## فصل سوم:

# ساختمان جامدات و عیوب بلوری

## الف) ساختمان جامدات

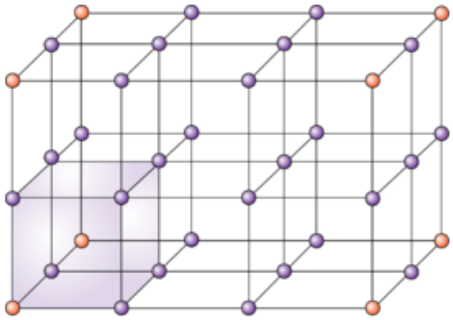
### تقسیم بندی مواد بر اساس نظم اتمی:

۱- مواد بلوری: نظم بلند دامنه اتمی در سه بعد دارند. مثل فلزات و اکثر سرامیک‌ها. شامل مواد چندبلور و تک‌بلور

۲- مواد آمورف (غیربلوری): بدون نظم بلند دامنه اتمی در سه بعد هستند. اگر نظمی در چیدمان اتم‌ها باشد، این نظم در فواصل کوتاه (چند فاصله اتمی) اتفاق می‌افتد.

### شبکه بلوری (Crystal Lattice):

نحوه آرایش فضایی اتم‌های ماده بلوری را گویند.

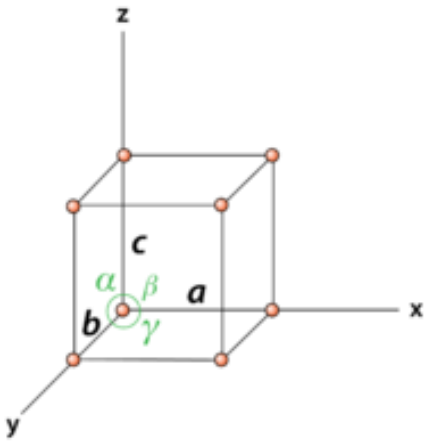


Crystal Lattice

### واحد شبکه (unit cell):

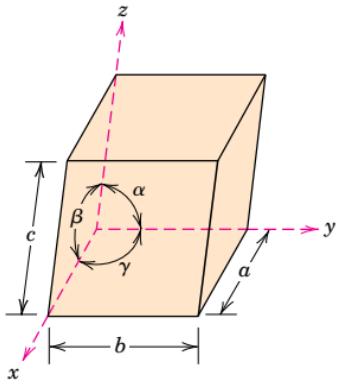
کوچک‌ترین واحد حجم شبکه بلوری که نشان دهنده ویژگی‌های ساختاری و تقارنی آن شبکه است.

هر واحد شبکه با ۶ پارامتر شبکه a، b، c و α، β، γ مشخص می‌شود.

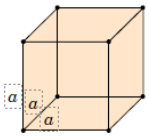
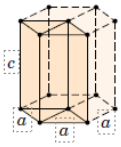
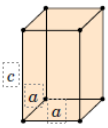
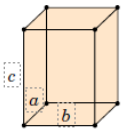
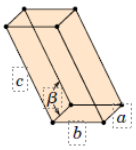
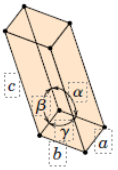



Unit Cell

کلیه جامدات بلوری طبق طبقه‌بندی براوه (شکل زیر و اسلاید بعدی) می‌توانند در ۷ سیستم بلوری (با هندسه واحد شبکه متفاوت یا پارامترهای شبکه متفاوت) متبلور شوند.

