



دانشگاه آزاد اسلامی  
واحد دزفول

دانشکده‌ی فنی و مهندسی  
گروه متالورژی

مقدمه‌ای بر

# علم مواد

مجید پورانوری

پاییز ۸۷

## فصل اول

### مقدمه‌ای بر علم و مهندسی مواد

#### مقدمه‌ای بر علم و مهندسی مواد

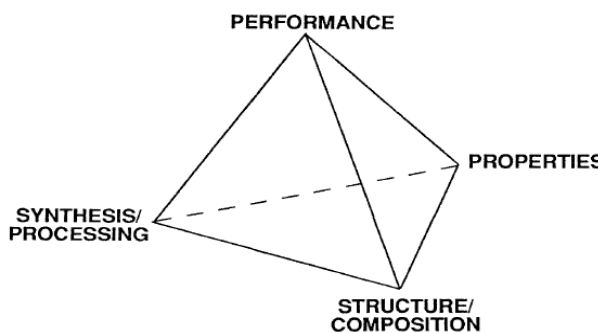
محور اصلی علم و مهندسی مواد را می‌توان در ۴ وجهی علم و مهندسی مواد خلاصه کرد (شکل ۱)، بطور کلی ۴ محور اصلی علم و مهندسی مواد عبارتند از:

۱- فرایند

۲- ساختار

۳- خواص

۴- کارایی



شکل ۱- چهار وجهی علم و مهندسی مواد (رابطه‌ی خواص - ساختار - فرایند و کارایی)

در واقع علم و مهندسی مواد ارتباط این ۴ عنصر را جستجو و بررسی می‌کند. در علم و مهندسی مواد به این نکته توجه می‌شود که اغلب خواص مواد علاوه بر ترکیب شیمیایی به ساختار درونی آن‌ها نیز بستگی دارد. در واقع با اطلاع از ترکیب شیمیایی یک آلیاژ نمی‌توان در مورد خواص آن اظهار نظر قطعی کرد زیرا باید مشخصات ساختاری آن نیز مشخص باشد.

به طور خلاصه، ساختار یک ماده به نحوه‌ی چینش اجزای درونی آن مرتبط است. بسته به ابعاد جزء سازنده‌ی درونی ماده، می‌توان سطوح مختلف ساختاری برای هر ماده تعریف کرد. جدول ۱ سطوح مختلف ساختاری را نشان می‌دهد.

جدول ۱- سطوح ساختاری مواد

مقیاس (m)	مشخصه‌ی ساختاری
$10^{-15}$	ساختار هسته‌ای
$10^{-10}$	ساختار اتمی
$10^{-9}$	ساختار کریستالی یا شیشه‌ای
$10^{-9}$	ساختار محلول جامد و ترکیبات
$10^{-8}$	ساختار دانه و مرزدانه‌ها
$10^{-7}$ تا $10^{-3}$	اندازه و شکل دانه‌ها و فازها
$10^{-5}$ تا $10^{-2}$	تجمع دانه‌ها و فازها
$10^3$ تا $10^{-3}$	سازه‌ی مهندسی

محدوده‌ی قابل کنترل برای تغییر خواص

محدوده‌ی قابل کنترل برای تغییر خواص ماده در جدول مشخص شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، کوچک‌ترین واحد ساختاری قابل کنترل برای تغییر در خواص، ساختار کریستالی یا شیشه‌ای (نحوه‌ی چیده شدن اتم‌ها در یک کریستال یا در یک ماده‌ی آمورف) است. ساختار هسته‌ای و ساختار اتمی، اگر چه خواص ذاتی و بنیادی مواد را توضیح می‌دهند، اما قابل کنترل برای بشر نیستند.

**تذکره:** خواص مواد را از نظر حساسیت به ریزساختار، می‌توان به دو دسته تقسیم کرد:

۱- خواص غیر حساس به ریزساختار: برخی از خواص مانند دانسیته، مدول یانگ، ضریب انبساط حرارتی و گرمای ویژه‌ی مواد تقریباً مستقل از ریزساختار ماده است. برای مثال دانسیته و مدول یانگ آهن خالص، فولاد کم‌کربن، فولاد پرکربن، فولادهای کم‌آلیاژی و فولادهای پرآلیاژی به ترتیب در محدوده‌ی  $7.8 - 7.9 \frac{gr}{cm^3}$  و  $203 - 215 \text{ GPa}$  است.

۲) خواص حساس به ریزساختار: برخی خواص مانند استحکام تسلیم، استحکام کششی، شکل‌پذیری، چقرمگی شکست، استحکام خستگی و استحکام خزشی به شدت تابع تاریخچه‌ی عملیات حرارتی و یا مکانیکی آن‌ها دارد و در نتیجه شدیداً تابع ریزساختار هستند. در واقع در این موارد، با داشتن ترکیب شیمیایی نمی‌توان خواص ماده را حدس زد.

## فصل دوم

### ساختار اتمی و پیوندهای بین اتمی

#### ۲-۱- ساختار اتمی

ساختار اتم متشکل از پروتون و نوترون در هسته و الکترون‌ها در حال حرکت به دور هسته است. پروتون و الکترون هر دو از نظر الکتریکی باردار هستند. بار پروتون مثبت و بار الکترون منفی و مقدار آن در هر دو مورد برابر  $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$  است. اتم‌ها در حالت عادی خنثی هستند.

در اینجا به چند تعریف مقدماتی اشاره می‌شود:

۱- عدد اتمی ( $Z$ ): تعداد پروتون‌های اتم

۲- عدد جرمی ( $A$ ): مجموع تعداد پروتون‌ها و نوترون‌ها در هسته

$$A = Z + N$$

که در آن؛

$A$ : عدد جرمی  $Z$ : عدد اتمی و  $N$ : تعداد نوترون‌ها.

ایزوتوپ‌های یک عنصر دارای عدد اتمی یکسان اما تعداد نوترون‌های متفاوت هستند.

۳- عدد آوگادرو ( $N_A$ ): یک مول از هر ماده  $6.02 \times 10^{23}$  اتم (عدد آوگادرو) دارد.

#### ۲-۲- ساختار الکترونی

در اینجا تنها به ذکر چند نکته‌ی مهم در این مورد بسنده می‌شود:

۱- **والانس ( $n$ ):** به تعداد الکترون‌های لایه آخر (لایه‌های  $S$  و  $P$  آخر) والانس گفته می‌شود که نقش تعیین‌کننده‌ای در خواص

شیمیایی ماده دارند زیرا الکترون‌های لایه‌ی آخر در واکنش‌های شیمیایی و پیوند برقرار کردن با دیگر اتم‌ها شرکت می‌کنند.

بر اساس تعداد الکترون‌های لایه‌های  $S$  و  $P$  آخر می‌توان عناصر را به 4 دسته تقسیم کرد.

الف -  $n=1,2,3$ : فلز

ب -  $n=4$ : شبه فلز

ج -  $n=5,6,7$ : نافلز

ت -  $n=8$ : گاز خنثی

**تذکر:** معمولاً اتم‌ها حین واکنش شیمیایی و برقراری پیوند اتمی تلاش دارند که به آرایش گاز پایدار برسند.

**۲- الکترونگاتیویته:** معیاری برای تمایل به جذب الکترون است.

فلزات تمایل زیادی به از دست دادن الکترون دارند و در نتیجه الکتروپوزیتیو هستند.

نافلزات تمایل زیادی به جذب الکترون دارند و در نتیجه الکترونگاتیو هستند.

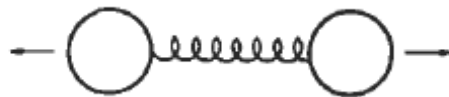
**۳- جدول تناوبی:** براساس آرایش الکترونی تمام عناصر در یک جدول تناوبی آرایش یافته‌اند. در واقع جدول تناوبی راهنمای

مناسبی برای اطلاع از خواص شیمیایی عناصر مختلف است.

**تذکر:** از آنجایی که عناصر موجود در هر گروه تعداد الکترون والانس برابر دارند؛ بنابراین قابل انتظار است که دارای خواص شیمیایی و فیزیکی یکسان باشند.

## ۲-۳- پیوندهای بین اتمی

تمام مواد از قرار گرفتن اتم‌ها در کنار هم تشکیل شده‌اند. برای فهم برخی خواص مواد نیاز به مطالعه‌ی نحوه‌ی پیوند بین اتم داریم. در این قسمت به بررسی مختصر نیروهایی که موجب نگه داشته شدن اتم‌ها در کنار هم می‌شود (پیوندهای بین اتمی) پرداخته شده است. در واقع در این‌جا مروری برماهیت فنر مجازی (شکل 1) که دو اتم را به هم متصل می‌کند، صورت می‌گیرد.



شکل ۱ - پیوند فنر مانند بین اتم‌ها

اتم‌ها به دو صورت با همدیگر پیوند دارند:

۱- پیوندهای اولیه (اصلی): این پیوندها شامل پیوندهای یونی، کوالانسی و فلزی هستند و به‌طور کلی پیوندهایی قوی هستند.

۲- پیوندهای ثانویه (فرعی): این پیوندها شامل پیوندهای واندروالس و هیدروژنی هستند که نسبتاً ضعیف هستند. در این پیوندها انتقال و اشتراک الکترون وجود ندارد.

البته قابل ذکر است که پیوندهای بین اتمی موجود در برخی موارد ممکن است خالص نباشد و ترکیبی از پیوندهای فوق باشد.

