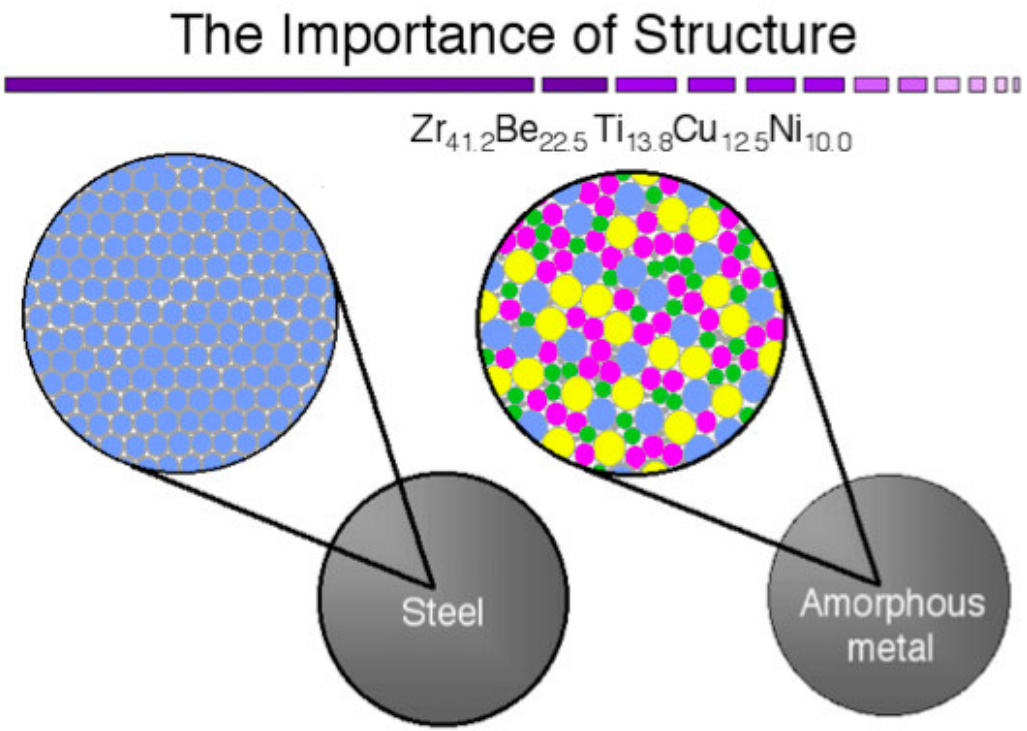
فصل دوم
ساختار اتمی جامدات

ساختار اتمی جامدات

ساختار جامدات

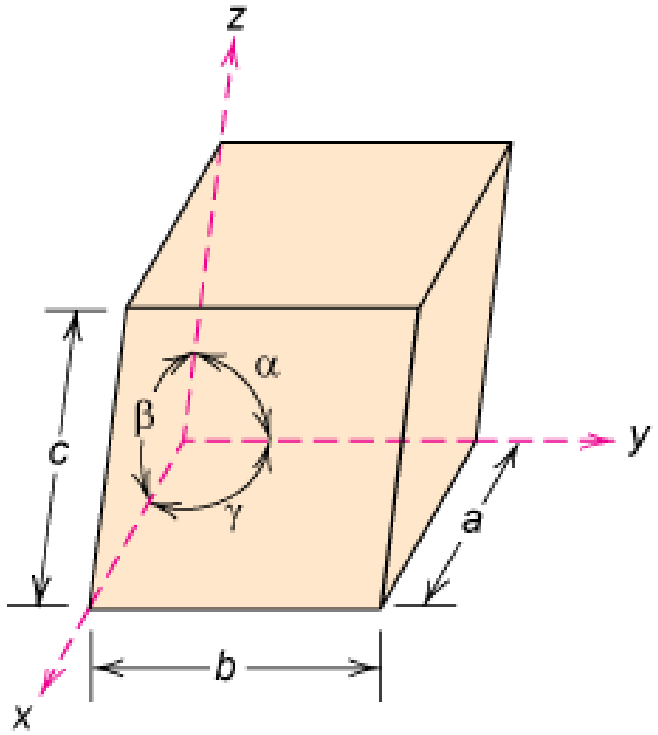
-کریستالی (بلورین): مثل فلزات، سرامیکها

-آمورف (بی شکل): مثل شیشه، پلاستیک، لاستیک و ...

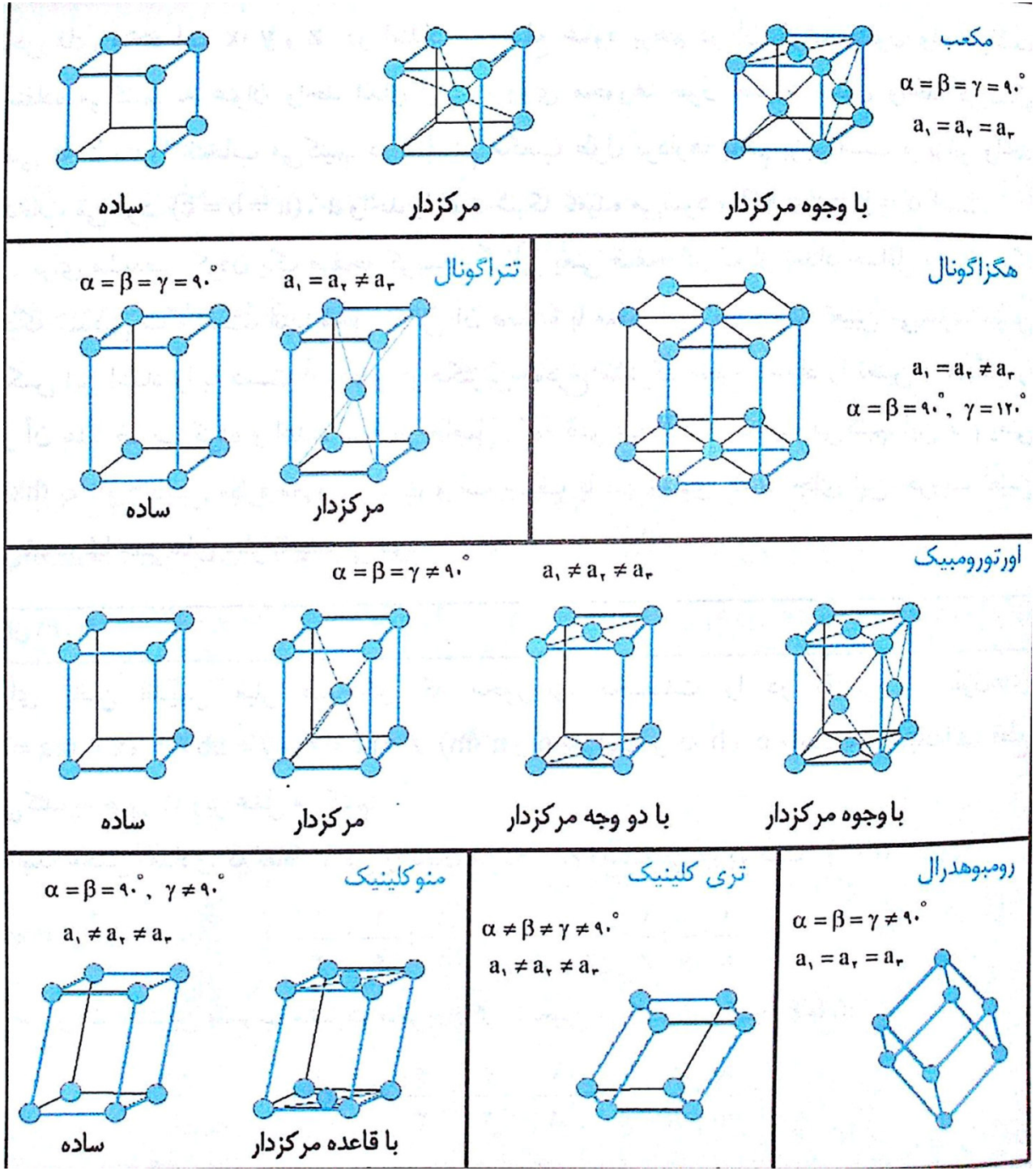


ساختار کریستالی و شبکه های فضایی

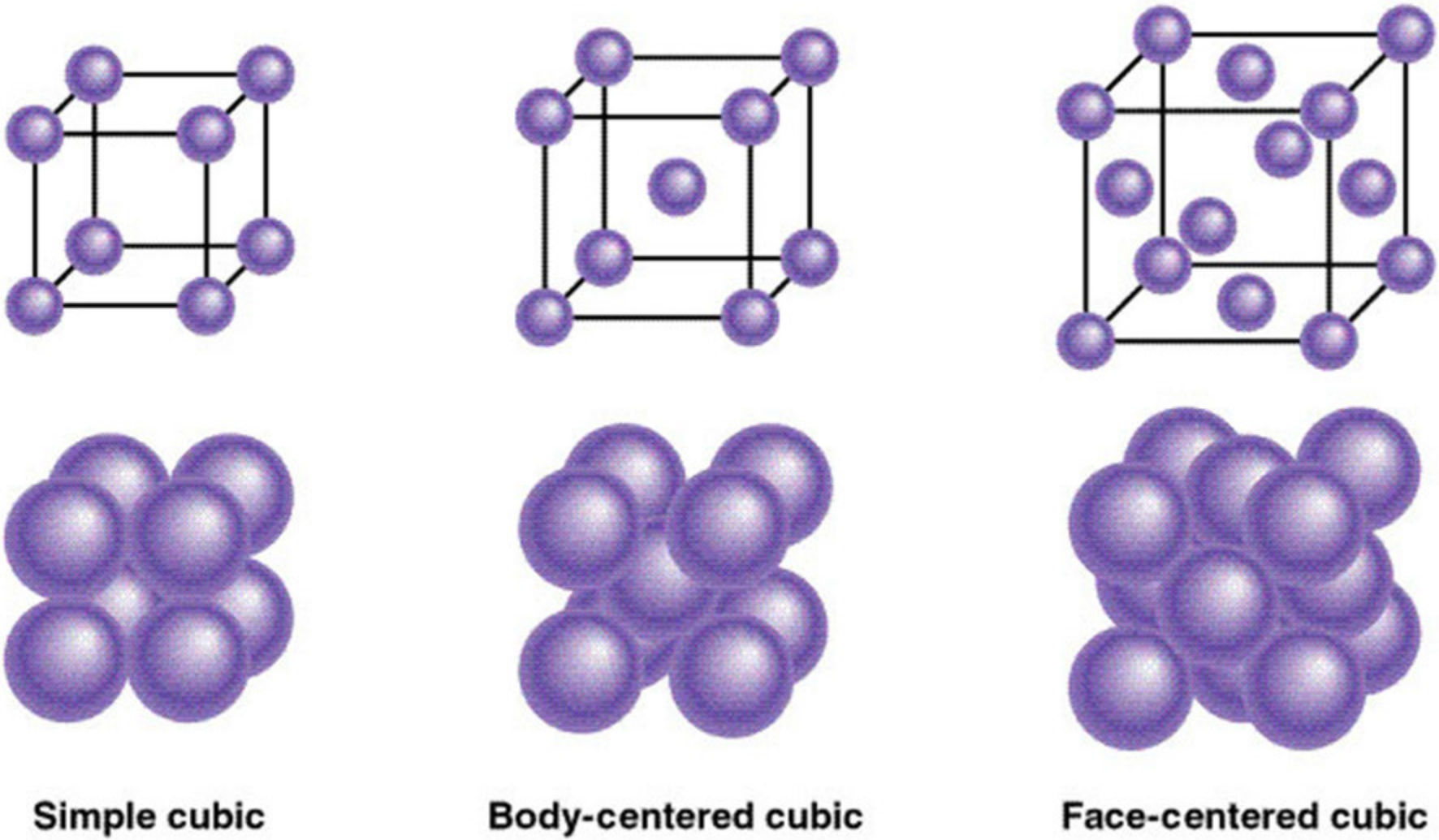
a، b و c واحدهای شبکه می باشند



ساختار کریستالی و شبکه های فضایی



۳ نوع شبکه مکعبی



محاسبه اتم معادل و ضریب تراکم در شبکه های کریستالی

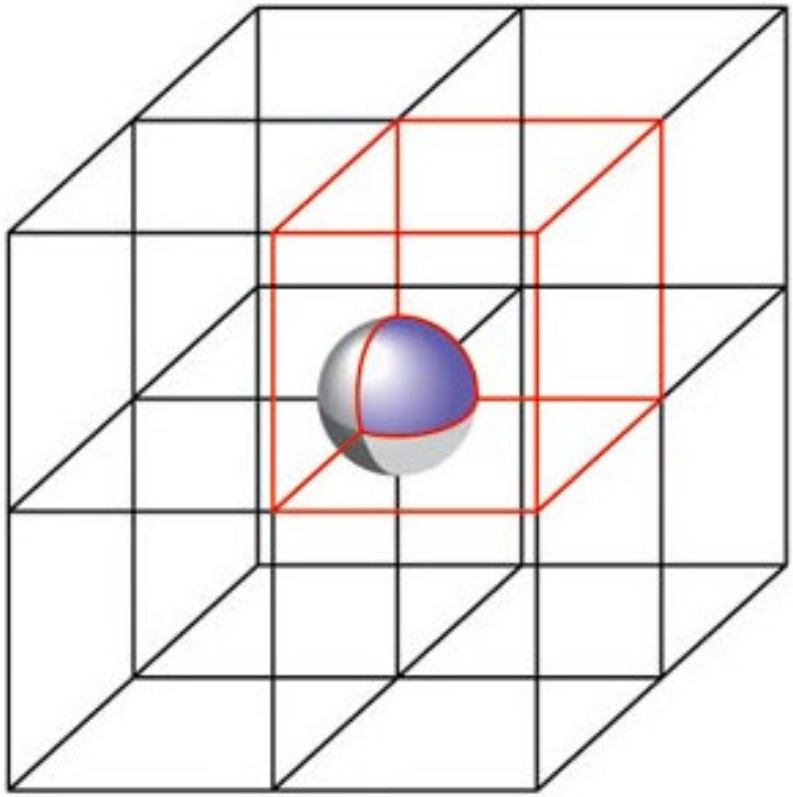
۱- شبکه مکعبی ساده (simple cubic)

۲- شبکه مکعب مرکزدار (body center cubic)

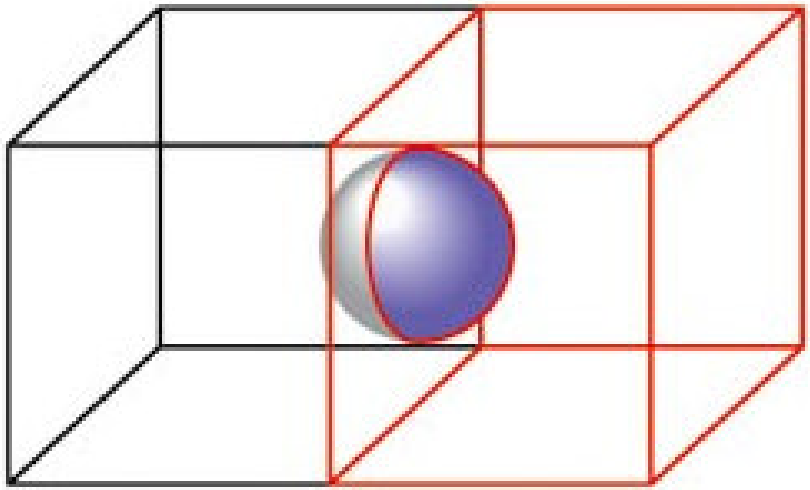
۳- شبکه مکعبی با وجوه مرکزدار (face center cubic)

۴- شبکه هگزاگونال متراکم (hexagonal close packed)

نحوه تعیین اتم معادل

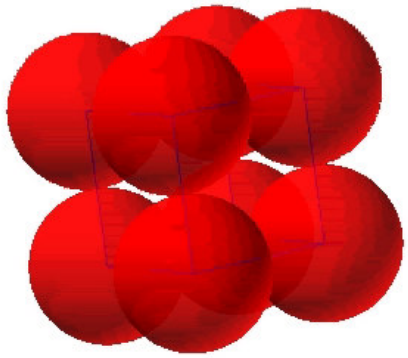


1/8×1=اتم معادل



1/2×1=اتم معادل

سیستم مکعبی ساده (SC)

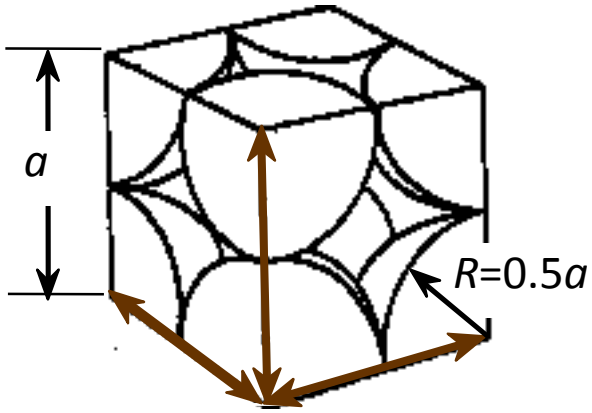


الف) تعداد اتم کامل: $8\times 1/8=1$

سیستم مکعبی ساده (SC)

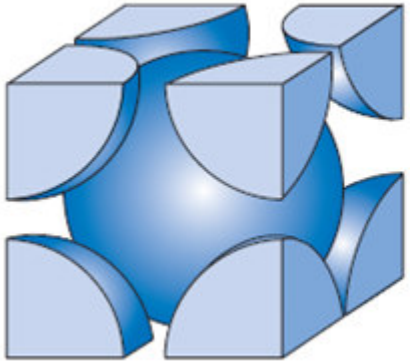
ب) محاسبه ضریب تراکم (*APF*)

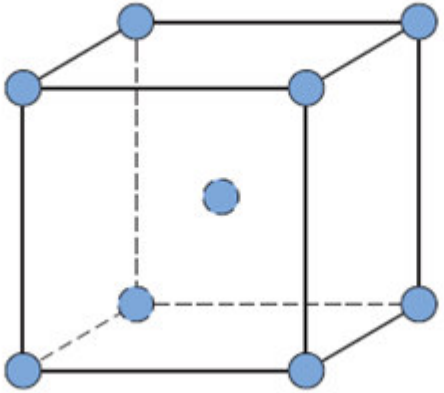
$$APF = \frac{\text{حجم اتمهای معادل در سلول واحد}}{\text{حجم سلول واحد}}$$

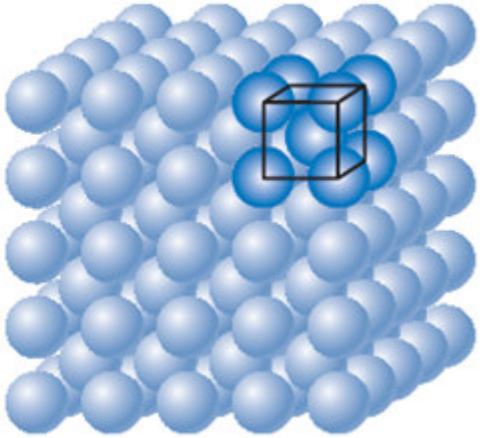


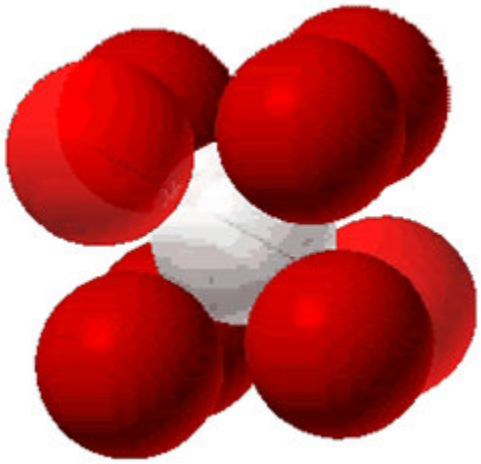
$$APF = \frac{\text{atoms/unit cell} \times \text{volume/atom}}{\text{volume/unit cell}} = \frac{1 \times \frac{4}{3}\pi (0.5a)^3}{a^3} = 0.53$$

