

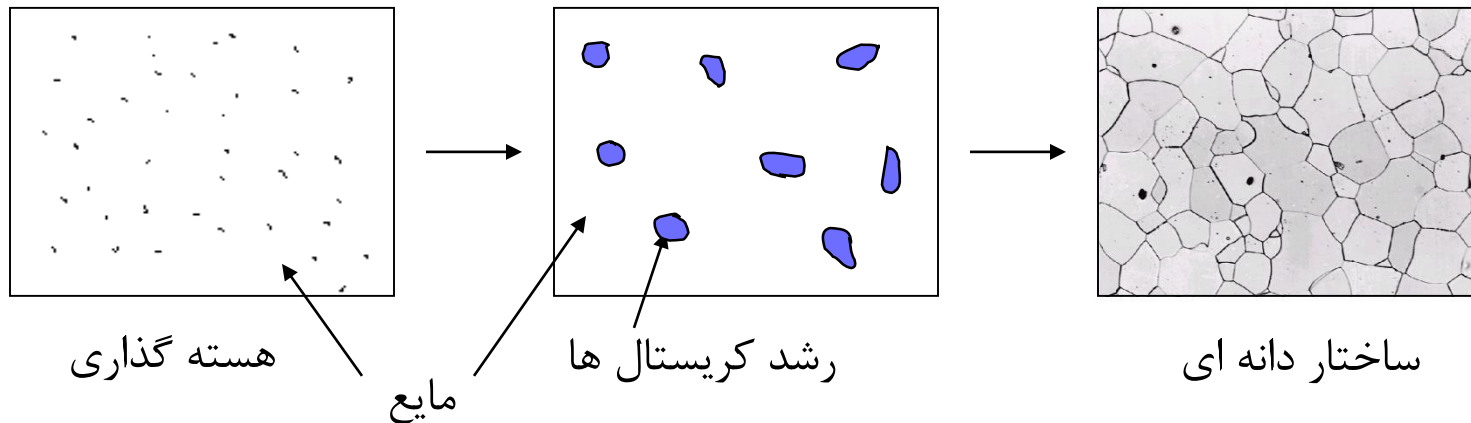
به نام خدا

فصل چهارم:  
نواقص بلوری در مواد



# نواقص در جامدات

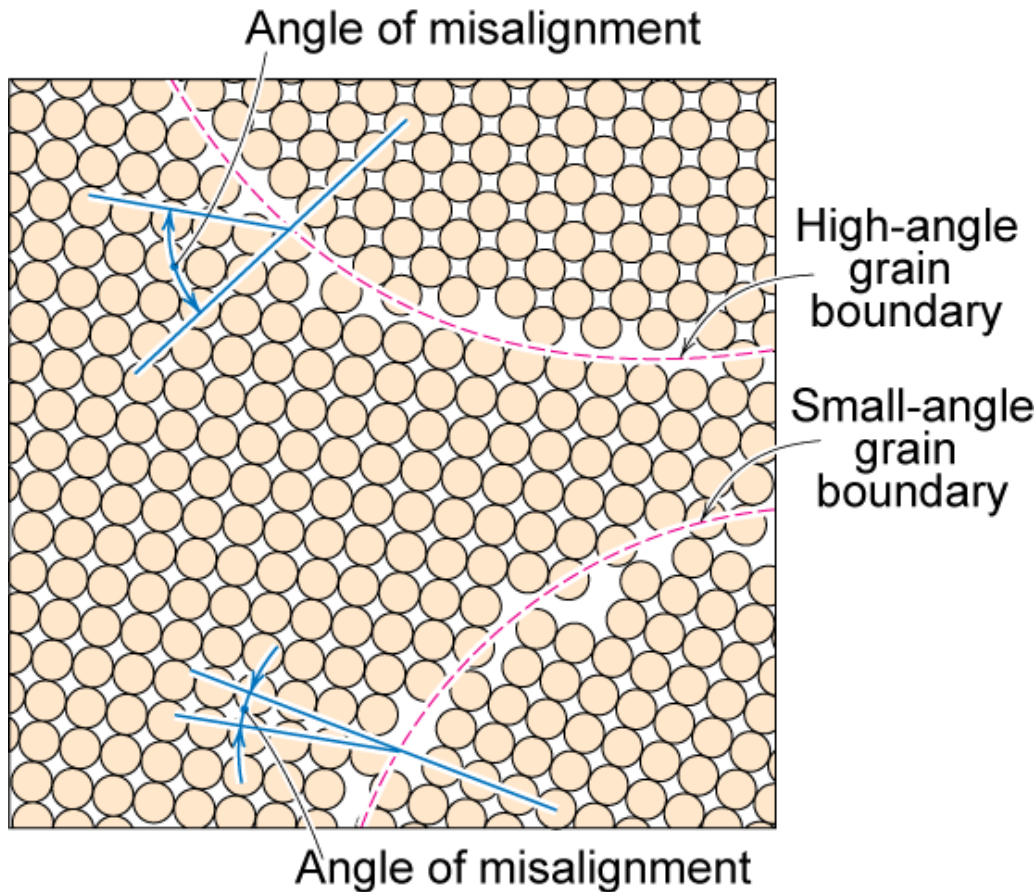
- انجماد: ناشی از ریخته گری فلز مذاب است.
  - انجماد در دو مرحله است:
    - شکل گیری هسته
    - رشد هسته تا شکل گیری کریستال-ساختار دانه ای
- انجماد با ماده مذاب شروع می شود.



- کریستال ها رشد کرده تا به همدیگر برسند.