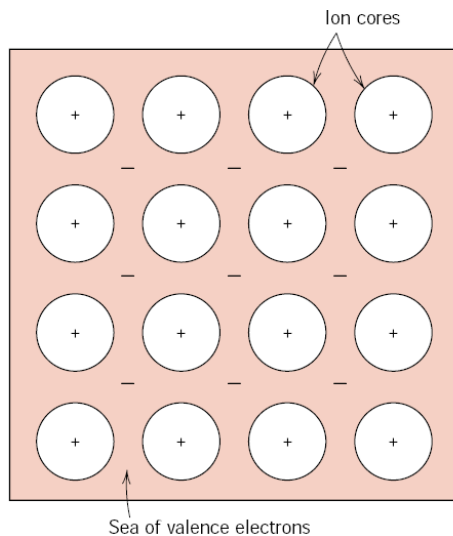
## ۲-۴- پیوندهای اولیه

### ۲-۴-۱- پیوند فلزی:

۱- این نوع پیوند در فلزات و آلیاژهای آن‌ها یافت می‌شود.

۲- مهم‌ترین مشخصه ساختار الکترون فلزات؛ دارا بودن الکترون آزاد است. (این الکترون‌ها تعلق خاص به هسته ندارند).

۳- مدلی که برای تشریح پیوند فلزی ارائه شده است بر اساس مدل "دریای الکترون آزاد" است در این مدل الکترون‌های آزاد به صورت دریایی از الکترون‌های آزاد که تعلق خاص به یک اتم ندارند در نظر گرفته می‌شوند و الکترون‌های غیروالانس باقیمانده و هسته‌ی اتم تشکیل هسته‌های یونی را می‌دهند. هسته‌های یونی دارای بار خالص مثبت هستند و در این دریای الکترون شناورند. (شکل ۲)

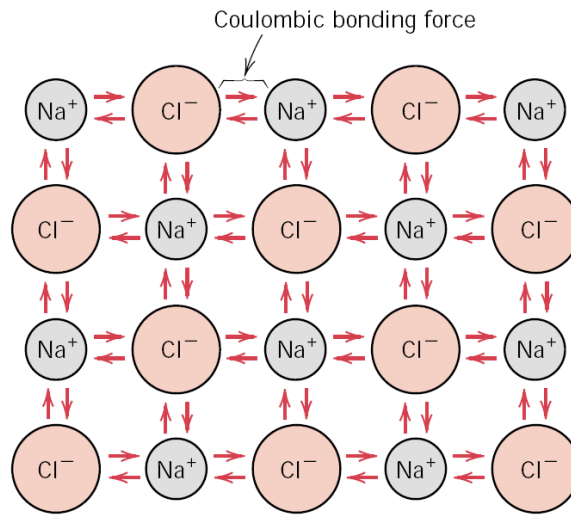


شکل ۲ - شماتیک پیوند فلزی

۴. عامل اتصال اتم‌ها در پیوند فلزی، جاذبه‌ی بین الکترون‌های آزاد و هسته‌ی یونی با بار مثبت است.
۵. ماهیت پیوند فلزی غیرجهت داراست.
۶. به کمک این مدل می‌توان برخی خواص فلزات را توضیح داد:
  - الف - فلزات رسانای خوب الکتریسته هستند.
  - ماده‌ای رسانای خوب الکتریسیته است که بتواند با کمترین مقدار پتانسیل اعمالی؛ حامل‌های بار الکتریکی (الکترون و/یا یون) را از خود عبور دهد. مواد فلزی به علت دارا بودن الکترون‌های آزاد، به نیروی محرکه‌ی کمی برای انتقال جریان نیاز دارند.
  - ب - فلزات دارای شکل‌پذیری خوبی هستند. این امر با توجه به مکانیزم‌های تغییر فرم و غیرجهت‌دار بودن ماهیت پیوند فلزی توضیح می‌یابد.

### ۲-۴-۲- پیوند یونی:

۱. این نوع پیوند در ترکیباتی یافت، شود که متشکل از یک عنصر الکترونگاتیو و یک عنصر الکتروپوزیو باشند.
۲. پیوند اتمی حاکم در بسیاری از سرامیک‌ها، یونی است.
۳. پیوند یونی براساس انتقال و داد و ستد الکترون است.
۴. در این پیوند عنصر فلزی با دادن الکترون‌های لایه ظرفیت خود به عنصر نافلز موجب می‌شود تا هر دو عنصر به آرایش گاز پایدار می‌رسند و فلز به یون مثبت (کاتیون) و نافلز به یون منفی (آنیون) تبدیل می‌شود. یک مثال کلاسیک در این مورد NaCl است که در شکل (۳) به‌طور شماتیک نشان داده شده است.



شکل ۳- شماتیک پیوند یونی در NaCl

۵. عامل پیوند، جاذبه الکترواستاتیکی بین یون مثبت و یون منفی است.

۶. ماهیت پیوند یونی، غیرجهت داراست یعنی مقدار پیوند در تمام جهات اطراف یک اتم یکسان است.

۷. برخی خواص مواد با پیوند یونی:

الف - مواد با پیوند یونی، رسانایی الکتریکی خوبی ندارند:

در این مواد عامل رسانایی، حرکت یون هاست (الکترون آزاد وجود ندارد). از آنجایی که اندازه‌ی بزرگ‌تر یون‌ها و نیروی دافعه‌ی بین بارهای هم‌نام مانع حرکت آزادانه‌ی یون‌ها می‌شود؛ این مواد رسانایی خوبی ندارند.

ب - مواد با پیوند یونی شکل‌پذیری خوبی ندارند.

این امر با توجه به مکانیزم تغییر فرم و قرار گرفتن بارهای هم‌نام در کنار هم و ایجاد نیروی دافعه بین آن‌ها حین تغییر فرم توضیح می‌یابد.

### ۲-۴-۳- پیوند کووالانسی:

۱. پیوند کووالانسی به شکل خالص در الماس، سیلیکون و ژرمانیوم یافت می‌شود.

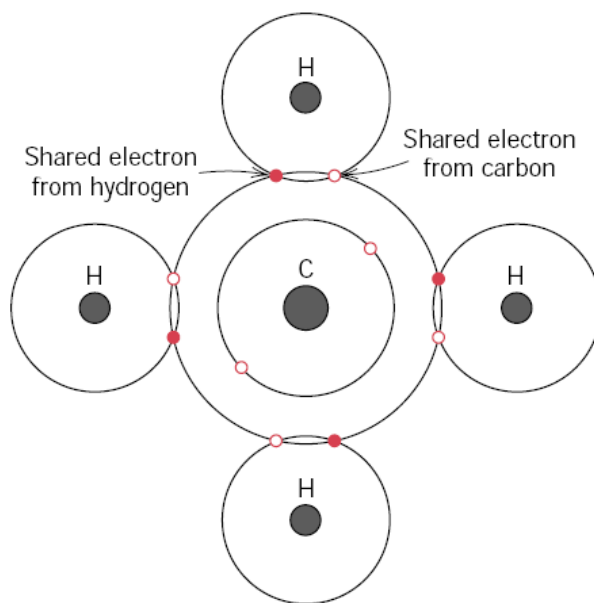
۲. پیوند کووالانسی پیوند اتمی حاکم در سرامیک‌های سیلیکاتی و شیشه‌ها است.

۳. پیوند اتمی برخی فلزات با نقطه ذوب بالا (تنگستن، مولیبدن، تانتالم و ...) علاوه بر پیوند فلزی؛ ماهیت کووالانسی نیز دارد.

۴. پیوند کووالانسی در پلیمرها نیز وجود دارد.

۵. پیوند کووالانسی براساس شراکت الکترون است. در این پیوند نزدیک شدن دو هسته موجب ایجاد یک اربیتال الکترونی جدید شامل الکترون‌های به شراکت گذاشته شده می‌شود. در این حالت الکترون‌های به شراکت گذاشته شده را می‌توان متعلق به هر دو اتم دانست.

شکل ۴ به‌طور شماتیک نحوه‌ی پیوند کووالانسی در  $\text{CH}_4$  را نشان می‌دهد.



شکل ۴ - پیوند کووالانسی در  $CH_4$

۶. یکی از مهم‌ترین مشخصه‌های پیوند کووالانسی جهت‌دار بودن آن است. به علت نامتقارن بودن شکل اربیتال‌ها، قدرت پیوند بین اتمی در تمام جهات یکسان نیست.

۷. برخی ویژگی‌های مواد با پیوند کووالانسی

الف - مواد با پیوند کووالانسی عایق خوب الکتریسته هستند. این مواد به علت فقدان الکترون آزاد و ذرات یونی رسانای الکتریسته نیستند.

ب - مواد کووالانسی به علت ماهیت جهت‌دار بودن پیوندشان با شکل‌پذیری ضعیفی دارند. در واقع تغییر فرم این مواد مستلزم تغییر در زاویه‌ی پیوندی آن‌هاست و تغییر در زاویه پیوندی یعنی شکست پیوند کووالانسی.

#### ۲-۴-۴- پیوندهای ترکیبی (هیبریدی)

در بسیاری از مواد، پیوندهای بین اتمی ترکیبی از پیوندهای اولیه یا ثانویه است.

۱. پیوند اتمی موجود در ترکیبات بین فلزی، ترکیبی از پیوند فلزی و پیوند یونی است. هرچه اختلاف الکترونگاتیویته دو فلز بیشتر باشد، سهم پیوند یونی بیشتر است.