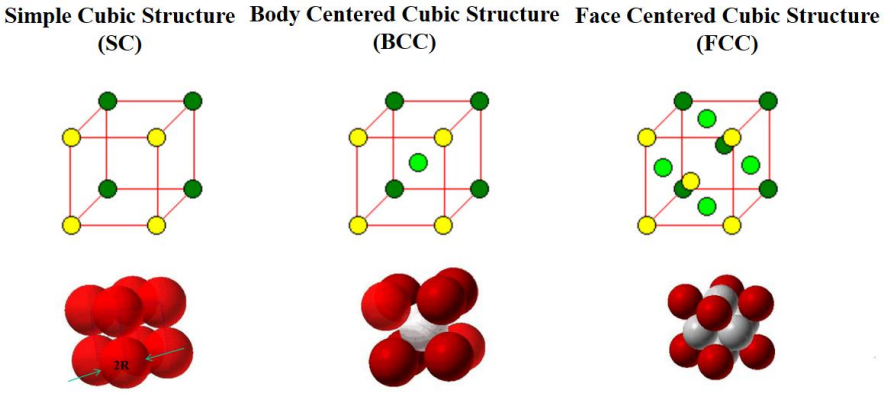



WileyPLUS: VMSE
Crystal Systems and Unit Cells for Metals

| Crystal System | Axial Relationships | Interaxial Angles | Unit Cell Geometry |
|---|---|---|---|
| Cubic | $a = b = c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90°$ |  |
| Hexagonal | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$ |  |
| Tetragonal | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90°$ |  |
| Rhombohedral (Trigonal) | $a = b = c$ | $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$ | |
| Orthorhombic | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90°$ |  |
| Monoclinic | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$ |  |
| Triclinic | $a \neq b \neq c$ | $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$ |  |

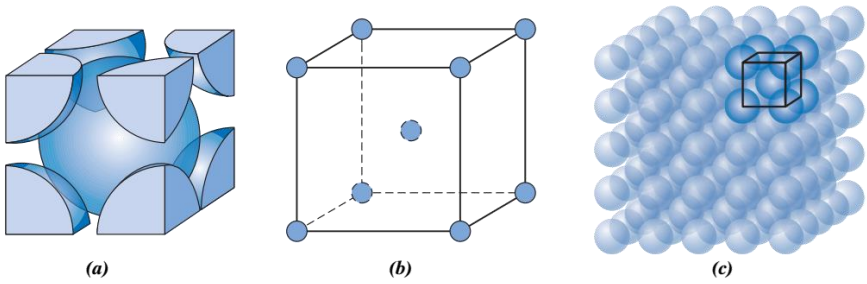
وابسته به نحوه چینش اتمها در واحد شبکه، در هر یک از این سیستم‌ها ممکن است چندین ساختار بلوری متفاوت داشته باشیم.

مثلاً در سیستم مکعبی می‌توانیم ساختارهای زیر را داشته باشیم:



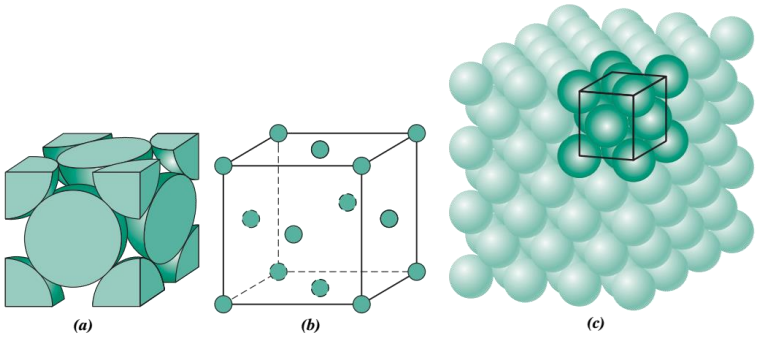

## ساختارهای بلوری مهم و موجود در فلزات صنعتی:

### - ساختار بلوری مکعبی مرکزدار (BCC)



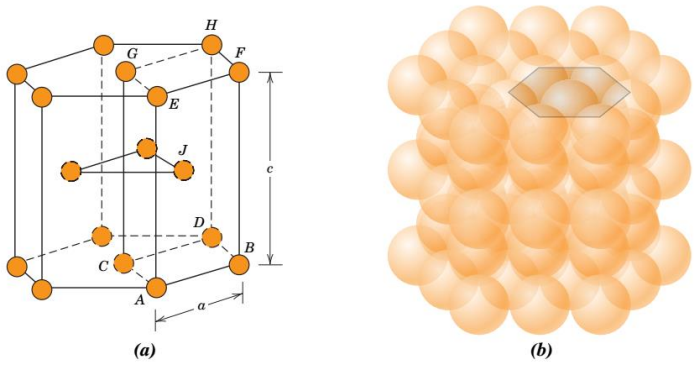

For the body-centered cubic crystal structure, (*a*) a hard-sphere unit cell representation, (*b*) a reduced-sphere unit cell, and (*c*) an aggregate of many atoms.