# مواد بسبیلور

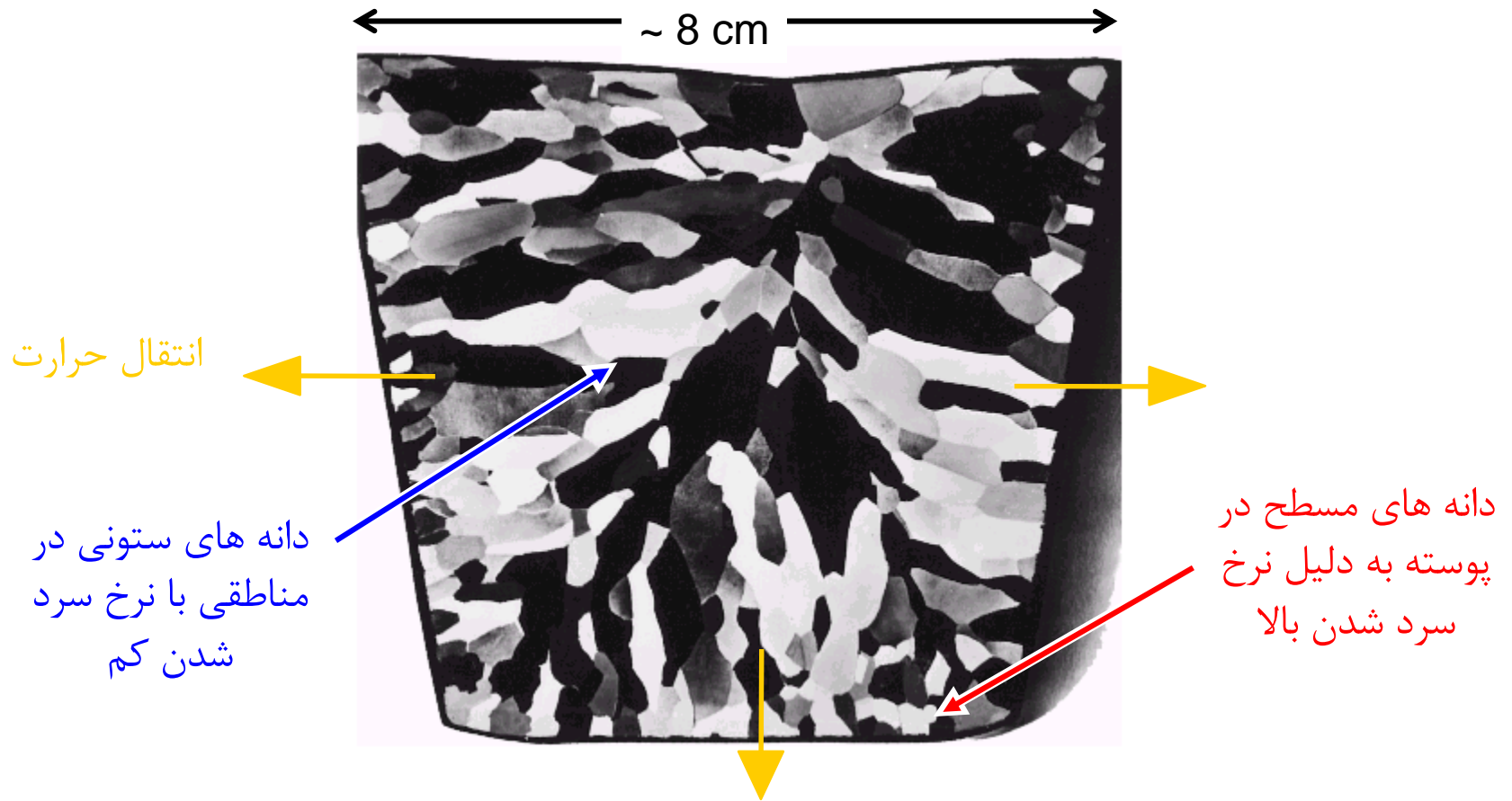
## مرزدانه



- مناطق بین کریستالها
- انتقال از شبکه یک منطقه به دیگری
- کمی بی نظم
- چگالی کم در مرزدانه ها
  - تحرک بالا
  - نفوذ بالا
  - برهمکنش شیمیایی بالا

# انجماد

- دانه ها می توانند مسطح ( تقریبا در همه جهات به یک اندازه) یا ستونی باشند.



برای ایجاد دانه های ریز، مسطح و هم اندازه از اصلاح کننده دانه استفاده می شود.

# نواقص در جامدات

چیزی به نام کریستال کامل وجود ندارد.

- نواقص چه هستند؟

- چرا آنها مهم هستند؟

بسیاری از خواص و ویژگیهای مهم مواد به دلیل همین نواقص بلوری هستند.