۲. پیوند اتمی موجود در سرامیک‌ها، ترکیبی از پیوند یونی و کووالانسی است. سهم پیوند کووالانسی در سرامیک‌ها را می‌توان به صورت رابطه‌ی زیر بیان کرد:

$$\text{سهم پیوند کووالانسی} = \exp[-0.25 \Delta E^2]$$

که در آن  $\Delta E$ ؛ اختلاف الکترونگاتیویته است. هرچه  $\Delta E$  کمتر باشد؛ سهم پیوند کووالانسی بیشتر خواهد بود.

۳. نوع پیوند در بسیاری از مواد مولکولی، ترکیبی از پیوند کووالانسی و پیوندهای ثانویه (واندروالس و هیدروژنی) است.



## ۲-۵- انرژی پیوندی

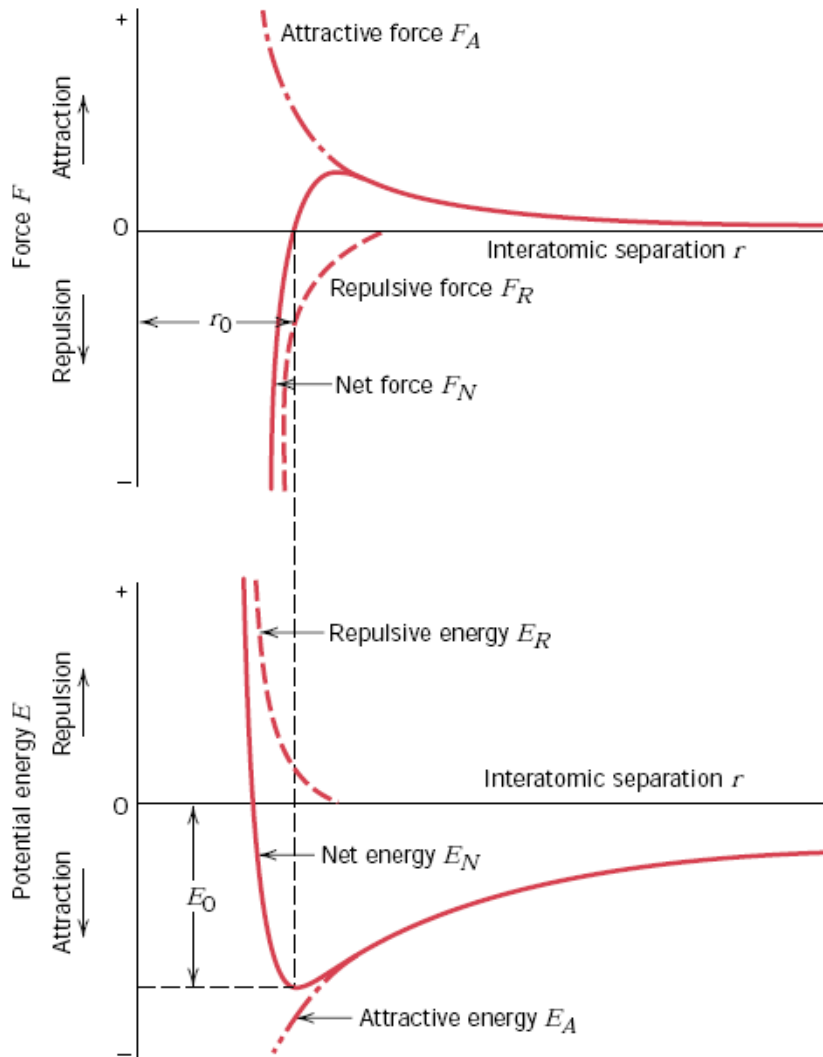
### منحنی تغییرات نیروی بین اتمی (و انرژی پتانسیل) برحسب فاصله‌ی بین اتمی

اصول پیوند اتمی را می‌توان با در نظر گرفتن اندرکنش دو اتم ایزوله که از فاصله‌ای دور به هم نزدیک می‌شوند، درک کرد. در فواصل دور؛ اندرکنش‌ها قابل صرف‌نظر کردن است. با نزدیک شدن دو اتم به هم؛ دو نوع نیروی بین اتمی (جاذبه و دافعه) بین آن‌ها شکل می‌گیرد. مقدار آن‌ها تابعی از فاصله‌ی بین اتمی است (شکل ۵-الف)

۱. منشأ نیروی جاذبه، بستگی به نوع پیوند اتمی دارد و به‌طور کلی ناشی از نیروی بین مراکز با بار مثبت و منفی است.
۲. منشأ نیروی دافعه، هم‌پوشانی الکترون‌های لایه‌ی آخر است که با هر چه بیشتر نزدیک شدن دو اتم، مقدار آن افزایش می‌یابد.
۳. نیروی خالص بین دو اتم مجموع این دو نیرو است؛

$$F_N = F_A + F_R$$

هنگامی که  $F_N = 0$  است اتم‌ها در فاصله‌ی  $r = r_0$  در حالت تعادل قرار دارند (شکل ۵-الف را ببیند)



شکل ۵-الف- تغییرات نیروی جاذبه، دافعه و نیروی خالص بین دو اتم برحسب فاصله ب- تغییرات انرژی جاذبه، دافعه و انرژی پتانسیل بین دو اتم برحسب فاصله

۴. انرژی پتانسیل بین دو اتم به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر به نیروی بین اتمی مرتبط می‌شود؛

$$E = \int F dr$$

شکل 1- ب تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب فاصله را نشان می‌دهد.

۵. مهمترین مشخصه‌ی منحنی انرژی - فاصله؛ نقطه مینیمم آن است. انرژی متناظر با فاصله‌ی تعادلی  $r_0$  انرژی پیوند ( $E_0$ ) است.

۶. انرژی پیوندی ( $E_0$ ) حداقل انرژی مورد نیاز برای جدا کردن و یا شکستن پیوند است.

۷. انرژی پیوندی تابع نوع پیوند بین اتمی است (جدول 1 را ببینید)

#### جدول 1- انرژی پیوندی در انواع پیوندهای اتمی

نوع پیوند	انرژی پیوندی (kJ)
یونی	625-1550
کووالانسی	520-1250
فلزی	100-800
واندروالسی	<40

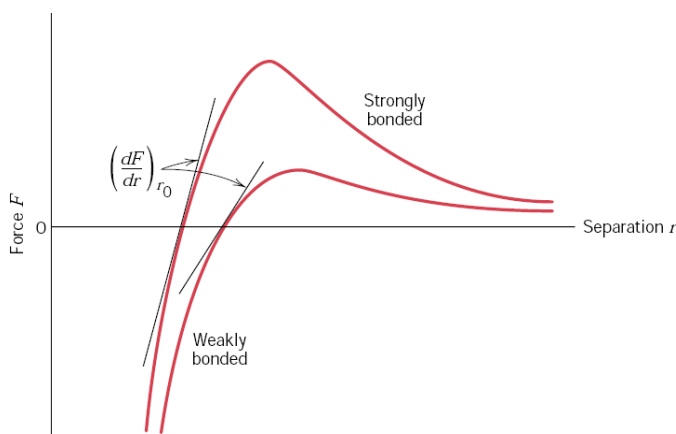
**تذکره:** برخی خواص مواد وابسته به انرژی پیوندی و شکل منحنی انرژی - فاصله است:

۱- هرچه انرژی پیوندی بیشتر باشد؛ دمای ذوب بیشتر است.

۲- در مقیاس اتمی؛ مقدار مدول یانگ تابعی از مقاومت پیوند اتمی در برابر تغییر فاصله‌ی تعادلی اتم‌هاست. در واقع مدول یانگ متناسب است با شیب نمودار نیروی بین اتمی - فاصله در نقطه‌ی  $r_0$ :

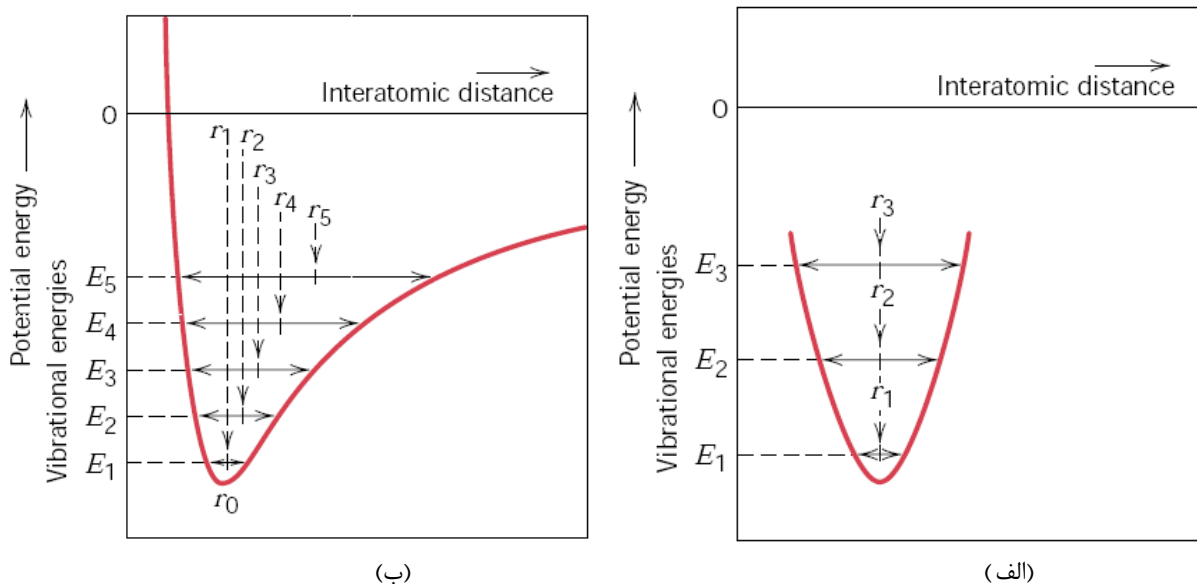
$$E \propto \left( \frac{dF}{dr} \right)_{r=r_0}$$

