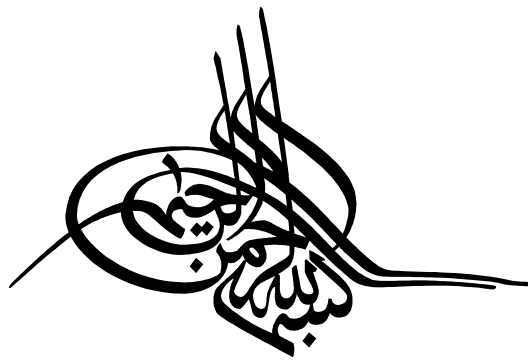




خواص فیزیکی

سری کتابهای کمک آموزشی کارشناسی ارشد

مجموعه مهندسی مواد

مؤلف: داریوش کوکبی

سرشناسه	: کوکبی، داریوش (۱۳۶۵)
عنوان	: خواص فیزیکی
مشخصات نشر	: تهران: مشاوران صعود ماهان، ۱۴۰۴
مشخصات ظاهری	: ۳۲۶ ص
فروست	: سری کتابهای کمک آموزشی کارشناسی ارشد
شابک	: ۹۷۸-۶۰۰-۳۸۹-۳۰۳-۰
وضعیت فهرست نویسی	: فیپای مختصر
یادداشت دسترسی است.	: این مدرک در آدرس http://opac.nlai.ir قابل
شماره کتابشناسی ملی	: ۴۲۳۵۰۳۲



کتاب: خواص فیزیکی
مدیر مسئول: هادی سیاری، مجید سیاری
مؤلف: داریوش کوکبی
ناشر: مشاوران صعود ماهان
مسئول تولید محتوا: سمیه بیگی
نوبت و تاریخ چاپ: اول / ۱۴۰۴
تیراژ: ۱۰۰۰ جلد
قیمت: ۴/۴۷۰/۰۰۰
شابک: ISBN: ۹۷۸-۶۰۰-۳۸۹-۳۰۳-۰

انتشارات مشاوران صعود ماهان: خیابان ولیعصر، بالاتر از تقاطع مطهری،

روبروی قنادی هتل بزرگ تهران، جنب بانک ملی، پلاک ۲۰۵۰

تلفن: ۸۸۱۰۰۱۱۳-۴

سخن ناشر ❀❀❀

«ن والقلم و ما یسطرون»

کلمه نزد خدا بود و خدا آن را با قلم بر ما نازل کرد.

به پاس تشکر از چنین موهبت الهی، مؤسسه ماهان درصدد برآمده است تا در راستای انتقال دانش و مفاهیم با کمک اساتید مجرب و مجموعه کتب آموزشی خود برای شما داوطلبان ادامه تحصیل در مقطع کارشناسی ارشد، گام مؤثری بردارد. امید است تلاش‌های خدمتگزاران شما در این مؤسسه پایه‌گذار گام‌های بلند فردای شما باشد.

مجموعه کتاب‌های کمک آموزشی ماهان به‌منظور استفاده داوطلبان کنکور کارشناسی ارشد سراسری و آزاد تألیف شده‌اند. در این کتاب‌ها سعی کرده‌ایم با بهره‌گیری از تجربه اساتید بزرگ و کتب معتبر داوطلبان را از مطالعه کتاب‌های متعدد در هر درس بی‌نیاز کنیم.

دیگر تألیفات ماهان برای سایر دانشجویان به‌صورت ذیل است.

● مجموعه کتاب‌های ۸ آزمون: شامل ۵ مرحله کنکور کارشناسی ارشد ۵ سال اخیر به همراه ۳ مرحله آزمون تألیفی ماهان همراه با پاسخ تشریحی می‌باشد که برای آشنایی با نمونه سوالات کنکور طراحی شده است. این مجموعه کتاب‌ها با توجه به تحلیل ۳ ساله اخیر کنکور و بودجه‌بندی مباحث در هریک از دروس، اطلاعات مناسبی جهت برنامه‌ریزی درسی در اختیار دانشجو قرار می‌دهد.

● مجموعه کتاب‌های کوچک: شامل کلیه نکات کاربردی در گرایش‌های مختلف کنکور کارشناسی ارشد می‌باشد که برای دانشجویان جهت جمع‌بندی مباحث در ۲ ماهه آخر قبل از کنکور مفید است.

بدین‌وسیله از مجموعه اساتید، مولفان و همکاران محترم خانواده بزرگ ماهان که در تولید و به‌روزرسانی تألیفات ماهان نقش مؤثری داشته‌اند، صمیمانه تقدیر و تشکر می‌نماییم.

دانشجویان عزیز و اساتید محترم می‌توانند هرگونه انتقاد و پیشنهاد درخصوص تألیفات ماهان را از طریق سایت ماهان به آدرس mahan.ac.ir با ما در میان بگذارند.

سخن مؤلف

مقدمه مؤلف

با توجه به نیاز روزافزون دانشجویان مبنی بر در اختیار داشتن منابعی قابل اعتماد جهت آمادگی آزمون ورودی مقاطع تحصیلات تکمیلی بر آن شدیم که تجربه حاصل از چندین سال تدریس دوره های آمادگی آزمون را در قالب سری کتب دروس تخصصی آزمون کارشناسی ارشد و دکترای تخصصی مجموعه مهندسی مواد و متالورژی در اختیار دانشجویان قرار دهیم.

کتابی که پیش روی شماست، نیاز به منابع مطالعاتی متنوع را تا حد امکان برطرف کرده و شامل تست های همراه با پاسخ تشریحی کامل از سال ۸۰ می باشد.

از آنجاییکه هیچ اثر تالیفی خالی از ایراد نیست، هر گونه اشکال در متن کتاب و یا هر پرسشی را می توانید به آدرس ایمیل D.kokabi@irost.org ارسال کنید تا در ادامه بتوانیم به حالت ایده آل نزدیکتر شویم.

بر خود لازم میدانم از تمامی دانشجویانی که در این سالها همراه بنده بوده اند سپاسگزار کنم. از پدر و مادر عزیزم و اصلی ترین فرد که انگیزه و انرژی تالیف کتب را در من ایجاد کرد، از صمیم قلب تشکر می کنم و امیدوارم این کتب کمکی هرچند کوچک در راستای اعتلای دانشجویان عزیز مجموعه مهندسی مواد باشند.

فصل اول - کریستالوگرافی	۶
تست‌ها و پاسخ تشریحی فصل اول	۳۱
فصل دوم - نفوذ در جامدات	۴۴
تست‌ها و پاسخ تشریحی فصل دوم	۵۷
فصل سوم - نمودارهای فازي دوتائی	۷۰
تست‌ها و پاسخ تشریحی فصل سوم	۹۶
فصل چهارم - دیاگرام تعادلی	۱۱۹
تست‌ها و پاسخ تشریحی فصل چهارم	۱۵۳
فصل پنجم - دیاگرام‌های سه‌تایی	۱۶۸
تست‌ها و پاسخ تشریحی فصل پنجم	۱۸۵
فصل ششم - جوانه‌زنی و رشد	۱۹۳
تست‌ها و پاسخ تشریحی فصل ششم	۱۹۹
فصل هفتم - فصل مشترک‌ها	۲۰۹
تست‌ها و پاسخ تشریحی کنکور سراسری فصل هفتم	۲۲۱
فصل هشتم - تابکاری، رسوب سختی و انواع استحاله‌های فازي	۲۲۶
تست‌ها و پاسخ تشریحی کنکور سراسری فصل هشتم	۲۴۴
سوالات کنکور از سال ۹۰ تا ۹۹	۲۵۶

فصل اول

کریستالوگرافی

مقدمه

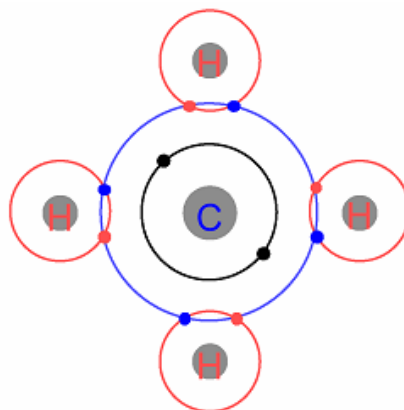
کریستالوگرافی یعنی علم شناخت شبکه‌های مواد. این علم برای دانشجویان مهندسی متالورژی از این جهت حائز اهمیت است که هرگونه خواص فیزیکی و مکانیکی و یا حتی خواص الکتریکی، مغناطیسی و نوری مواد به ساختار کریستالی مواد وابسته است.

پیوندهای اتمی و انواع آنها

مواد گوناگون با توجه به نوع عناصر تشکیل‌دهنده چهار نوع پیوند می‌توانند داشته باشند:

۱-۲-۱- پیوند کووالانسی: اتم‌های بعضی از عناصر ممکن است به وسیله شریک شدن در یک یا چند الکترون اتم‌های مجاور حالت پایداری پیدا کنند. در این حالت یون به وجود نمی‌آید بلکه پیوندی محکم به علت نیروی جاذبه بین الکترون‌های اشتراکی و هسته‌های مثبت به وجود می‌آید. این پیوند را کووالان ، هموپولار یا اشتراکی می‌نامند که غیرممتقارن و جهت‌دار بوده و ساختار آنها شکنندگی و تردی بالا و هدایت الکتریکی و حرارتی کمی دارند.

در شکل ۱ شمایی از این نوع پیوند در گاز متان دیده می‌شود که کربن برای پرکردن ظرفیت خالی الکترونی خود با چهار اتم هیدروژن پیوند برقرار می‌کند.



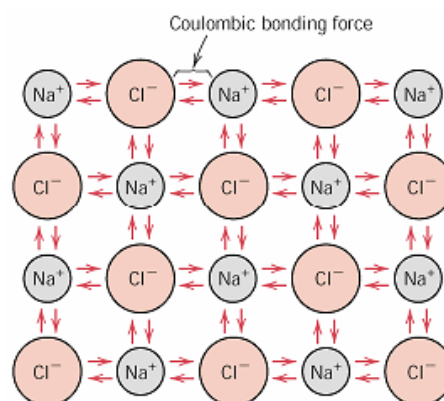
شکل ۱: پیوند کووالانسی در متان

نکته: در اکثر موادی که با این پیوند به‌وجود آمده‌اند، استحکام پیوند بسیار قوی‌تر از بقیه انواع پیوندهاست.

نکته: بین دو غیرفلز ایجاد می‌شود بنابراین این پیوندها جهت‌دار و نامتقارن هستند.

۲-۲-۱- پیوند یونی: در این پیوند عنصری مانند کلر که دارای یک جای خالی الکترونی در لایه والانس خود است، الکترونی را از عنصری مانند سدیم که یک الکترون تنها در لایه آخر خود دارد، دریافت می‌کند. این انتقال به‌صورت کامل، باعث ایجاد پیوند یونی بین عنصر کلر و سدیم می‌گردد.