# انواع نواقص بلوری

• نواقص نقطه ای

جای خالی  
اتمهای بین نشین  
اتمهای جانشین

• نواقص خطی ← نابجایی ها

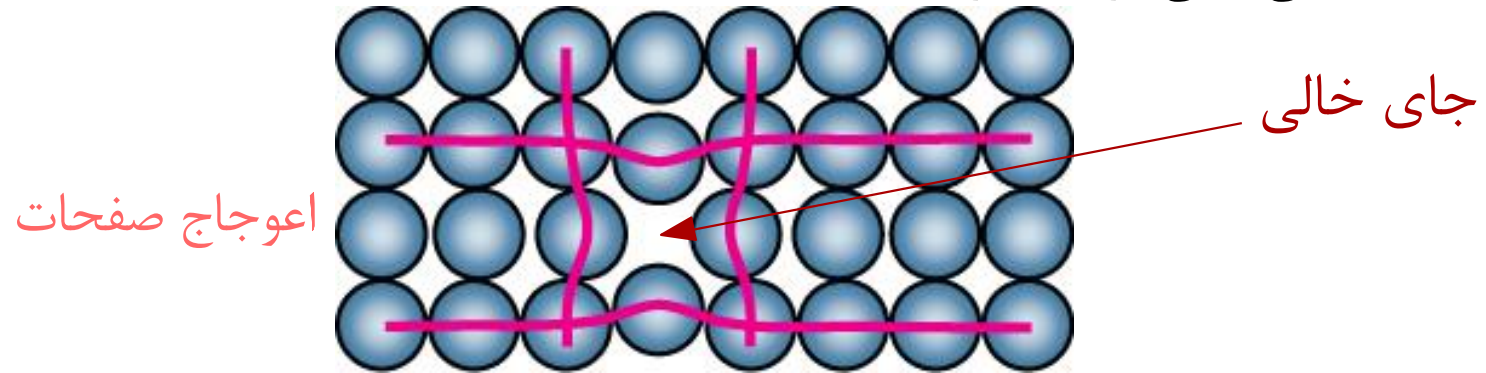
• نواقص سطحی ← مرز دانه



# نواقص نقطه ای در فلزات

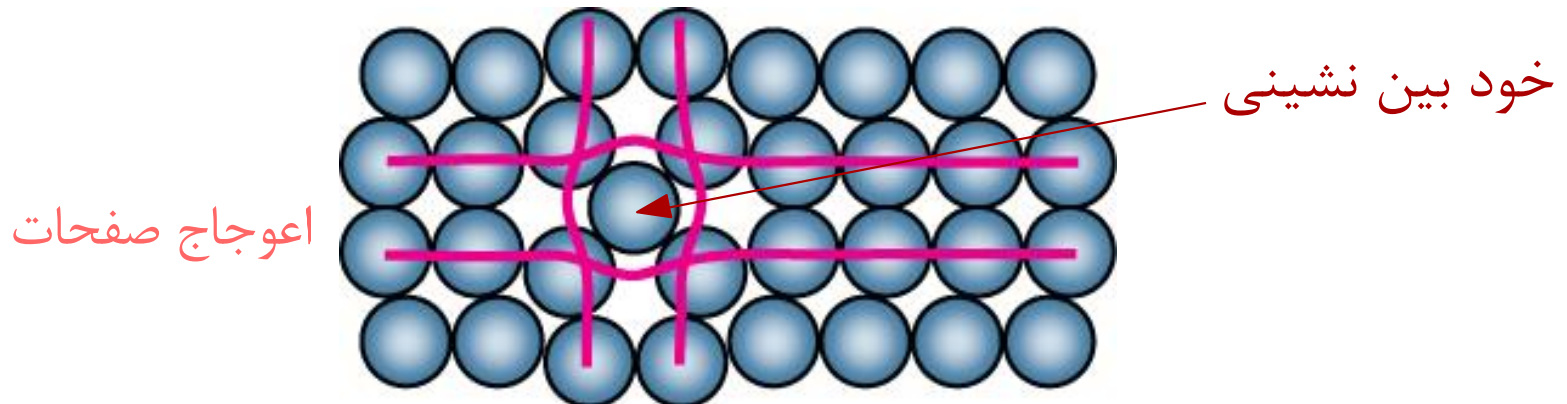
## • جای خالی

مکانهای اتمی خالی در ساختار



## • خود بین نشینی

- اتمهای اضافی بین اتمهای دیگر قرار می گیرند.



# غلظت تعادلی: نواقص نقطه ای

- غلظت تعادلی با دما تغییر می کند.

$$\frac{N_V}{N} = \exp\left(\frac{-Q_V}{kT}\right)$$

تعداد نقص  $N_V$  → تعداد مکانهای بالقوه نقص  $N$

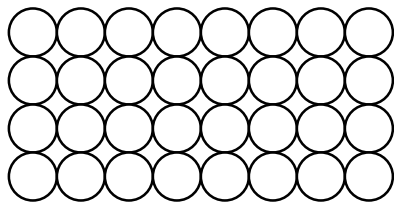
انرژی فعالسازی  $Q_V$

دما  $T$

ثابت بولتزمن  $k$

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

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



هر مکان شبکه یک مکان  
جای خالی بالقوه است.



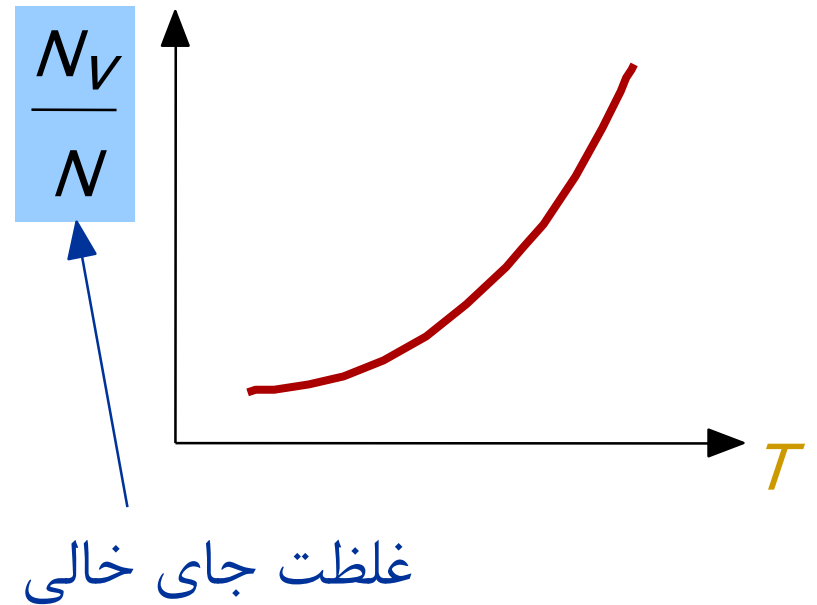
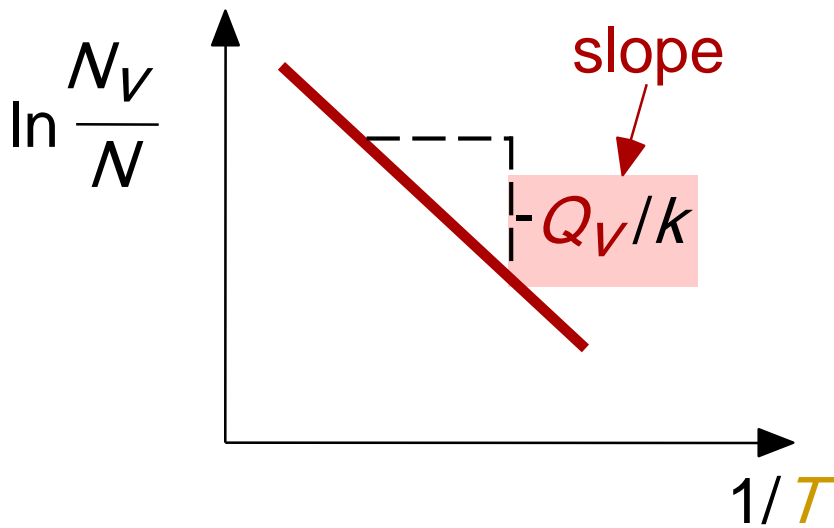
# اندازه گیری انرژی فعالسازی

• مقدار  $Q_V$  می تواند از آزمایش بدست آید.

$$\frac{N_V}{N} = \exp\left(\frac{-Q_V}{kT}\right)$$

• اندازه گیری این ...