سیستم مکعب مرکزدار (bcc)



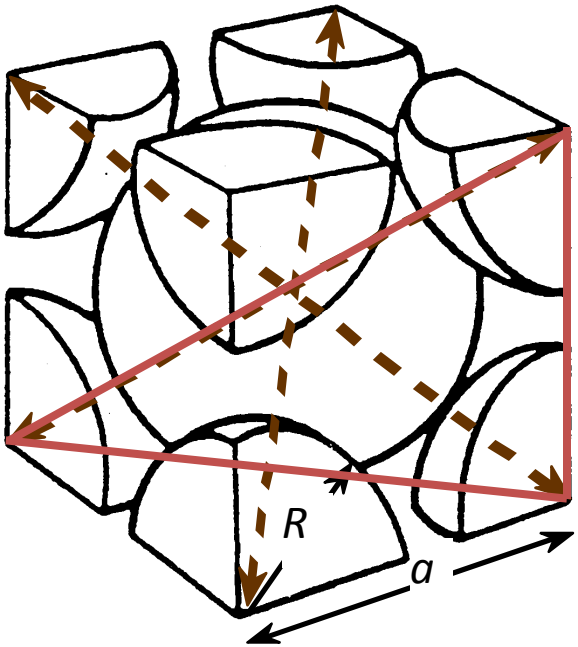




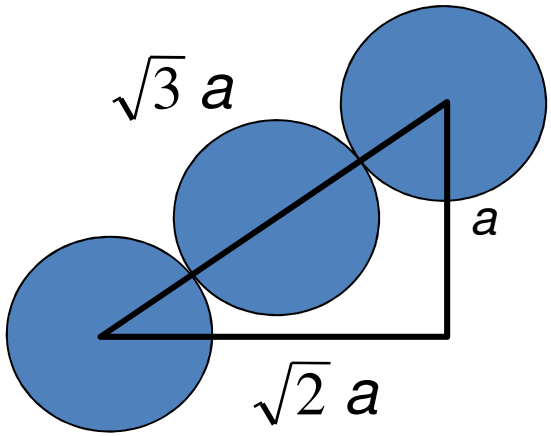


الف) تعداد اتم کامل: $8\times1/8+1=2$

سیستم مکعب مرکزدار (bcc)

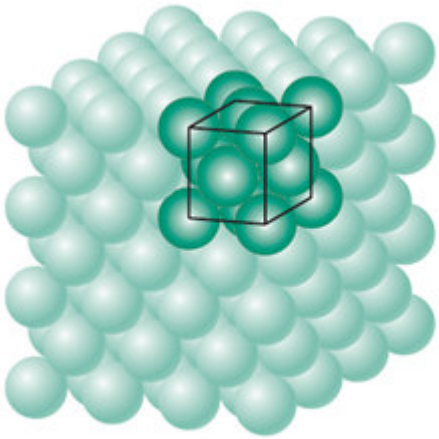


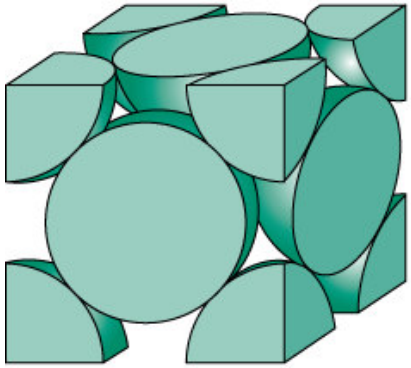
ب) محاسبه ضریب تراکم

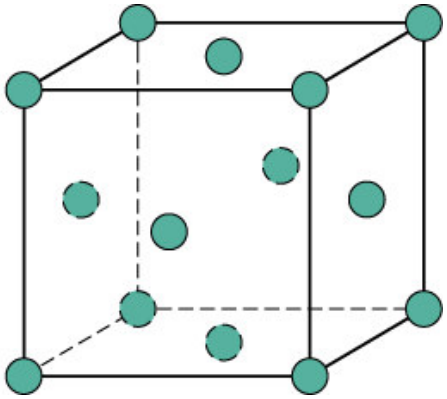


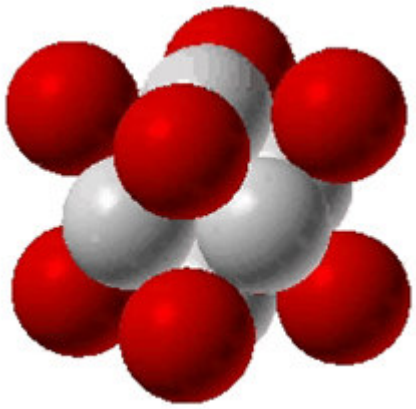
$$APF = \frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \times \frac{\text{volume}}{\text{atom}} \Big/ \frac{\text{volume}}{\text{unit cell}} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3}{a^3} = 0.68$$

سیستم مکعب با وجوه مرکزدار (fcc)





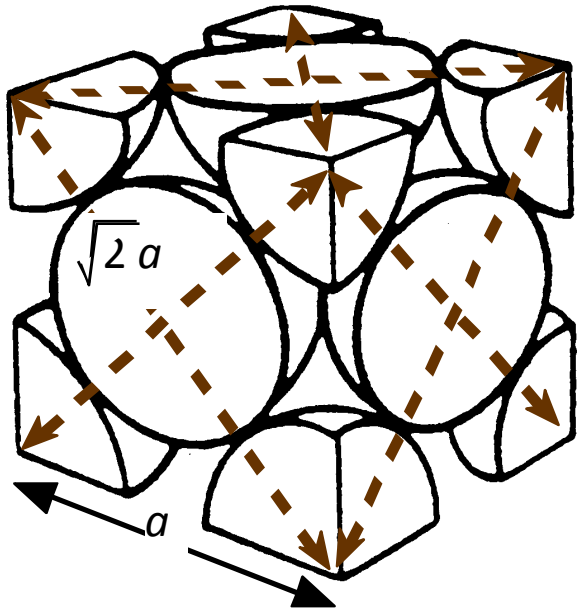




الف) تعداد اتم کامل: $8\times1/8+6\times1/2=4$

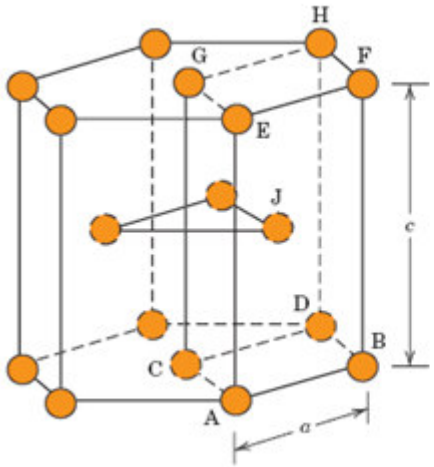
سیستم مکعب با وجوه مرکزدار (fcc)

ب) محاسبه ضریب تراکم

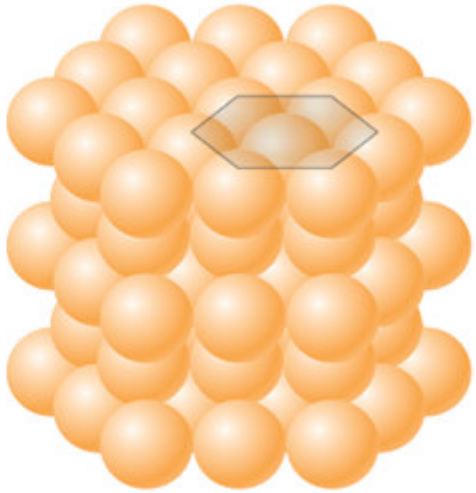


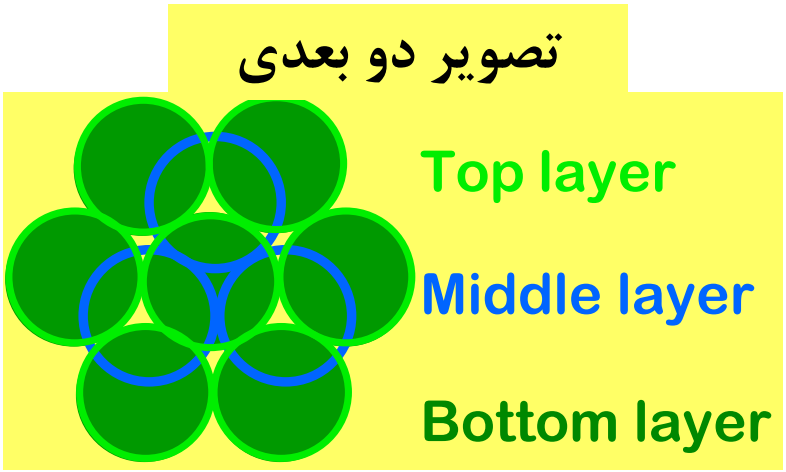
$$APF = \frac{\text{toms}/\text{it cell} \times \text{volume}/\text{atom}}{\text{volume}/\text{unit cell}} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi\left(\sqrt{2}\,a/4\right)^3}{a^3} = 0.74$$

سیستم هگزاگونال متراکم (hcp)



- c/a = 1.633





الف) تعداد اتم کامل: $12\times1/6+2\times1/2+3=6$

ب) ضریب تراکم: 0.74

ساختار کریستالی برخی از فلزات

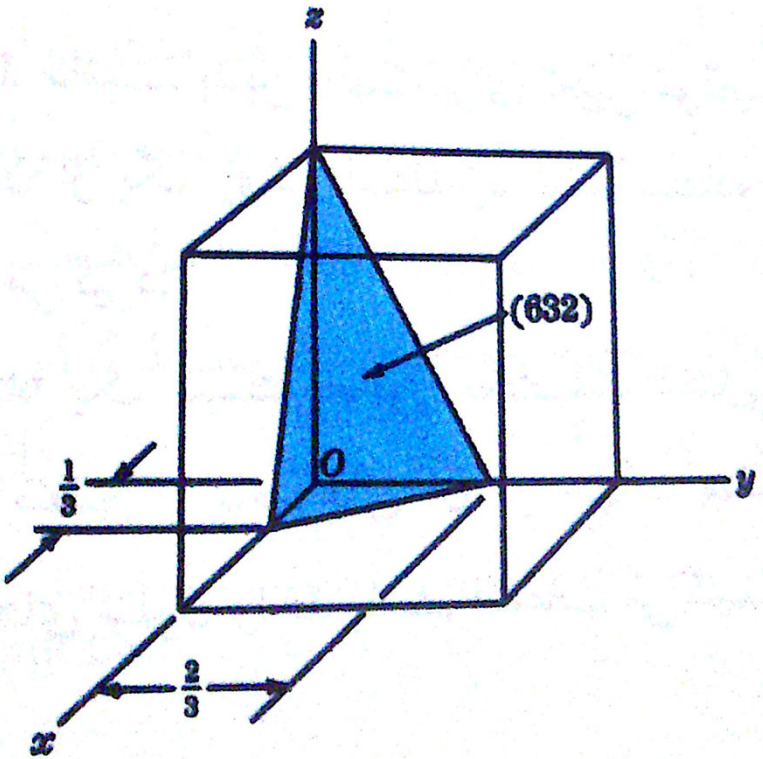
Table 3.1 Atomic Radii and Crystal Structures for 16 Metals

Metal	*Crystal Structure*[a]	*Atomic Radius*[b] *(nm)*	*Metal*	*Crystal Structure*	*Atomic Radius (nm)*
Aluminum	FCC	0.1431	Molybdenum	BCC	0.1363
Cadmium	HCP	0.1490	Nickel	FCC	0.1246
Chromium	BCC	0.1249	Platinum	FCC	0.1387
Cobalt	HCP	0.1253	Silver	FCC	0.1445
Copper	FCC	0.1278	Tantalum	BCC	0.1430
Gold	FCC	0.1442	Titanium (α)	HCP	0.1445
Iron (α)	BCC	0.1241	Tungsten	BCC	0.1371
Lead	FCC	0.1750	Zinc	HCP	0.1332

[a] FCC = face-centered cubic; HCP = hexagonal close-packed; BCC = body-centered cubic.

[b] A nanometer (nm) equals 10^{-9} m; to convert from nanometers to angstrom units (Å), multiply the nanometer value by 10.

صفحات کریستالی

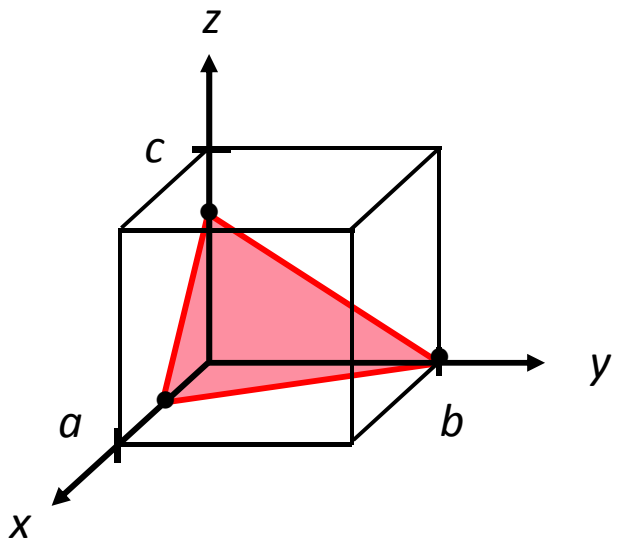


محورهای مختصات	x	y	z
تقاطع با محور	1/3	2/3	1
معکوس اعداد	3	3/2	1
ضرب اعداد در ک م م	6	3	2

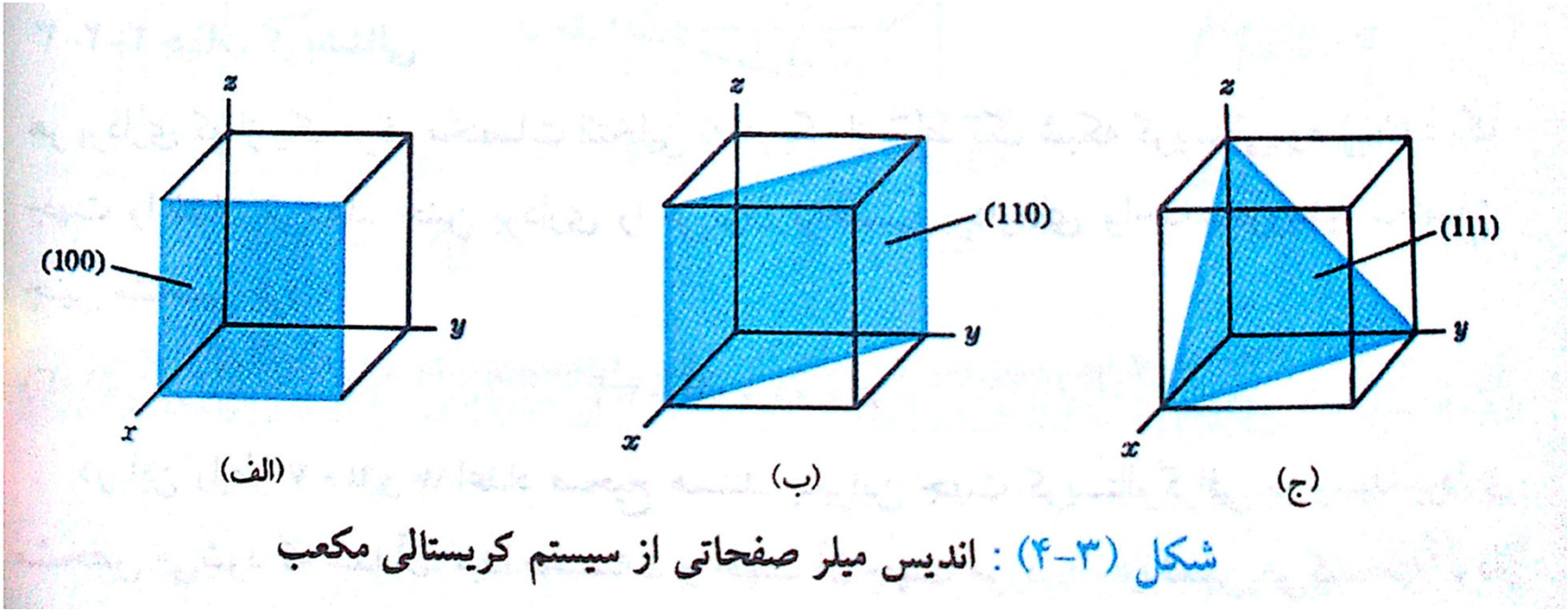
اندیس میلر (6 3 2)

