات محور X است.

در رسم صفحات کریستالی که اندیس منفی دارند نیز به روش مشابه عمل می‌شود. یعنی ابتدا مبداء را متناسب با اندیس جهتی که منفی است، منتقل شده و سپس محل صفحه به سادگی به دست می‌آید. به عنوان مثال موقعیت صفحه $(\bar{1}\bar{1}2)$ در زیر به دست آمده است.



$$(\bar{1}\bar{1}2) \rightarrow \bar{1}\bar{1}\frac{1}{2}$$