• رسم مجدد آن



## مثال

• تعداد جاهای خالی تعادلی در ۱ سانتیمتر مکعب از مس را در دمای  $1000^{\circ}\text{C}$  بیابید؟

• Given:

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

$$Q_V = 0.9 \text{ eV/atom} \quad N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ atoms/mol}$$

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

Annotations:  
-  $Q_V = 0.9 \text{ eV/atom}$  (red arrow pointing to the numerator)  
-  $kT = 1273 \text{ K}$  (yellow arrow pointing to the denominator)  
-  $k = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/atom-K}$  (green arrow pointing to the denominator)

For  $1 \text{ m}^3$ ,  $N = \rho \times \frac{N_A}{A_{\text{Cu}}} \times 1 \text{ m}^3 = 8.0 \times 10^{28} \text{ sites}$

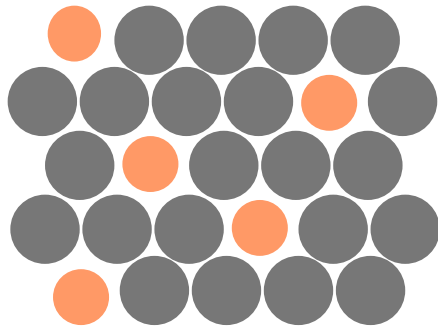
• Answer:

$$N_V = (2.7 \times 10^{-4})(8.0 \times 10^{28}) \text{ sites} = 2.2 \times 10^{25} \text{ vacancies}$$



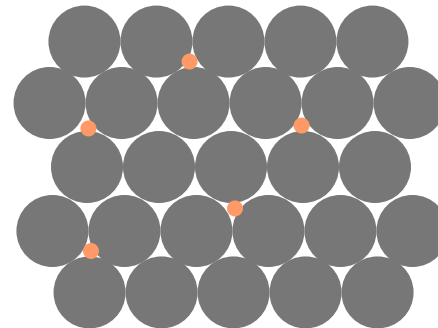
# ادامه نواقص نقطه ای در فلزات

اگر ناخالص B به میزبان A اضافه شود دو نتیجه در پی دارد:  
• محلول جامد B در A



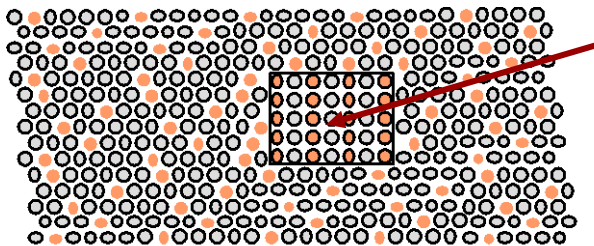
محلول جامد جانشینی.  
(e.g., Cu in Ni)

OR



محلول جامد بین نشینی.  
(e.g., C in Fe)

• محلول جامد B در A به علاوه ذراتی از فاز جدید (معمولاً برای مقدار بیشتر B)



فاز دوم  
-- ترکیب متفاوت  
-- اغلب ساختار متفاوت

# ادامه نواقص نقطه ای در فلزات

شرایط تشکیل مجلول جامد جانشینی:

1. اختلاف شعاع اتمی کمتر از ۱۵٪ باشد.
2. نزدیکی در جدول تناوبی
  - مثلاً الکترونگاتیوی مشابه
3. ساختار کریستالی یکسان برای فلزات خالص
4. ظرفیت شیمیایی
  - یک فلز تمایل بیشتری برای حل کردن یک فلز با ظرفیت بیشتر نسبت به یک فلز با ظرفیت کمتر را دارد



# Imperfections in Metals (iii)

<i>Element</i>	<i>Atomic Radius (nm)</i>	<i>Crystal Structure</i>	<i>Electro-negativity</i>	<i>Valence</i>
Cu	0.1278	FCC	1.9	+2
C	0.071			
H	0.046			
O	0.060			
Ag	0.1445	FCC	1.9	+1
Al	0.1431	FCC	1.5	+3
Co	0.1253	HCP	1.8	+2
Cr	0.1249	BCC	1.6	+3
Fe	0.1241	BCC	1.8	+2
Ni	0.1246	FCC	1.8	+2
Pd	0.1376	FCC	2.2	+2
Zn	0.1332	HCP	1.6	+2

1. شما پیش بینی می کنید مقدار بیشتر Al یا Ag در Zn حل شود؟

2. Zn یا Al بیشتر در Cu؟



# ادامه نواقص نقطه ای در فلزات

- مشخصات ترکیب

$$C_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \times 100$$

– درصد وزنی

$m_1 = 1$  جرم جزء ۱

$$C'_1 = \frac{n_{m1}}{n_{m1} + n_{m2}} \times 100$$

– درصد اتمی

$n_{m1} = 1$  تعداد مولهای جزء ۱



# نواقص خطی

ناجایی ها:

- نواقص خطی هستند.
- لغزش بین صفحات کریستالی موقعی رخ می دهد که ناجایی ها حرکت کنند.
- تولید تغییرشکل پلاستیک دائمی می کند.

نمای شماتیکی از Zn (hcp)

• قبل از تغییرشکل



• بعد از کشش



مراحل لغزش

# نواقص خطی

## نقص خطی (نابجایی ها)

– نقصهای یک بعدی هستند که در اطراف آنها اتمها ناهماهنگ قرار گرفته اند.

### • نابجایی لبه ای:

– نیم صفحه اضافی از اتمهایی که در یک ساختار کریستالی وارد شده اند.

– بردار برگرز **b** عمود ( $\perp$ ) بر خط نابجایی است.

### • نابجایی پیچی:

– صفحه اریب مارپیچی ناشی از تغییر شکل برش

– بردار برگرز **b** عمود ( $\parallel$ ) بر خط نابجایی است.