### - ساختار بلوری مکعبی با وجوه مرکزدار (FCC)




For the face-centered cubic crystal structure, (*a*) a hard-sphere unit cell representation, (*b*) a reduced-sphere unit cell, and (*c*) an aggregate of many atoms.

### - ساختار بلوری هگزاگونال فشرده (Hexagonal Close-Packed, HCP)




For the hexagonal close-packed crystal structure, (*a*) a reduced-sphere unit cell (*a* and *c* represent the short and long edge lengths, respectively), and (*b*) an aggregate of many atoms.

## نشان دادن جهات و صفحات در یک شبکه بلوری:

- یک جهت خاص [UVW]  یک خانواده از جهات <UVW>

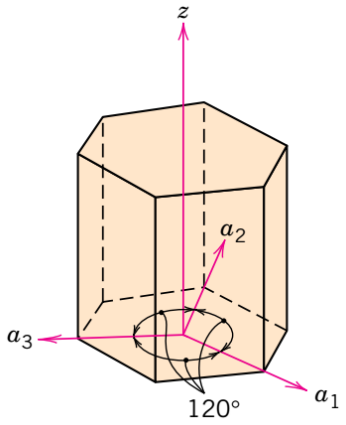
- یک صفحه بلوری خاص (hkl)  یک خانواده از صفحات {hkl}

برای ساختار هگزاگونال فشرده معمولاً از اندیس‌های ۴-تایی استفاده می‌شود. می‌توان ابتدا اندیس‌های ۳-تایی را به دست آورد و سپس آنها را به صورت زیر به اندیس‌های ۴-تایی تبدیل کرد:

$$[UVW] \rightarrow [uvtw] \qquad u = \frac{1}{3}(2U - V) \qquad v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = -(u + v) \qquad w = W$$

**(hkl) → (hkil)  i=-(h+k)**

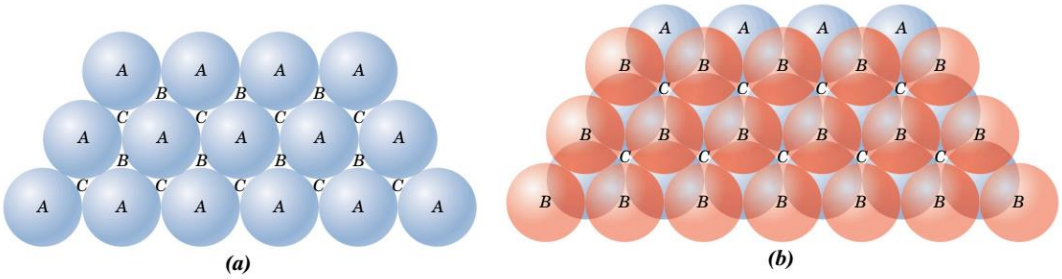



## نظریه توپ بیلیارد (مدل اتم کروی سخت):

بر اساس این نظریه، ساختمان جامدات را می‌توان از روی هم چیده شدن اتم‌ها به صورت کره‌های جامد سخت با شعاع مشخص تصور کرد.