صفحات کریستالی

a	*b*	*c*
1/2	1	3/4
1/½	1/1	1/¾
2	1	4/3
6	3	4



صفحات کریستالی

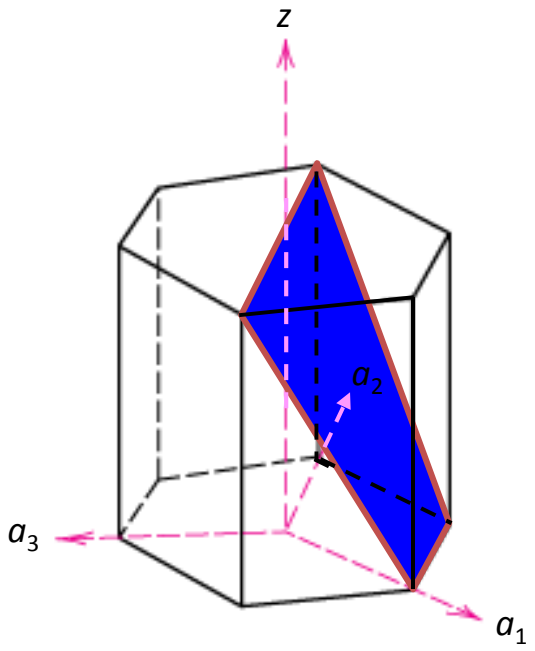


شکل (۳-۴) : اندیس میلر صفحاتی از سیستم کریستالی مکعب

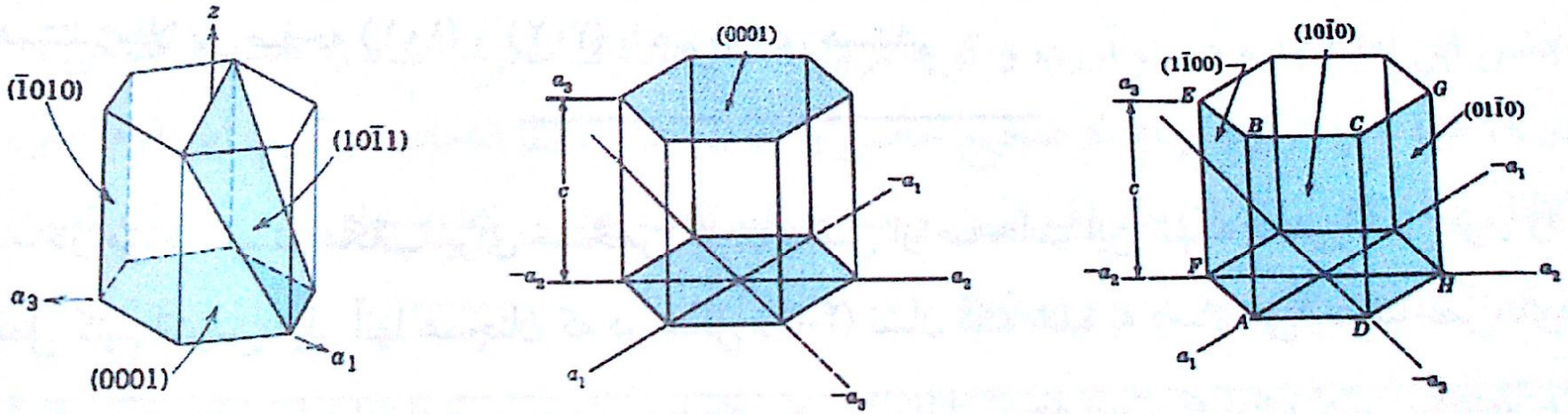
صفحات کریستالی

a_1	a_2	a_3	c
1	∞	-1	1
1	$1/\infty$	-1	1
1	0	-1	1
1	0	-1	1

اندیس میلر-براویس $(10\bar{1}1)$

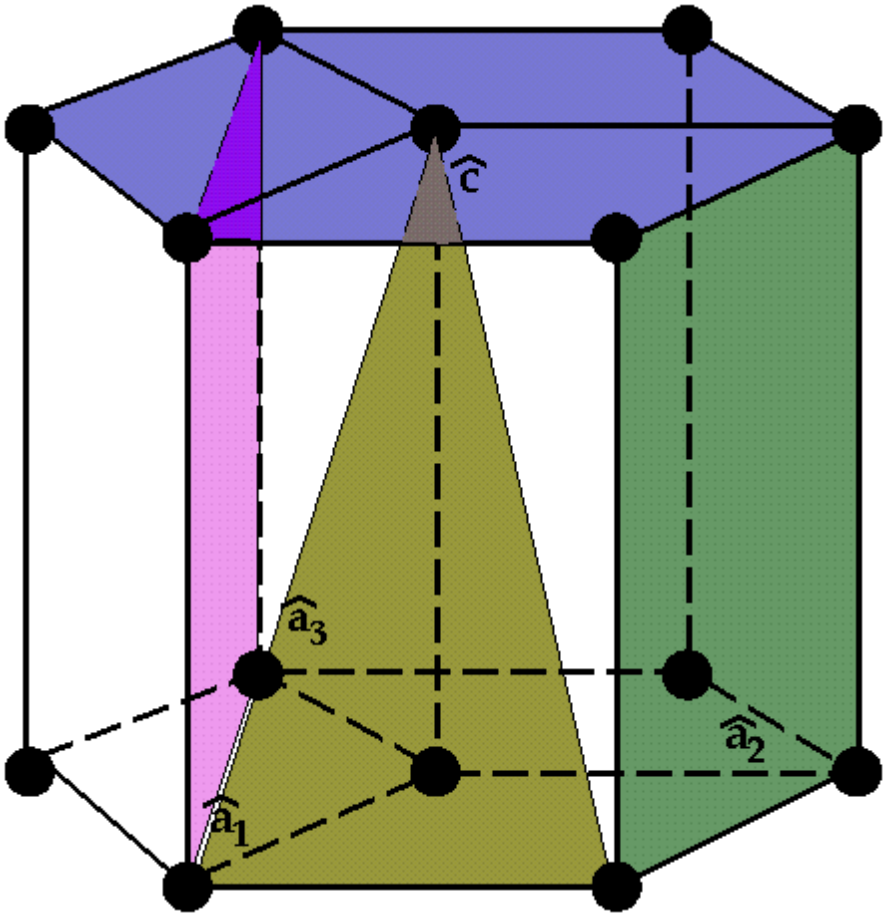


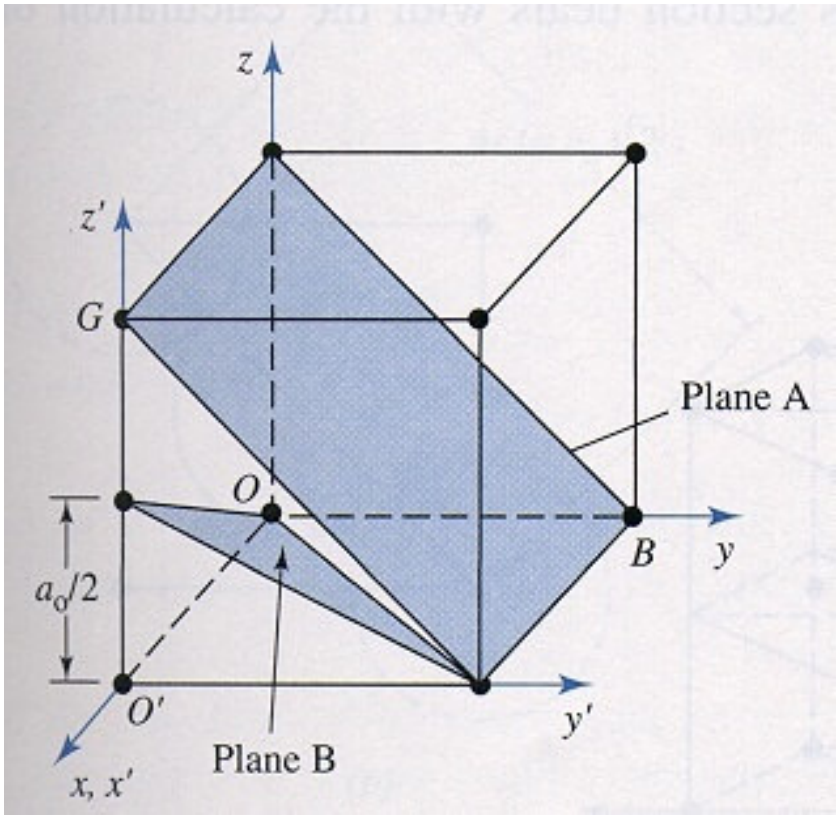
صفحات کریستالی



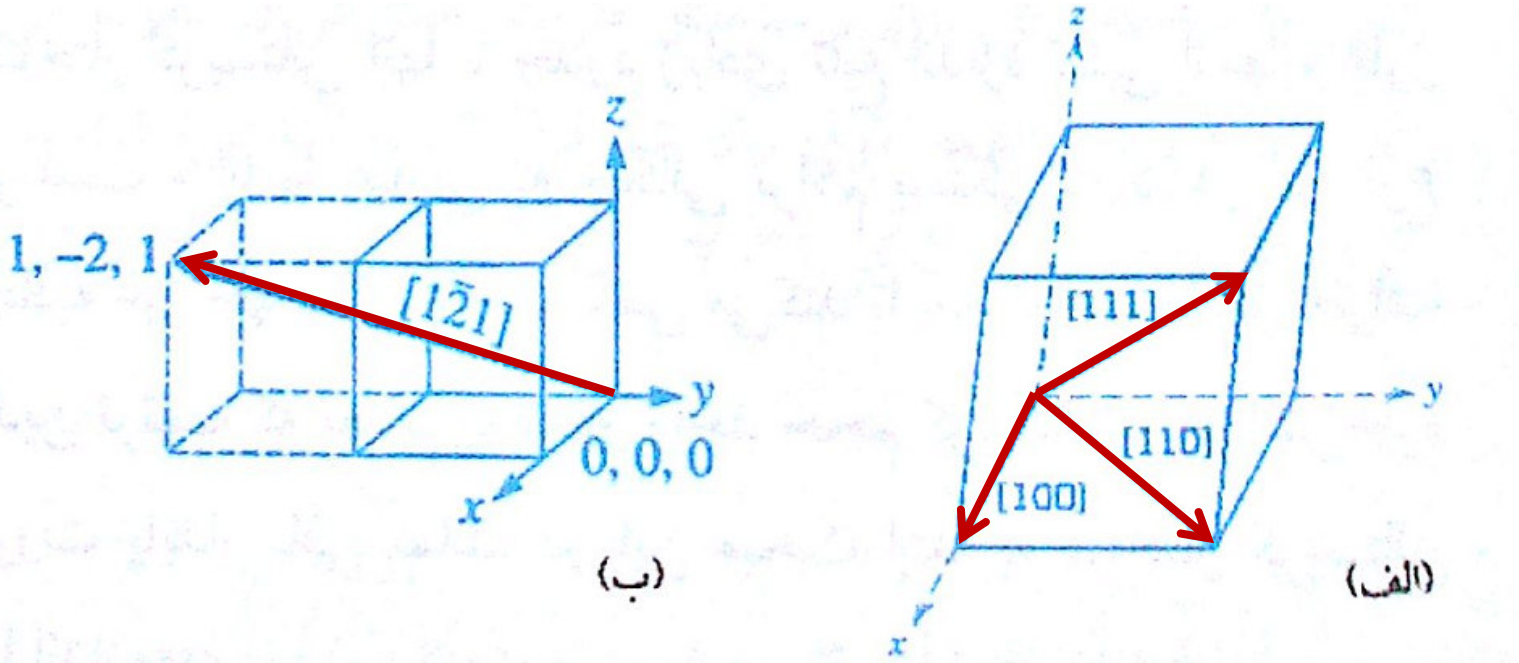
شکل (۳-۵) : اندیس‌های میلر- براویس صفحه‌هایی از سیستم هگزاگونال، [۳].

صفحات کریستالی



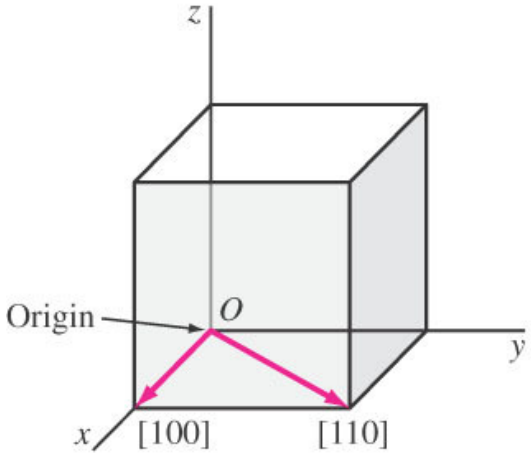


جهات کریستالی

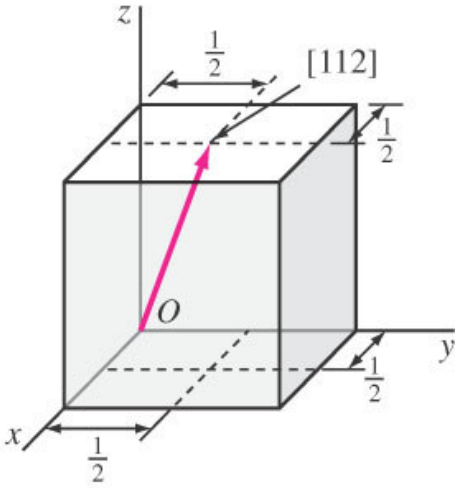


شکل (۳-۶) : اندیس میلر جهات شبکه کریستالی در سیستم مکعب

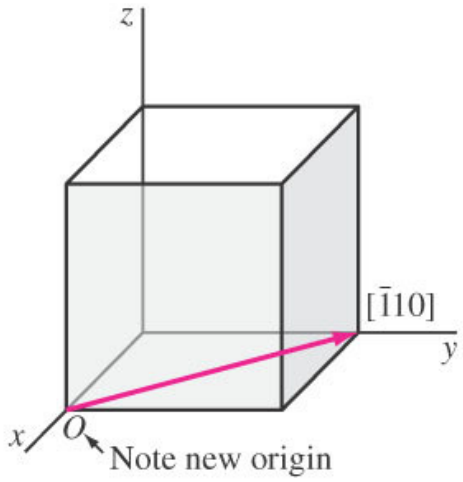
جهات کریستالی



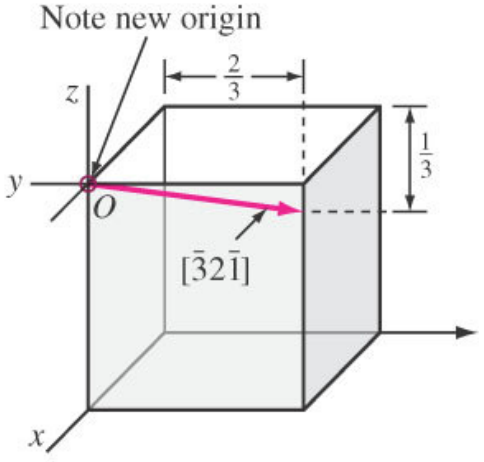
a



b

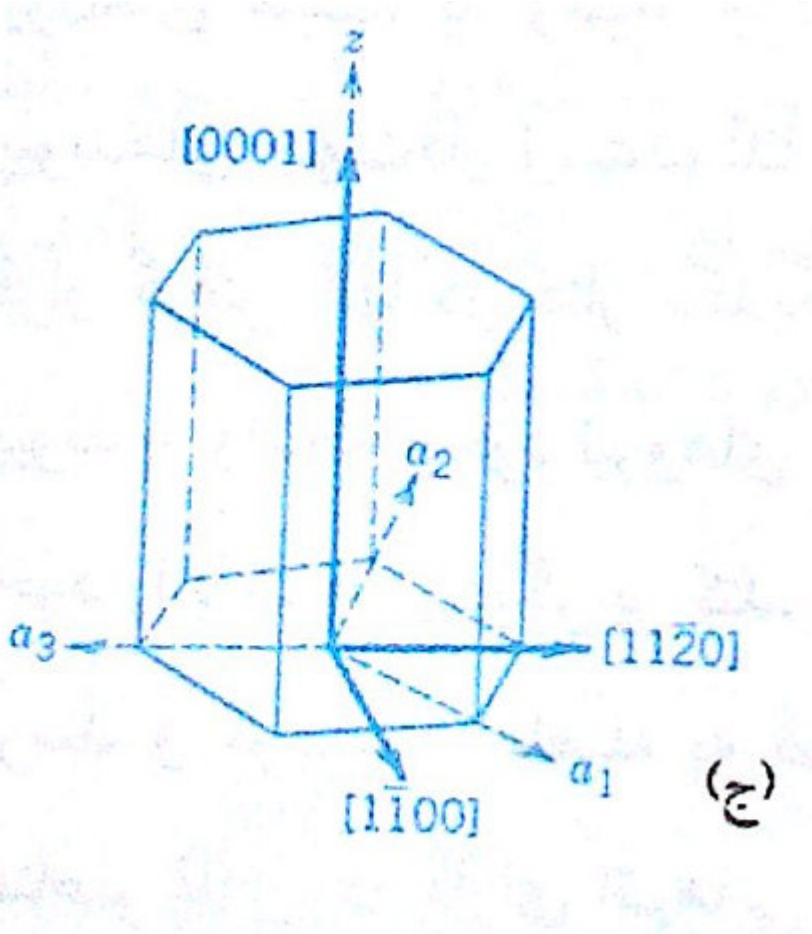


c



d

جهات کریستالی



(ج)

- اندیس میلر $[a_1\ a_2\ a_3\ c\ ]$

محاسبه چگالی تئوری مواد

$$\text{چگالی} = \rho = \frac{\text{جرم اتمهای یک سلول}}{\text{حجم سلول}}$$

$$\rho = \frac{n A}{V_C N_A}$$

n = تعداد اتمهای سلول

A = جرم اتمی (g/mol)

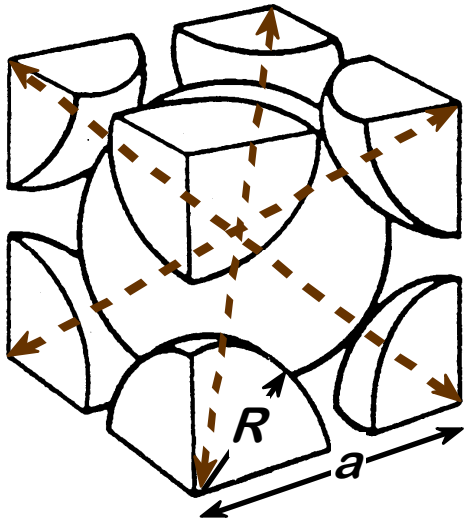
V_C = حجم سلول واحد = a^3

N_A = عدد آووگادرو

= 6.022 x 10^{23} atoms/mol

محاسبه چگالی تئوری مواد

مثال: Cr (BCC)



A = 52.00 g/mol

R = 0.125 nm

n = 2 atoms/unit cell

$a = 4R/\sqrt{3} = 0.2887$ nm

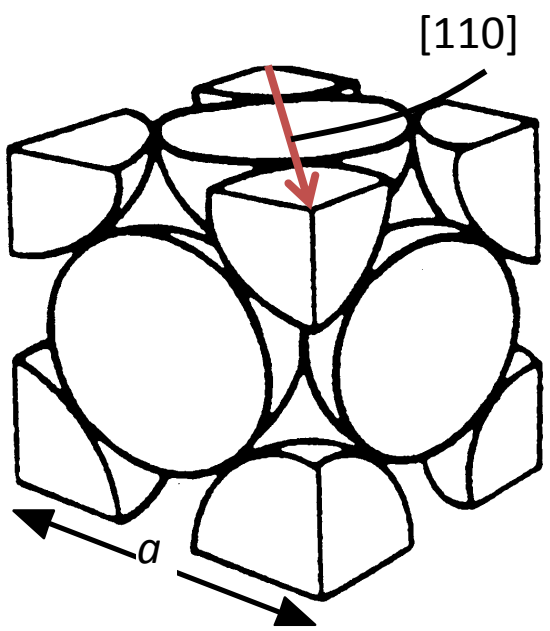
$$\rho = \frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \times \frac{\text{g}}{\text{mol}} \Big/ \left(\text{volume unit cell} \times \frac{\text{atoms}}{\text{mol}} \right)$$

$$\rho = \frac{2 \times 52.00}{a^3 \times 6.022 \times 10^{23}}$$

$\rho_{\text{تئوری}}$	= 7.18 g/cm^3
$\rho_{\text{واقعی}}$	= 7.19 g/cm^3

چگالی خطی

$$\text{چگالی خطی اتمها} \equiv LD = \frac{\text{تعداد اتمهای موجود بر روی خط}}{\text{طول خط}}$$



مثال: مطلوبست دانسیته خطی در Al و در راستای [110] اگر ثابت شبکه در Al برابر با $a =$ 0.405 nm باشد.

تعداد اتم

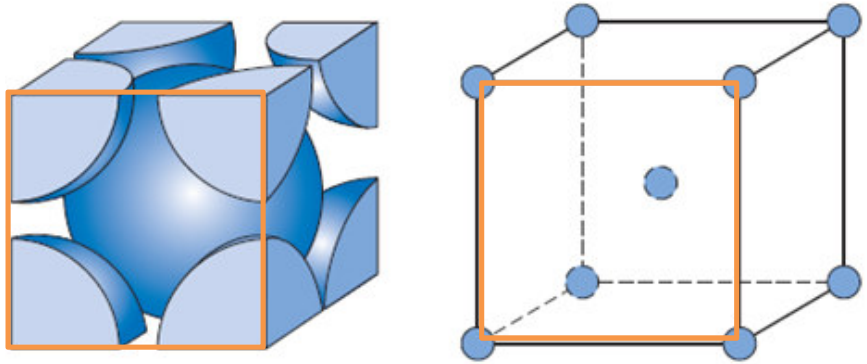
$$LD = \frac{2}{\sqrt{2}a} = 3.5\ \text{nm}^{-1}$$

طول خط

چگالی صفحه ای

$$PD=\frac{\text{تعداد اتمهای موجود بر روی صفحه}}{\text{مساحت صفحه}}$$

مثال: مطلوبست دانسیته صفحه ای در آهن با ساختار bcc و در صفحه (۱۰۰) اگر شعاع اتمهای آهن برابر 0.1241nm باشد.



تعداد اتمها

مساحت صفحه

$$PD=\frac{1}{a^2}=\frac{1}{\left(\frac{4\sqrt{3}}{3}R\right)^2}=12.1\ \frac{\text{اتم}}{\text{nm}^2}=1.2\times10^{19}\ \frac{\text{اتم}}{\text{m}^2}$$

جدول (۳-۱): ساختار شبکه کریستالی تعدادی از مواد، [۳].