بردار برگرز **b**: اعوجاج شبکه را اندازه گیری می کند.





# نابجایی لبه ای

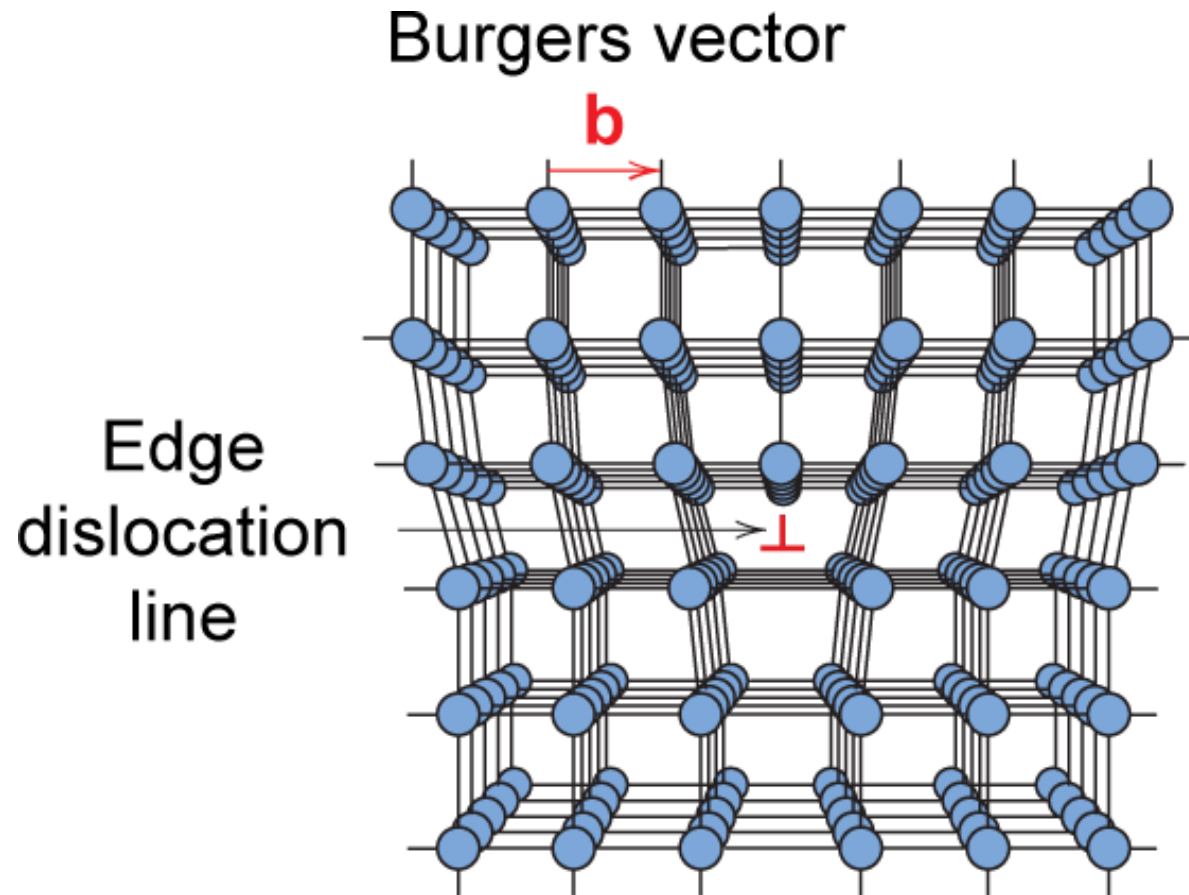
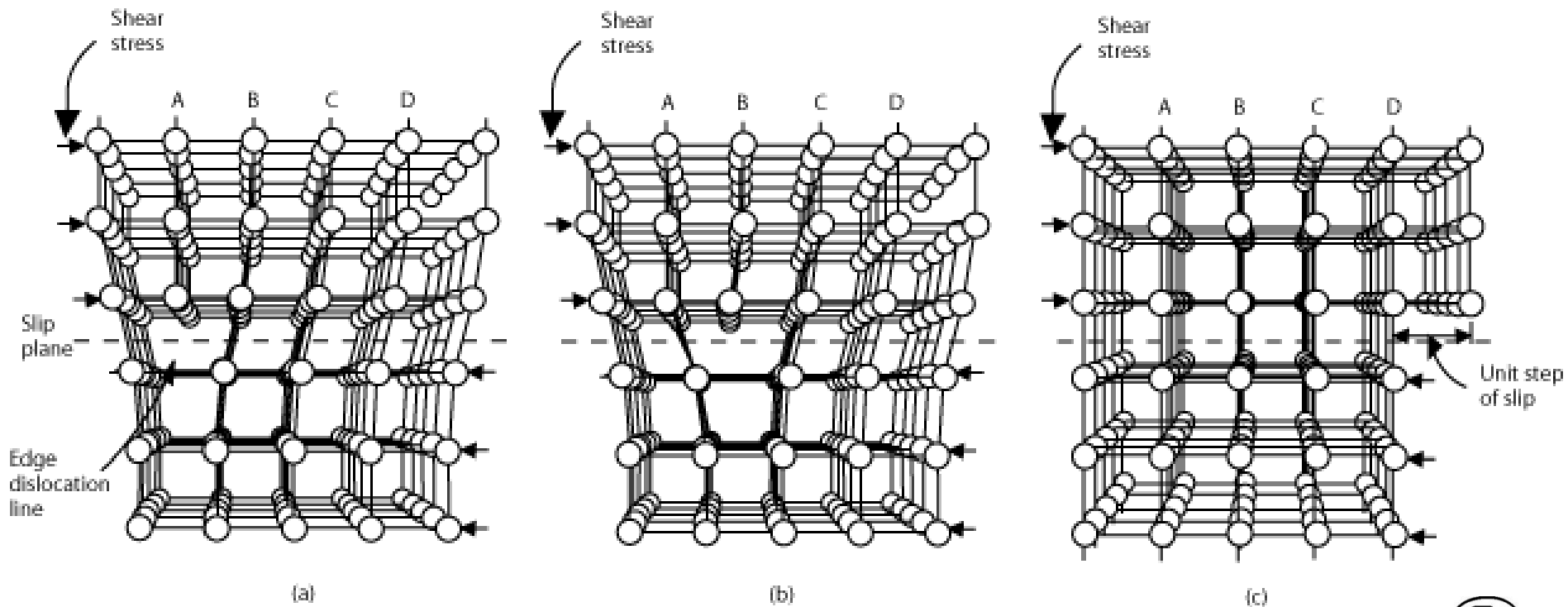


Fig. 4.3, Callister & Rethwisch 8e.