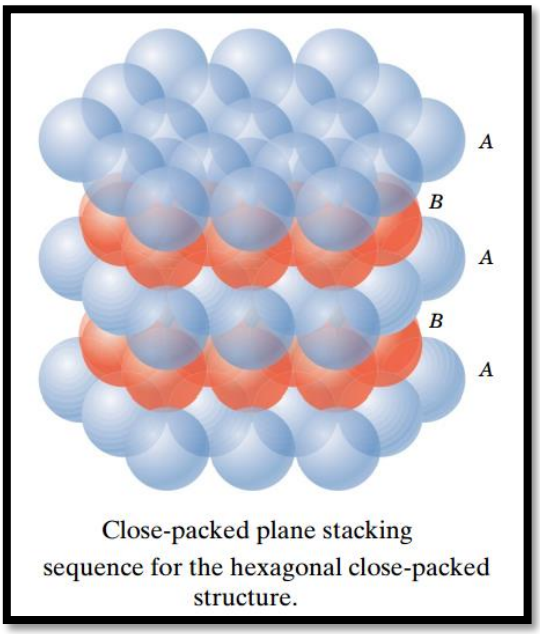
بر اساس این نظریه، دو شبکه FCC و HCP را به ترتیب می‌توان از روی هم قرار گرفتن صفحات کاملاً فشرده {111} و {0001} ساخت.

در هر دوی این خانواده از صفحات، اتم‌ها در فشرده‌ترین حالت خود و مطابق شکل زیر آرایش یافته‌اند:

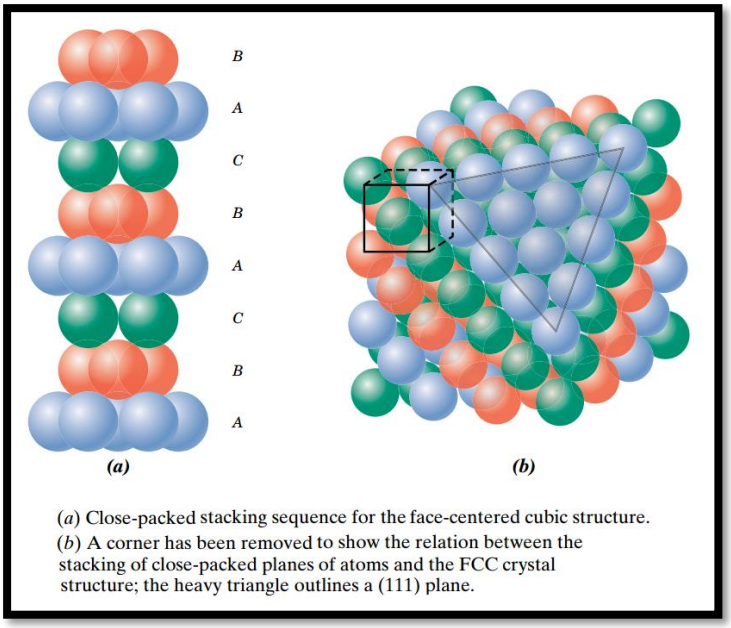



(*a*) A portion of a close-packed plane of atoms; *A*, *B*, and *C* positions are indicated. (*b*) The *AB* stacking sequence for close-packed atomic planes.

تفاوت در این است که چیدمان صفحات فشرده اتمی در شبکه FCC با ترتیب ABCABC… است ولی در شبکه HCP به صورت ABABAB…



Close-packed plane stacking sequence for the hexagonal close-packed structure.




(*a*) Close-packed stacking sequence for the face-centered cubic structure. (*b*) A corner has been removed to show the relation between the stacking of close-packed planes of atoms and the FCC crystal structure; the heavy triangle outlines a (111) plane.

## ب) عیوب یا نقائص شبکه بلوری (Lattice Defects)

منظور از عیب، هر گونه انحراف شبکه از حالت ایده‌آل آن یا هرگونه بی‌نظمی موضعی در چیده شدن اتم‌های ماده بلوری است.