به شکل ۶ توجه کنید:



شکل ۶ - نمودار نیرو - فاصله برای دو ماده با مدول الاستیسیته‌ی بالا و پائینی

۳- ضریب انبساط حرارتی ( $\alpha$ ) وابسته به شکل منحنی انرژی - فاصله است. هرچه مقاومت پیوند اتمی در برابر تغییر فاصله‌ی بین اتمی در اثر تغییر دما بیشتر باشد، ضریب انبساط حرارتی بیشتر خواهد بود. انبساط حرارتی ناشی از انحنا‌ی نامتقارن قسمت پایین منحنی انرژی - فاصله است. در صورتی که منحنی متقارن باشد با افزایش دما؛ فاصله تعادلی ثابت می‌ماند (یعنی  $\alpha=0$ ) ولی هرچه منحنی نامتقارن‌تر باشد با افزایش دما فاصله‌ی تعادلی و در نتیجه  $\alpha$  افزایش می‌یابد (شکل ۷)



شکل ۷- تغییرات انرژی پتانسیل برحسب فاصله بین اتمیالف- یک منحنی نامتقارن: همانطور که ملاحظه می‌شود، فاصله‌ی بین اتمی با افزایش دما افزایش می‌یابد. با حرارت دادن، فاصله‌ی بین اتمی از  $r_0$  به  $r_1$  به  $r_2$  و به همین ترتیب افزایش می‌یابد. ب- یک منحنی متقارن: با افزایش دما، فاصله‌ی تعادلی اتم‌ها تغییر نمی‌کند و بنابراین ضریب انبساط حرارتی برابر صفر است.

تذکر: به‌طور کلی با افزایش انرژی پیوندی؛ دمای ذوب و مدول یانگ افزایش می‌یابد و ضریب انبساط حرارتی کاهش می‌یابد.

# فصل سوم

## ساختار کریستالی مواد

### ۳-۱- مقدمه

مواد را از نظر نظم اتمی می‌توان به سه دسته تقسیم کرد:

- مواد بی‌نظم: مثل گازها
- مواد با نظم بلند دامنه (کریستال): در این مواد (کریستال‌ها)، اتم‌ها در طی فاصله‌های طولانی اتمی دارای نظم تکرار شونده یا آرایش پربندی هستند. در واقع طی انجماد، اتم‌ها خود را در یک الگوی سه بعدی تکرار شونده آرایش می‌دهند به صورتی که هر اتم با نزدیک‌ترین اتم همسایه پیوند دارد. در این مواد، عدد همسایگی برای اتم‌های بالک در سرتاسر کریستال حفظ می‌شود.
- مواد با نظم کم دامنه (آمورف): در این مواد نظم اتمی تا چند فاصله‌ی اتمی حفظ می‌شود و عدد همسایگی متغیر است. یکی از روش‌های تهیه مواد آمورف فلزی، سریع سرد کردن مذاب آن‌ها با سرعت‌های در حدود  $10^6$  k/sec است. در این سرعت‌های بالای انجماد با اتم‌ها فرصت کافی برای آرایش منظم در موقعیت‌های مشخص اتمی را ندارند.

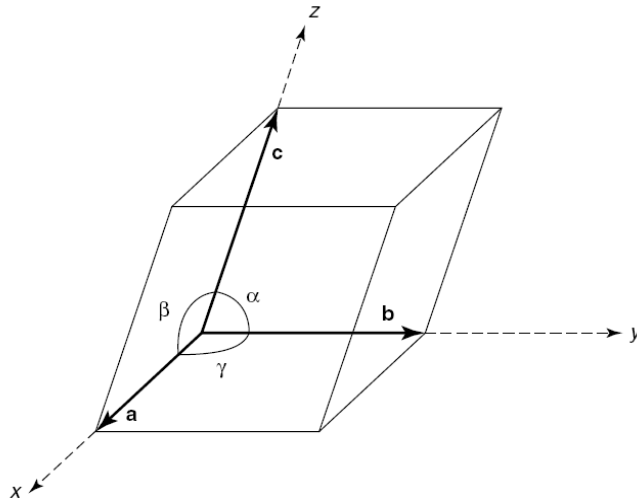
### تذکر:

- در بحث زیر اتم‌ها یا یون‌ها به صورت کره‌های جامد با قطر مشخص در نظر گرفته می‌شوند.
- در توصیف ساختارهای کریستالی از کوچکترین جزء تکرار شونده (سلول واحد) استفاده می‌شود.

### ۳-۲- سیستم‌های بلوری (سیستم‌های تبلور)

از آنجا که ساختارهای بلوری مختلفی وجود دارند گاهی راحت تر است که آنها را بر مبنای شکل سلول واحد و یا آرایش اتمی گروه بندی کنیم. این روش فقط بر پایه‌ی هندسی سلول واحد یعنی شکل سلول واحد متوازی السطوح و بدون توجه به موقعیت اتم‌ها در سلول واحد است. در این روش یک سیستم مختصاتی  $x, y, z$  بر قرار می‌شود. بگونه‌ای که مبدا در یکی از گوشه‌های سلول واحد و هر یک از محورهای مختصات  $x, y$  و  $z$  بر روی یکی از سه لبه‌ی متوازی السطوح مجاور مبدا منطبق می‌گردد. شکل هندسی سلول واحد به طور کامل توسط ۶ پارامتر تعیین می‌شود:

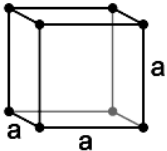
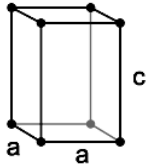
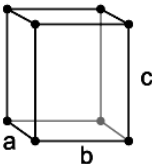
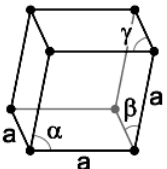
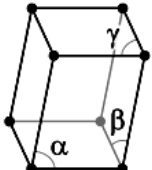
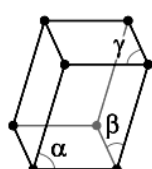
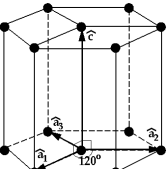
- ۱- طول بردار در امتداد محور x (a)
- ۲- طول بردار در امتداد محور y (b)
- ۳- طول بردار در امتداد محور z (c)
- ۴- زاویه‌ی بین بردار b و c ( $\alpha$ )
- ۵- زاویه‌ی بین بردار a و c ( $\beta$ )
- ۶- زاویه‌ی بین بردار a و b ( $\gamma$ )



شکل ۱- پارامترهای شبکه

بر این اساس هفت تلفیق احتمالی a, b, c,  $\alpha$ ,  $\beta$  و  $\gamma$  وجود دارد که هر کدام یک سیستم بلوری یا سیستم تبلور جداگانه را مشخص می‌کنند. این هفت سیستم بلوری عبارتند از: مکعبی، تتراگونال، هگزاگونال، ارتورمبیک، رمبوهدرال، مونوکلینیک و تری کلینیک. ارتباط پارامترهای شبکه و نمای کلی از سلول واحد برای هر یک از این سیستم‌ها در جدول ۱ آورده شده است. این سیستم‌ها نحوه‌ی قرارگیری اتم‌ها در سلول واحد را در نظر نمی‌گیرند. در صورتی که نحوه‌ی قرارگیری اتم‌ها در سلول واحد را در نظر بگیریم، ۱۴ حالت قرارگیری اتم‌ها در سلول واحد بوجود خواهد آمد. به ۱۴ حالت، ۱۴ شبکه‌ی براوه گفته می‌شود.

جدول ۱: مشخصات هفت سیستم بلوری و شکل هندسی آن‌ها

سیستم بلوری	ارتباط پارامترهای شبکه	زوایای بین محورها	شکل هندسی سلول واحد
مکعبی	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
تتراگونال	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
اورتورومبیک	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
رومبوهدرال (تری‌گونال)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
مونوکلینیک	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
تری‌کلینیک	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	
هگزاگونال	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	

در این قسمت ساختارهای کریستالی مهم در فلزات، مواد یونی و مواد کووالانسی توضیح داده می‌شود.

### ۳-۳- ساختار کریستالی فلزات:

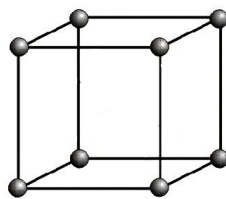
#### ۳-۳-۱- ساختار کریستالی مکعب ساده (SC)

اگر چه این ساختار در فلزات مهندسی وجود ندارد اما به علت سادگی ابتدا به بحث در مورد این نوع شبکه پرداخته می‌شود. شکل ۲، ساختار کریستالی مکعبی ساده را نشان می‌دهد.

- به فاصله‌ی مرکز تا مرکز اتم‌های روی ضلع مکعب در ساختارهای مکعبی، پارامتر شبکه ( $a_0$ ) گفته می‌شود.