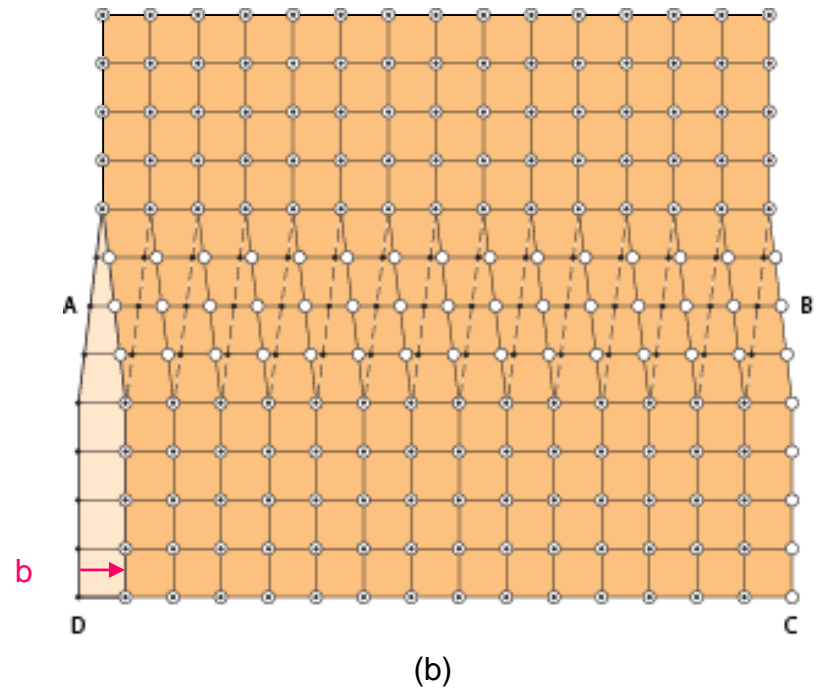
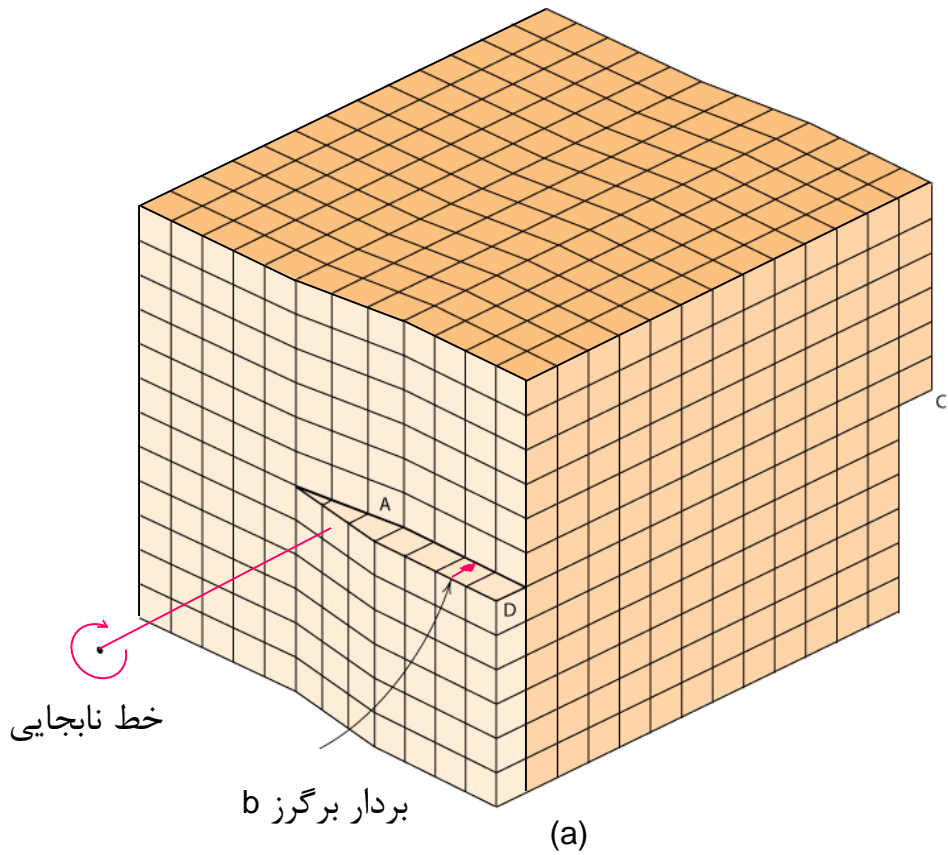


# حرکت نابجایی لبه ای

- حرکت نابجایی ها نیازمند تکانه های پی در پی نیم صفحه اتمها است.
- پیوندها در عرض صفحه لغزش شکسته شده و در بعدی دوباره ایجاد می شوند.