نام عنصر	علامت اختصاری	عدد اتمی	وزن اتمی g/mol	نوع شبکه	شعاع اتمی (r) Å	واحد شبکه (a) Å	چگالی $\times 10^3$ kg/m^3
آلومینیم	Al	۱۳	۲۶/۹۸	fcc	۱/۴۳	۴/۰۵	۲/۶۹۹
ارسنیک	As	۳۳	۷۴/۹۲	هگزاگونال	۱/۲۵	a= ۳/۷۵۹ c= ۱۰/۵۴۸	۵/۷۷
آنتیموان	Sb	۵۱	۱۲۱/۷۵	هگزاگونال	۱/۶۰	a= ۴/۳۰۷ c= ۱۱/۲۷۳	۶/۶۹
اورانیم	U	۹۲	۲۳۸/۰۳	اورتورمبیک*	۱/۳۸	a= ۲/۸۵۸ b= ۵/۸۷۶ c= ۴/۹۵۴	۱۹/۰۷
آهن	(α) Fe	۲۶	۵۵/۸۵	bcc	۱/۲۴	۲/۸۶۶	۷/۸۷
»	(γ) Fe	۲۶	۵۵/۸۵	fcc	۱/۲۶	۳/۵۸۹	
»	(δ) Fe	۲۶	۵۵/۸۵	bcc	۱/۲۷	۲/۹۳۳	
باریم	Ba	۵۶	۱۳۷/۳۳	bcc	۲/۱۷	۵/۰۱۱	۳/۵
بُر	B	۵	۱۰/۸۱	اورتورمبیک	۰/۹۷	a= ۱۷/۶۴ b= ۲۵/۰۰ c= ۱۰/۲۶	۲/۳۴
برلیم	Be	۴	۹/۰۱	hcp	۱/۱۳	a= ۲/۲۸۶ c= ۳/۵۸۴	۱/۸۴۸
بیسموت	Bi	۸۳	۲۰۸/۹۸	هگزاگونال	۱/۸۲	a= ۴/۵۴۵ c=۱۱/۸۶	۹/۸۰۸
پالادیم	Pd	۴۶	۱۰۶/۴	fcc	۱/۳۷	۳/۸۷۵	۱۲/۰۲
پتاسیم	K	۱۹	۳۹/۱	bcc	۲/۳۸	۵/۴۹۲	۰/۸۶۲
پلاتین	Pt	۷۸	۱۹۵/۰۸	fcc	۱/۳۹	۳/۹۲۳	۲۱/۴۵
تنتالیم	Ta	۷۳	۱۸۰/۹۵	bcc	۱/۴۳	۳/۳۰۲	۱۶/۶
تنگستن	W	۷۴	۱۸۳/۸۵	bcc	۱/۳۷	۳/۱۵۸	۱۹/۳
تیتانیم	Ti	۲۲	۴۷/۸۸	hcp*	۱/۴۷	a= ۲/۹۵۰ c= ۴/۶۸۲	۴/۵۰۷
روی	Zn	۳۰	۶۵/۳۹	hcp	۱/۳۳	a= ۲/۶۶۵ c= ۴/۹۴۷	۷/۱۳
زیرکونیم	Zr	۴۰	۹۱/۲۲	hcp*	۱/۶۰	a= ۳/۲۳۱ c= ۵/۱۴۷	۶/۵
ژرمانیم	Ge	۳۲	۷۲/۵۹	مکعب الماسی	۱/۳۹	۵/۶۵۶	۵/۳۲
سدیم	Na	۱۱	۲۲/۹۹	bcc	۱/۹۲	۵/۶۵۷	۰/۹۷۱

ادامه جدول (۳-۱): ساختار شبکه کریستالی تعدادی از مواد، [۳].

نام عنصر	علامت اختصاری	عدد اتمی	وزن اتمی g/mol	نوع شبکه	شعاع اتمی (r) Å	واحد شبکه (a) Å	چگالی $\times 10^3$ kg/m^3
سرب	Pb	۸۲	۲۰۷/۱۹	fcc	۱/۷۵	۴/۹۵	۱۱/۳۶
سلیسیم	Si	۱۴	۲۸/۰۹	مکعب الماسی	۱/۱۷	۵/۴۳۱	۲/۳۳
طلا	Au	۷۹	۱۹۶/۹۷	fcc	۱/۳۹	۴/۰۷۸	۱۹/۳۲
فسفر	P	۱۵	۳۰/۹۷	اورتورومبیک	۱/۱۰	a= ۳/۳۱ b= ۴/۳۸ c=۱۰/۵۰	۱/۸۲
قلع خاکستری	Sn	۵۰	۱۱۸/۶۹	مکعب الماسی	۱/۵۸	۶/۴۹۱	۷/۲۹۸
قلع سفید	Sn	۵۰	۱۱۸/۶۹	تتراگونال	۱/۵۸	a= ۵/۸۳۱ c= ۳/۱۸۱	
کادمیم	Cd	۴۸	۱۱۲/۴۱	hcp**	۱/۴۸	a= ۲/۹۷۸ c= ۵/۶۱۷	۸/۶۵
کبالت	Co	۲۷	۵۸/۹۳	hcp**	۱/۲۵	a= ۲/۵۰۷ c= ۴/۰۶۹	۸/۸۵
کربن (گرافیت)	C	۶	۱۲/۰۱	هگزاگونال	۰/۷۷	a= ۴/۲۵۵ c= ۶/۴۰۷	۲/۲۵
کربن (الماس)	C	۶	۱۲/۰۱	مکعب الماسی	۰/۷۷	۳/۵۶۷	۳/۵۲
کُرُم	Cr	۲۴	۵۱/۹۹۶	bcc*	۱/۲۶	۲/۸۸۴	۷/۱۹
گوگرد	S	۱۶	۳۲/۰۶	اورتورومبیک	۱/۰۴	a= ۱۰/۴۸ b= ۱۲/۹۲ c= ۲۴/۵۵	۲/۰۷
لیتیم	Li	۳	۶/۹۴	bcc	۱/۵۷	۳/۵۲۵	۰/۵۳۶
مس	Cu	۲۹	۶۳/۵۵	fcc	۱/۲۸	۳/۶۱۵	۸/۹۴
مولیبدن	Mo	۴۲	۹۵/۹۴	bcc	۱/۳۶	۳/۱۴۷	۱۰/۲۲
منگنز	Mn	۲۵	۵۴/۹۴	مکعبی*	۱/۱۸	۸/۹۲۲	۷/۴۴
منیزیم	Mg	۱۲	۲۴/۳۱	hcp	۱/۶۰	a= ۳/۲۰۹ c= ۵/۲۰۹	۱/۷۴
نیکل	Ni	۲۸	۵۸/۶۹	fcc	۱/۲۵	۳/۵۱۷	۸/۹۰
نقره	Ag	۴۷	۱۰۷/۸۷	fcc	۱/۴۴	۴/۰۸۶	۱۰/۴۹
نایوبیم	Nb	۴۱	۹۲/۹۱	bcc	۱/۴۷	۳/۲۹۵	۸/۵۷
وانادیم	V	۲۳	۵۰/۹۴	bcc	۱/۳۶	۳/۰۲۸	۶/۱

* اعداد داده شده برای شعاع اتمی و واحد شبکه در درجه حرارت معمول محیط است (به غیر از عنصر آهن)

** این عنصر دارای شبکه‌های کریستالی دیگر هم در دماهای دیگر است.

تمرین

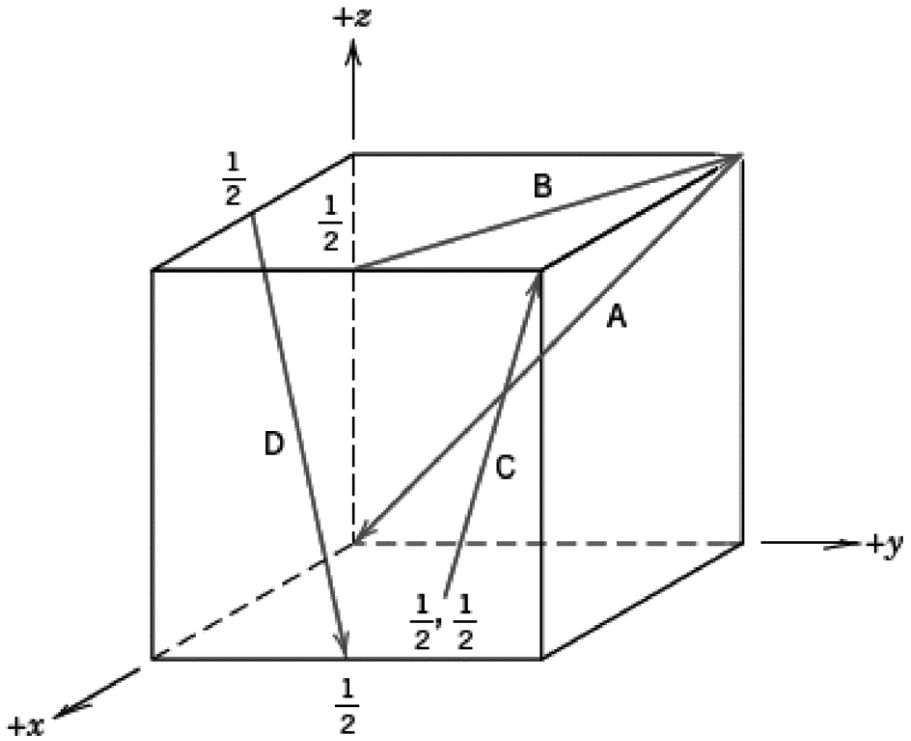
۱- آلیاژی شامل 85% وزنی مس و 15% وزنی قلع است. درصد اتمی هر عنصر را محاسبه کنید. ($A_{Cu=}63.5g/mol$-$A_{Sn=}118.7g/mol$)

۲- شبکه کریستالی کروم (bcc) را ترسیم کنید و صفحه (۱۰۲) را سایه بزنید. چگالی صفحه ای اتمها چقدر است؟

۳- صفحه نازکی از طلا دارای ضخامت 0.08mm و سطح $670mm^2$ است. الف) طلا ساختاری مکعبی با a=0.4076nm دارد. در این صفحه چند سلول واحد وجود دارد؟ ب) اگر چگالی طلا $19.32g/cm^3$ باشد، جرم هر سلول واحد چقدر است؟

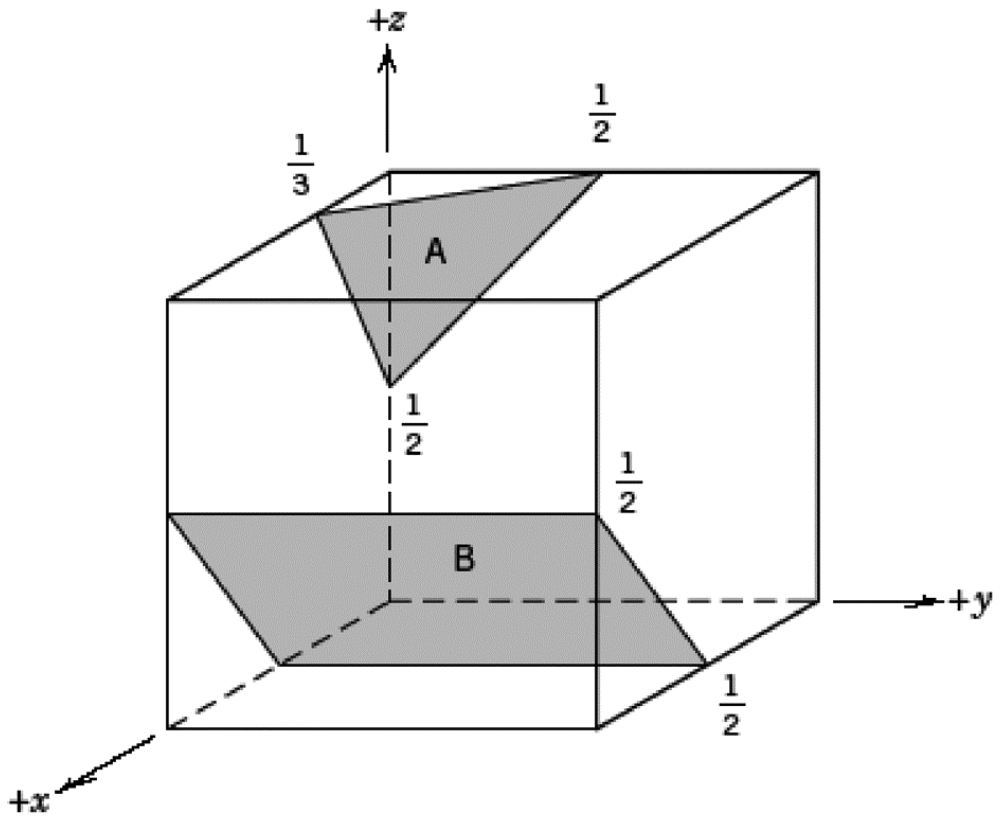
تمرین

- جهات کریستالی در شکل زیر را نامگذاری کنید.



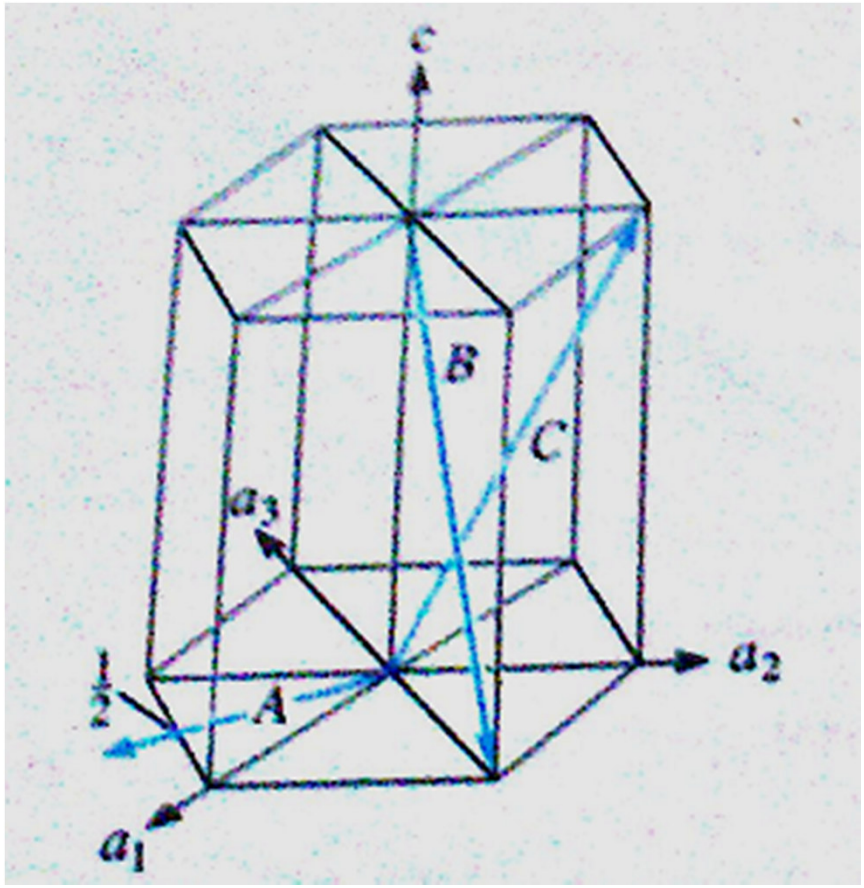
تمرین

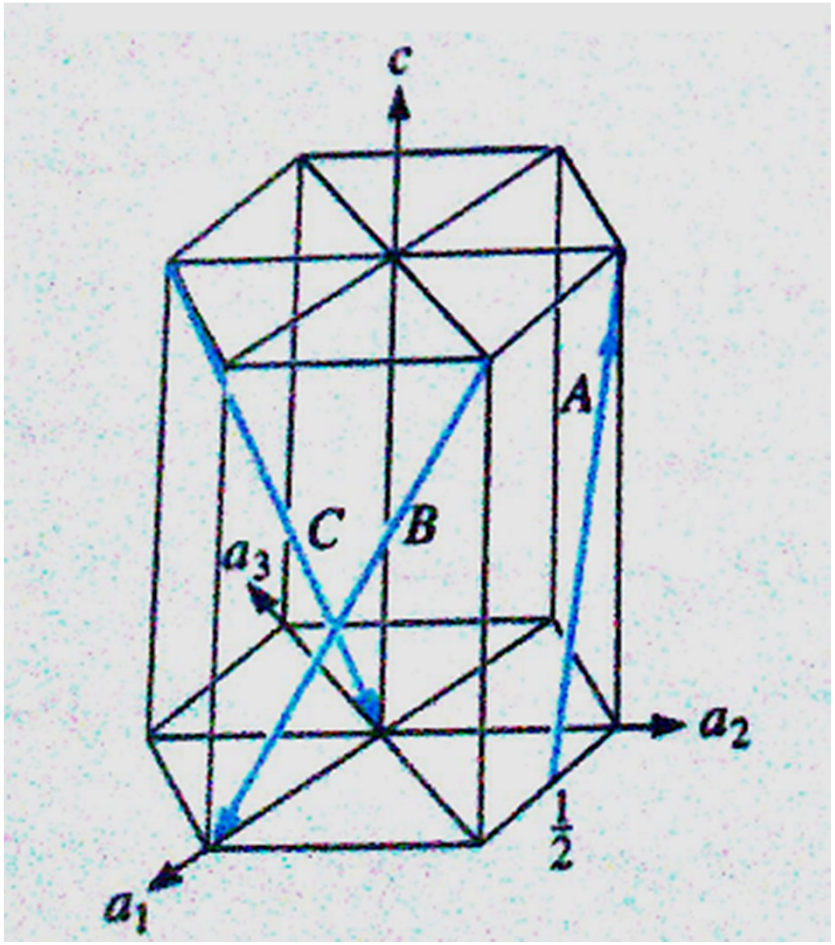
- اندیس گذاری میلر صفحات زیر را بنویسید.



تمرین

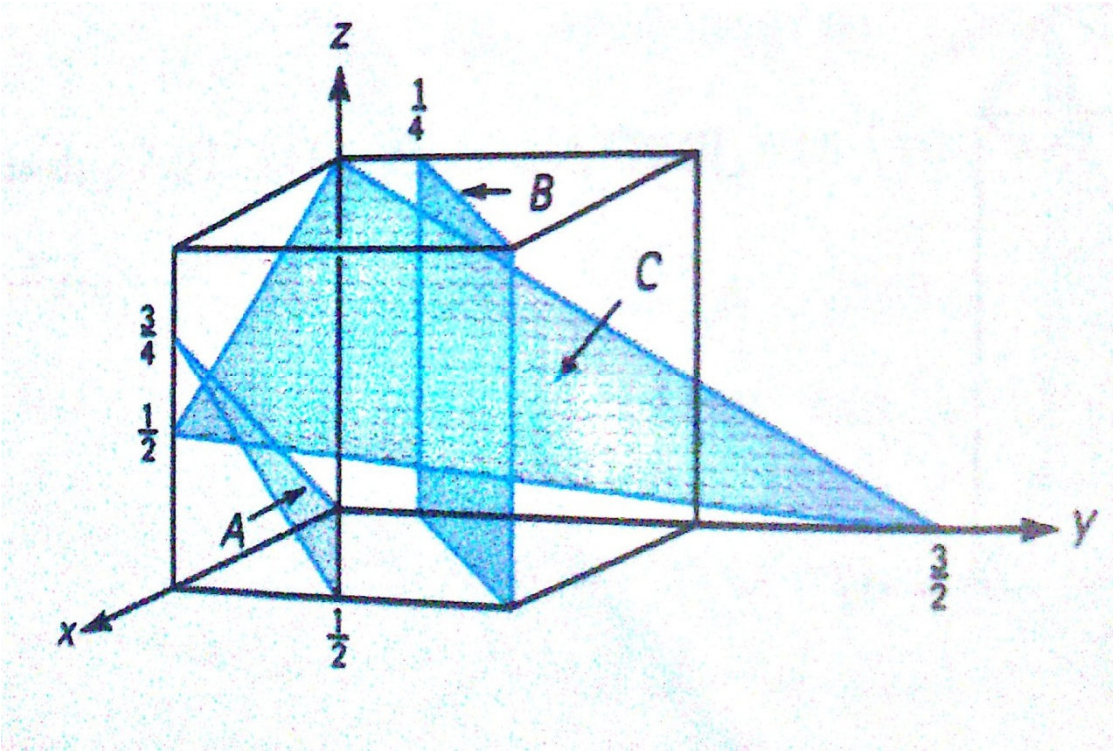
- جهات کریستالی در شکل زیر را نامگذاری کنید.