- اتم‌ها در گوشه‌های یک مکعب قرار دارند.

- موقعیت اتم‌ها:  $(0, 0, 0)$



شکل ۲- شبکه‌ی مکعبی ساده

مشخصه‌های مهم شبکه‌کریستالی SC:

الف - تعداد اتم به ازای واحد شبکه (N)

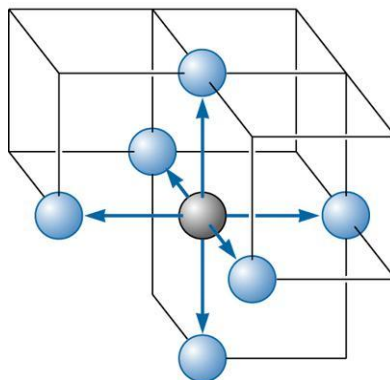
$$N_{SC} = 8 \times \frac{1}{8} = 1$$

تذکر: سهم هر اتم گوشه در یک سلول واحد مکعبی  $\frac{1}{8}$  است.

ب - عدد کئوردیناسیون (همسایگی)

تعداد نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه با فاصله‌ی یکسان تا هر اتم در شبکه را عدد کئوردیناسیون گویند.

$$(C.N)_{SC} = 6$$

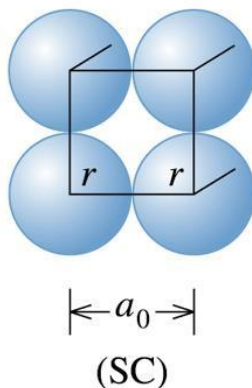


پ - ارتباط بین پارامتر شبکه ( $a_0$ ) و شعاع اتمی ( $r$ )

برای پیدا کردن ارتباط  $a_0$  و  $r$ ، فرض می‌شود اتم‌ها در متراکم‌ترین جهت برهم مماس‌اند. در شبکه SC متراکم‌ترین جهت، جهت ضلع

$$a_0 = 2r$$

مکعب است پس



### ت - فاکتور تراکم اتمی:

APF درصدی از فضای شبکه کریستالی است که توسط اتم اشغال شده است و از تقسیم حجم اتم‌های سلول واحد بر حجم سلول واحد به دست می‌آید.

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

$$\text{A.P.F} = \frac{\text{حجم اتم} \times \text{تعداد اتم به ازای سلول واحد}}{\text{حجم سلول واحد}} \times 100 = \frac{N \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\text{حجم سلول واحد}} \times 100$$

فاکتور تراکم اتمی برای شبکه‌ی مکعبی ساده به صورت زیر است:

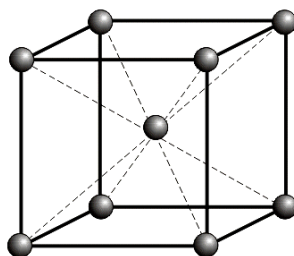
$$(\text{APF})_{\text{SC}} = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(a_0)^3} = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(2r)^3} = 0.52$$

### ۳-۲-۳- ساختار مکعبی مرکز پر (BCC)

شکل ۳ ساختار BCC را نشان می‌دهد.

- ۸ اتم در گوشه‌های مکعب و ۱ اتم در مرکز مکعب

- موقعیت اتم‌ها:  $(0,0,0)$  و  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$



شکل ۳- شبکه‌ی مکعبی مرکزدار



- برخی فلزات دارای ساختار bcc: آهن در دمای اتاق، W و Mo و V و Cr و Ti در دمای بالا

**مشخصه‌های مهم شبکه‌ی BCC**

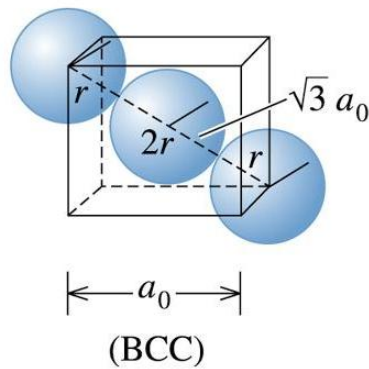
الف -  $N = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

ب -  $C.N = 8$

پ - ارتباط  $a_0$  و  $r$ :

$a_0 \cdot \sqrt{3} = 4r$

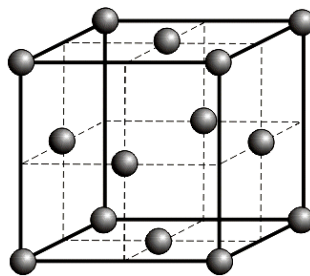
فرض می‌شود اتم‌ها در جهت قطر اصلی مکعب برهم مماس‌اند.



ت -  $(APF)_{bcc} = 0.68$

**۳-۳-۳ ساختار مکعبی وجوه مرکزدار FCC**

شکل 4 ساختار FCC را نشان می‌دهد.



شکل ۴- شبکه‌ی مکعبی وجوه مرکزدار

- 8 اتم در گوشه‌های مکعب و 6 اتم در وجوه مکعب

- موقعیت اتم‌ها  $(0, 0, 0)$ ،  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ،  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ ،  $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

- برخی فلزات دارای ساختار FCC: Al، Cu، Au، Ag، Ni، Pb

**برخی مشخصه‌های ساختار FCC**

الف -  $N_{FCC} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$

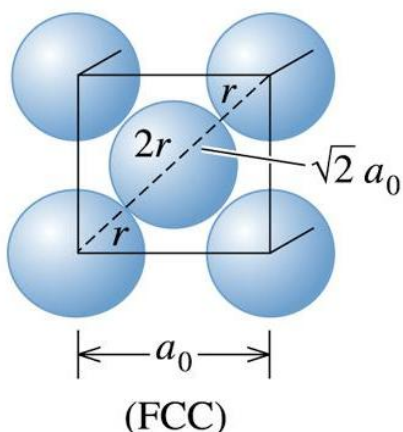
تذکره: سهم هر اتم واقع بر وجوه مکعب در یک سلول واحد با  $\frac{1}{2}$  است.

ب -  $(C.N)_{FCC} = 12$

پ - ارتباط  $a_0$  و  $r$ :

فرض می‌شود اتم‌ها در جهت قطر فرعی مکعب برهم مماسند.

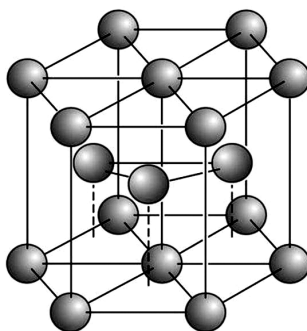
$$a_0 \sqrt{2} = 4r$$



ت -  $(A.P.F)_{FCC} = 0.74$

### ۳-۳-۴- ساختار هگزاگونال فشرده (HCP)

شکل ۵ سلول واحد HCP را نشان می‌دهد.



شکل ۵- شبکه‌ی منشوری هگزاگونال فشرده

- ۱۲ اتم در گوشه‌های ۶ ضلعی، ۲ اتم در مرکز قاعده‌ی بالا و پائین و هر اتم در وسط شبکه

- موقعیت اتم‌ها:  $(0,0,0)$  و  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$

- چند فلز دارای ساختار HCP: Ti در دمای اتاق، Mg، Be، Cd و Co و Zn

**چند مشخصه‌ی مهم ساختار HCP:**

$$N_{HCP} = 12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6 \quad \text{الف}$$

$$(C.N)_{HCP} = 12 \quad \text{ب}$$

پ - ارتباط بین پارامترهای شبکه و  $r_0$ :

- ۱- برای به دست آوردن ارتباط بین  $a_0$  و  $r$  فرض می‌شود اتم‌ها در جهت ضلع شش وجهی برهم مماسند پس
- ۲- در یک شبکه HCP ایده‌آل ارتباط  $C$  و  $a_0$  به صورت زیر است:

$$\frac{C}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.63$$

**تذکره:** در فلزات HCP واقعی نسبت  $C/a$  از مقدار ایده‌آل انحراف مثبت یا منفی دارد.

$$(A.P.F)_{hcp} = 0.74 \quad \text{ت}$$

**تذکره:**

- ۱- APF در ساختارهای کریستالی فلزات مستقل از نوع اتم می‌باشد.
- ۲- فلزات تمایل به افزایش C.N دارند. هرچه A.P.F بیشتر باشد C.N نیز بیشتر است.
- ۳- کوچک‌ترین جزء ساختاری قابل کنترل خواص، ساختار کریستالی است.
- ۴- یکی از راه‌های کنترل ساختار کریستالی، کنترل عناصر آلیاژی است. بدین منظور برای مثال از عناصر پایدارکننده‌ی FCC که خود ساختار FCC دارند و یا عناصر پایدارکننده‌ی BCC که خود ساختار BCC دارند استفاده می‌شود.