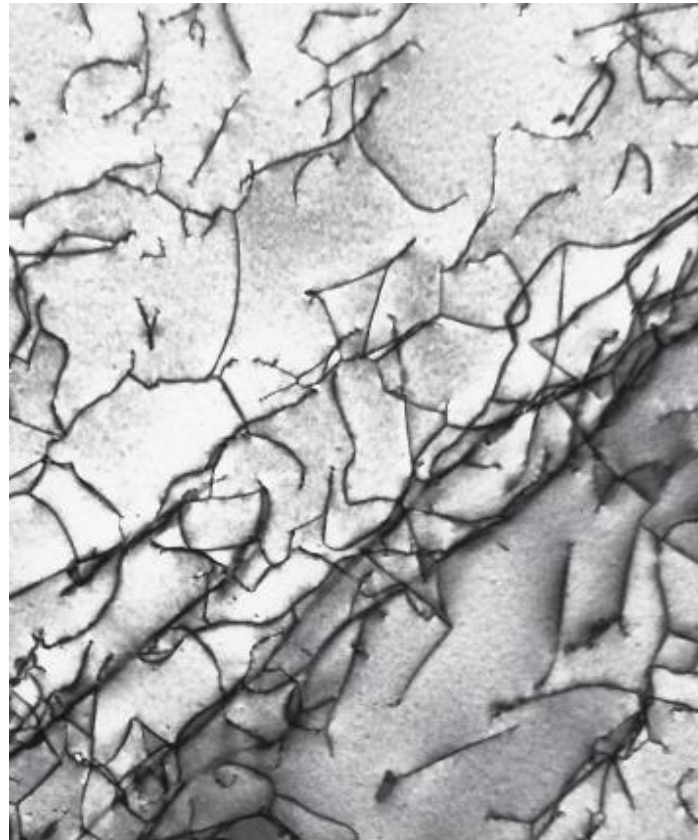


# نابجایی پیچی



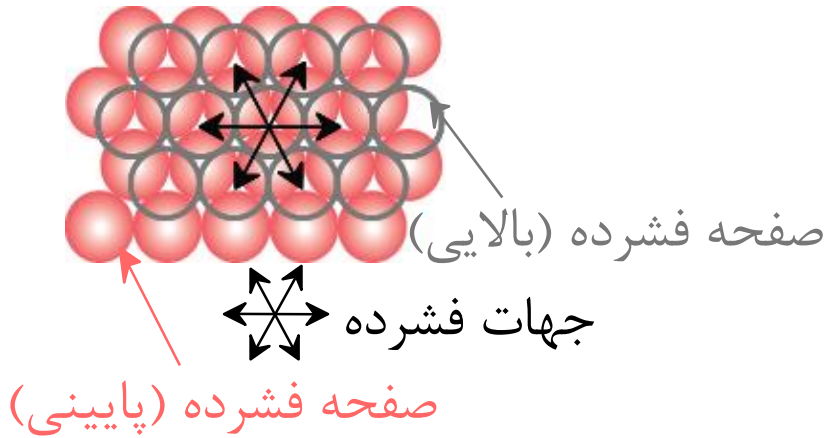
# نابجایی ها

نابجایی ها توسط میکروسکوپ الکترونی قابل مشاهده هستند.



0.2  $\mu\text{m}$

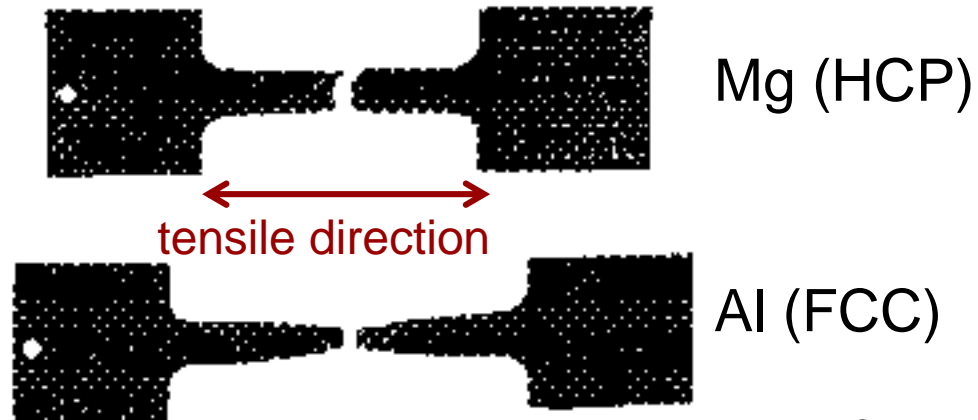
# Dislocations & Crystal Structures



- ساختار: صفحات و جهات با بالاترین تراکم (فشرده‌گی) برای لغزش مناسب هستند.

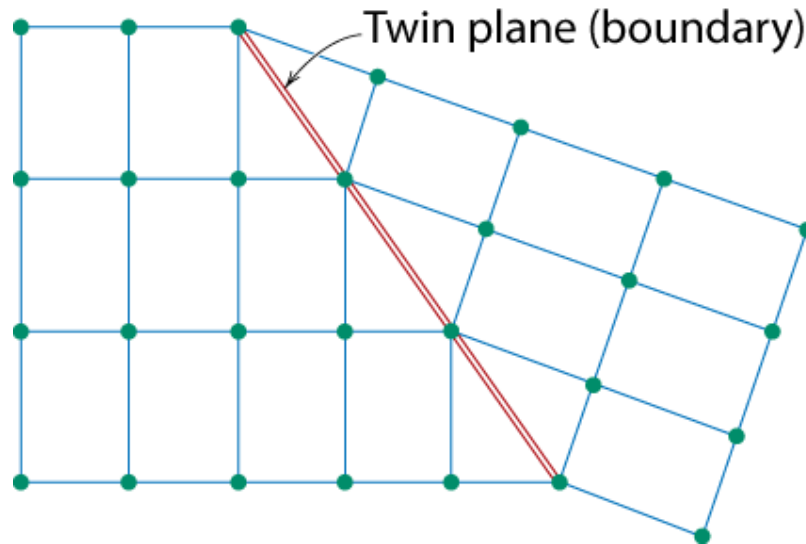
- مقایسه میان ساختارهای کریستالی:
  - FCC: دارای تعداد زیادی صفحه و جهت فشرده
  - HCP: دارای یک صفحه و سه جهت فشرده
  - BCC: ندارد

نمونه‌هایی که تحت تست کشش قرار گرفتند.



# نقص های صفحه ای در جامدات

- یکی از آنها مرزها (صفحات) دوقلویی است.  
- اساساً انعکاس آینه ای از موقعیت های اتم در سطح صفحه دوقلو است.