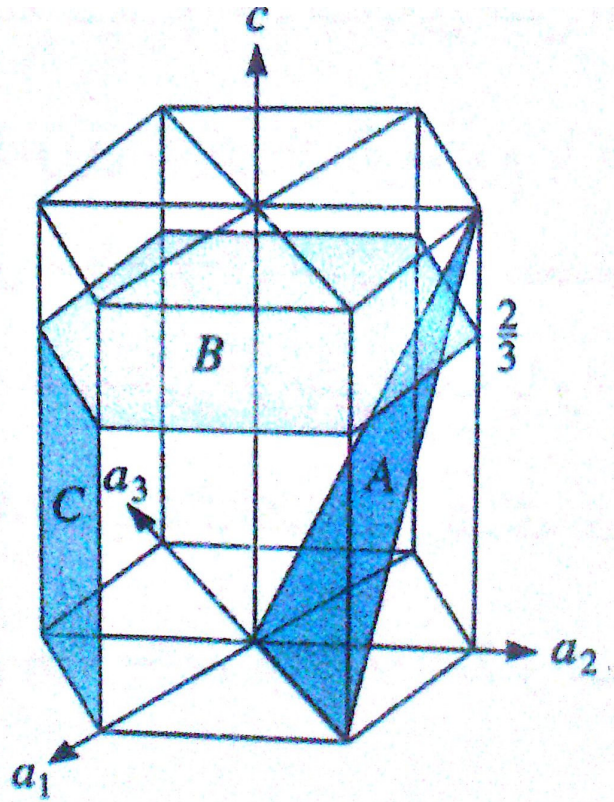




تمرین

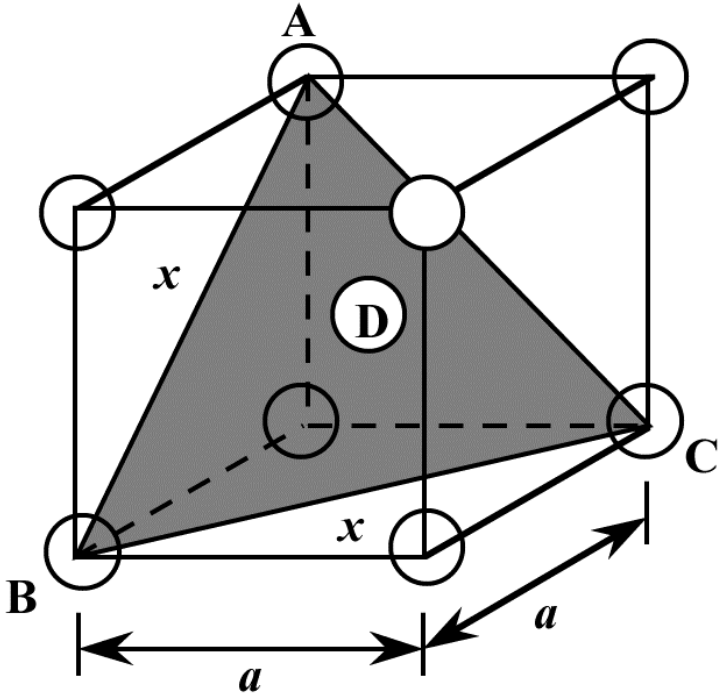
- اندیس گذاری میلر صفحات زیر را بنویسید.

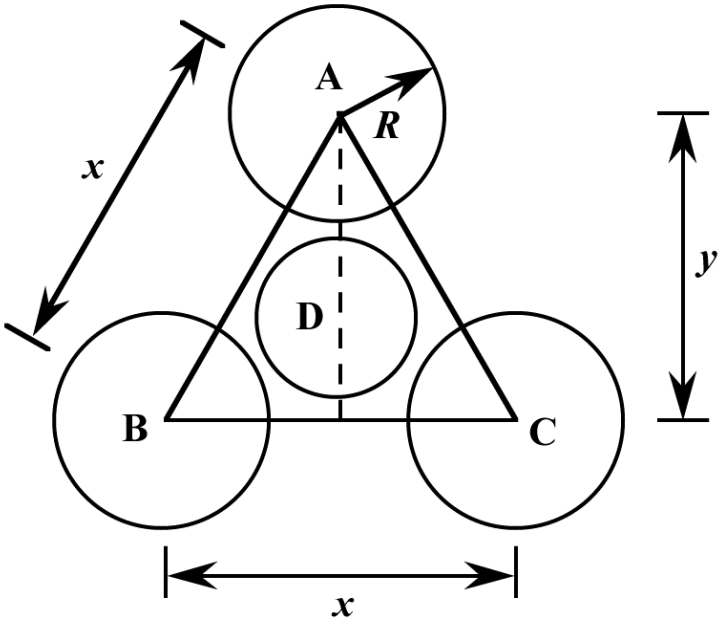




تمرین

- چگالی صفحه ای صفحه (۱۱۱) در سیستم bcc را بدست آورید.

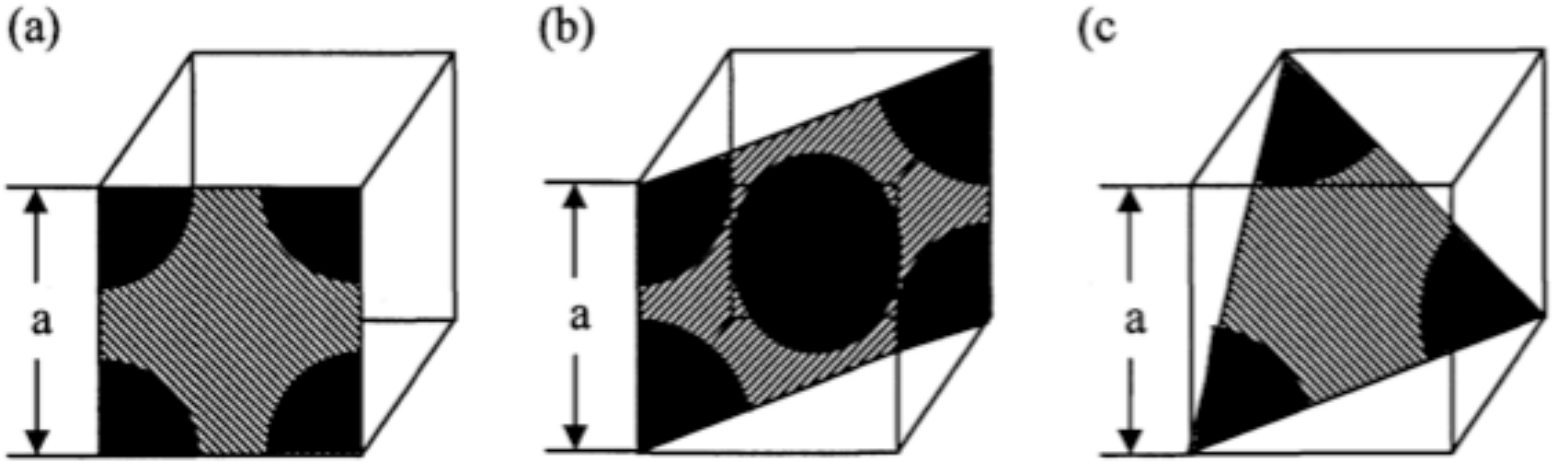




$$PD_{111}(BCC) = \frac{0.5\ \text{atom}}{\frac{8R^2}{\sqrt{3}}} = \frac{\sqrt{3}}{16R^2} = \frac{0.11}{R^2}$$

تمرین

- چگالی صفحه ای صفحات (۱۱۱)، (۱۱۰) و (۱۰۰) در سیستم bcc را بدست آورید.



فصل سوم
عیوب شبکه کریستالی

- کریستالی که دارای ساختار شبکه ای کاملا **منظم از تکرار سلول واحد** باشد، **کریستال ایده آل** نامیده می شود.
- عموما تمام کریستالها دارای عیوب مختلفی هستند که خواص فیزیکی و مکانیکی کریستالها را تغییر می دهند.
- با کنترل عیوب می توان فلزات و آلیاژهایی با استحکام بالا و خواص صنعتی بهتر تولید کرد.

انواع عیوب شبکه کریستالی

۱- عیوب نقطه ای

- ❖ عیب جای خالی
- ❖ عیب بین نشینی
- ❖ عیب شوتکی
- ❖ عیب جانشینی
- ❖ عیب فرنکل

۲- عیوب خطی

- ❖ نابجایی لبه ای
- ❖ نابجایی پیچی
- ❖ نابجایی مختلط

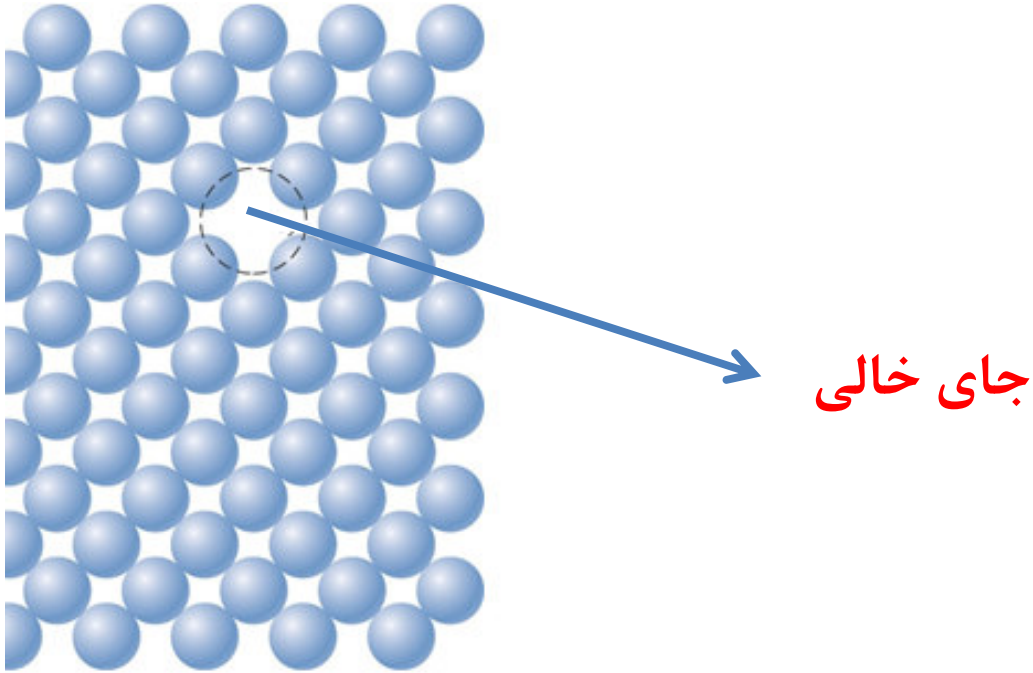
۳- عیوب صفحه ای

- ❖ عیب لایه ای
- ❖ مرزدانه ها

۴- عیوب فضایی یا حجمی

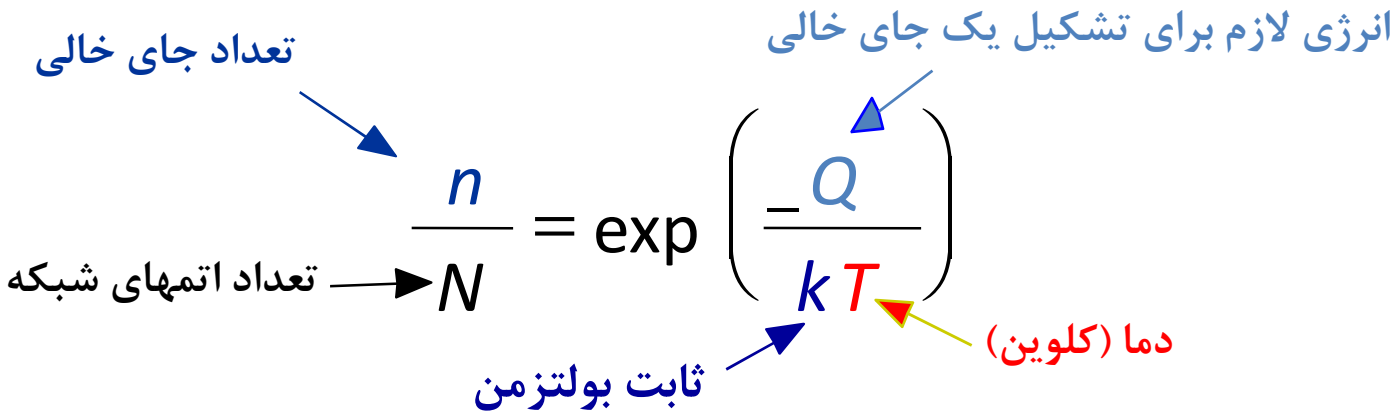
عیوب جای خالی

- این عیب به عنوان مهمترین و ساده ترین عیوب نقطه ای شناخته می شود.
- دلایل تشکیل:
  - انجماد (به خصوص سرد کردن با سرعت زیاد از دمای بالا)
  - تغییر شکل
  - پرتودهی



عیوب جای خالی

- محاسبه تعداد جای خالی در شبکه کریستالی



$(1.38 \times 10^{-23}$ J/atom-K)

$(8.62 \times 10^{-5}$ eV/atom-K)

عیوب جای خالی

مثال۱: مطلوبست تعداد جای خالی در اتم مس در دمای ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد در ۱ متر مکعب اگر انرژی لازم برای تشکیل یک جای خالی برابر 0.9 eV/atom باشد.

$\rho = 8.4\ g/cm^3$ $A_{Cu} = 63.5\ g/mol$

$N_A = 6.02 \times 10^{23}\ atoms/mol$

$$\frac{n}{N} = \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) = 2.7 \times 10^{-4}$$

Q: 0.9 eV/atom

T: 1273 K

k: 8.62×10^{-5} eV/atom-K

برای : **1 m³** , $N = \rho \times \frac{N_A}{A_{Cu}} \times 1\ m^3 = 8.0 \times 10^{28}$ sites

$n = (2.7 \times 10^{-4})(8.0 \times 10^{28}) = 2.2 \times 10^{25}$ جای خالی

مثال۲: محاسبه کنید تعداد جای خالی اتمی لازم برای کسب اهنی با شبکه کریستالی bcc و با چگالی $7.87g/cm^3$ اگر واحد شبکه اهن 2.866 A باشد

حل: مقدار چگالی آهن را از لحاظ نظری (تئوری) با فرض معلوم بودن واحد شبکه، تعداد اتم‌های سلول واحد و جرم اتمی و با توجه به تعداد دو اتم موجود در سلول واحد آن با استفاده از رابطه (۳-۱۲) می توان بدست آورد:

$$\rho = \frac{nM}{VN_A} = \frac{(۲)(۵۵/۸۴۷\ g/mol)}{(۲/۸۶۶\times۱۰^{-۱۰}\ m)^3(۶/۰۲\times۱۰^{۲۳}\ atom/mol)} = ۷/۸۸۱۴\times۱۰^{۶}\ g.m^{-۳}$$

اما از آنجا که منظور مسئله تولید آهنی با چگالی پایین‌تر یعنی $\rho = ۷/۸۷\times۱۰^{۶}\ g.m^{-۳}$ است، می توان با ایجاد محل‌های خالی اتمی به آن دست یافت.

$$n = \frac{\rho VN_A}{M} = \frac{(۷/۸۷\times۱۰^{۶}\ g/m^۳)(۲/۸۶۶\times۱۰^{-۱۰}\ m)^3(۶/۰۲\times۱۰^{۲۳}\ atom/mol)}{(۵۵/۸۴۷\ g/mol)} = ۱/۹۹۷۱\ atom$$

بنابراین باید تعداد جای خالی اتمی ۰/۰۰۰۲۹ در هر سلول واحد وجود داشته باشد و تعداد جای خالی در هر متر مکعب برابر است با:

$$\text{تعداد جای خالی اتمی در هر مترمکعب} = \frac{۰/۰۰۰۲۹}{(۲/۸۶۶\times۱۰^{-۱۰}\ m)^۳} = ۱/۲۳\times۱۰^{۲۶}$$

مثال۳: نوعی عملیات حرارتی در نظر بگیرید که حدود ۱۰۰۰ برابر جای خالی اتمی در مس بیش از آنچه در دمای محیط است ایجاد کند. اگر مقدار انرژی حرارتی مورد نیاز برای یک جای خالی 83700J/mol و ثابت شبکه مس 3.6151A باشد دمای مورد نیاز را محاسبه کنید.

✓**تعداد اتمها در هر مترمکعب:**

$$N = \frac{۴}{(۰/۳۶۱۵۱\times۱۰^{-۹}\,m)^{۳}} = ۸/۴۷\times۱۰^{۲۸}$$

✓**تعداد جای خالی در دمای اتاق:**

$$n = (۸/۴۷\times۱۰^{۲۸}\,atom/m^{۳})\exp\left[\frac{-۸۳۷۰۰\ J/mol}{(۸/۳۱\ J.mol^{-۱}K^{-۱})(۲۹۸K)}\right] = ۱/۷۷۴\times۱۰^{۱۴}$$

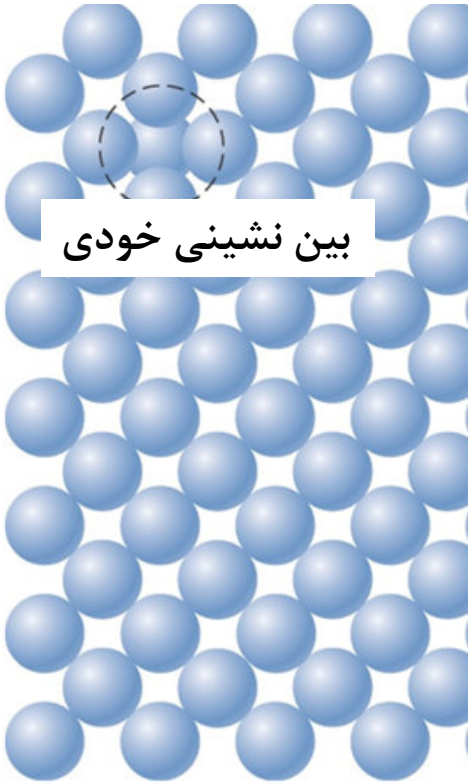
✓**هدف ایجاد جای خالی معادل ۱۰۰۰ برابر مقدار بالا می باشد، پس:**

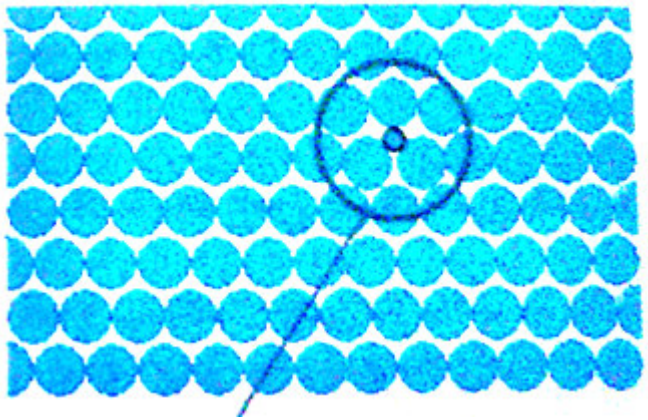
$$n = ۱/۷۷۴\times۱۰^{۱۷} \rightarrow \exp\left[\frac{-۸۳۷۰۰}{۸/۳۱T}\right] = \frac{۱/۷۷۴\times۱۰^{۱۷}}{۸/۴۷\times۱۰^{۲۸}} = ۲/۰۹۵\times۱۰^{-۱۲}$$

$$\frac{-۸۳۷۰۰}{۸/۳۱T} = \ln(۲/۰۹۵\times۱۰^{-۱۲}) = -۲۶/۸۹ \rightarrow T = \frac{۸۳۷۰۰}{۸/۳۱\times۲۶/۸۹} = ۳۷۵^{\circ}K = ۱۰۲^{\circ}C$$

عیب بین نشینی

- قرار گرفتن یک اتم در فضای موجود بین اتمهای اصلی شبکه عیب بین نشینی است.
- شرط اولیه این عیب به اندازه کافی کوچک بودن اتم مهمان می باشد.
- این عیب بیشتر در شبکه هایی با APF پایین قابل مشاهده می باشد.
- این عیب می تواند به دو صورت بین نشینی **اتم مهمان** و **اتم خودی** صورت گیرد.