در این حالت یک پیوند بین اتم‌ها برقرار می‌شود که مثل پیوند کووالانسی یک پیوند قوی است. در شکل ۲ می‌بینید که با رفتن الکترون از لایه آخر اتم سدیم به لایه آخر اتم کلر بین این دو کاتیون و آنیون ایجاد شده است. در این حالت جاذبه قوی بین این کاتیون و آنیون ایجاد شده و نمک طعام NaCl تولید می‌شود. در این حالت ماده به‌دست آمده خواص کاملاً متفاوتی نسبت به مواد تشکیل‌دهنده دارد.



شکل ۲: پیوند یونی در نمک طعام

نکته: به دلیل وجود پیوندهای قوی در مواد یونی و کووالانسی، انعطاف‌پذیری کمی در مواد جامدی که دارای این پیوندها هستند وجود دارد.

نکته: بین کاتیون‌ها و آنیون‌ها جاذبه‌ای وجود دارد که به نام پیوند کولومی نامگذاری می‌شود. میزان این جاذبه با میزان فاصله اتم‌ها نسبت به هم رابطه داشته و به‌صورت زیر است:

$$E_A = -\frac{A}{r}$$

نکته: همچنین بین هسته‌های مثبت این کاتیون‌ها و آنیون‌ها و بین الکترون‌های زیر لایه ظرفیت این دو دافعه‌ای با هم وجود دارد. میزان این دافعه به‌صورت زیر است:

$$E_R = \frac{B}{r^x}$$

نکته: در روابط بالا A و B اعداد ثابت مربوط به هر ماده و r فاصله مرکز کاتیون‌ها و آنیون‌ها از هم است.

نکته: هرچه ظرفیت دو عنصر و اختلاف الکترونگاتیوی آنها بیشتر باشد، پیوند آنها قوی‌تر است. این نوع پیوند غیرجهت‌دار و متقارن است.

همانطور که در مورد نمک طعام هم دیده شد در پیوند یونی یک جزء فلزی با یک جزء غیرفلزی پیوند برقرار می‌کند. مهم‌ترین موادی که پیوند یونی و یا کووالانسی دارند سرامیک‌ها هستند که با توجه به قدرت بالای پیوندها انعطاف‌پذیری کمی در دمای

محیط دارند. انرژی پیوند یونی بین ۶۰۰ تا ۱۵۰۰ کیلوژول بر مول است که مقدار بسیار بالایی است. علاوه بر عدم انعطاف پذیری این مواد به دلیل انرژی بالای پیوند، دمای ذوب آنها نیز به همین دلیل بسیار بالاست. همچنین مواد یونی و کووالانسی به دلیل نداشتن الکترون آزاد از نظر الکتریکی و حرارتی عایق‌اند.

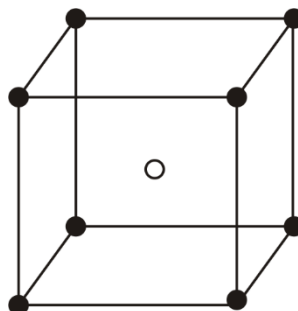
انواع شبکه‌های بلوری مهم در ساختارهای یونی بصورت زیر دسته بندی می‌شوند.

- شبکه کلرید سدیم (CsCl)

ساختار Cs به صورت مکعبی ساده است و مواضع بین‌نشینی مکعبی توسط یون‌های Cl پر می‌شوند.

$$\frac{r_{\text{Cs}^+}}{r_{\text{Cl}^-}} = \frac{1/67}{1/81} = 0/92$$

$$\Rightarrow 0/732 \leq \frac{r^+}{r^-} < 1 \Rightarrow \text{CN} = 8$$



●: Cs^+
○: Cl^-

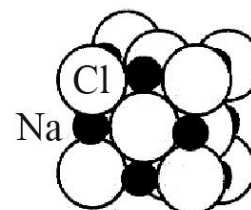
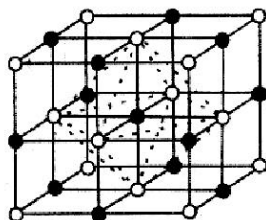
- شبکه کلرید سدیم (NaCl)

سدیم مواضع FCC را اشغال می‌کند و کلر در مواضع بین‌نشینی اکتاهدرال جای می‌گیرد.

$$\text{تعداد یون‌های } \text{Na}^+ : 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

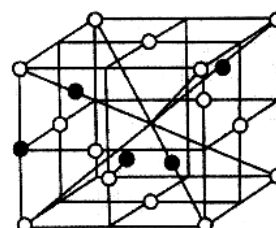
$$\text{تعداد یون‌های } \text{Cl}^- : 1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4$$

$$\frac{r_{\text{Na}^+}}{r_{\text{Cl}^-}} = \frac{0/97}{1/81} = 0/536 \Rightarrow 0/414 \leq \frac{r^+}{r^-} < 0/732 \Rightarrow \text{CN} = 6$$



- شبکه بلندروی (ZnS)

Zn مواضع FCC را اشغال می‌کند و S مواضع بین‌نشینی تتراهدرال را پر میکند.



تعداد یون‌های Zn^{2+} = ۴

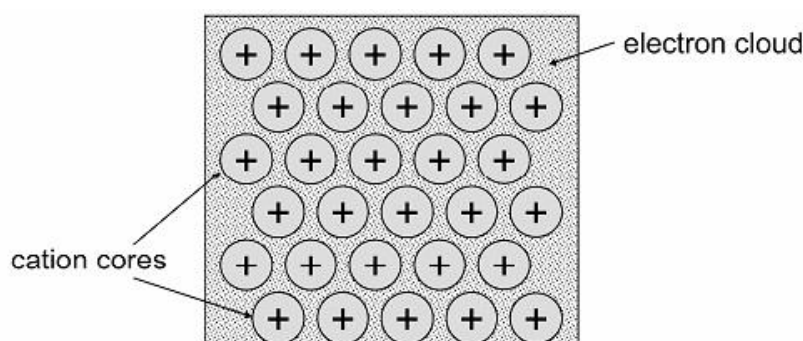
۴ = تعداد یونهای S^{2-}

$$\frac{r_{Zn^{2+}}}{r_{S^{2-}}} = \frac{0.74}{1.84} = 0.402 \Rightarrow 0.225 \leq \frac{r^+}{r^-} < 0.414 \Rightarrow CN = 4$$

نکته: با افزایش $\frac{r^+}{r^-}$ ، عدد همسایگی و PF بلور یونی افزایش می‌یابد.

۳-۲-۱- پیوند فلزی: در صورتی که تعداد مکان‌های خالی الکترونی لایه آخر اتم‌ها بالا باشد، چندین اتم برای پر کردن لایه آخر خود، الکترون‌ها را با اتم‌های دیگر به اشتراک می‌گذارند. طبیعی است که این پیوند با توجه به ماهیت اشتراکی خود مانند حالت کووالانسی است. اما با توجه به زیاد بودن اتم‌های مشترک با یک اتم، پیوند اتمی ضعیف‌تر از پیوند کووالانسی است. همانطور که در شکل ۳ دیده می‌شود، در پیوند فلزی برخلاف پیوند کووالانسی که مکان قرارگیری الکترون‌های اشتراکی مشخص است. الکترون‌های اشتراکی دارای مکان مشخص نبوده و کاتیون‌ها در میان دریایی از الکترون‌های آزاد قرار می‌گیرند. این حالت به این دلیل است که در پیوند کووالانسی تعداد ظرفیت خالی الکترونی در لایه آخر پایین است. اما در مورد فلزات تعداد ظرفیت خالی بسیار بیشتر است.

نکته: یک اتم فلزی برای پر کردن ظرفیت خالی خود علاوه بر اشتراک گذاردن درصدی از الکترون‌های خود با اتم‌هایی که با آنها تماس نزدیک (اتم‌های همسایه رده اول) دارند، درصدی از الکترون‌های اتم‌هایی که با اتم‌های همسایه رده اول تماس دارند (اتم‌های همسایه رده دوم) را نیز به اشتراک می‌گیرد. در این حالت احتمال وجود الکترون لایه ظرفیت هر اتم در هر کجای ماده وجود دارد و الکترون حالت شناور دارد. این شناور بودن است که موجب رسانایی الکتریکی و حرارتی فلزات می‌شود.



شکل ۳: پیوند فلزی

نکته: به اتم‌هایی که در یک فلز با یک اتم مشخص پیوند برقرار می‌کنند و در نتیجه در کنار آن اتم قرار می‌گیرند، اتم‌های همسایه گفته و به تعداد این اتم‌ها عدد همسایگی اطلاق می‌شود.

نکته: پیوندهای فلزی غیرجهت‌دار و متقارن است به همین علت هنگام تغییر فرم شکسته نمی‌شوند.

نکته: در پیوندهای فلزی به علت هم‌اندازه بودن اتم‌ها عدد همسایگی می‌تواند تا ۱۲ افزایش یابد، در حالی که در پیوند کووالانسی کمترین عدد همسایگی را داریم. پیوند یونی هم بین این دو حالت است.

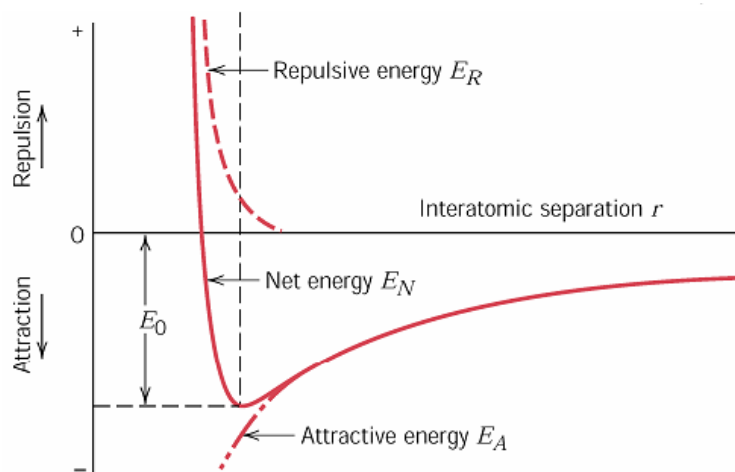
نکته: فشردگی ساختارهای فلزی و یونی نسبت به ساختار کووالانسی بیشتر است.

۴-۲-۱- پیوند واندروالسی: این نوع پیوند ضعیف‌ترین پیوند در مواد است که به دلیل قطبیت لحظه‌ای اتم‌ها و ایجاد جاذبه بین اتم‌ها ایجاد می‌شود.