**۳-۴- محاسبه‌ی حجم سلول واحد**

۱- حجم سلول واحد ساختارهای مکعبی از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$V_{cubic} = a^3$$

۲- حجم سول واحدهای ارتوگونال ( $\alpha, \beta, \gamma = 90$ ) از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$V_{ortogonal} = abc$$

۳- حجم سلول واحد hcp از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$V_{hcp} = 6 \times \frac{a^2 \sqrt{3}}{4} \times C$$

**۳-۵- محاسبه‌ی دانسیته تئوری مواد کریستالی**

دانسیته‌ی تئوری مواد با ساختار کریستالی را می‌توان بر اساس سلول واحد محاسبه کرد. دانسیته تئوری مواد کریستالی را می‌توان از رابطه‌ی زیر به دست آورد:

$$P = \frac{N \times A}{N_A \times V_{uc}}$$

که در آن:

$N$ : تعداد اتم به ازای سلول واحد،  $N_A$ : عدد آواگادرو،  $A$ : جرمی اتمی،  $V_{uc}$ : حجم سلول واحد

تذکر: براساس این رابطه، دانسیته‌ی مواد کریستالی تابع وزن اتمی و نحوه‌ی چیده شدن اتم‌ها (نوع ساختار کریستالی) دارد.

### ۳-۶- تحولات آلوتروپیک:

تغییر ساختار کریستالی مواد با تغییرات دما را آلوتروپی (در مورد مواد خالص) یا پلی مورفیسم (در مورد ترکیبات) گفته می‌شود.

تذکر:

۱- تغییر حجم ناشی از تحولات آلوتروپیک نقش مهمی در میزان تنش‌های تولیدی حین گرم و سرد شدن یک ماده آلوتروپیک دارد.

۲- محاسبه  $\Delta V$  حین تحول آلوتروپیک:

فرض کنید در دمای T؛ ساختار کریستالی ماده‌ای از  $\alpha$  به  $\beta$  تغییر می‌کند در صورتی که تعداد اتم به ازای یک سلول واحد ساختار

$\alpha$ ؛  $N_\alpha$  و تعداد اتم به ازای یک سلول واحد ساختار  $\beta$ ،  $N_\beta$  باشد، پس یک سول واحد  $\alpha$  به  $\frac{N_\alpha}{N_\beta}$  سلول واحد  $\beta$  تبدیل می‌شود:

$$\alpha \rightarrow \frac{N_\alpha}{N_\beta} \beta$$

تغییر حجم نسبی بر مبنای یک سلول واحد و با در نظر گرفتن اصل بقای جرم از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید؛

$$\% \frac{\Delta V}{V} = \frac{\frac{N_\alpha}{N_\beta} V_\beta - V_\alpha}{V_\alpha} \times 100$$

که در آن  $V_\alpha$  و  $V_\beta$  به ترتیب حجم سلول واحد شبکه‌های  $\alpha$  و  $\beta$  هستند.

**مثال** مس دارای ساختار FCC و شعاع اتمی  $1.278 \text{ \AA}$  و وزن اتمی  $63.54 \text{ gr/mol}$  می‌باشد. وزن مخصوص آن برحسب  $\frac{\text{gr}}{\text{cm}^3}$  چقدر

است؟

پاسخ:

$$\rho = \frac{4 \times 63.54}{6.02 \times 10^{23} \times \left( \frac{4 \times 1.278 \times 10^{-8}}{\sqrt{2}} \right)^3} = 8.93 \frac{\text{gr}}{\text{cm}^3}$$

**مثال** - درصد تغییر حجم نسبی تئوریک در تحول آلوتروپیک یک فلز خالص از ساختمان کریستالی FCC به BCC چند درصد است؟

**پاسخ:** از آنجایی که FCC، 4 اتم به ازای سلول واحد دارد حین تبدیل به 2 سلول واحد BCC تبدیل می‌شود تا اصل بقای جرم حفظ

شود.

$$\text{FCC} \rightarrow \frac{4}{2} \text{BCC}$$

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{2V_{\text{bcc}} - V_{\text{fcc}}}{V_{\text{fcc}}} \times 100 = \frac{2 \left( \frac{4r}{\sqrt{3}} \right)^3 - \left( \frac{4r}{\sqrt{2}} \right)^3}{\left( \frac{4r}{\sqrt{2}} \right)^3} \times 100 = +8.1\%$$

**تذکر:** نتیجه‌ی به‌دست آمده در این مثال که براساس، فرض کردن اتم‌ها به‌صورت کره‌های سخت (کره‌هایی با شعاع ثابت) به‌دست آمده است تنها به ساختار کریستالی، و چینش هندسه اتم‌ها بستگی دارد و مستقل از پارامتر شبکه و در نتیجه نوع اتم است. اما در فلزات واقعی؛ اتم‌ها را نمی‌توان این‌گونه فرض کرد. برای مثال برای محاسبه‌ی تغییرات حجمی حین گرم کردن آهن خالص از ساختار bcc با  $a_0 = 0.2910$  به ساختار fcc با  $a_0 = 0.3647$  در دمای  $910^\circ\text{C}$  داریم:

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{2(0.2910)^3 - (0.3647)^3}{(0.2910)^3} \times 100 = -1.54\%$$

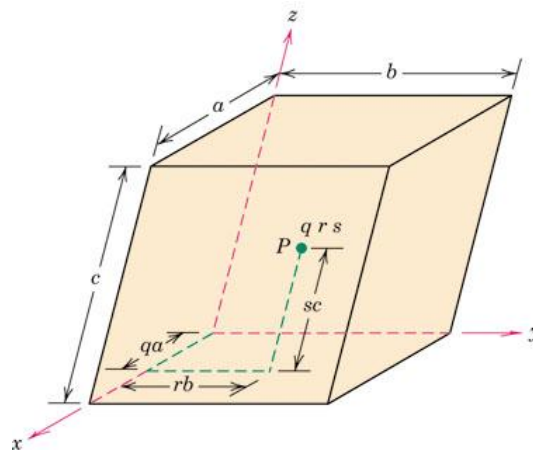
این مقدار با مقدار واقعی تغییر حجم تطابق خوبی دارد.

### ۳-۱۲-نقطه، جهت و صفحه در شبکه‌های کریستالی:

وقتی که با مواد بلوری سروکار داریم، غالباً نیاز است که به یک نقطه‌ی خاص درون سلول واحد، یک جهت بلوری یا بعضی از صفحات بلوری اتم‌ها اشاره کنیم.

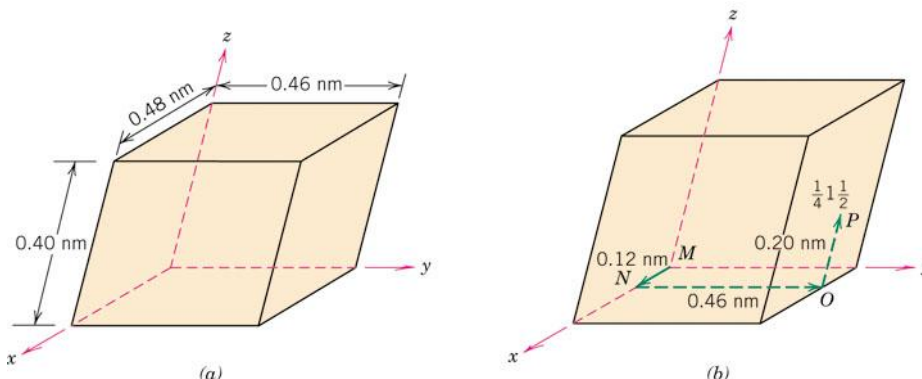
#### ۳-۱۲-۱-مختصات نقطه

موقعیت هر نقطه درون سلول واحد می‌تواند با مختصات آن به صورت کسرهایی از طول لبه‌های سلول واحد (یعنی با  $a$ ،  $b$  و  $c$ ) تعیین می‌شود. برای نشان دادن این مطلب، سلول واحد و نقطه‌ی  $P$  با مختصات عمومی  $q$ ،  $r$  و  $s$  را در نظر بگیرید (شکل ۱۶) که  $q$  کسری از طول  $a$  در امتداد محور  $x$ ،  $r$  کسری از طول  $b$  در امتداد محور  $y$  و  $s$  کسری از طول  $c$  در امتداد محور  $z$  است. بنابراین، موقعیت  $P$  با استفاده از مختصات  $qrs$  با مقادیر کم‌تر یا مساوی یک، تعیین می‌شود. علاوه بر این، بر طبق قرارداد، این اعداد با کاما یا علامت دیگری از هم جدا نمی‌شوند.



شکل ۱۶- روش تعیین  $qrs$  برای نقطه  $P$  درون سلول واحد. مختصات  $q$  (که به صورت کسری است) مربوط به فاصله‌ی  $qa$  در امتداد محور  $x$  است که  $a$  طول لبه‌ی سلول واحد است. مختصات  $r$  و  $s$  نیز به روش مشابه برای محورهای  $y$  و  $z$  تعیین می‌شوند.

**مثال:** برای سلول واحد نشان داده شده در شکل زیر (a)، موقعیت نقطه‌ی با مختصات  $\frac{1}{4}1\frac{1}{2}$  را تعیین کنید.