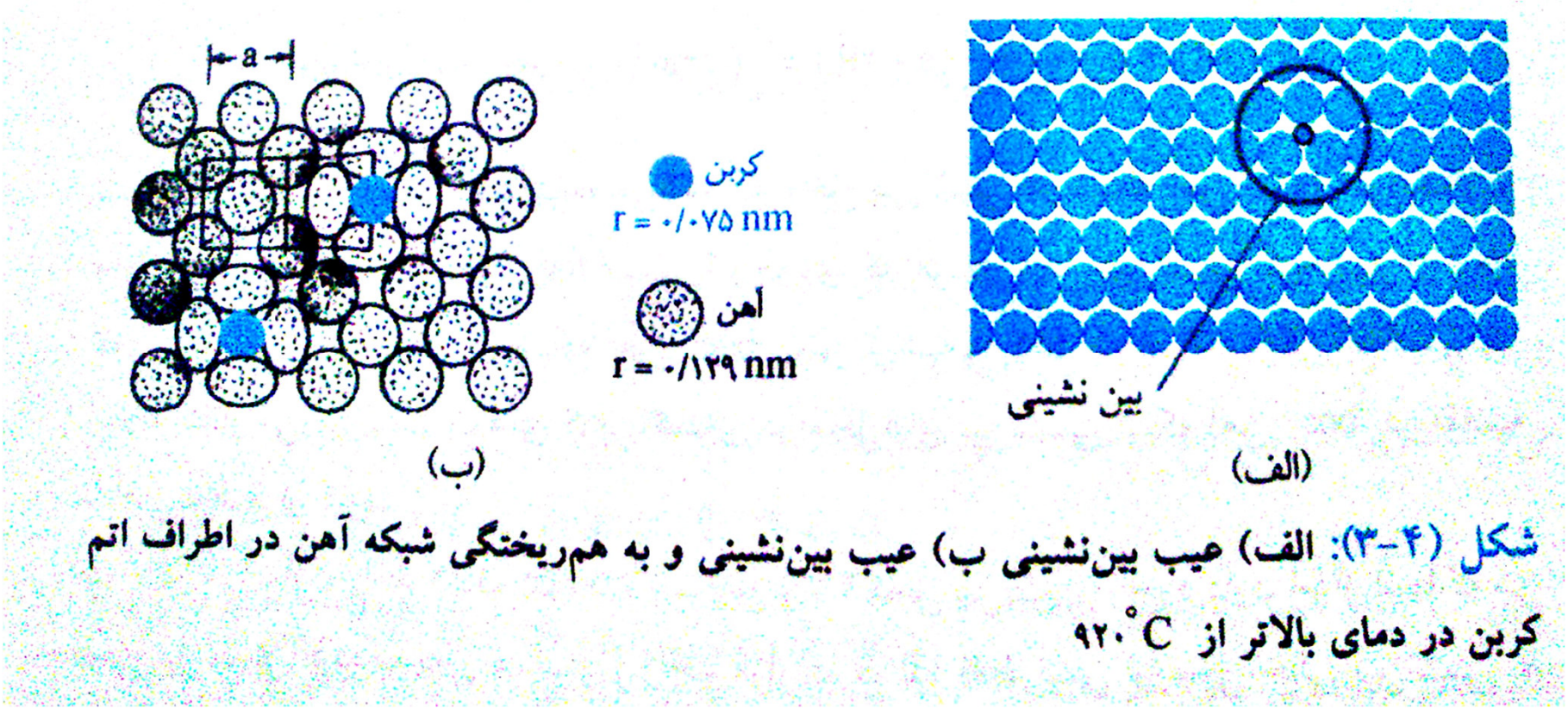




بین نشینی اتم مهمان

عیب بین نشینی

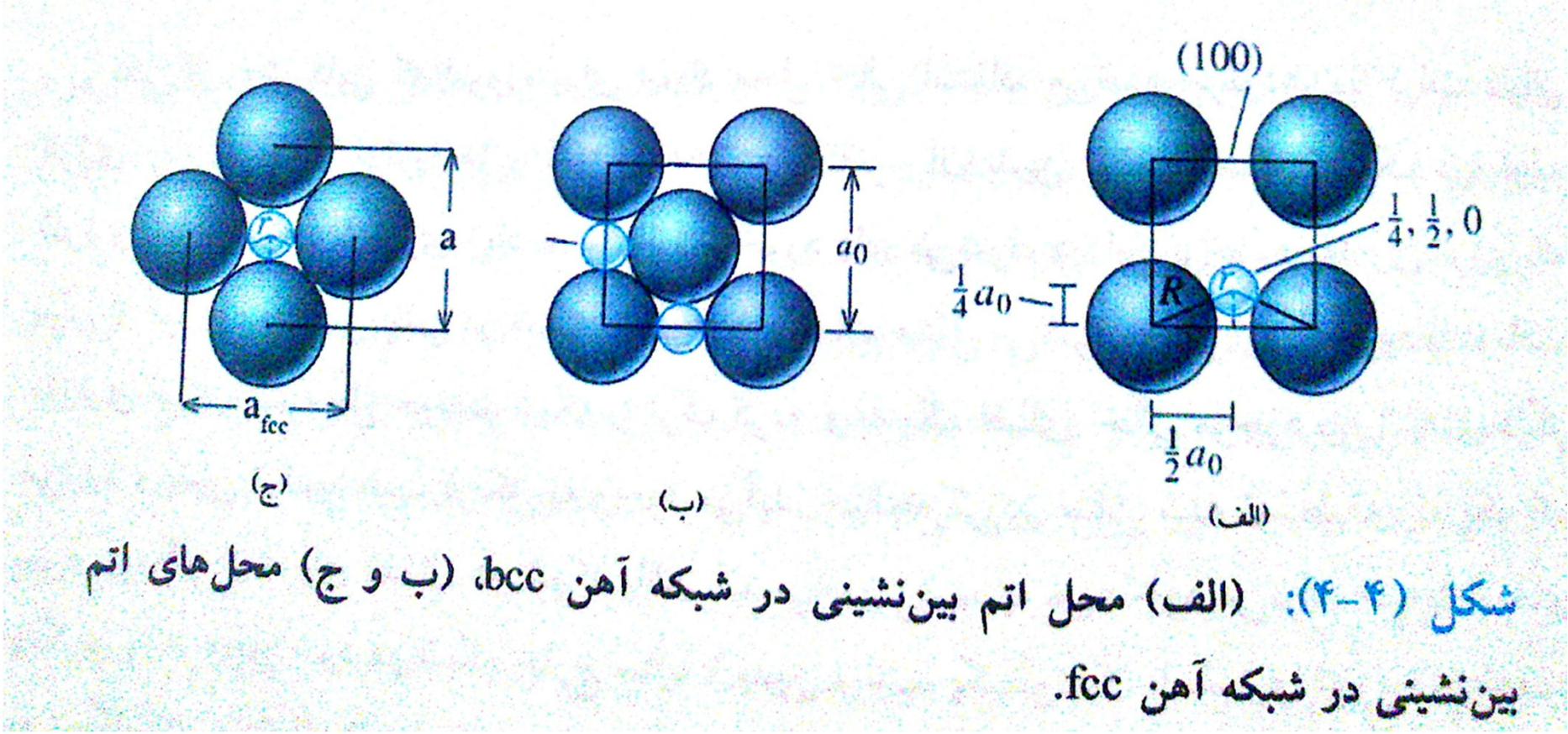
- به عنوان مثال قرار گرفتن اتم آهن در شبکه fcc که باعث کجی یا تغییر شکل موضعی در ساختار شبکه کریستالی می شود.



شکل (۴-۳): الف) عیب بین‌نشینی ب) عیب بین‌نشینی و به هم‌ریختگی شبکه آهن در اطراف اتم کربن در دمای بالاتر از $920^{\circ}C$

عیب بین نشینی

- محلهای مناسب برای قرار گرفتن کربن در شبکه آهن با ساختار **fcc** در **مرکز و وسط یالها** و در شبکه **bcc** در فضای خالی به **مختصات (۱/۴،۱/۲،۰)** می باشد.



شکل (۴-۴): (الف) محل اتم بین‌نشینی در شبکه آهن bcc، (ب و ج) محل‌های اتم بین‌نشینی در شبکه آهن fcc.

عیب بین نشینی

بررسی شبکه bcc

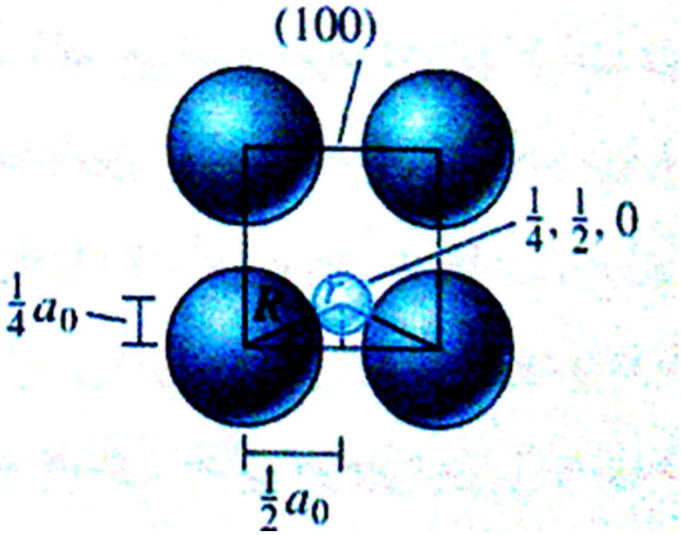
الف) محاسبه شعاع اتمی

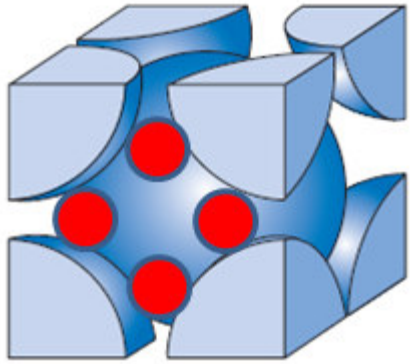
$$R_{bcc} = \frac{\sqrt{3}a}{4} = \frac{\sqrt{3} \times 0.2886}{4} = 0.124$$

ب) ارتباط بین شعاع اتم مهمان و اتمهای شبکه

$$(r+R)^2 = (\frac{a}{2})^2 + (\frac{a}{4})^2 \rightarrow r = 0.0361nm$$

ج) تعداد محلهای مستعد ۲۴ محل و تعداد اتمهای معادل:





$$= 24 \times \frac{1}{2} = 12$$

عیب بین نشینی

بررسی شبکه fcc

الف) محاسبه شعاع اتمی

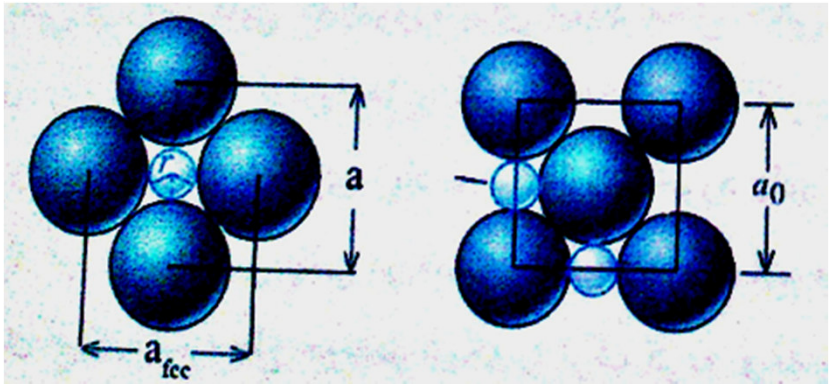
$$R_{fcc} = \frac{\sqrt{2}a}{4} = \frac{\sqrt{2} \times 0.3571}{4} = 0.1243nm$$

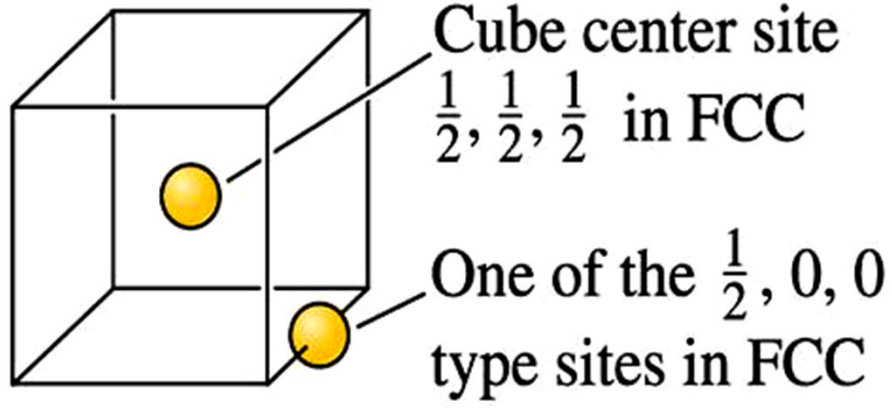
ب) ارتباط بین شعاع اتم مهمان و اتمهای شبکه

$$(2r + 2R) = a \rightarrow r = 0.0523nm$$

ج) تعداد محلهای مستعد ۱۳ و تعداد اتم مهمان در شبکه

$$= 12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$$





عیب بین نشینی

سوال۱: به هم خوردگی کدام یک از شبکه ها بیشتر است؟

$r_{bcc}=0.0361nm$
$r_{fcc}=0.0523nm$ } ⟵ **محل بین نیشنی در شبکه bcc کوچکتر از شبکه fcc است.**

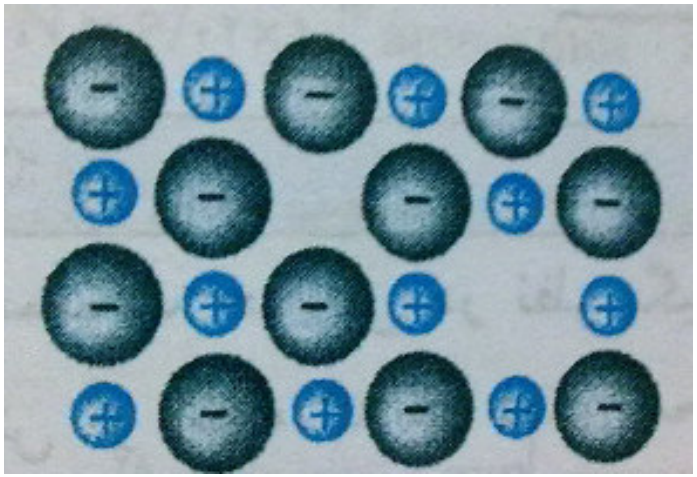
سوال ۲: درصد اتمی اتم مهمان در هر دو شبکه به چه صورت است؟

$$\text{درصد اتمی در bcc} = \frac{\text{۱۲ اتم مهمان}}{\text{۱۲ اتم مهمان +۲ اتم آهن}} = ٪۸۶$$

$$\text{درصد اتمی در fcc} = \frac{\text{۴اتم کربن}}{\text{۴ اتم مهمان +۴ اتم آهن}} = ٪۵۰$$

عیوب شوتکی (schottky)

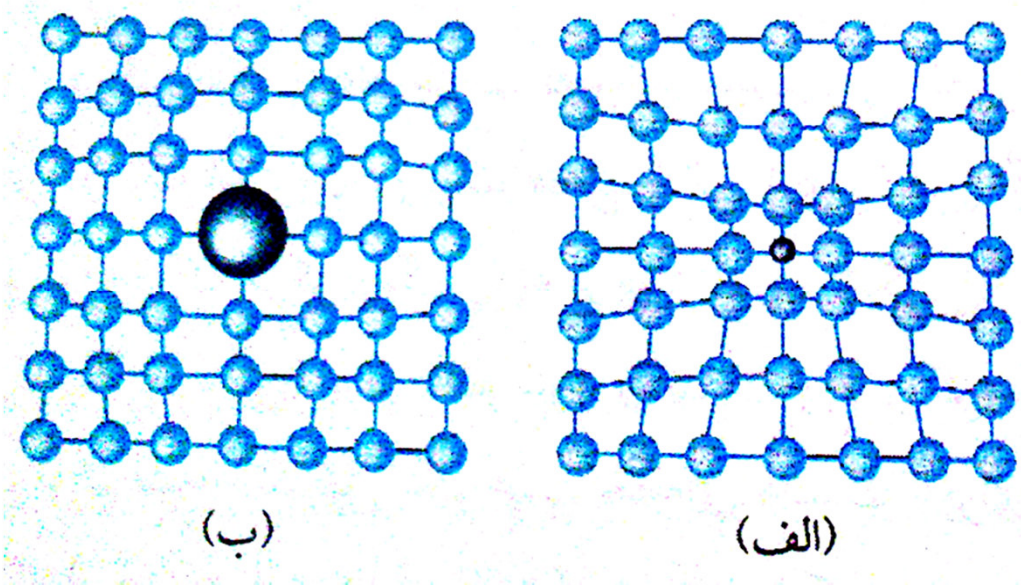
- این عیب در شبکه کریستالی با پیوند یونی یافت می شود.
- محل خالی یون مثبت یا منفی می باشد.
- دلایل ایجاد
  - عدم حضور یا حضور بیش از حد بار الکتریکی در شبکه
  - جایگزینی اتم باردار شبکه با اتمی دیگر با ظرفیت کمتر یا بیشتر
  - انحراف از قانون نسبت های معین (مثلا اکسید آهن کاملا بصورت FeO نباشد بلکه $Fe_{0.9}C$ باشد)



عیب شوتکی در کریستال NaCl

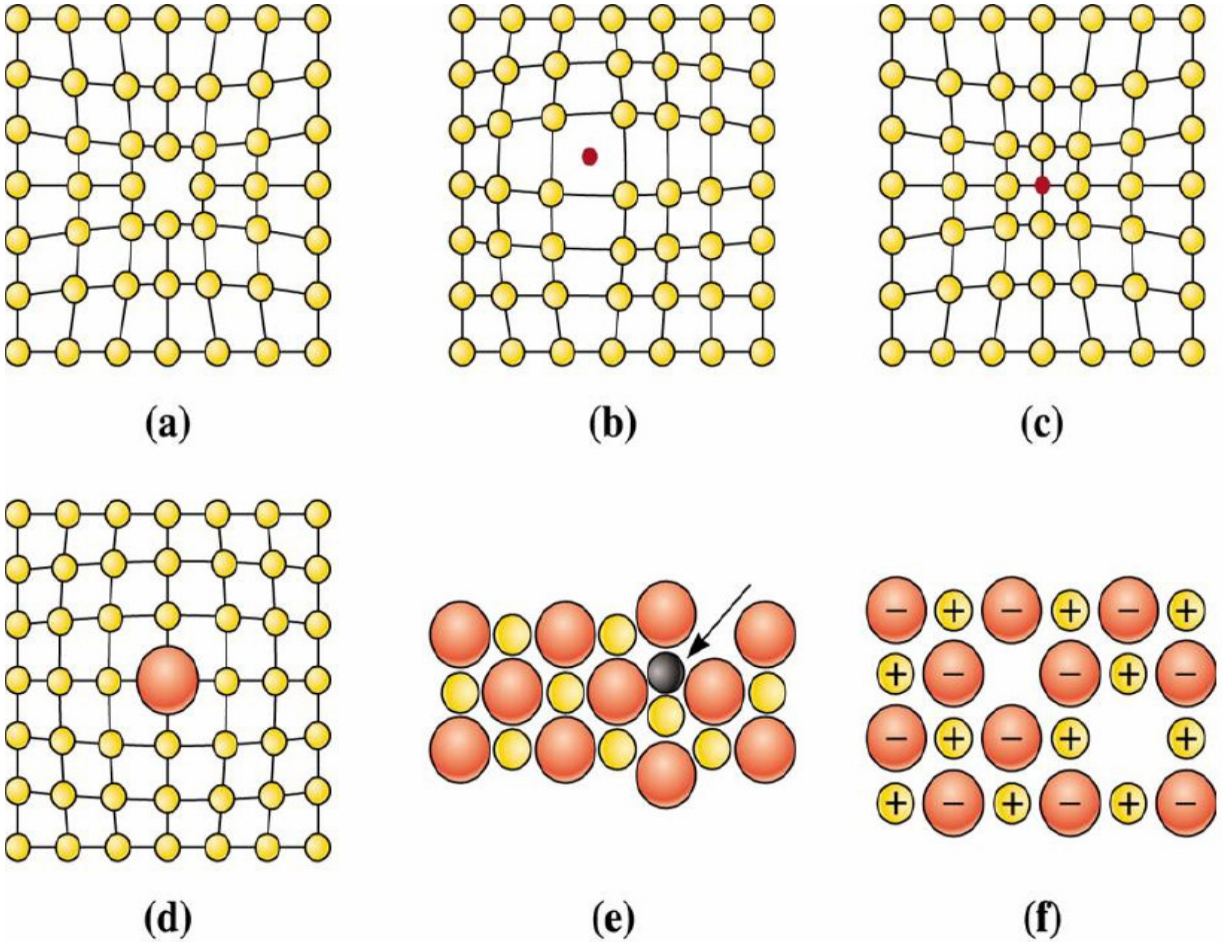
عیب جانشینی

- اتمهایی در شبکه ممکن است جایگزین اتمهای شبکه شوند که اندازه آن ممکن است کوچکتر یا بزرگتر از اتمهای شبکه باشند.