### انواع عیوب بلوری:

۱. عیوب نقطه‌ای (Point defects)

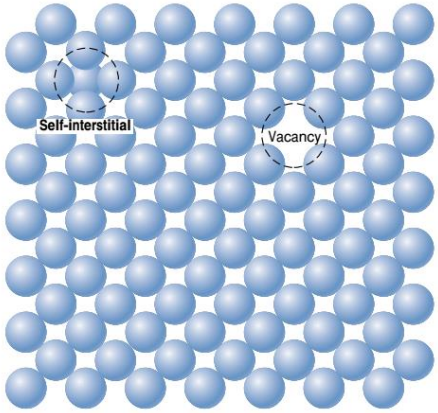
۲. عیوب خطی (Linear defects (Dislocations))

۳. عیوب سطحی (Planar defects)

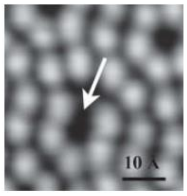
۴. عیوب حجمی (Bulk (volume) defects)

## ۱. عیوب نقطه‌ای:

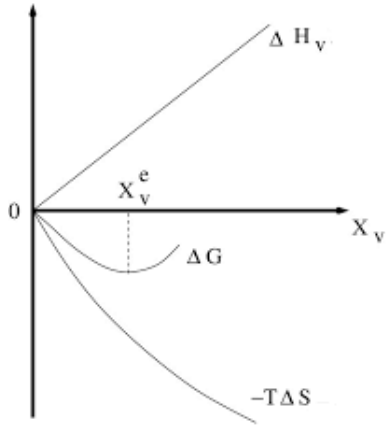
در مقیاس یک اتم است. مثل **جای خالی (vacancy)**:




Two-dimensional representations of a vacancy and a self-interstitial.
(Adapted from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 77. Copyright © 1964 by John Wiley & Sons, New York, NY. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)




Scanning probe micrograph that shows a vacancy on a (111)-type surface plane for silicon. Approximately 7,000,000×.

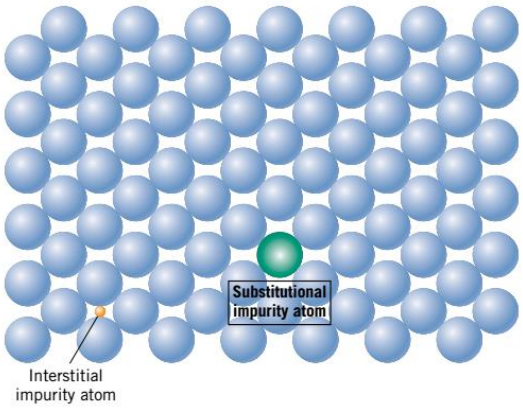



$$n = Nexp\left(-\frac{E}{kT}\right)$$

تعداد جای خالی تعادلی:

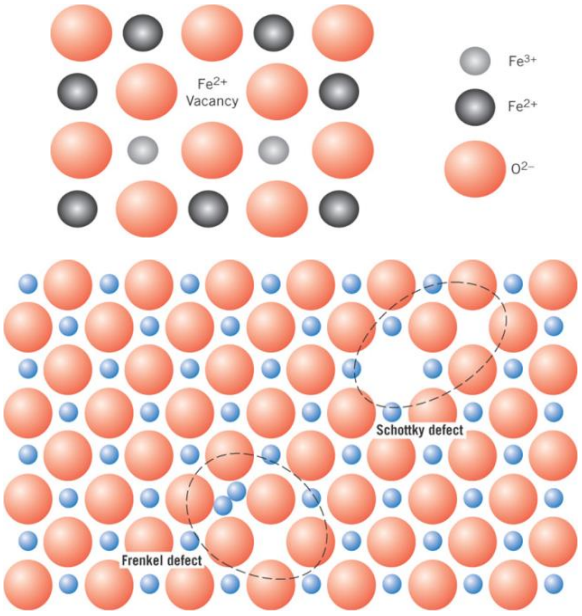
**اتم خارجی جانشینی (Substitutional impurity atom)**

**اتم خارجی بین نشینی (Interstitial impurity atom)**




Two-dimensional schematic representations of substitutional and interstitial impurity atoms.