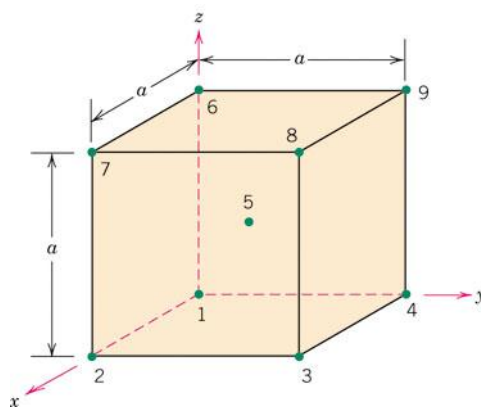


**حل**

از شکل (a) طول‌های لبه‌های این سلول واحد عبارتند از  $a=0.48\text{nm}$ ،  $b=0.46\text{nm}$  و  $c=0.40\text{nm}$ . علاوه بر این، با توجه به مباحث بالا، کسرهای طول عبارتند از:  $q = \frac{1}{4}$ ،  $r = 1$  و  $s = \frac{1}{2}$ . بنابراین، همانطور که در شکل (b) نشان داده شده است، ابتدا از مبدا سلول واحد (نقطه M) به اندازه  $qa = \frac{1}{4}(0.48\text{nm}) = 0.12\text{nm}$  واحد در طول محور x (به نقطه N) حرکت می‌کنیم. متشابهاً، به موازات محور y از نقطه N به نقطه O می‌رویم. نهایتاً، همانطور که در شکل (b) مشاهده می‌شود، از این موقعیت به اندازه  $sc = \frac{1}{2}(0.40\text{nm}) = 0.20\text{nm}$  در امتداد محور z به نقطه P می‌رویم. این نقطه P مربوط به مختصات  $\frac{1}{4}1\frac{1}{2}$  است.

**مثال:** مختصات تمام موقعیت‌های اتمی سلول واحد BCC را تعیین کنید.

**حل:** برای سلول واحد BCC شکل ۱۷، مختصات موقعیت اتمی به محل‌های مرکزهای تمام اتم‌ها در سلول واحد، یعنی هشت اتم در گوشه‌ها و اتم مرکزی مربوط می‌شود. این موقعیت‌ها در شکل زیر نشان داده و نام‌گذاری شده‌اند.



شکل ۱۷- نقاط مادی موجود در شبکه‌ی BCC

مختصات نقطه برای موقعیت شماره ۱، ۰۰۰ است. این موقعیت در مبداء سیستم مختصات قرار دارد و کسر طول سلول واحد در امتداد محورهای x، y و z، به ترتیب ۰، ۰، ۰ است. علاوه بر این، برای موقعیت شماره ۲، از آنجا که این نقطه به اندازه یک طول یال سلول واحد در امتداد محور x قرار دارد، کسر طولهای آن به ترتیب ۱، ۰، ۰ است که مختصات نقطه‌ای ۱۰۰ برای آن به دست می‌آید. جدول زیر کسر طول یال سلول واحد در امتداد محورهای x، y و z و مختصات نقطه‌ای مربوطه‌ی ۹ نقطه‌ی روی تصویر بالا را نشان می‌دهد.

### ۳-۱۲-۲-اندیس میلر جهات

#### الف - سیستم‌های غیر هگزاگونالی

برای یافتن اندیس میلر جهات مراحل زیر را باید طی کرد:

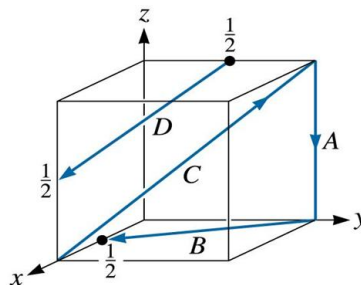
الف - یک دستگاه مختصاتی OXYZ دلخواه راست‌گرد انتخاب می‌کنیم.

ب - مختصات نقطه‌ی انتهای بردار جهت را از مختصات نقطه‌ی ابتدا کم می‌کنیم.

پ - در صورتی که اعداد حاصله عدد کسری باشند آن‌ها را به کوچک‌ترین عدد صحیح تبدیل می‌کنیم.

ت - اعداد به‌دست آمده را در علامت کروش [ ] قرار می‌دهیم.

**مثال:** در شکل زیر اندیس میلر جهات نشان داده شده را تعیین کنید:



**حل:**

جهت A:

$$\vec{A} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{vmatrix}$$

پس اندیس میلر جهت A به صورت  $[00\bar{1}]$  است.

جهت B:

$$\vec{B} = \begin{vmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

از آنجا که اعداد حاصله کسری هستند؛ آن‌ها را در کوچک‌ترین مضرب مشترک مخرج کسرها ضرب می‌کنیم؛ پس اعداد حاصله را در

۳ ضرب می‌کنیم؛ اندیس میلر جهت B به صورت  $[2\bar{1}0]$  است.

س اندیس میلر جهت AB به صورت  $[\bar{1}01]$  است.

جهت C:

$$\vec{A} = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{vmatrix}$$

پس اندیس میلر جهت C به صورت  $[\bar{1}11]$  است.

جهت D:

$$E = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{vmatrix}, F = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix} \Rightarrow EF = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{vmatrix}$$

از آنجا که اعداد حاصله کسری هستند؛ آن‌ها را در کوچک‌ترین مضرب مشترک مخرج کسرها ضرب می‌کنیم؛ پس اعداد حاصله را در ۲ ضرب می‌کنیم؛ اندیس میلر جهت D به صورت  $[2 \bar{1} \bar{1}]$  است.

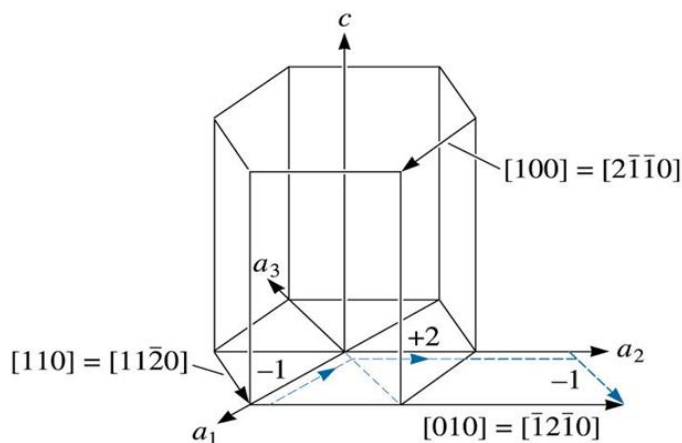
تذکره:

۱- جهت  $[h \ k \ l]$  با جهت  $[nh \ nk \ nl]$  (صحیح و غیرصفر است) مشابه است.

۲- جهت  $[h \ k \ l]$  با جهت  $[\bar{h} \ \bar{k} \ \bar{l}]$  یکسان نیست. هرگز به سمت شرق رفتن مشابه به سمت غرب رفتن نیست!

### ب- اندیس میلر سیستم‌های شش‌گوش

اندیس میلر سیستم‌های هگزاگونال را می‌توان به دو روش سه‌اندیس و چهاراندیسی بیان کرد. مسئله‌ای که در بلورهای دارای تقارن شش‌گوش وجود دارد این است که بعضی از جهت‌های بلوری معادل، اندیس‌های مشابهی ندارند. با استفاده از سیستم مختصات چهارمحوری میلر-براوایس می‌توان بر این مشکل غلبه کرد (شکل ۱۸).



شکل ۱۸ سیستم محوره‌های مختصات برای سلول واحد شش‌گوش (روش میلر-براوایس) به همراه اندیس میلر سه‌تایی و چهارتایی چند جهت

هر سه محور  $a_1$ ،  $a_2$  و  $a_3$  در یک صفحه (که صفحه پایه نامیده می‌شود) و بازوهای  $120^\circ$  نسبت به هم، قرار دارند. محور Z بر این صفحه‌ی پایه عمود است. اندیس‌های جهت، که به روش توضیح داده شده در بالا به دست می‌آیند، با چهار اندیس مشخص می‌شوند و به صورت  $[uvtw]$  نشان داده می‌شوند. سه اندیس اول تصویر جهت بر روی سه محور  $a_1$ ،  $a_2$  و  $a_3$  در صفحه‌ی پایه است. در روش سه‌اندیسی محوره‌های  $a_1$ ،  $a_2$  و Z را در نظر می‌گیریم.



**تذکر:** برای یافتن اندیس میلر چهار تایی می‌توان ابتدا اندیس میلر سه تایی را یافت و با استفاده از روابط زیر آنها را اندسی میلر-براوایس چهار تایی تبدیل کرد.

**تذکر:** تبدیل سیستم سه اندیسی به سیستم چهار اندیسی ( $[u'v'w'] \rightarrow [uvw]$ ) با استفاده از روابط زیر انجام می‌شود:

$$u = \frac{n}{3}(2u' - v')$$

$$v = \frac{n}{3}(2v' - u')$$

$$t = -n(u + v)$$

$$w = nw'$$

در اینجا اندیس‌های با علامت پریم ( $'$ ) مربوط به روش سه اندیسی است و اندیس‌های بدون پریم مربوط به اندیس سیستم چهارتایی میلر-براوایس است. البته همانطور که در بالا ذکر شد، ممکن است ساده کردن اندیس‌ها به کوچک‌ترین عدد صحیح ممکن، لازم باشد. به همین خاطر یک ضریب  $n$  در روابط بالا در نظر گرفته شده است.

### تعریف دانسیته‌ی خطی:

$$LD = \frac{\text{تعداد اتم‌هایی که مرکز آن‌ها روی بردار جهت قرار دارد}}{\text{طول بردار جهت}}$$

**تذکر:** مبنای محاسبه یک سلول واحد است.

### تعریف فاکتور تراکم خطی:

$$LPF = \frac{\text{طول اتم‌هایی که مرکز آن‌ها روی بردار جهت قرار دارند}}{\text{طول بردار جهت}} = LD \times 2r$$

### ۳-۱۲-۳-اندیس میلر صفحات

#### الف - سیستم‌های غیر هگزاگونالی

برای یافتن اندیس میلر صفحات مراحل زیر را باید طی کرد:

الف - یک دستگاه مختصات  $xyz$  مناسب و راست‌گرد انتخاب می‌کنیم.