۳-۱- انرژی پیوند

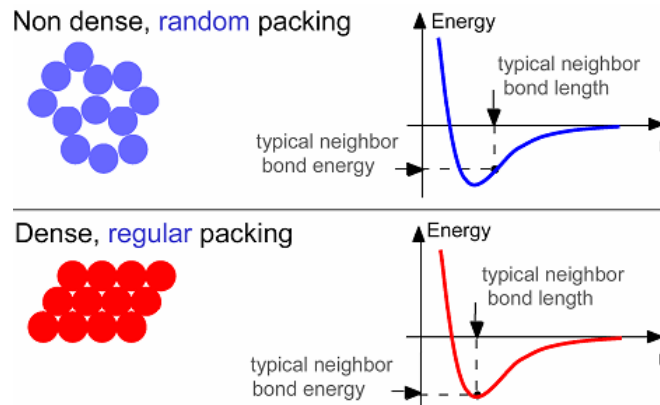
بدون توجه به نوع پیوند، در هر پیوند اتمی، دو اتم در فاصله تعادلی از هم قرار می‌گیرند که در این حالت نیروهای جاذبه بین الکترون‌های هر اتم با هسته اتم دیگر و نیروهای دافعه هسته‌ها و الکترون‌ها، به صورت تعادلی درمی‌آید. در اکثر حالات مقدار شعاع اتمی r_0 مساوی با نصف فاصله دو هسته اتم است. اما این حالت همیشگی نیست. با توجه به اینکه در اثر پیوند به چه مقدار انرژی سیستم کاهش می‌یابد، خواص فیزیکی و مکانیکی ماده تغییر می‌کند.

اگر دو اتم از فاصله بینهایت به هم نزدیک شوند دو نیروی جاذبه و دافعه همانطور که گفته شد، از طرف این دو اتم به هم اعمال می‌شوند. این حالت در شکل ۴ دیده می‌شود همانطور که در شکل دیده می‌شود، تا فواصل خیلی نزدیک نیروی دافعه‌ای بین دو اتم وجود ندارد اما با رسیدن دو اتم به یک فاصله مشخص نیروی دافعه به میزان بسیار زیادی ایجاد می‌شود. اما نیروی جاذبه بین دو اتم در همه فواصل وجود دارد. اگر برای یافتن نیروهای اعمالی روی اتم این دو نیروی جاذبه و دافعه را با هم جمع کنیم به منحنی سومی می‌رسیم که در شکل ۴ دیده می‌شود.



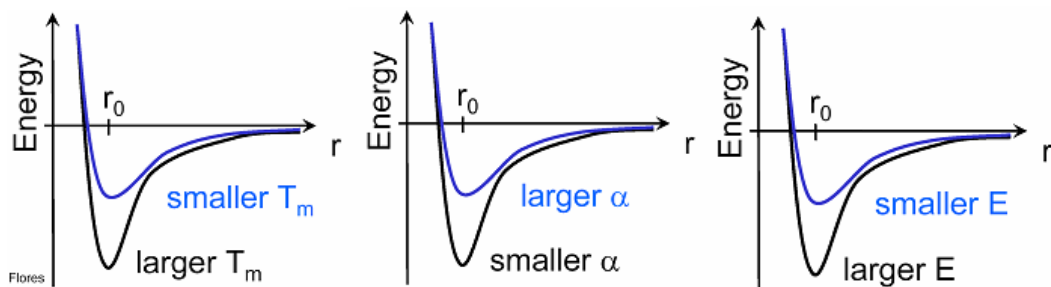
شکل ۴: نیروی دافعه و جاذبه بین دو اتم. جمع نیروهای بین دو اتم به صورت خط پر نمایش داده شده است.

این منحنی سوم مانند یک گودی است که اگر توپی در هر طرف این گودی قرار دهیم، توپ تمایل دارد به سمت پایین این گودی حرکت کرده و انرژی پتانسیل خود را کاهش دهد. حالت انرژی دو اتم هم به همین شکل است. دو اتم سعی می‌کنند در فاصله‌ای نسبت به هم قرار گیرند که دارای انرژی مینیمم شوند. یعنی فاصله بین دو اتم به اندازه r_0 است. با قرارگیری این دو اتم در این فاصله انرژی دو اتم به اندازه E_0 کاهش می‌یابد. به همین دلیل است که اتم‌های مواد سعی می‌کنند در فواصل مشخص در کنار هم قرار گرفته و علاوه بر ایجاد نظم دوربرد در ماده، حالتی با چگالی بالاتر ایجاد کنند. این حالت در شکل ۵ دیده می‌شود.



شکل ۵: تمایل ایجاد نظم در مواد برای رسیدن به حالت انرژی درونی کمتر

➤ توضیح مهم: با توجه به میزان کاهش انرژی E_0 در هنگام ایجاد پیوند خصوصیات فیزیکی و مکانیکی ماده تعیین می‌شود. ماده‌ای که در آن کاهش انرژی بیشتر است دارای دمای ذوب بالاتری است. همچنین ماده‌ای که E_0 بالاتری دارد به دلیل پایدارتر بودن دارای ارتعاشات کمتر اتمی است و در نتیجه ضریب انبساط حرارت کمتری خواهد داشت. همچنین به دلیل افزایش قدرت پیوند با بالا رفتن E_0 میزان مدول الاستیک ماده بالا می‌رود. این سه مطلب در شکل ۶ دیده می‌شود.



شکل ۶: بالا رفتن دمای ذوب و مدول الاستیک و کاهش ضریب انبساط حرارتی با بالا رفتن انرژی پیوند

نکته: ضریب انبساط حرارتی ساختمان کووالانسی به علت وجود فضای داخلی خالی در ساختار کم است در نتیجه شاهد انبساط کمتری هستیم.

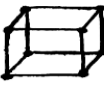
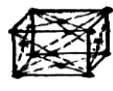
۴-۱- ساختار بلوری فلزات

بلور را بصورت آرایه ایی منظم از اتمها در فضا تعریف می‌کنند. ساختارهای بلوری بسیار متفاوتی موجود است و بعضی از آنها کاملاً پیچیده اند.

✚ سلول واحد ساختار بلوری کوچکترین گروه از اتمهایی است که واجد تقارن بلوری هستند که در صورت تکرار در همه جهات، شبکه بلوری را تشکیل می‌دهند.

۴-۱-۱- چهارده شبکه براوه:

در صورت در نظر گرفتن مکان‌های علاوه بر گوشه‌های سلول واحد، در مرکز سلول و یا در مرکز وجوه شش وجهی‌ها می‌توان سلول‌های واحد مختلفی را در نظر گرفت. براوه اثبات کرد که تنها چهارده حالت برای چیدن منظم اتم‌ها وجود دارد. این حالات در شکل زیر دیده می‌شود.

	ساده (Primitive)	قاعده‌های مرکزدار (Base Centered)	مرکزدار (Body Centered)	سطوح مرکزدار (Face Centered)
سه شیب (Triclinic) $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$				
تک شیب (Monoclinic) $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$				
شش وجهی (Hexagonal) $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$				
لوزی‌جی (Rhombohedral) $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$				
مکعب مستطیلی (Orthorhombic) $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
چهاروجهی (Tetragonal) $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
مکعبی (Cubic) $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				

نکته: تعداد اتم‌های سازنده هر کدام از سلول‌های واحد اشاره شده در بالا از رابطه زیر به دست می‌آیند:

$$\text{تعداد اتم مرکز} + \frac{\text{تعداد اتم وجه}}{2} + \frac{\text{تعداد اتم کج}}{8} = \text{تعداد اتم سازنده}$$

۱-۴-۲- مفاهیم کلی

جهت آشنایی با شبکه‌های کریستالی مختلف در فلزات ابتدا لازم است یک سری مفاهیم کلی را یادآور شویم:

۱-۲-۴-۱ عدد همسایگی یا هماهنگی (CN) : تعداد اتم‌های مماس بر هر اتم در سلول واحد می‌باشد.

بر اساس اندازه اتم بین نشین و اندازه‌ی اتم زمینه هر اتم دارای عدد همسایگی مشخصی خواهد بود که در زیر آورده شده است.

$$\frac{r}{r'} < 0.155 \rightarrow C.N = 2$$

$$\frac{r}{r'} < 0.225 \rightarrow C.N = 3$$

$$\frac{r}{r'} < 0.414 \rightarrow C.N = 4$$

$$\frac{r}{r'} < 0.732 \rightarrow C.N = 6$$

$$\frac{r}{r'} < 1 \rightarrow C.N = 8$$

$$\frac{r}{r'} = 1 \rightarrow C.N = 1$$

۱-۲-۴-۲ جهت متراکم یا فشرده : از بیشمار جهتی که در یک سلول واحد وجود دارد ، جهتی که در آن اتم‌ها برهم مماسند، تراکم خطی آن ۱۰۰٪ می‌باشد، به عنوان جهت متراکم شناخته می‌شود.

۱-۲-۴-۳ صفحه فشرده یا متراکم : صفحه‌ای در سلول واحد که اولاً بیشترین تراکم را داشته باشد و ثانیاً حداقل دارای دو جهت متراکم باشد.

۱-۲-۴-۴ دانسیته خطی (Linear Density) : نسبت تعداد اتم‌های موجود بر روی یک خط به طول خط است.

$$L.D = \frac{\text{تعداد اتم‌های روی خط}}{\text{طول خط}}$$

۱-۲-۴-۵ دانسیته صفحه‌ای (Planar Density) : نسبت تعداد اتم‌های موجود در صفحه به مساحت صفحه است.

$$P.D = \frac{\text{تعداد اتم‌های موجود در صفحه}}{\text{مساحت صفحه}}$$

۱-۲-۴-۶ ضریب تراکم فضایی یا ضریب فشردگی (Packing Factor) : حجم اتم‌های درون واحد حجم سلول واحد است.

$$P.F = \frac{\text{حجم اتم‌های درون سلول واحد}}{\text{حجم سلول واحد}}$$

نکته : چون اتم‌ها کروی فرض می‌شوند P.D و P.F هیچگاه یک نمی‌باشد.

نکته : در محاسبات برای اتم‌های مشترک بین چند سلول واحد یا صفحه باید سهم هر سلول واحد یا صفحه از اتم مورد نظر را در نظر داشت.

➤ توضیح: به حالتی که اتمها فقط در کنج‌های سلول واحد حضور دارند، حالت را با P نمایش می‌دهیم. وقتی علاوه بر

گوشه‌ها، یک اتم در مرکز قرار گرفته باشد، حالت را I می‌نامیم. حالتی را که اتمها بر روی وجوه ۶ وجه سلول قرار

گرفته باشند حالت را F می‌نامیم. همچنین به حالتی که اتم علاوه بر کنج‌ها در مرکز دو وجه رو به هم قرار گرفته باشد، حالت را C نمایش می‌دهیم.

بنابراین برای هر سلول واحد از نوع P یک اتم، برای هر سلول واحد از نوع I، دو اتم، برای سلول از نوع F چهار اتم و برای سلول از نوع C دو اتم وجود دارد.

۵-۱- شبکه بلوری فلزات

فلزات در حالت جامد معمولاً به صورت بلورین هستند:

- تک بلور Monocrystalline
- چندبلور Polycrystalline

عموماً فلزات چندبلوری هستند:

بلورهای یک فلز چندبلوری با عنوان دانه (Grain) شناخته می‌شوند.

ساختار داخلی دانه‌ها که شامل چگونگی چیدمان اتم‌ها در داخل دانه‌هاست، ساختمان بلوری (Crystal Structure) نامیده می‌شود.