## عیوب نقطه‌ای در سرامیک‌ها:

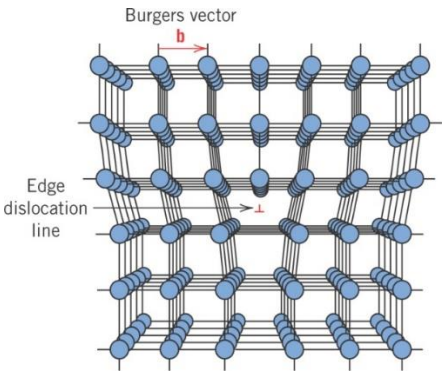



### ۲. عیوب خطی (نابجایی‌ها):

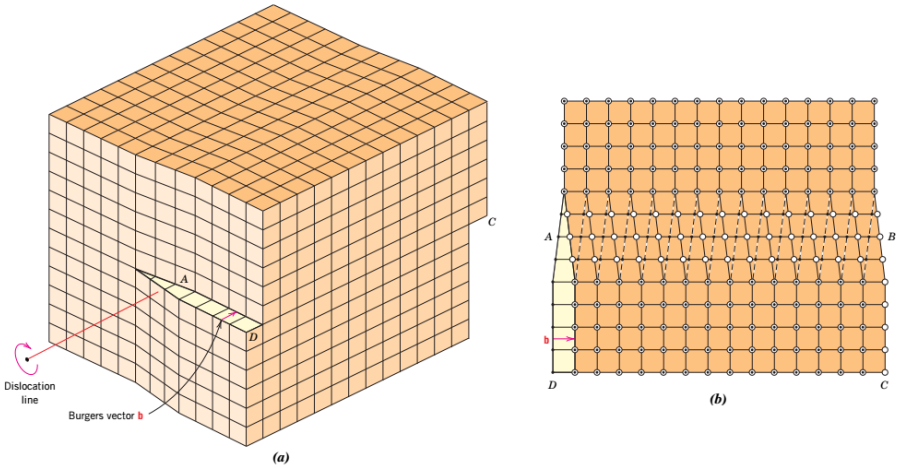
در این حالت، بی‌نظمی در امتداد یک خط ایجاد می‌شود.