شکل (۴-۵): عیب جانشینی (الف) اندازه اتم جانشینی کوچکتر، (ب) اندازه اتم جانشینی بزرگتر

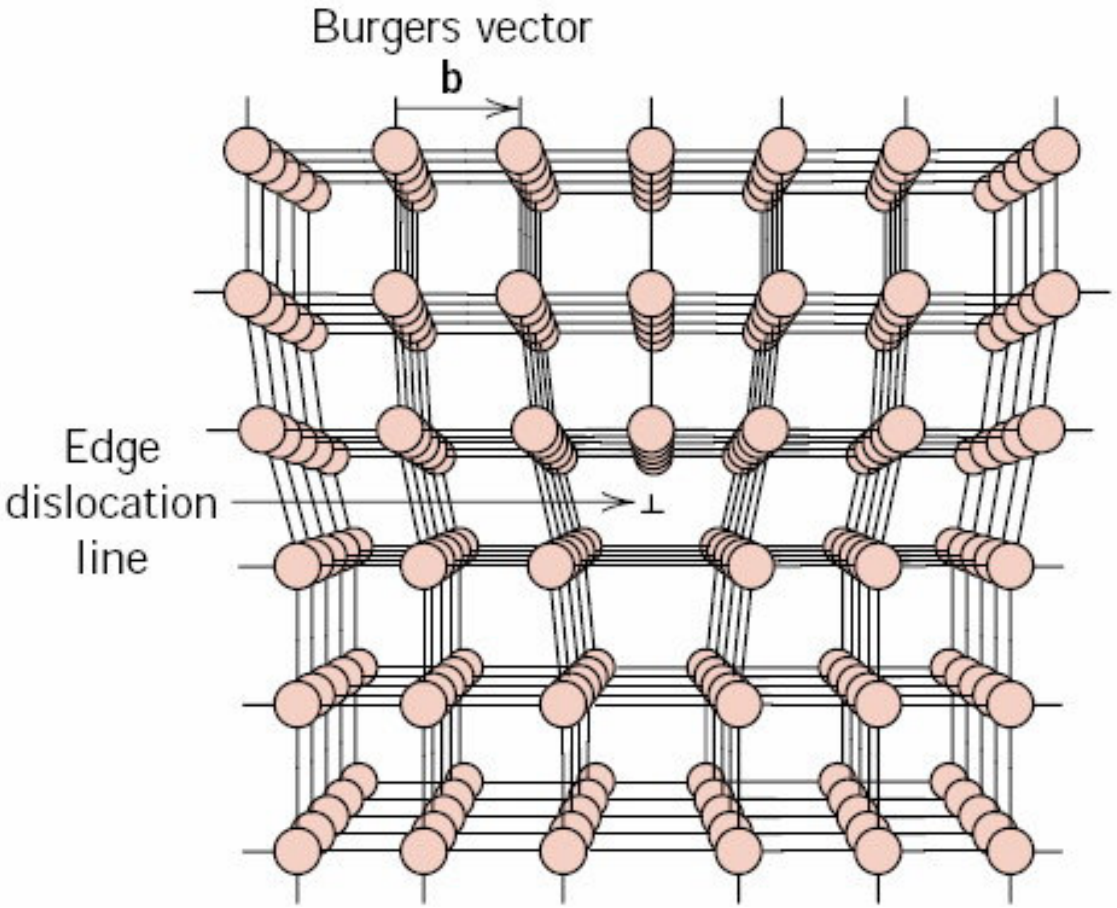
انواع عیوب نقطه ای



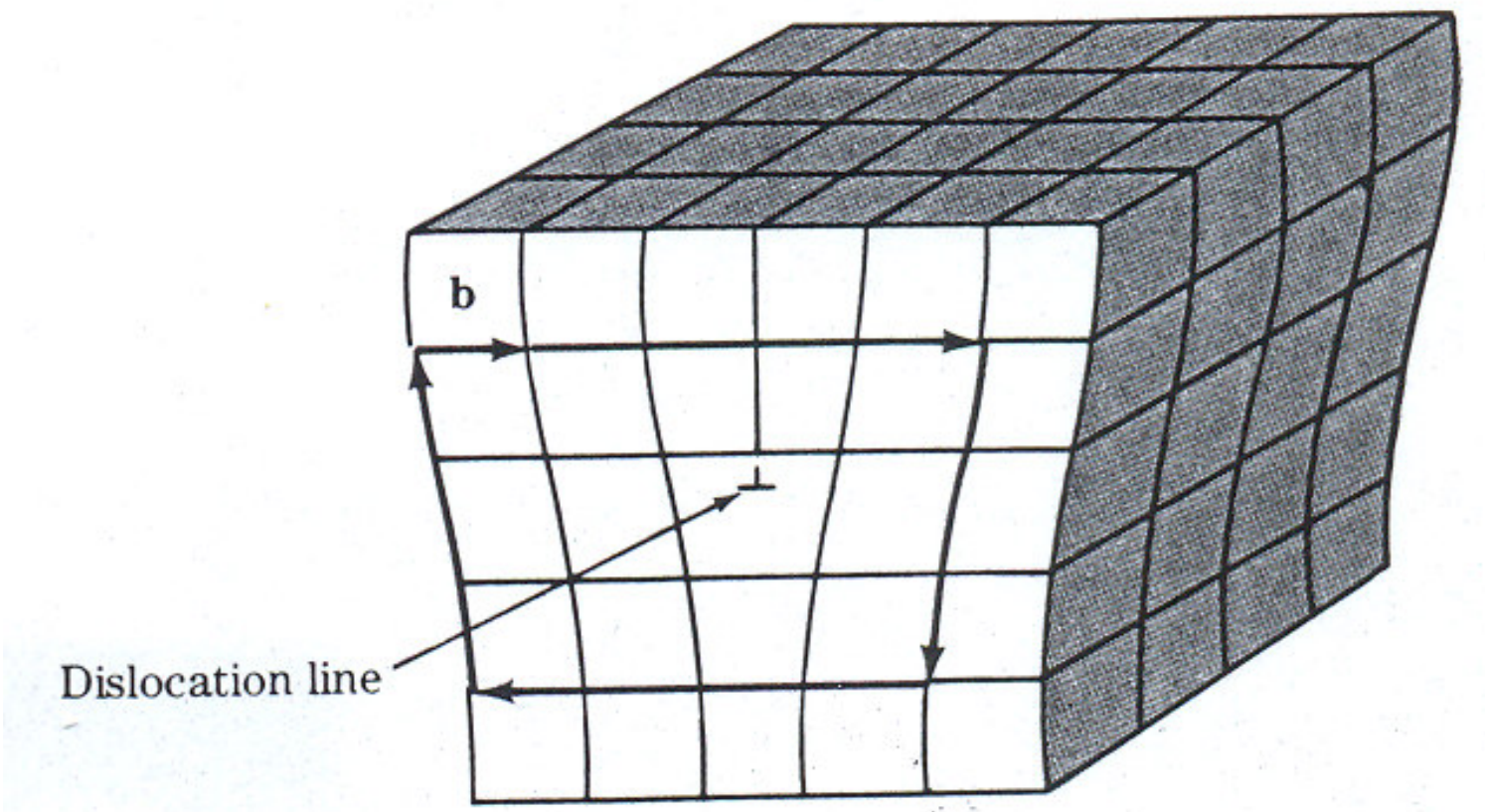
عیوب خطی

- معمولترین نوع عیب خطی در درون بلور نابجایی است.

- **نابجایی خطی:** به صورت لبه صفحه اتمی اضافی در درون ساختار بلوری تعریف می شود.



نمایش سه بعدی نابجایی لبه ای



عیوب خطی

- **نابجایی لبه ای**

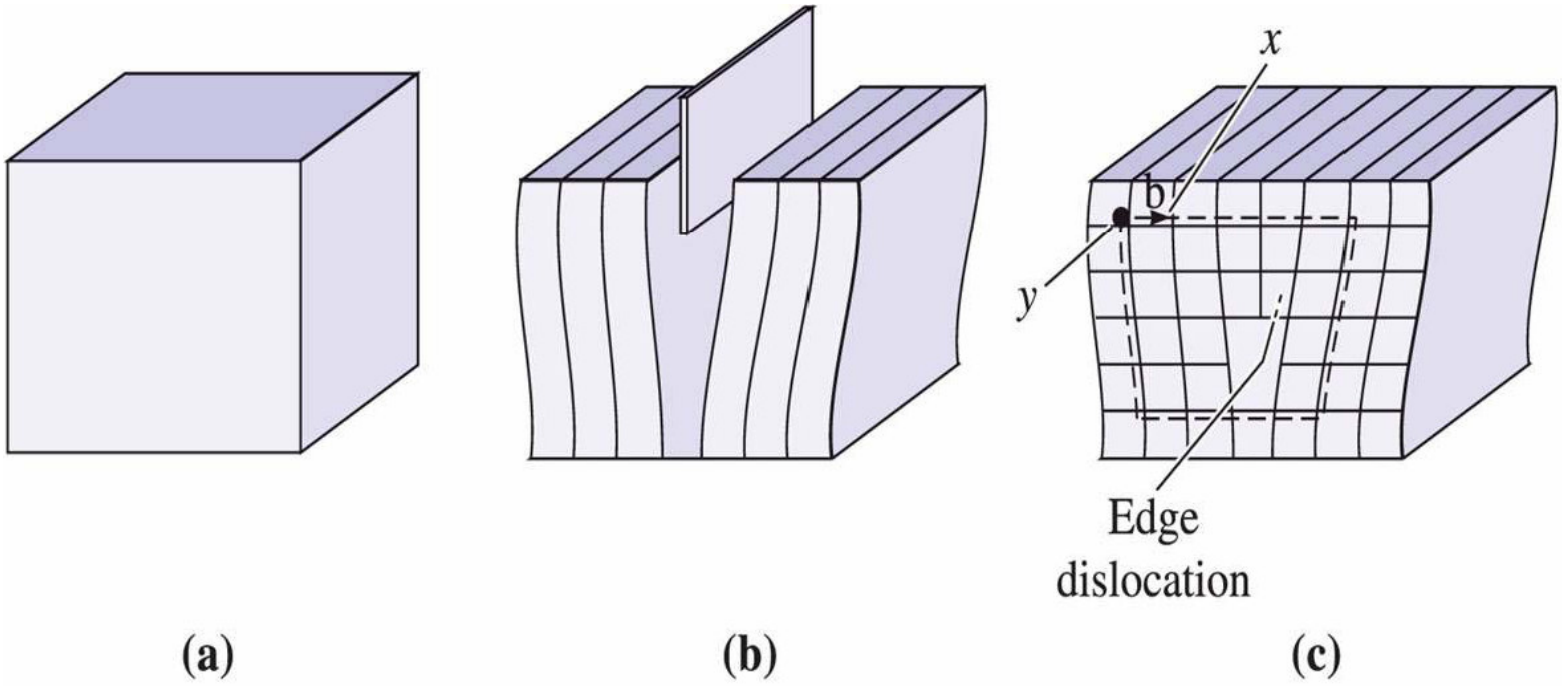
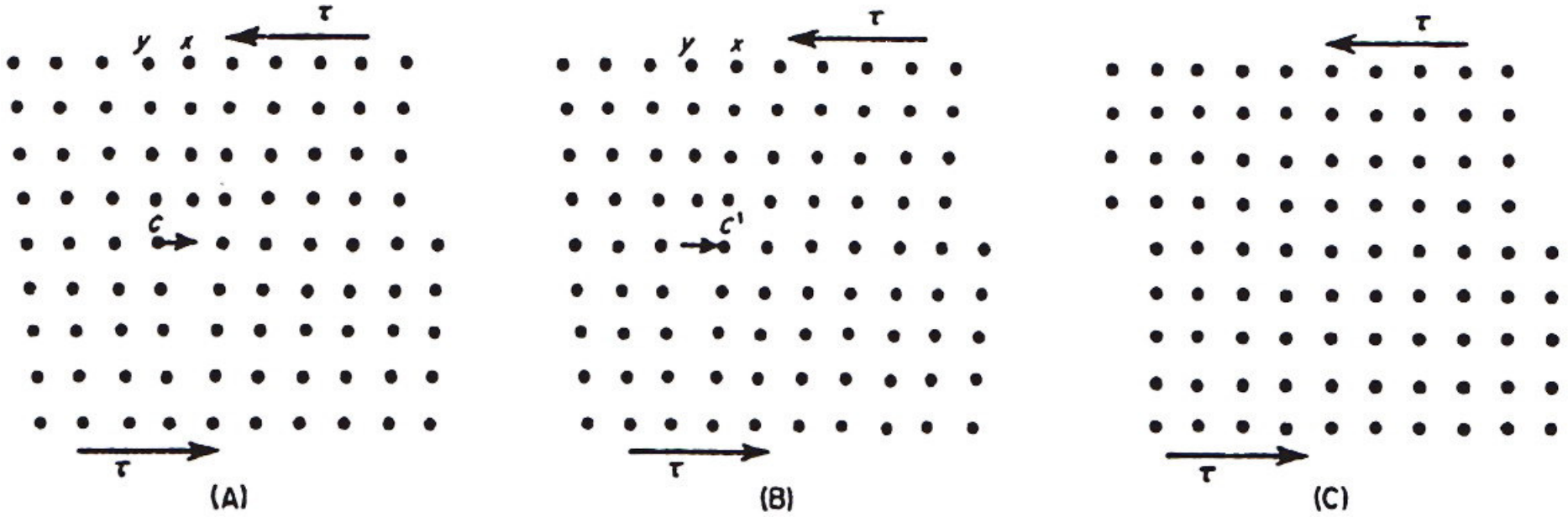


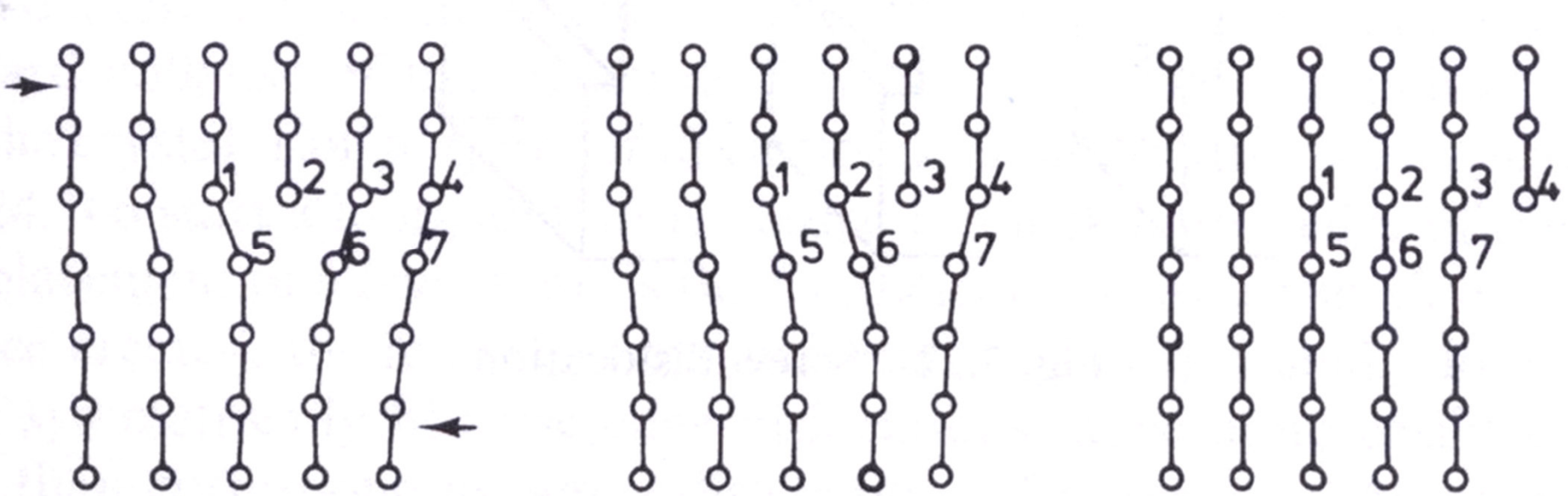
Figure 4-5 The perfect crystal in (a) is cut and an extra plane of atoms is inserted (b). The bottom edge of the extra plane is an edge dislocation (c). A Burgers vector **b** is required to close a loop of equal atom spacings around the edge dislocation. *(Adapted from J.D. Verhoeven, Fundamentals of Physical Metallurgy, Wiley, 1975.)*

مراحل حرکت یک نابجایی لبه‌ای از بین یک بلور

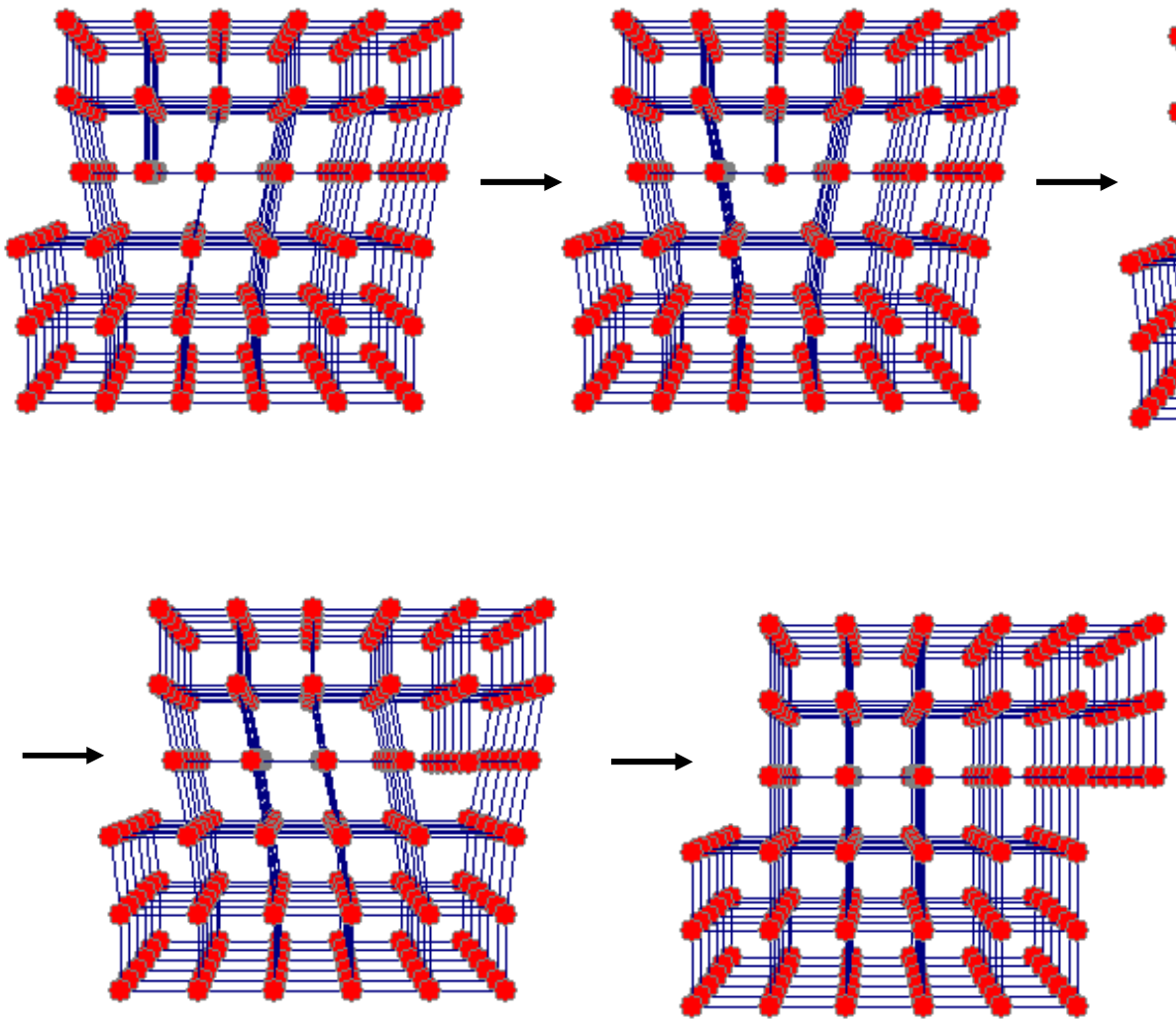
در نتیجه اعمال تنش، اتم C به موقعیت C’ نقل مکان می‌کند و نابجایی به اندازه یک فاصله اتمی به چپ حرکت می‌کند. تداوم اعمال تنش باعث حرکت نابجایی در گام‌های بعدی در طول صفحه لغزش به اندازه یک فاصله اتمی می‌شود. این مراحل حرکت نابجایی مستلزم تغییر کوچکی در چیدمان اتم‌ها در همسایگی صفحه اضافی است و نیروی لازم برای این کار در حدود مقدار تنش تسلیم است.