➤ اغلب فلزات به صورت یکی از سه ساختار ساده متبلور می‌شوند:

۱- مکعبی مرکزدار (BCC) Body Centered Cubic

۲- مکعبی با وجوه مرکزدار (FCC) Face Centered Cubic

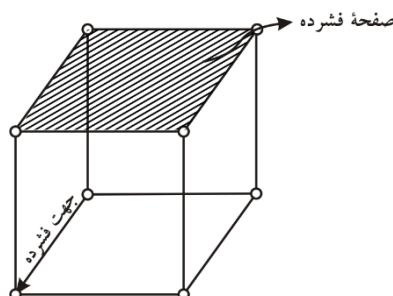
۳- هگزاگونال فشرده (HCP) Hexagonal Close Pack

۵-۱-۱- شبکه مکعبی ساده (SC)

در این شبکه‌ها، اتم‌ها تنها در کنج‌ها قرار گرفته‌اند به عبارتی دیگر موقعیت قرارگیری اتم‌ها (۰۰۰) می‌باشد.

$$n = 8 \times \frac{1}{8} = 1$$

تعداد اتم‌ها :



اتم‌هایی که روی ضلع مکعب قرار گرفته‌اند بر هم مماسند بنابراین :

$$f(a,r): a = 2r$$

عدد همسایگی در این شبکه‌ها ۶ می‌باشد. (CN=۶) (به یک اتم در سه جهت فضایی و در هر جهت دو اتم مماس

است)

جهت فشرده در واقع اضلاع اصلی مکعب هستند بنابراین اندیس جهات فشرده به صورت $\langle 100 \rangle$ میباشد و صفحه فشرده وجوه اصلی مکعب هستند که با $\{100\}$ نشان داده می‌شوند.

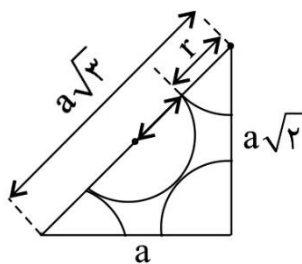
$$P.F_{sc} = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3} \pi r^3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52 \Rightarrow P.F_{sc} = 52\%$$

بنابراین ضریب تراکم فضایی در این شبکه ۵۲٪ می‌باشد. پس این ساختارها، ساختارهای غیرفشرده و ناپایداری می‌باشند عملاً هیچ فلزی دارای این شبکه نمی‌باشد و فقط اکسیژن و فلوئور در حالت جامد ساختار SC دارند.

۱-۵-۲- شبکه مکعبی مرکزدار (BCC)

موقعیت قرارگیری اتم‌ها در شبکه‌های BCC در مکان‌های $\langle 100 \rangle$ و $\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right]$ می‌باشد به عبارتی اتم‌ها علاوه بر کنج‌ها در مرکز مکعب هم قرار دارند. اتمی که در مرکز مکعب واقع شده است با اتم‌هایی که در گوشه‌ها قرار گرفته‌اند تماس خواهد داشت ولی اتم‌های گوشه‌ها با هم تماس نخواهند داشت.

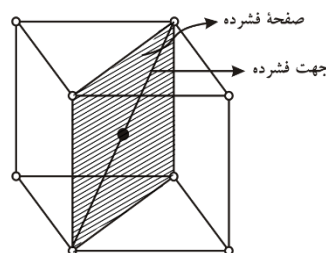
$$f(a, r) : a\sqrt{3} = 4r \Rightarrow a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$



از آنجا که اتم‌های موجود در گوشه‌ها برای هشت مکعب مجاور هم مشترک هستند، ساختمان سلول واحد BCC کلاً دارای ۲ اتم خواهد بود.

$$n = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$$

تعداد اتم‌های سلول واحد :



عدد همسایگی این شبکه‌ها ۸ می‌باشد. (CN = ۸) (به طور مثال هر اتم در مرکز سلول واحد را ۴ اتم از بالا و ۴ اتم از پایین احاطه کرده‌اند).

جهت فشرده از خانواده جهات $\langle 111 \rangle$ یعنی قطر اصلی مکعب می‌باشد و صفحه فشرده صفحه قطر اصلی مکعب یعنی از خانواده صفحات $\{110\}$ می‌باشد.

ضریب فشردگی در این ساختار ۶۸٪ می باشد (PF = ۶۸٪). بنابراین به طور کلی BCC، ساختمانی نیمه فشرده محسوب می شود که از چینش صفحات متراکم $\{110\}$ با آرایش ABAB... ساخته می شود.

$$P.F = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(a)^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\sqrt{3} \pi}{8} = 0.68$$

نکته: صفحات $\langle 111 \rangle$ صفحاتی مثلثی هستند که اضلاع آنها اقطار وجوه مکعب هستند.

نکته: اتم مرکز BCC، روی صفحه (۱۱۱) قرار ندارد.

فلزات معروفی که دارای ساختمان BCC می باشند به صورت زیر می باشند:

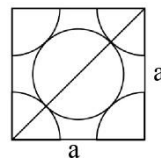
فلزات قلیایی: Li, Na, K, Rb, Cs, Fr

فلزات واسطه: $Fe_{\alpha}, Cr, V, Nb, W, Ta, Mn, Ti_{T > 882^{\circ}C}$

تمامی عناصر فوق کاربردی قوی می باشند که به عنوان عنصر آلیاژی در فولادها مورد استفاده قرار می گیرند.

۱-۵-۳- شبکه مکعبی با سطوح مرکزدار (FCC)

در سلول واحد FCC علاوه بر اتم های موجود در گوشه های مکعب در مرکز هر وجه مکعب نیز یک اتم واقع شده است ولی در مرکز مکعب اتمی وجود ندارد. اتم هایی که در مرکز سطوح مکعب واقع شده اند با اتم هایی که در گوشه های مجاور قرار گرفته اند تماس دارند.



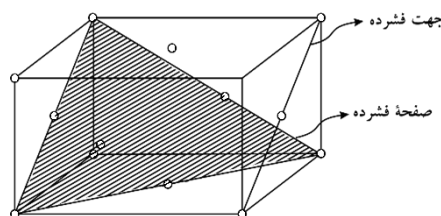
نمایی از صفحات $\{100\}$

$$f(a, r): a\sqrt{2} = 4r \Rightarrow a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

از آنجایی که اتم گوشه ها برای ۸ مکعب مجاور و اتم هر وجه برای ۲ مکعب مجاور مشترک هستند بنابراین ساختمان بلوری FCC در هر سلول واحد کلاً ۴ اتم خواهد داشت:

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

تعداد اتم ها:



عدد همسایگی این ساختار ۱۲ می باشد.

جهت فشرده در ساختار FCC از خانواده $\langle 110 \rangle$ می باشد به عبارتی قطر وجوه می باشد و صفحه فشرده صفحات

مثلثی درون سلول واحد از خانواده $\{111\}$ می باشد. ضریب فشردگی اتمی در این ساختارها ۷۴٪ (PF = ۷۴٪)

می باشد بنابراین FCC ساختمانی فشرده و پایدار محسوب می شود که از چینش صفحات متراکم $\{111\}$ با آرایش

ABCABC... روی هم ایجاد می‌شوند. فلزاتی که ساختار FCC دارند به دلیل فشردگی بالا دارای شکل پذیری و قابلیت انعطاف پذیری مطلوبی می‌باشند.

$$P.F = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

عمده فلزات این ساختار عبارتند از :

Pb, Ni, Al, Cu, Fe_γ,

Co_{T>418°C}, Pd, Pt, Ag, Au

۱-۵-۴- شبکه شش وجهی (هگزاگونال) متراکم (HCP)

سلول واحد شبکه فضایی HCP از دو صفحه اصلی تشکیل شده که به صورت شش وجهی روی هم قرار گرفته‌اند. به طوری که در هر گوشه شش ضلعی‌های قاعده‌ها و مرکز آنها یک اتم جای گرفته و علاوه بر اینها سه اتم نیز در وسط حداثصل دو صفحه اصلی (قاعده‌ها) به شکل مثلث متساوی‌الاضلاع قرار گرفته‌اند. اتم‌هایی که در کنج‌ها قرار گرفته‌اند بر اتم مجاور خود مماس می‌باشند:

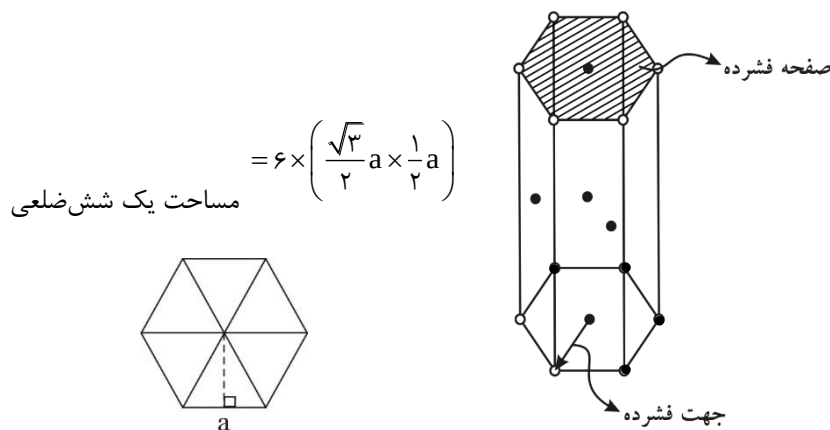
$$f(a, r): a = 2r$$

$$n = \left(12 \times \frac{1}{6}\right) + \left(2 \times \frac{1}{2}\right) + 3 = 6$$

تعداد اتم‌ها

در اینجا هم مدل گوی‌های فشرده کمک می‌کند $CN = 12$ بهتر فهمیده شود. عدد همسایگی در این ساختارها ۱۲ می‌باشد. ($CN = 12$)

$$V_{hcp} = 3\sqrt{2}a^3 \quad \text{یا} \quad V_{hcp} = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2c$$



نکته : در HCP ایده‌آل همواره نسبت $\frac{c}{a}$ مقدار مشخص ۱/۶۳ را دارد می‌باشد.

✚ جهت فشرده اقطار اصلی ۶ وجهی می باشد که از خانواده جهات $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ می باشد و صفحه فشرده صفحات پایه و قاعده می باشند که از خانواده صفحات $\{0001\}$ می باشد.

✚ ضریب فشردگی اتمی نیز در این ساختارها ۷۴٪ می باشد ($PF = 74\%$). بنابراین hcp ساختاری فشرده می باشد که از روی هم قرار گرفتن صفحات متراکم با آرایش ABAB... ایجاد می شوند.
فلزات معروف که دارای ساختار hcp هستند عبارتند از : Zr, Cd, Be, Ti, Co, Zn, Mg

۶-۱- اندیس گذاری جهات و صفحات

در بحث های خواص فیزیکی و مکانیکی مواد مهمترین مورد، شناخت صفحات مختلف در سلول واحد است.
برای اندیس گذاری صفحات، جهات و یا نقاط مهم ترین نکته انتخاب محورهای مختصات است.