### انواع نابجایی‌ها:

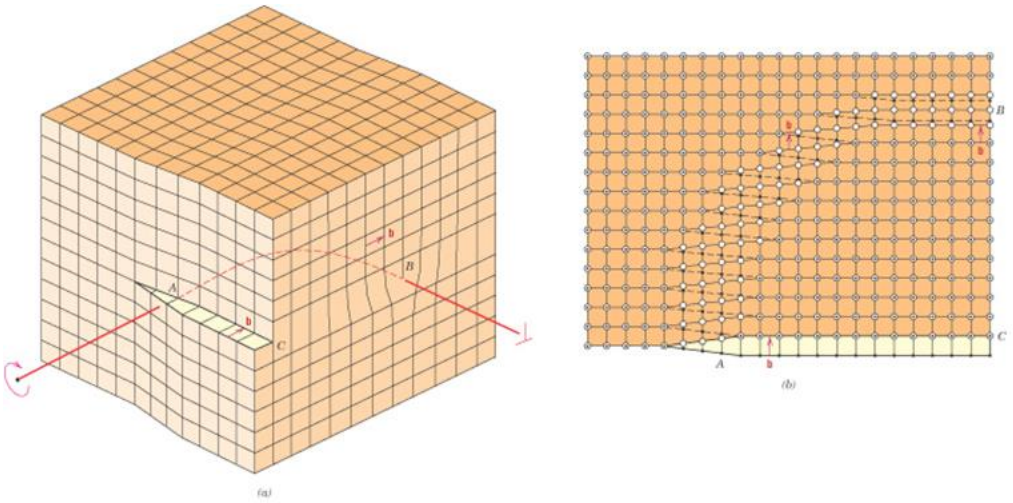
- **نابجایی لبه‌ای (Edge dislocation)**




- **نابجایی پیچی (Screw dislocation)**



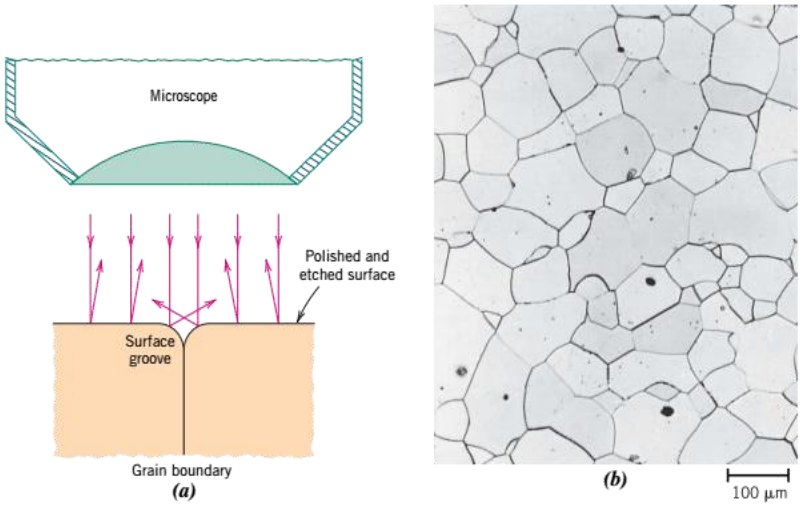
- **نابجایی ترکیبی (Mixed dislocation)**



## ۳. عیوب سطحی

مهم‌ترین عیوب سطحی عبارتند از:

- **مرز بین دانه‌ها (Grain boundary):** نواحی بدون نظم اتمی با عرض فقط چند فاصله اتمی بین دانه‌های یک ماده چندبلور (پلی کریستال). آرایش و جهت‌گیری بلوری با رفتن از یک دانه به دانه دیگر تغییر می‌کند.



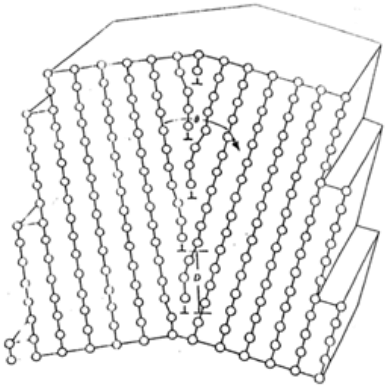

**انواع مرزدانه:**

- اگر اختلاف جهت‌گیری دانه‌های دو طرف مرز، کمتر از ۱۵ درجه باشد، آن را مرز کم زاویه (Low angle grain boundary) گویند. در این حالت مدل‌های زیر برای مرزدانه ممکن است وجود داشته باشد:

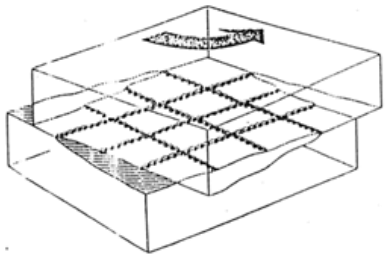
a) مدل تجمع نابجایی‌های لبه‌ای (مرز کج) (Low angle tilt boundary)

b) مدل تجمع نابجایی‌های پیچی (Low angle twist boundary)

c) ترکیبی از دو حالت بالا



**Edge dislocations in a low angle tilt boundary**



**Screw dislocations forming a low angle twist boundary**

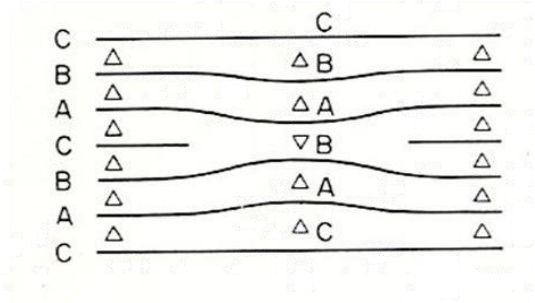
- **نقص در چیده شدن (Stacking fault):** در صورتی که انحراف یا اختلالی در ترتیب چیده شدن صفحات اتمی روی هم ایجاد شود، آن را نقص در چیده شدن گویند.