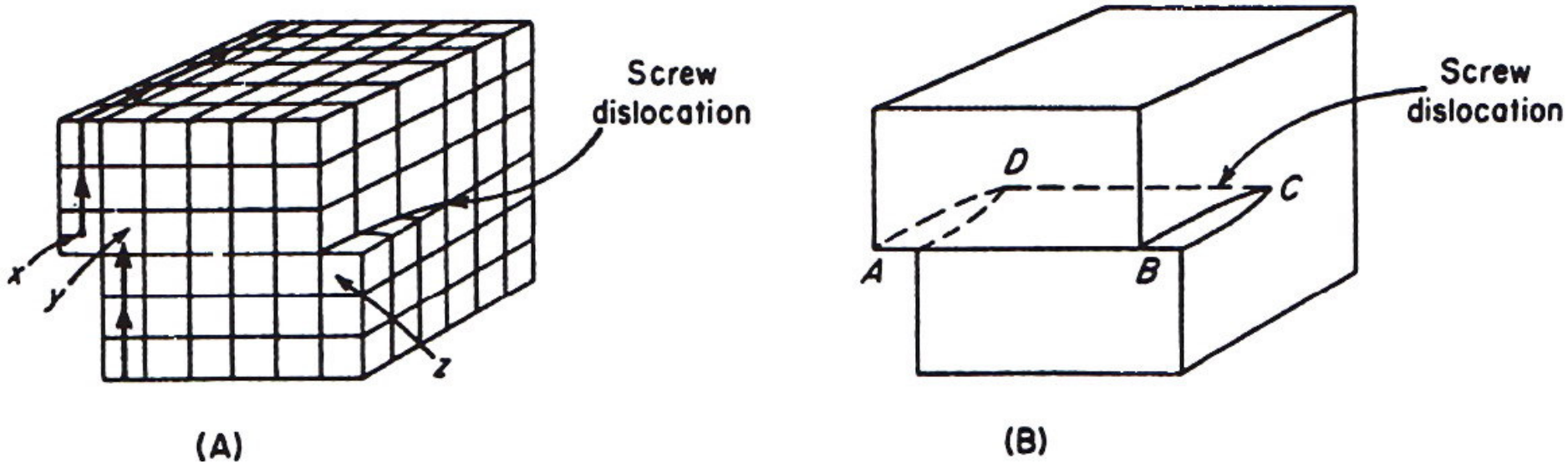
مراحل حرکت یک نابجایی لبه‌ای از بین یک بلور



مراحل حرکت یک نابجایی لبه‌ای از بین یک بلور



نابجایی پیچی

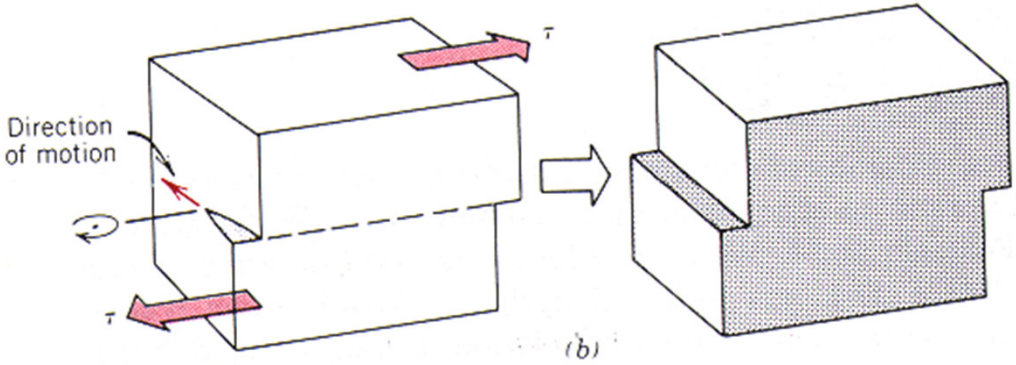


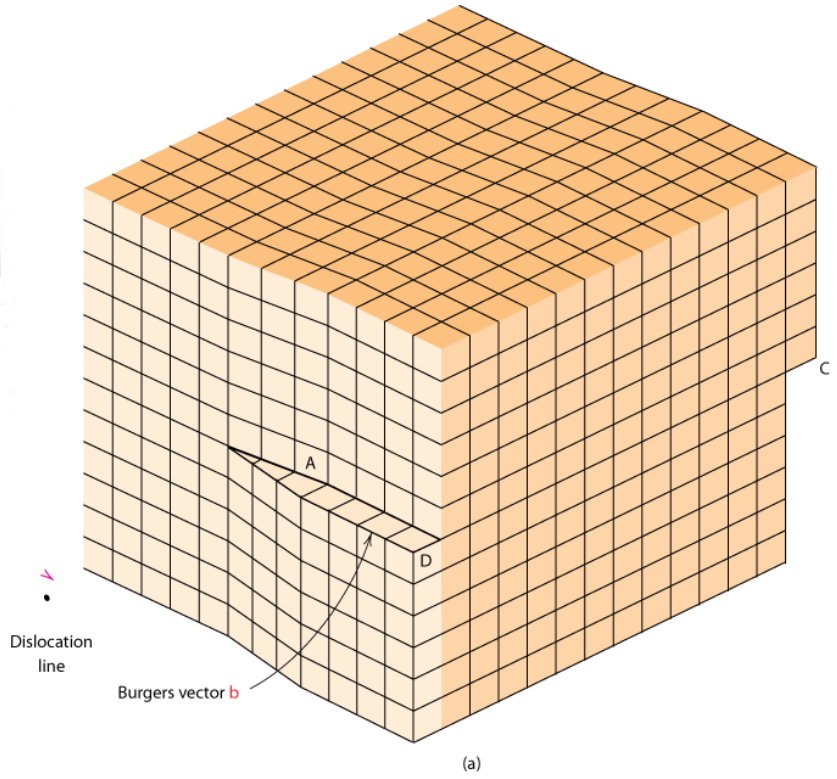
دو نمایش از نابجایی پیچی

صفحات دور این نابجایی پیچی مثل یک پیچ چپ‌گرد چرخیده‌اند. نابجایی پیچی نیز مرز بین یک سطح لغزش یافته و یک سطح لغزش نیافته است.

نابجایی پیچی

- تحت بارگذاری پیچشی، تغییر فرم این نابجایی به کل شبکه منتقل می شود





عیوب صفحه ای

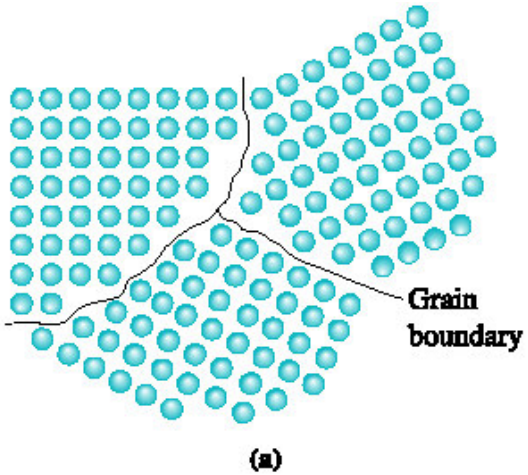
۱- عیب لایه ای

- این عیب از قرار گرفن بدون نظم صفحات اتمی بر روی یکدیگر بوجود می آید. یعنی در قسمتی از کریستال یکی از لایه ها وجو ندارد.
- مثلا در سیستم هگزاگونال تکرار صفحات بصورت ...ABBABAB باشد. در این حالت صفحه اتمی **A** در قسمتی از کریستال وجود ندارد.

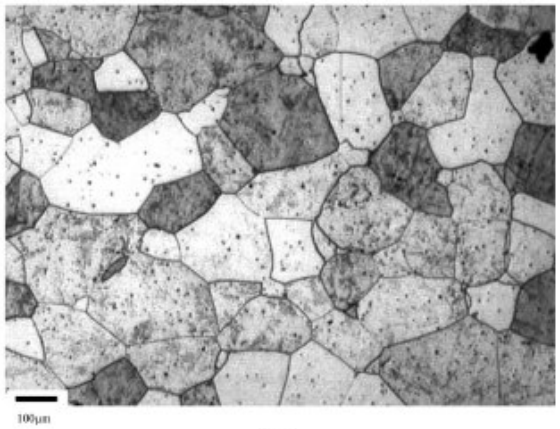
عیوب صفحه ای

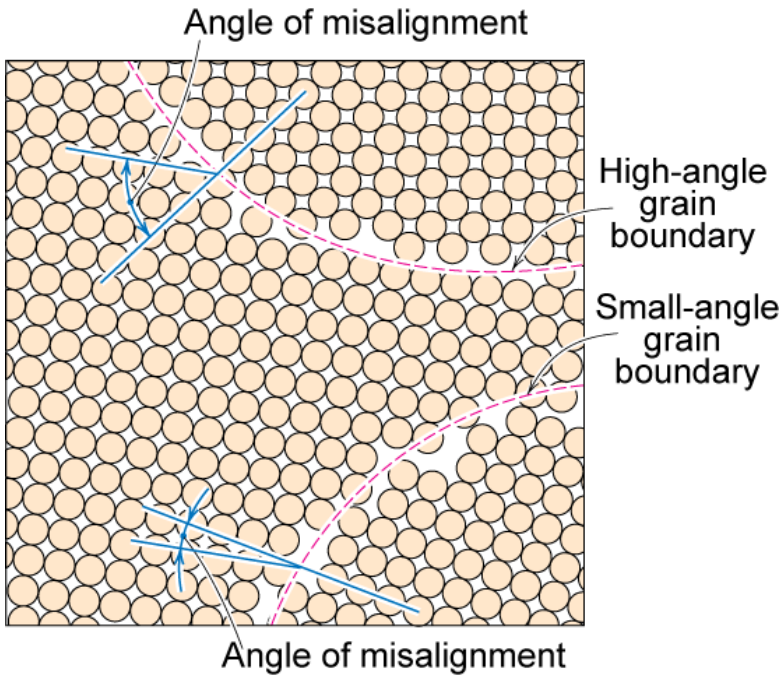
۲- مرزدانه ها

تقریبا تمام مواد **چند بلوری** هستند که دارای تعداد زیادی دانه با جهات کریستالی مختلف می باشند که هریک توسط **مرزدانه ها** از هم جدا شده اند.



(a)


(b)



تصویر میکروسکوپ الکترونی (SEM) از دانه ها و مرز دانه ها

در مناطق مرزدانه اتمها در فواصل تعادلی خود نیستند. این مناطق انرژی بیشتری نسبت به درون دانه ها دارند. اگر فلز را به مدت چند ثانیه در یک محلول مناسب قرار دهیم مرزدانه ها سریعتر حل می شوند و می توان شکل دانه ها را به این صورت مشاهده کرد. این کار را متالوگرافی می نامند.

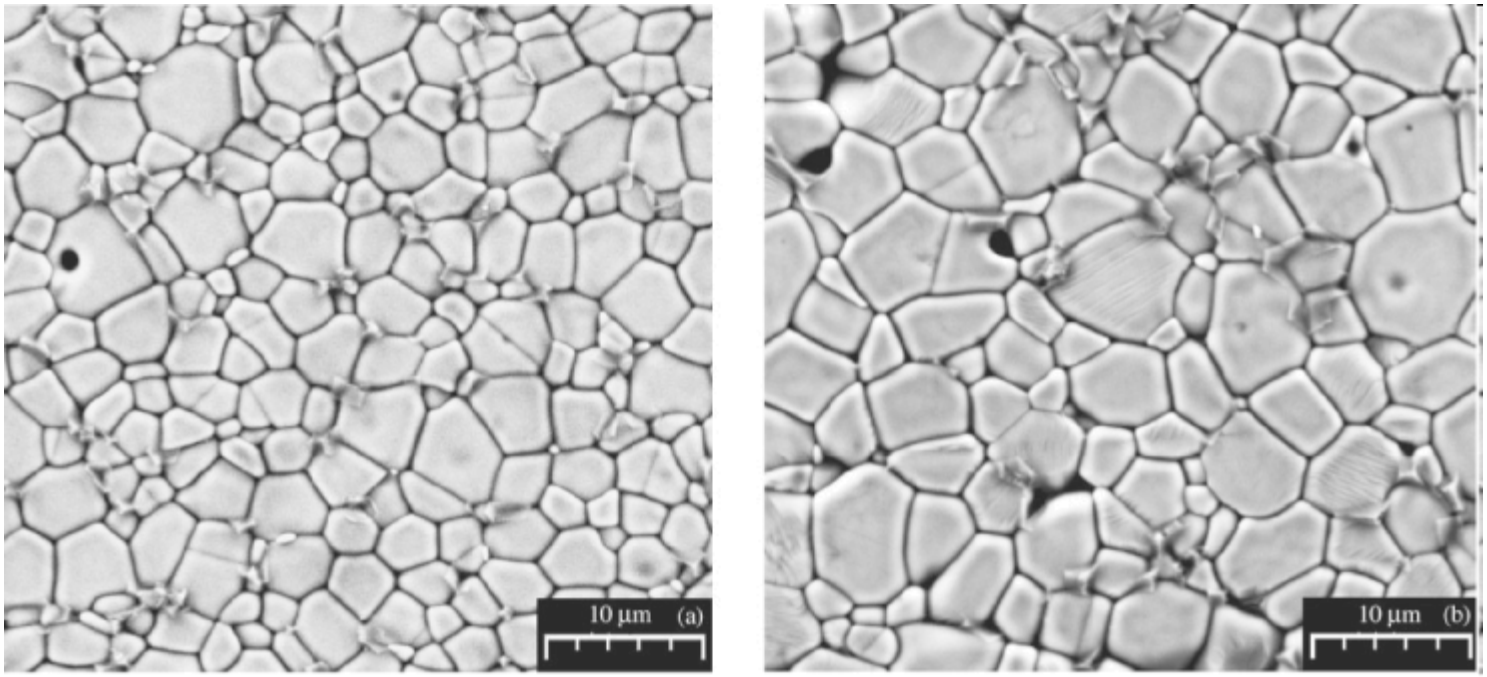


Figure 4. SEM micrographs of the SMNb0.2% composition sintered at 1300 °C for: (a) 1 h; (b) 4 h.

مشخص کردن اندازه دانه

- از آنجایی که اندازه دانه اثرات زیادی بر خواص مکانیکی، نوری، مغناطیسی و ... دارد لازم است معیاری برای گزارش اندازه دانه داشته باشیم.

برای این منظور از استاندارد **ASTM** استفاده می کنیم.

ASTM= American Society for Testing Materilas

مشخص کردن عدد اندازه (شماره) دانه

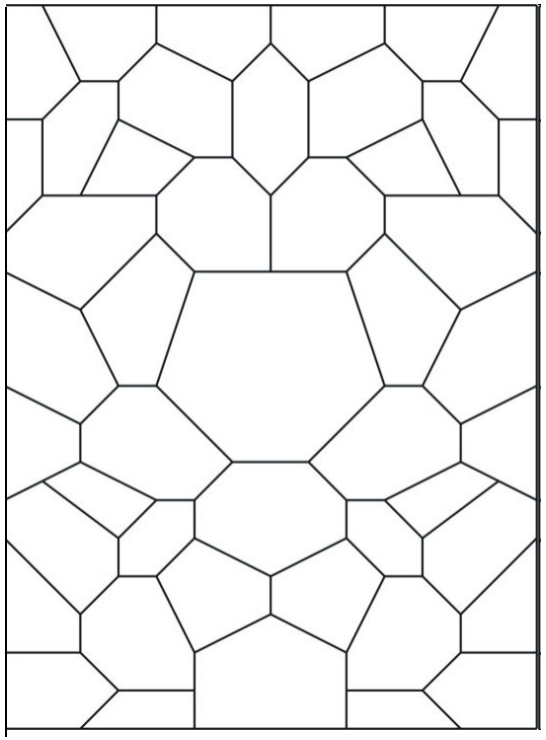
- ابتدا عکسی از نمونه در بزرگنمایی ۱۰۰ تهیه می کنیم و سپس تعداد دانه ها در ۱ اینچ مربع را می شماریم.
- از فرمول زیر برای محاسبه عدد اندازه دانه (Grain Size Number) استفاده می کنیم

$$N= 2^{n-1}$$

- در این فرمول N تعداد دانه ها در یک اینچ مربع می باشد که از عکسی که در بزرگنمایی ۱۰۰ به دست آمده، شمارش می شود.
- همچنین n عدد اندازه دانه (Grain size number) می باشد. هر چه n زیاد تر باشد اندازه دانه کوچکتر است.

مشخص کردن اندازه دانه

- همان طور که در عکس مشاهده می شود بعضی دانه ها در گوشه عکس قرار می گیرند و بعضی در لبه ها (وجوه) و بعضی دانه ها کاملا داخل عکس قرار می گیرند.
- تعداد کل دانه ها= تعداد دانه ای داخل سطح + نصف تعداد دانه های در لبه ها + ¼ دانه های در گوشه ها



عیوب حجمی یا فضایی

- فضاهای خالی میکروسکوپی و ماکروسکوپی مانند ترکهای موئی، حفره های گازی و ..... از این قبیل عیوب هستند.