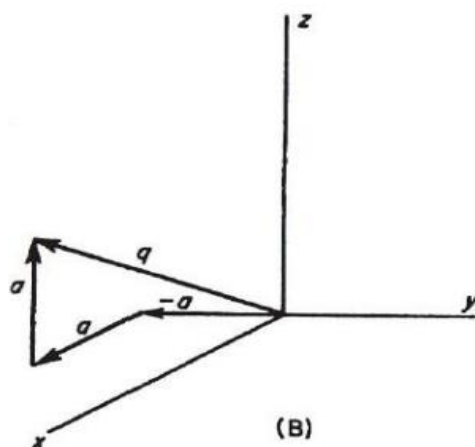
برای تعیین اندیس یک جهت در ساختارها در ابتدا باید مرکز مختصات و جهات اصلی را تعیین کنیم. مراحل بدست آوردن یک اندیس جهت بصورت زیر می باشد:

۱- از مبدا مختصات برداری به موازات جهت مورد نظر رسم می شود (بعبارتی مبدا مختصات را در نقطه شروع جهت مورد نظر قرار می دهیم).

۲- مولفه های بردار بر روی سه محور مختصات تعیین می شوند.

۳- مولفه های بردار به کوچک ترین اعداد صحیح تبدیل می شوند.

نکته: همواره جهات X, Y و Z بصورت استاندارد به شکل زیر باید در نظر گرفته بشوند.



نکته: اندیس میلر یک جهت در براکت و به صورت $[hkl]$ نشان داده می شود. همچنین تمام جهات هم نوع به صورت $\langle hkl \rangle$ نشان داده می شوند. که به آنها خانواده جهات گفته می شود.

نکته: بهتر است که مبدا مختصات در ابتدای جهت موردنظر انتخاب شود. ابتدا و انتهای جهت در صورت تست ها اهمیت ندارد بطوریکه اگر اندیس بدست آورده شده در گزینه ها وجود نداشته باشد، می توان تمامی مولفه های اندیس را همزمان در مقدار ۱- ضرب کرد.

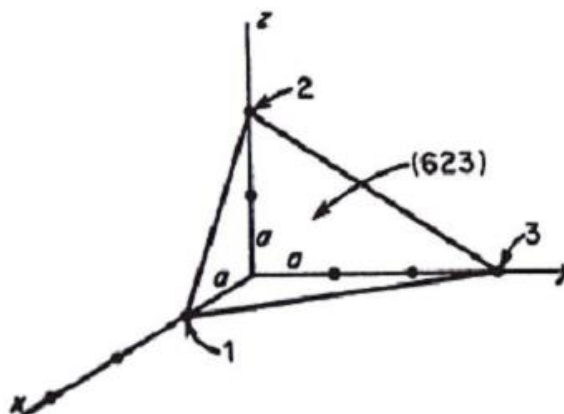
نکته: در صورتی که جهت موردنظر در راستای منفی یکی از محورهای مختصات حرکتی داشته باشد، در نهایت روی اندیس موردنظر علامت (-) قرار می گیرد.

۱-۶-۱- اندیس گذاری صفحات

برای صفحات مکعبی می توان با استفاده از روش زیر تعیین اندیس صفحات را انجام داد:

روش تعیین اندیس های صفحات در شبکه مکعبی

- ۱- انتخاب مبدا مختصات مناسب. مبدا مختصات مناسب در صفحات باید دارای ویژگی های زیر باشد:
 - روی صفحه مورد نظر قرار نداشته باشد.
 - با امتداد از آن در راستاهای مختصاتی، یا با صفحه مورد نظر برخورد کنیم و یا با آن موازی باشیم.
 - ۲- فاصله نقاط تقاطع صفحه موردنظر با مبدا تعیین و مقدار آن ها را یادداشت میکنیم.
 - ۳- اندیس میلر صفحه متناسب با معکوس فاصله های بدست آورده شده است که باید به کوچک ترین اعداد صحیح تبدیل شوند.



$$\left(\frac{1}{1}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right)$$

$$(623)$$

نکته: اندیس میلر یک صفحه در پرانتز و به صورت (hkl) نشان داده می شود ولی تمام صفحات هم نوع به صورت {hkl} نشان داده می شوند.

نکته: اندیس میلر یک صفحه و جهت عمود بر آن صفحه یکسان هستند.

بطور مثال اندیس وجه مکعب که عمود بر محور x است (۱۰۰) و اندیس محور x نیز برابر [۱۰۰] است.

همچنین اندیس صفحه اکتاهدرال در مکعب (۱۱۱) و اندیس قطر مکعب که عمود بر آن است نیز [۱۱۱] است.

۱-۶-۲- اندیس گذاری شبکه هگزاگونال

در شبکه هگزاگونال به جای در نظر گرفتن سه بردار، چهار بردار را برای اندیس گذاری در نظر می گیریم که در این حالت سه بردار ابتدایی بردارهای صفحه شش ضلعی هستند و بردار چهارم برابر حرکت جهت مورد نظر در راستای بردار C است.

✚ در شبکه هگزاگونال همیشه صفحات به صورت چهار مولفه ای هستند. یعنی بصورت (hkl) و همواره رابطه $(h + k + i = 0)$ برقرار است. یعنی با به دست آوردن دو مولفه، مولفه سوم به دست می آید.

✚ در اندیس گذاری جهات هگزاگونال ابتدا جهت مورد نظر را بر روی صفحه قاعده شش ضلعی تصویر کرده، مقادیر مولفه های a_1 و a_2 و a_3 را بدست می آوریم. سپس مقدار تغییر ارتفاع جهت یعنی مقدار حرکت در راستای C را تعیین می کنیم.

✚ در اندیس گذاری صفحات هگزاگونال نیز ابتدا a_1, a_2 و C را همانند روش تعیین اندیس صفحات مکعبی بدست آورده و از رابطه مجموع سه مولفه ابتدایی برابر صفر، مولفه سوم را بدست می آوریم.

نکته: در مورد جهات هر ضربی از بردار با آن برابر است. به عبارتی $[abc] = [na \quad nb \quad nc]$.

۳-۶-۱- چیدمان اتمی:

هر شبکه ای را به صورت چیدمانی از صفحه های اتمی فشرده مشابه می توان در نظر گرفت. این صفحات را با توجه به موقعیت منحصر بفردشان با حروف A, B, C و ... نامگذاری می کنند. صفحه A صفحه ای است که اتم های آن هم در مکان های نوع A قرار گرفته اند و صفحه B چیدمان کاملاً مشابه صفحه A داشته در حالیکه موقعیت کلی مکان های آن نسبت به صفحه A با کمی تغییر در راستاهای مختصاتی قرار گرفته اند.

چیدمانهای زیر را صرفاً بخاطر بسپارید به این دلیل که در مبحث سیستم های لغزش نابجایی ها مورد استفاده خواهند داشت. چیدمان اتمی SC:

همانطور که دیده می شود صفحات (۱۰۰) از ساختار SC به صورت مشابه روی هم قرار می گیرند و شبکه SC را می سازند. به صورت ...AAA...

چیدمان BCC:

چیدمان اتمی bcc، از صفحات اتمی مشابه (۱۱۰) به صورت ...ABAB... می باشد.

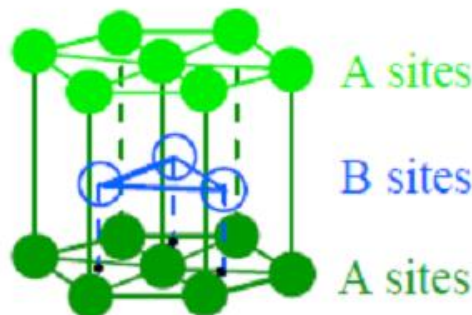
چیدمان FCC:

در fcc دسته صفحه های (۱۱۱) مشابه اند. همانطور که دیده می شود مرکزگیری صفحات اتمی مشابه به صورت ...ABCABC... است.

چیدمان HCP:

در مورد چیدمان شبکه هگزاگونال فشرده اگر به شکل زیر دقت شود اگر اتم هایی را که با ارتفاع $\frac{1}{2}$ هستند به هم وصل کنیم چیدمان دقیقاً مانند صفحه صفر است. تنها تفاوت در قرار نگرفتن این اتم ها در مکان های زیرین است. اتم های ارتفاع ۱ هم دقیقاً روی اتم های ارتفاع صفر قرار می گیرند. اگر قرارگیری اتم های صفر را A و اتم های $\frac{1}{2}$ را B در نظر بگیریم، چیدمان اتم های HCP به صورت ABAB است. اگر دقت شود صفحات (۰۰۱) رسم شده برای HCP دقیقاً با شکل صفحات (۱۱۱) fcc مشابه است. تنها تفاوت قرارگیری صفحات (۱۱۱) به صورت ABCABC است. میزان عدد همسایگی HCP هم مانند fcc

۱۲، است. اگر اتم قرار گرفته در مرکز ارتفاع صفر (یعنی صفحه (000)) را در نظر بگیرید. این اتم در این صفحه با شش اتم در تماس است. همچنین ۳ اتم در ارتفاع $\frac{1}{4}$ و سه اتم در ارتفاع $\frac{3}{4}$ با این اتم تماس دارند.



در مجموع برای جمع بندی بحث مورد نظر برای سیستم‌های بلوری می‌توان جدول زیر را داشت:

	SC	BCC	FCC	HCP
تعداد اتم	۱	۲	۴	۶
عدد هماهنگی C.N	۶	۸	۱۲	۱۲
فاکتور چیده شدن اتمی	۰/۵۲	۰/۶۸	۰/۷۴	۰/۷۴
رابطه a با r	$r=a$	$a\sqrt{3}=4r$	$a\sqrt{2}=4r$	$\frac{c}{a}=\sqrt{\frac{8}{3}}=1/63$ $a=2r\sqrt{3}$
نقطه یا نقاط سازنده	(000)	$(000) \left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$	$(000)\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$ $\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)\left(0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$	(000) $\left(\frac{1}{3}\frac{2}{3}\frac{1}{3}\right)$
ترتیب چیده شدن صفحات	AAA	AB AB	ABC ABC	AB AB
صفحات سازنده	(100)	(110)	(111)	(0001)
جهت برداشته		$\langle 111 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$
صفحه برداشته		$\{110\}$	$\{111\}$	$\{0001\}$

۴-۶-۱- ضرب داخلی و خارجی

برای بردارها دو حالت ضرب داخلی و خارجی وجود دارد که اولی به یک عدد و دومی به یک بردار عمود بر صفحه دو بردار اولیه می‌انجامد.