- نقص در چیده شدن  
- برای فلزات با ساختار FCC نقصی در چینش صفحات ABCABC... وجود دارد.  
- مثلاً ABCABABC

# نقص های صفحه ای در جامدات

## سطوح خارجی ماده و پستی و بلندی های آن:

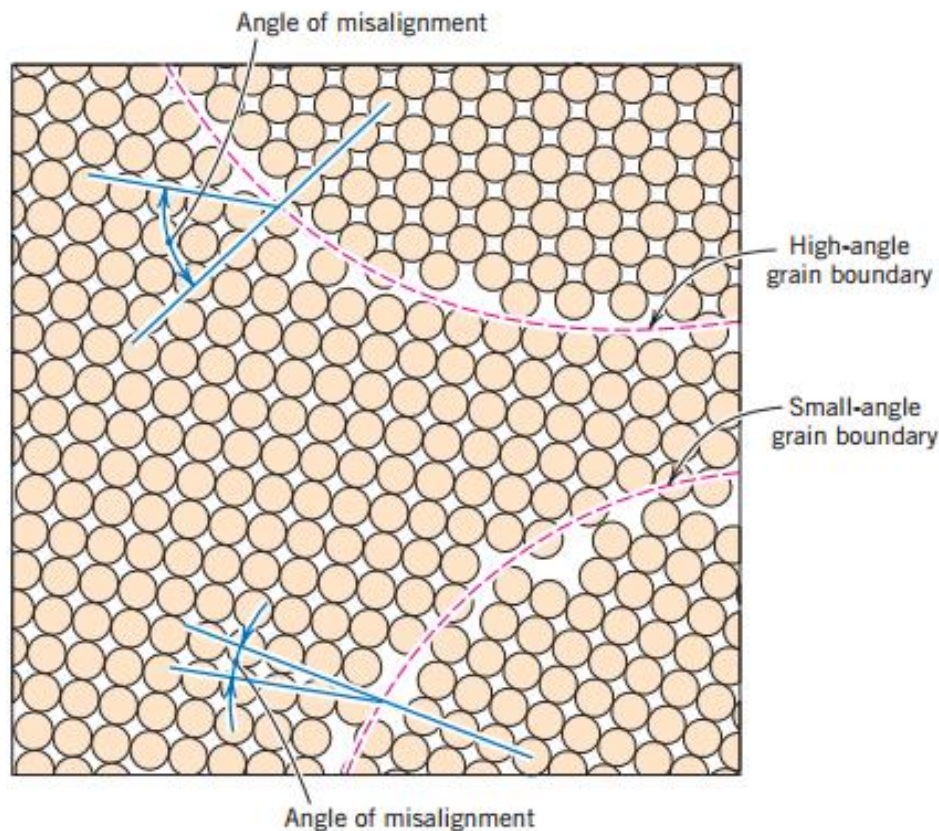
تحت تاثیر کشش سطحی و عوامل بیرونی از ماده قرار دارند و اتمهای واقع در سطح ماده چون در فضای خارج از ماده با اتمهای مشابه خود در تماس نیستند دارای سطح انرژی بالاتری نسبت به اتمهای داخل ماده هستند و آمادگی بیشتری برای ایجاد فعل و انفعالات شیمیایی دارند.



# نقص های صفحه ای در جامدات

مرزدانه ها و فصل مشترک های داخل ماده:

در داخل ساختار بلوری فصل مشترک دانه هایی که دارای جهات بلوری متفاوتی هستند را مرز دانه گویند. ضخامت مرز دانه در حد دو تا پنج اتم است.





# نقص های صفحه ای در جامدات

## انواع مرز دانه

1. مرزدانه با زاویه بزرگ: عدم تطابق دو دانه در کنار یکدیگر بیشتر از ۲۰ درجه است.
2. مرزدانه با زاویه کوچک: عدم تطابق دو دانه در کناریکدیگر کمتر از ۱۵ درجه است.



# تعیین اندازه دانه

- روشهای مختلفی برای تعیین اندازه دانه وجود دارد. یکی از این روشها، روش قطع کردن است.
- در این روش خطوط مستقیم با یک اندازه روی دانه ها کشیده می شود (روی تصویری که توسط میکروسکوپ نوری گرفته شده است). تعداد دانه هایی که خط را قطع کرده شمرده می شود. سپس طول خط (ضربدر بزرگنمایی) بر تعداد متوسط دانه هایی که خطوط را قطع کرده تقسیم می شود و قطر متوسط دانه ها بدست می آید.



- استاندارد ASTM معادله زیر را که رابطه بین عدد اندارزه دانه ( $n$ ) و تعداد دانه بر اینچ مربع ( $N$ ) در بزرگنمایی  $100\times$  است را ارائه کرده است.

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



(a) In order to determine the ASTM grain size number ( $n$ ) it is necessary to employ Equation 4.16. Taking logarithms of both sides of this expression leads to

$$\log N = (n - 1) \log 2$$

And, solving for  $n$  yields

$$n = \frac{\log N}{\log 2} + 1$$

From the problem statement,  $N = 45$ , and, therefore

$$n = \frac{\log 45}{\log 2} + 1 = 6.5$$

(b) At magnifications other than  $100\times$ , use of the following modified form of Equation 4.16 is necessary:

$$N_M \left( \frac{M}{100} \right)^2 = 2^{n-1} \quad (4.17)$$

In this expression  $N_M$  = the number of grains per square inch at magnification  $M$ . In addition, the inclusion of the  $(M/100)^2$  term makes use of the fact that, while magnification is a length parameter, area is expressed in terms of units of length squared. As a consequence, the number of grains per unit area increases with the square of the increase in magnification.

Solving Equation 4.17 for  $N_M$ , realizing that  $M = 85$  and  $n = 6.5$  leads to

$$\begin{aligned} N_M &= 2^{n-1} \left( \frac{100}{M} \right)^2 \\ &= 2^{(6.5-1)} \left( \frac{100}{85} \right)^2 = 62.6 \text{ grains/in.}^2 \end{aligned}$$

مثال (الف) اگر تعداد دانه بر اینچ مربع یک فلز در بزرگنمایی  $100\times$ ، ۴۵ باشد، بر اساس استاندارد ASTM عدد اندازه دانه را تعیین کنید.

(ب) برای همین نمونه در بزرگنمایی  $85\times$  چه تعداد دانه در اینچ مربع وجود دارد.