**نقص در چیده شدن‌های مهم:**

**در شبکه FCC:**

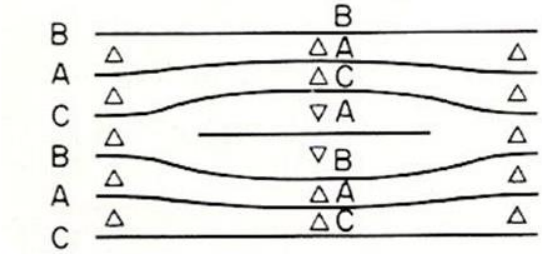
در این شبکه، چیده شدن صفحات اتمی متراکم {111} با ترتیب ABCABCABC… اتفاق می‌افتد، اما این نظم می‌تواند در برخی قسمت‌های بلور به هم بخورد. در صورتی که یکی از صفحات {111} در محل خود قرار نداشته باشد عیب را نقص در چیده شدن ذاتی (intrinsic stacking fault) می‌نامند. در این حالت در راستای بردار رسم شده، ۴ لایه اتمی درون شبکه FCC، آرایش شبکه HCP یافته‌اند.

intrinsic




در صورتی که یک صفحه اضافی در میان صفحات اتمی قرار گیرد، عیب را نقص در چیده شدن خارجی (extrinsic stacking fault) می‌نامند.

extrinsic



**در شبکه HCP:**

در این شبکه، ترتیب چیده شدن اتم‌ها در صفحات اتمی متراکم، به صورت زیر است:

ABABAB….

در صورتی که قسمتی از بلور جابجا شود طوری که صفحه B به موقعیت C منتقل شود:

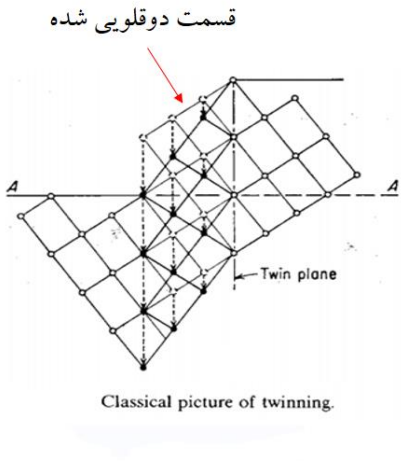
**ABABABABAB…. →ABABACBCBC…**

این چهار لایه در وسط شبکه HCP به ساختار FCC تبدیل شده اند.

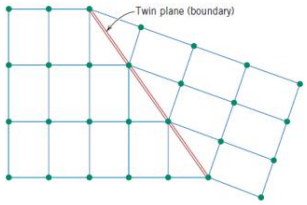
در شبکه BCC ایجاد نقص در چیده شدن بسیار دشوارتر بوده و کمتر دیده می‌شود.

### - مرز دوقلویی (Twin boundary)

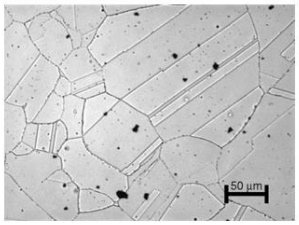
در صورتی که آرایش اتمی در قسمتی از بلور به صورت تصویر آینه‌ای از سایر قسمت‌های بلور نسبت به یک صفحه خاص (صفحه یا مرز دوقلویی) باشد، به آن قسمت دوقلویی می‌گویند.



Classical picture of twinning.



قسمت سمت راست تصویر آینه ای از قسمت سمت چپ نسبت به صفحه دوقلویی است.




### ۴. عیوب حجمی

عیوبی که در سه بعد باعث بر هم خوردن نظم اتمی می‌شوند.

مانند ترک‌ها (Cracks)، حفرات (Voids)، ذرات ناخالصی (Inclusions)