ضرب داخلی (اسکالر یا عددی)

اگر بخواهیم دو بردار $[u_1 v_1 w_1]$ و $[u_2 v_2 w_2]$ را در هم ضرب داخلی کنیم، داریم:

$$[U_1 V_1 W_1][U_2 V_2 W_2] = (U_1 U_2 + V_1 V_2 + W_1 W_2)$$

که این جواب یک عدد است. قبلا می دانستیم که این مقدار با ضرب اندازه بردارها در کسینوس زاویه بین آنها برابر است
بعبارتی:

$$[U_1 V_1 W_1][U_2 V_2 W_2] = |U_1 V_1 W| \times |U_2 V_2 W| \cos \phi$$

همانطور که می دانید، از قبل داشتیم:

$$\begin{aligned} |U_1 V_1 W| &= \sqrt{U_1^2 + V_1^2 + W_1^2} \\ |U_2 V_2 W_2| &= \sqrt{U_2^2 + V_2^2 + W_2^2} \\ \xrightarrow{(2),(1)} \cos \phi &= \frac{U_1 U_2 + V_1 V_2 + W_1 W_2}{\sqrt{U_1^2 + V_1^2 + W_1^2} \sqrt{U_2^2 + V_2^2 + W_2^2}} \end{aligned}$$

نکته: در نتیجه زاویه بین دو بردار به راحتی با این عمل ضرب داخلی به دست می آید.

نکته: هرگاه ضرب داخلی دو بردار صفر شود دو بردار بر هم عمودند.

ضرب خارجی دو بردار، برداری عمود بر آن دو بردار به ما می دهد. البته در این حالت ترتیب نوشتن بردارها (اول و یا دوم نوشتن یک بردار) جهت بردار به دست آمده از ضرب برداری را مشخص می کند. با تغییر در نوشتن بردارها جهت بردار به دست آمده از ضرب برداری قرینه می شود. برای دو بردار $[u_1 v_1 w_1]$ و $[u_2 v_2 w_2]$ ، بردار ضرب خارجی با ضرب اندازه این بردارها در سینوس زاویه بین آنها به دست می آید. یعنی:

$$[U_1 V_1 W_1] \wedge [U_2 V_2 W_2] = |U_1 V_1 W_1| \times |U_2 V_2 W_2| \times \sin \phi$$

۵-۶-۱- اندیس صفحه و بردار نرمال

برای هر صفحه ای با اندیس (hkl) یک جهت وجود دارد که هم اندیس و عمود بر صفحه است. البته این حالت فقط برای سلول مکعبی صدق می کند.

➤ مهم ترین استفاده از این بردار به دست آوردن جهاتی است که در صفحه قرار دارد. فرض کنید جهت (hkl) در صفحه مثلا $[111]$ قرار داشته باشد. اگر این جهت در آن صفحه باشد، بنابراین بر بردار نرمال صفحه عمود است پس ضرب داخلی این بردار در بردار $[111]$ باید صفر باشد.

➤ نتیجه: هر جهتی که این خاصیت را داشته باشد در صفحه $[111]$ قرار دارد. مانند:

$$[\bar{1}\bar{1}0], [1\bar{2}\bar{3}], [2\bar{2}\bar{4}], [\bar{2}11] \dots$$

➤ کاربرد دوم بردار نرمال، اندازه گیری زاویه بین دو صفحه است. چون دو بردار نرمال بر دو صفحه مربوط به خود عمودند. پس زاویه بین دو صفحه برابر زاویه بین دو بردار نرمال می شود و از طریق ضرب داخلی می توان این زاویه را حساب کرد. یعنی:

$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + L_1 L_2}{|h_1 k_1 L_1| \times |h_2 k_2 L_2|}$$

✚ کاربرد سوم بردار نرمال پیدا کردن جهتی است که در هر دو صفحه وجود دارد. توجه دارید که هر دو صفحه متقاطع غیرهمنام با هم محل تلاقی دارند. این محل تلاقی همان برداری است که در هر دو صفحه وجود دارد و آنرا فصل مشترک دو صفحه می‌نامند. پس بر هر دو بردار نرمال صفحات عمود است.

✚ کاربرد چهارم بردار نرمال پیدا کردن صفحه ایست که از دو جهت بلوری خاص می‌گذرد. کافی است دو بردار را در هم ضرب خارجی کنیم تا برداری را که بر این دو جهت درون صفحه عمود است را به دست آوریم.

✚ کاربرد پنجم بردار نرمال تعیین هم صفحه بودن سه بردار داده شده است. اگر سه بردار در یک صفحه باشند، در صورتیکه دو بردار را در هم ضرب خارجی کنیم و حاصل را در بردار سوم ضرب داخلی کنیم باید پاسخ صفر شود یعنی بردار نرمال به دست آمده از ضرب خارجی دو بردار اول، بر بردار سوم هم عمود باشد تا این بردار هم در آن صفحه قرار داشته باشد.

✚ کاربرد ششم بردار نرمال یافتن صفحات هم‌قطب است (صفحات هم‌محور). این صفحات به گونه‌ای کنار هم قرار می‌گیرند که محل تقاطع مشترک دارند. برای مثال یک کتاب باز را در نظر بگیرید. صفحات این کتاب هم‌محورند و محور مشترک، محوری در پشت جلد کتاب است. برای پیدا کردن این که آیا سه صفحه موردنظر هم‌محورند یا نه، کافی است محور مشترک دو صفحه اول را به دست آورده و در بردار نرمال صفحه سوم ضرب داخلی کنیم که پاسخ در این حالت باید برابر صفر باشد.

نکته: صفحاتی که در امتداد یک جهت مشترک متقاطع هستند، صفحات یک ناحیه را تشکیل می‌دهند و خط تقاطع، محور ناحیه نامیده می‌شود.

۶-۶-۱- فاصله صفحات هم‌ارز

صفحات هم‌ارز صفحاتی هستند که دارای اندیس‌های با ضرایب ثابتند. عبارتی همه این صفحات با ضرب شدن عددی ثابت در یک صفحه اولیه بدست می‌آیند. در نتیجه این صفحات همگی با هم موازی بوده و دارای یک فاصله یکسان از هم می‌باشند. صفحات هم‌ارز دارای جهات و فواصل یکسانند. فواصل صفحات را در سلول مکعبی برای صفحه (hkl) از فرمول زیر بدست می‌آوریم:

$$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + L^2}}$$

که a ثابت شبکه (طول هر یال مکعب) است.

عدد همسایگی در صفحه

برای پیدا کردن عدد همسایگی در صفحه باید تعداد اتم در تماس با هر کدام از اتم‌ها در صفحه مورد نظر را محاسبه کرد. برای این کار ابتدا باید صفحه اتمی موردنظر را تجسم کنید.

انرژی صفحات کریستالی

با توجه به تعداد اتم‌های قطع شده، انرژی سیستم برای یک صفحه کریستالی بالا می‌رود. مثلاً فرض کنید یک کریستال BCC در صفحه (۱۰۰) را مقطع زده‌ایم، به علت اینکه عدد همسایگی برای سلول BCC در صفحه (۱۰۰) صفر است، تعداد اتم‌های قطع شده برای هر اتم ۴ است. (چون در bcc عدد همسایگی حجمی ۸ است و چهار اتم هم به‌صورت قطع نشده در زیر صفحه (۱۰۰) موردنظر قرار دارند).

✚ انرژی سطحی هر صفحه به‌صورت حاصل ضرب ۸ (انرژی پیوند) در تعداد پیوندهای قطع شده است که در نهایت به سطح موردنظر تقسیم می‌شود.

۷-۶-۱- استحاله و تغییرات حجم ناشی از آن:

به موادی که در حالت جامد در چند شکل بلوری متبلور می‌گردند آلوتروپ گفته می‌شوند و به استحاله‌ای که در آن فقط شبکه بلوری و نه ترکیب شیمیایی یک فلز خالص تغییر می‌کند استحاله آلوتروپیک یا پلی مورفیزم گفته می‌شود. منبع اصلی ایجاد چنین تحولی نقایص بلوری به ویژه نقص در چیده شدن (Stacking Fault) می‌باشند.

تغییر حجم شبکه‌های

به طور کلی انقباض و انبساط به دو شکل حرارتی و شبکه‌ای می‌باشد و همیشه تغییر ساختار بلوری و تغییر دما با تغییر حجم همراه می‌باشد. طی استحاله‌های شبکه‌ای اصل بقای جرم و انرژی همواره برقرار است. به عبارتی مقدار ماده یا تعداد اتم‌ها تغییر نمی‌کند بلکه تعداد سلول‌های واحد تغییر می‌کند. فرض کنید ماده در حالت اول N اتم داشته باشد، مسلماً در حالت دوم هم N اتم دارد. برای حالت اول بطور مثال شبکه بلوری FCC، هر سلول واحد در برگرفته ۴ اتم است. بنابراین $\frac{N}{4}$ سلول واحد در حالت اول و $\frac{N}{2}$ سلول واحد در حالت دوم (با فرض شبکه BCC) داریم.

تغییر حجم شبکه‌ای طی استحاله فرضی از FCC به BCC بصورت زیر محاسبه می‌شود.

✚ عبارتی درصد تغییرات حجم حین تغییر شبکه عبارتست از اختلاف حجم نسبت به حجم اولیه سیستم.

✚ اگر مقدار عبارت منفی شود یعنی طی استحاله کاهش حجم داشته ایم و آنرا انقباض حین استحاله می‌نامیم و در صورت مثبت شدن مقدار، آنرا انبساط حین استحاله می‌نامیم.

۷-۱- مکان‌های بین نشین

در هر ساختار فلزی برخی از اتم‌ها به هم متصل نیستند. در نتیجه بین آنها یکسری فضای خالی هرچند کوچک وجود دارد که البته بزرگ‌ترین این فضاها نیز بسیار از کوچک‌ترین اتم‌ها، کوچک‌تر هستند.

براساس تعداد همسایه‌های اتم اصلی ساختار بلوری، این فضاها نامگذاری می‌شوند. دو نوع اصلی فضای بین نشینی عبارتند از فضاهای: اکتاهدرال (هشت وجهی) و تتراهدرال (چهاروجهی).

۱- فضاهای اکتاهدرال در سلول‌های مکعبی:

در ساختار BCC: وسط هر یک از وجوه و وسط هر یال فضای اکتاهدرال دارند.

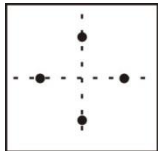
$$\text{در مجموع} = n_{\text{oct}}^{\text{BCC}} = 12 \times \frac{1}{4} + 6 \times \frac{1}{2} = 6 \Rightarrow r_{\text{oct}}^{\text{BCC}} = 0.155R$$

در ساختار FCC: وسط پال‌ها و مرکز سلول واحد فضای اکتاهدرال دارند.

$$\text{در مجموع} = n_{\text{oct}}^{\text{FCC}} = 12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4 \Rightarrow r_{\text{oct}}^{\text{FCC}} = 0.414R$$

۲- فضاهای تتراهدرال در سلول‌های مکعبی:

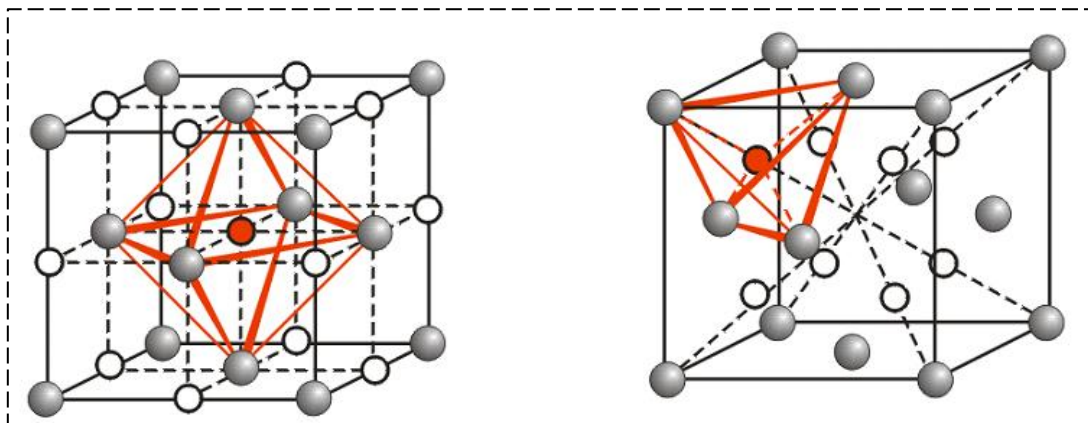
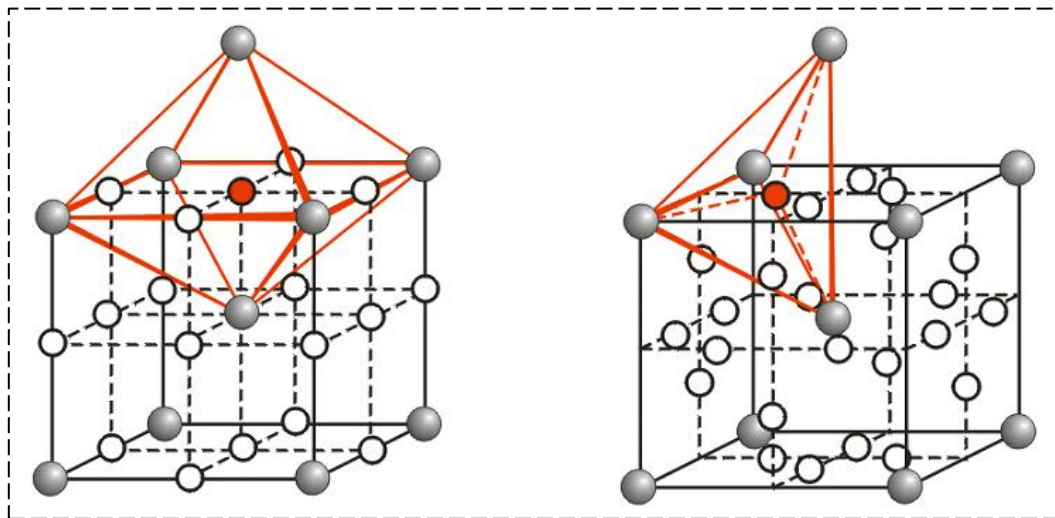
در ساختار BCC: روی هر وجه در فاصله $\frac{1}{4}$ از میانه هر ضلع قرار دارند.



$$\text{در مجموع} = n_{\text{tet}}^{\text{BCC}} = 6 \times 4 \times \frac{1}{4} = 12 \Rightarrow r_{\text{tet}}^{\text{BCC}} = 0.29R$$

در ساختار FCC: در فاصله $\frac{1}{4}$ از گوشه‌های اقطار داخلی مکعبی قرار دارند.

$$\text{در مجموع} = n_{\text{tet}}^{\text{FCC}} = 8 \times 1 = 8 \Rightarrow r_{\text{tet}}^{\text{FCC}} = 0.225R$$



نکته: تعداد فضاهای بین نشین ساختار BCC از FCC بیشتر می باشد.

نکته: مهم ترین اصل برای قرارگیری یک اتم در فضای بین نشین، تعداد همسایگی هایی است که می تواند ایجاد کند، در نتیجه صرف نظر از اندازه فضاها، همواره فضاهای اکتاهدرال برای بین نشین شدن مرجح هستند.

نکته: به علت کوچک تر بودن فضای بین نشین از اندازه شعاع کوچک ترین اتم های موجود، نتیجه می شود که با بین نشین شدن یک اتم، سایر فضاها به دلیل ایجاد اعوجاج در ساختار ناشی از وجود اتم بین نشین، کوچک تر هم می شوند. در نتیجه تعداد اتم هایی که توانایی بین نشین شدن دارند به شدت کاهش می یابد.

نکته: حلالیت اتم بین نشین در یک ساختار به حجم فضاهای بین نشین وابسته است که این حجم در ساختار FCC بیشتر از BCC است در نتیجه حد حلالیت بین نشینی در ساختار FCC بیشتر است.

۸-۱- تصاویر استریوگرافیک:

برای داشتن یک دیدگاه سه بعدی از سلول واحد و صفحه های آن و داشتن تجسمی از زوایای بین صفحات، تصاویر استریوگرافیک رسم شده اند. فرض کنید برای یک سلول واحد، بردارهای نرمال را از وسط صفحات به بیرون رسم کنیم. حال اگر به مرکز مکعب کره ای رسم کنیم، برخورد این بردارهای نرمال با شبکه یک سری نقطه به ما می دهد. با رسم این نقاط، تعداد زیادی نقطه روی کره داریم. اگر بخواهیم این کره را به صورت دوبعدی رسم کنیم باید تصویری را که در هر جهت از آن می بینیم در دو بعد رسم کنیم.

مانند تصویری که از کره زمین با نصف النهارها و خطوط استوانه ای رسم می شود.

۱-۸-۱- ترسیم تصویر استریوگرافی

در ترسیم تصویر استریوگرافی:

(۱) بلور در مرکز یک کره محیط بر آن در نظر گرفته می شود.

(۲) کلیه جهات و صفحات از مرکز کره رسم می شوند.

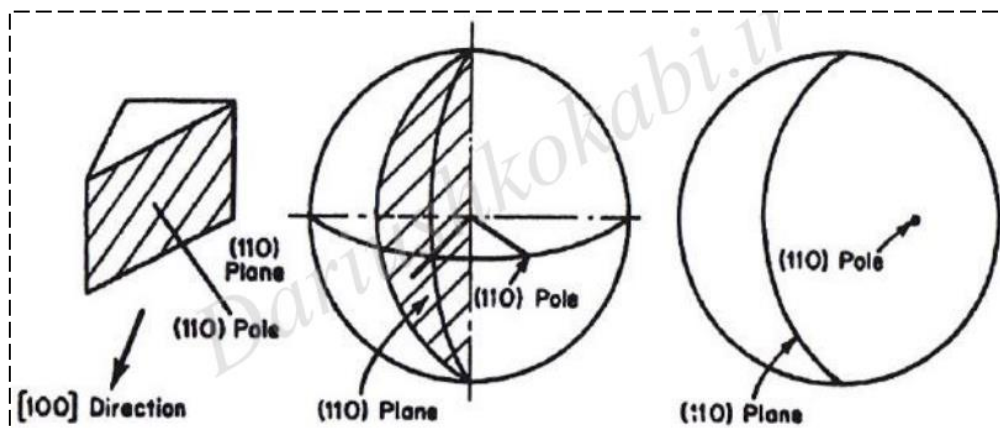
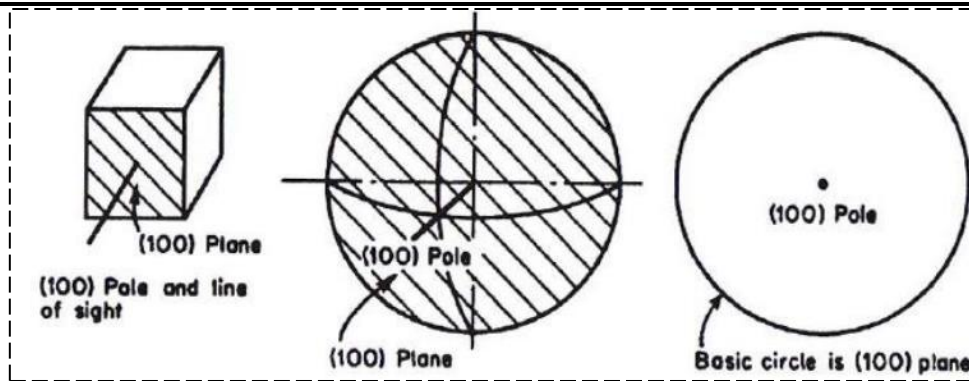
به این ترتیب هر جهت به یک قطب بر روی کره تبدیل می شود و هر صفحه، توسط یک دایره عظیمه و یا به وسیله نقطه ای که نشان دهنده خط عمود بر صفحه است نشان داده می شود.

۱- در ترسیم تصویر استریوگرافی باید یک جهت بلوری به عنوان جهت دید انتخاب شود.

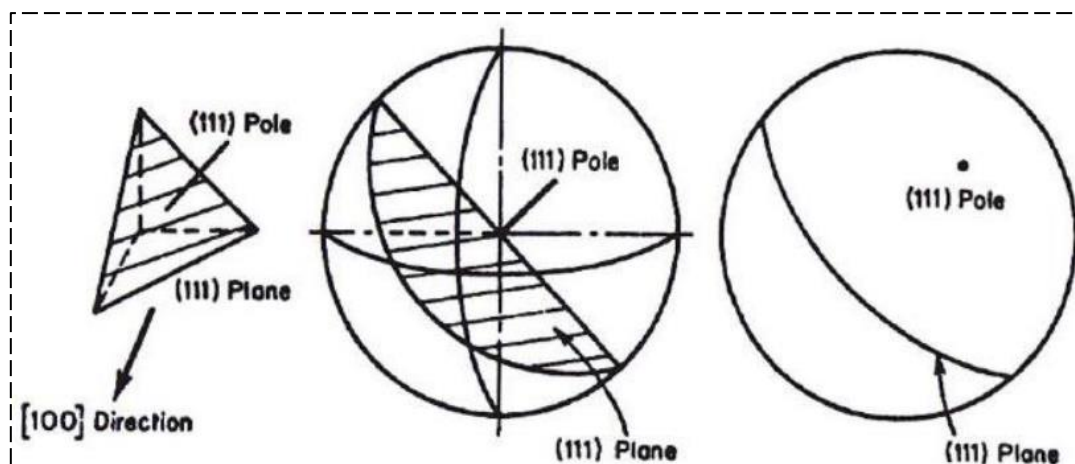
۲- صفحه عمود بر این جهت دید، صفحه مبنای تصویر استریوگرافی است.

۳- قطب مربوط به جهت دید (که منطبق بر خط عمود بر صفحه است) در مرکز تصویر استریوگرافی قرار داده می شود.

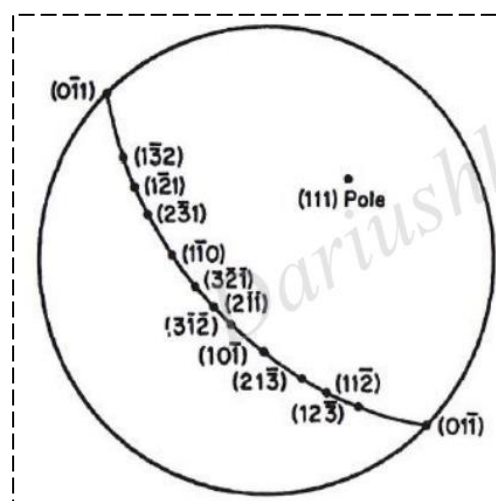
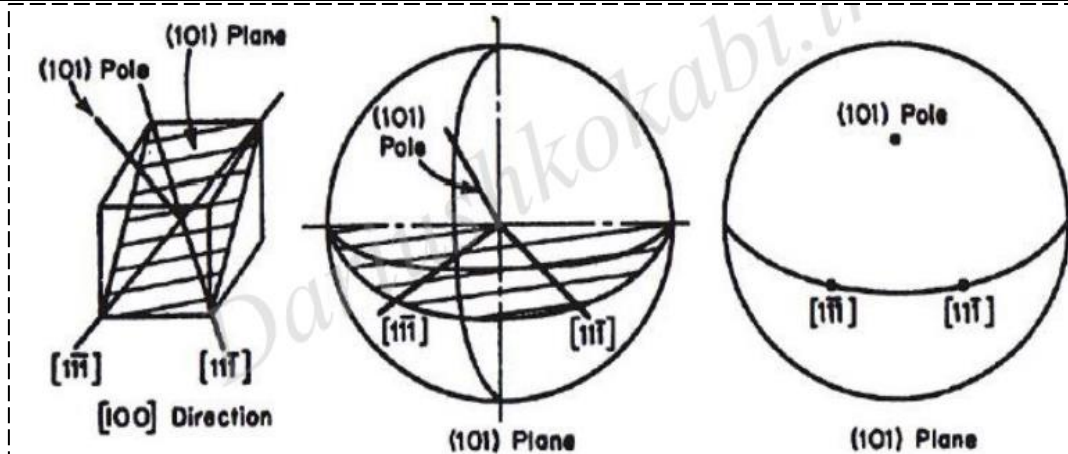
۴- صفحه ی مربوط به محور دید، محیط دایره استریوگرافی می باشد.



همانطور که مشاهده می‌شود، نتیجه می‌گیریم که کمان مربوط به هر صفحه و قطب مربوط به نرمال صفحه با هم زاویه ۹۰ درجه ای می‌سازند.



در کل باید نتیجه گیری کرد که کلیه زوایای بین جهات و صفحات در شبکه بلوری، وقتی بر روی تصویر استریوگراف قرار می‌گیرند، به همان شکل مشاهده می‌شوند. بطور مثال زاویه بین دو قطر اصلی مکعب را بر روی صفحه قطری می‌توان در شکل زیر مشاهده کرد.



با توجه به تعریف محور منطقه اگر بخواهیم محور و صفحات هم منطقه یا هم ناحیه را بر روی یک تصویر استریوگراف نمایش دهیم، بصورت مقابل می‌توان اینها را رسم کرد. در تصویر تمام بردارهای نرمال صفحات هم ناحیه، بر روی صفحه مربوط به محور منطقه قرار می‌گیرند.

نکته: با توجه به محور اصلی و در واقع همان زاویه دید مربوط به تصویر استریوگراف در عبور از مبدا در دو سمت قطعا مولفه‌های مربوط به یکسری صفحات قرینه می‌شوند. بطور مثال در خط دید مربوط به $[100]$ با عبور از نصف النهار مبدا، تمام نقاط قرینه، دارای مولفه x قرینه هم هستند.

۹-۱- پراش پرتو X

اشعه x یک تشعشع الکترومغناطیسی با طیفی دقیقاً شبیه نور معمولی ولی با طول موجی بسیار کوتاهتر میباشد. طول موج اشعه x بین $0.5-2.5$ آنگستروم می‌باشد که از لحاظ طول موج بین امواج ماوراءبنفش و اشعه γ قرار دارد. وقتی که اشعه x با طول موج λ و با زاویه θ نسبت به جسم تابیده می‌شود، اشعه در تمام جهات پراکنده می‌شود. به علت قرار گرفتن اتم‌ها به صورت تناوبی، میان پرتوهای پراکنده روابط فازی خاصی وجود دارد. به طوریکه در بیشتر

جهات پرتوها یکدیگر را تضعیف کرده و تداخل مخرب رخ می‌دهد و پراکندگی در جهات مختلفی ایجاد می‌شود. اما در چند جهت پرتوها همدیگر را تقویت کرده و تداخل سازنده ایجاد می‌کنند و باریکه‌های پراشیده شکل می‌گیرند. تداخل مخرب وقتی رخ می‌دهد که باریکه‌های پراکنده در تمام جهات فضا غیرهم فاز باشند و همدیگر را خنثی کنند اما در تداخل سازنده، پرتوهای پراکنده از اتم‌های موجود در تمام صفحات به طور کامل همفاز بوده و یکدیگر را تقویت می‌کنند. از طرفی وقتی که دو پرتو اختلاف مسیرشان صفر و یا مضرب صحیحی از طول موج باشد، آن دو موج همفاز هستند. بنابراین شرط لازم پراش آن است که اختلاف مسیر دو موج برابر $n\lambda$ که $n=0, 1, 2, 3, \dots$ قانون براگ بیان کننده شرط لازم پراش است:

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

θ : زاویه ورودی موج یا زاویه براگ (زاویه پراش یا تفرق برابر 2θ می‌باشد).

d : فاصله بین صفحات کریستالی

λ : طول موج اشعه x

n : مرتبه بازتاب و عدد صحیحی است که با تعداد طول موجهای اختلاف مسیری برابر است که از صفحات مجاور شبکه‌های پراکنده می‌شوند.

طبق قانون براگ صفحاتی که $(h^2 + k^2 + l^2)$ کمتری دارند پراش می‌دهند چراکه $\sin \theta$ حداکثر می‌تواند ۱ باشد. همانطور که گفتیم قانون براگ شرط لازم جهت پراش را بیان می‌کند. شرط کافی جهت پراش فاکتور ساختمانی می‌باشد. طبق فاکتور ساختمانی هر بلور، تنها صفحات خاصی در هر شبکه بلوری امکان پراش دارند که اگر این صفحات شرایط براگ را نیز فراهم کنند پراش صورت می‌گیرد.

ساختار	شرط تشکیل تفرق
SC	تمام صفحات امکان پراش دارند.
BCC	زوج $h + k + l$
FCC	h و k و l هر سه زوج یا هر سه فرد باشند.
HCP	$h + 2k$ مضرب ۳ نباشد و l زوج باشد.
DC	h و k و l هر سه فرد و یا هر سه زوج+قابل تقسیم به عدد ۴

۱-۹-۱ روش‌های پراش

سه روش اصلی برای پراش با تغییر پارامترهای θ و λ وجود دارد:

۱- روش لاوله (Lave method)

۲- روش بلور دورانی (Rotating – Crystal method)

۳- روش پودری (Powder method)

روش لاوله

λ	θ
متغیر	ثابت
ثابت	متغیر (تأحدی)
ثابت	متغیر

نمونه مورد استفاده در این روش تک بلور می باشد که این تک بلور بین منبع اشعه X که در این روش طیف سفید می باشد و فیلم قرار می گیرد. این مدل به لایه عبوری موسوم است. طول موج توسط طیف سفید آنقدر تغییر می کند تا بالاخره در یک λ مشخص شرایط پراش تأمین شود. نوع دیگری از روش لایه ، لایه پس تاب می باشد که در آن نمونه مقابل منبع اشعه و فیلم قرار گرفته است.

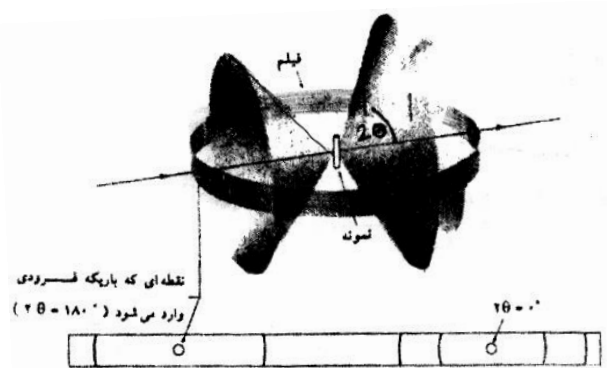
روش بلور چرخان

نمونه مورد استفاده در این روش تک کریستال است که حول یکی از محورهاش دوران می کند تا در یک θ مشخص شرایط براگ تأمین شود. اشعه X مورد استفاده باریکه تکفام یا مونوکروماتیک می باشد.

روش پودری (دبای-شرر)

در روش پودری بلوری که مورد آزمایش قرار می گیرد به پودر بسیار ریزی تبدیل می شود و در معرض پرتوهای تکفام اشعه X قرار می گیرد. هر ذره پودر یک بلور ریز و یا مجموعه ای از بلورهای کوچکتر است که به طور اتفاقی نسبت به باریکه فرودی جهت یابی می شوند. یک و یا مقداری بلور کوچک تصادفاً طوری جهت یابی خواهند شد که صفحات (hkl) آنها زاویه صحیح براگ را برای بازتاب بسازند.

رایج ترین روش پراش پودری ، روش دبای شرر می باشد. در این روش ، نوار باریکی از فیلم در استوانه های کوتاه دایرهوار قرار می گیرد. نمونه روی محور استوانه واقع شده و باریکه فرودی با زاویه عمود بر این محور تابیده می شود. مخروطهای باریکه های پراشیده نوار استوانه فیلم را به صورت خطوطی قطع می کنند و هنگامیکه فیلم باز شده و به صورت مسطح پهن شود ، طرح حاصل ظاهری مانند شکل زیر خواهد داشت.



خطوط به طور کلی انحنایافته هستند به جز در $2\theta = 90^\circ$ که این حالت به صورت خطوط مستقیم نمایان می شوند. از موقعیت اندازه گیری شده یک خط پراشیده معین بر روی فیلم ، می توان θ را تعیین کرد و با مشخص بودن λ ، می توان فاصله صفحات بازتابی شبکه های را محاسبه کرد که این خطوط را به وجود می آورند. اگر فاصله بین $2\theta = 0^\circ$ و $2\theta = 180^\circ$ برابر w باشد و m فاصله بین دو زاویه مختلف باشد، θ از رابطه زیر به دست می آید:

$$\frac{w}{m} \frac{\pi}{2\theta} \Rightarrow \theta = \frac{m\pi}{2w}$$

برعکس اگر شکل و اندازه سلول واحد بلوری مشخص باشد، می توان موقعیت تمام خطوط پراش ممکن بر روی فیلم را پیش بینی کرد. خط مربوط به کمترین مقدار 2θ از بازتاب صفحاتی با بیشترین فاصله تولید می شود.