ب- حالا، یا صفحه‌ی بلوری با هر یک از محورها موازی است یا آن را قطع می‌کند. طول از مبدا تا محل برخورد صفحه تا محور بر حسب پارامترهای شبکه  $a$ ،  $b$  و  $c$  تعیین می‌شود.

پ- برعکس این اعداد را در نظر می‌گیریم. فاصله‌ی مبدا تا محل برخورد صفحه‌ای که با یک محور موازی باشد را می‌توان بی‌نهایت فرض کرد و بنابراین اندیس آن را صفر در نظر گرفت.

ت- در صورت لزوم، این اعداد را با ضرب یا تقسیم بر یک عامل مشترک<sup>۱</sup>، به کوچک‌ترین عدد صحیح ممکن، تبدیل کرد.

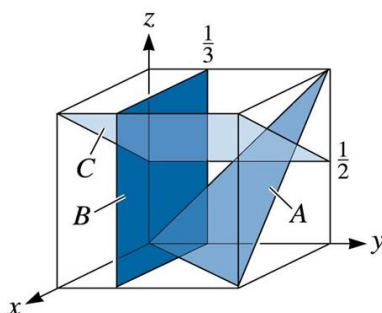
ث - نهایتاً، اندیس‌های صحیح، بدون استفاده از کاما در بین آن‌ها، در یک پرانتز نوشته می‌شوند:  $(hkl)$ .

محل برخورد با محورها در جهت منفی نسبت به مبدا، با علامت بار یا منها بر روی اندیس مربوطه مشخص می‌شود.

۱- گاهی، ساده کردن اندیس انجام نمی‌شود (مثلاً برای مطالعات پرتوی ایکس،  $(002)$  به  $(001)$  تبدیل نمی‌شود. علاوه بر این، برای مواد سرامیکی، آرایش یونی برای صفحات با اندیس ساده شده، ممکن است با صفحه‌ی با اندیس اصلی، تفاوت داشته باشد.

**تذکر:**

- ۱- در صورتی که صفحه از مبدا مختصات بگذرد، باید مبدا را به یک نقطه‌ی مناسب دیگر منتقل کرد.
  - ۲- گاهی اوقات با تغییر مبدا مختصات می‌توان آسانتر محل تقاطع صفحه به محورهای مختصات را پیدا کرد.
  - ۳- صفحه  $(hkl)$  با صفحه‌ی  $(nh\ nk\ nl)$  (  $n$  یک عدد صحیح و غیرصفر است) یکسان نیست.
  - ۴- برعکس کردن علامت‌های تمام اندیس‌ها، صفحه‌ی مشابهی با صفحه‌ی اول نشان می‌دهد که با فاصله‌ی مساوی در طرف دیگر مبدا قرار داشته و با صفحه‌ی اولی موازی است.
  - ۵- در شبکه‌های مکعبی اندیس جهت نرمال صفحه با اندیس میلر صفحه یکسان است.
- مثال:** اندیس میلر صفحات نشان داده شده را در کریستال مکعبی زیر تعیین کنید:



**حل:**

اندیس میلر صفحه A:

از آنجایی که این صفحه از مبدا مختصات می‌گذرد، پس باید مبدا مختصات را به یک نقطه جدید منتقل کرد. برای راحتی کار مبدا را به نقطه  $(0\ 1\ 0)$  منتقل می‌کنیم. در این حالت داریم:

	محور $x$ جدید	محور $y$ جدید	محور $z$ جدید
محل برخورد با محورها	۱	-۱	۱
عکس اعداد فوق	۱	-۱	۱
تبدیل به عدد صحیح	۱	-۱	۱

پس اندیس میلر این صفحه به صورت  $(\bar{1}\bar{1}1)$  است.

اندیس میلر صفحه B:

	محور $x$	محور $y$	محور $z$
محل برخورد با محورها	$\infty$	$\frac{1}{3}$	$\infty$
عکس اعداد فوق	۰	۳	۰
تبدیل به عدد صحیح	۰	۳	۰

پس اندیس میلر این صفحه به صورت  $(030)$  است.

اندیس میلر صفحه C:

از آنجایی که این صفحه نقاط برخورد محورها مختصات فعلی نیاز به امتداد دادن صفحه و استفاده از روابط هندسی می‌باشد،

برای راحتی کار مبدا را به نقطه  $(\frac{1}{2}\ 1\ 1)$  منتقل می‌کنیم. در این حالت داریم:

	محور $x$ جدید	محور $y$ جدید	محور $z$ جدید
محل برخورد با محورها	$-\frac{1}{2}$	$\infty$	$\frac{1}{2}$
عکس اعداد فوق	$-2$	$0$	$2$
تبدیل به عدد صحیح	$-2$	$0$	$2$

پس اندیس میلر این صفحه به صورت  $(\bar{2} 0 2)$  است.

### ب- اندیس میلر صفحه در سیستم‌های هگزاگونال

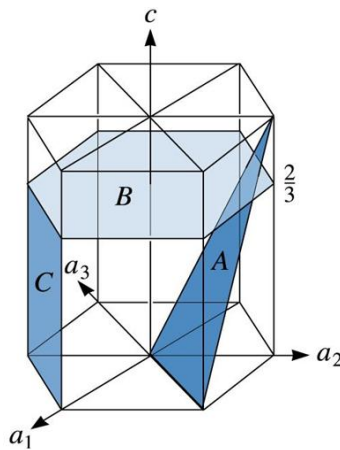
اندیس میلر صفحات در سیستم‌های هگزاگونال را به روش چهار اندیسی بیان می‌کنند. مراحل شبیه مراحل پیدا کردن اندیس میلر صفحات در سیستم‌های غیرهگزاگونالی است. در این حالت بین اندیس‌ها میلر صفحه  $(hkil)$  رابطه زیر برقرار است:

$$i = -(h + k)$$

تذکر: بنابراین برای تعیین اندیس میلر کافی است از سه اندیس اول، ۲ اندیس را مشخص کرد.

### مثال:

اندیس میلر صفحات نشان داده شده در زیر را تعیین کنید.



### حل:

اندیس میلر-براهه صفحه A:

صفحه‌ی A از مبدا مختصات می‌گذرد، بنابراین مبدا را به یک نقطه‌ی جدید مثلاً نقطه‌ی  $(010)$  منتقل می‌کنیم و محورهای مختصات را در این نقطه برپا می‌کنیم. در این حالت صفحه‌ی A محور  $a_1$  را در مختصات ۱، محور  $a_2$  را در مختصات  $-1$  و با محور  $a_3$  موازی است و محور C را در مختصات ۱ قطع می‌کند. با عکس کردن اعداد حاصل، اندیس میلر-براهه این صفحه به صورت  $(1\bar{1}01)$  خواهد بود.

اندیس میلر-براهه صفحه B:

صفحه‌ی B با محورهای  $a_1$ ،  $a_2$  و  $a_3$  موازی است و محور C را در مختصات  $\frac{2}{3}$  قطع می‌کند. با عکس کردن اعداد حاصل و ضرب آنها

در ۳ اندیس میلر-براهه این صفحه به صورت  $(0006)$  خواهد بود.

اندیس میلر-براهه صفحه C:

صفحه‌ی C محور  $a_1$  را در مختصات ۱، محور  $a_2$  را در مختصات ۱- و با محور  $a_3$  و C موازی است. با عکس کردن اعداد حاصل، اندیس میلر-براهه این صفحه به صورت  $(1\bar{1}00)$  خواهد بود.

**تعریف دانسیته‌ی صفحه‌ای:**

$$PD = \frac{\text{تعداد اتم‌هایی که مرکز آن‌ها روی صفحه قرار دارد}}{\text{طول بردار جهت}}$$

تذکر: مبنای محاسبه یک سلول واحد است.

**تعریف فاکتور تراکم صفحه‌ای:**

$$PPF = \frac{\text{مساحت اتم‌هایی که مرکز آن‌ها روی صفحه قرار دارند}}{\text{طول بردار جهت}} = PD \times \pi r^2$$

تذکر: جدول زیر جهات و صفحات فشرده در شبکه‌های کریستالی مرسوم را نشان می‌دهد:

Structure	Directions	Planes
SC	$\langle 100 \rangle$	None
BCC	$\langle 111 \rangle$	None
FCC	$\langle 110 \rangle$	{111}
HCP	$\langle 100 \rangle, \langle 110 \rangle$ or $\langle 11\bar{2}0 \rangle$	(0001), (0002)

## فصل چهارم

### عیوب کریستالی

عیوب کریستالی را می توان براساس ابعاد آنها به ۴ دسته تقسیم کرد:

۱- عیوب صفر بعدی (عیوب نقطه‌ای): برای مثال جاهای خالی و اتم‌های محلول.

۲- عیوب یک بعدی (خطی): نابجایی‌ها

۳- عیوب دو بعدی (صفحه‌ای): مرزدانه‌ها، نقص در چیده شدن و دو قلوبی.

۴- عیوب سه بعدی (حجمی): آخال، حفره، مک.

با کنترل عیوب کریستالی می توان خواص ماده را کنترل کرد.

#### ۱-۴- عیوب نقطه‌ای

شکل ۱ انواع عیوب نقطه‌ای را نشان می‌دهد.

#### ۱-۱-۴- عیب جالی خالی

۱- به یک مکان تعادلی خالی، جای خالی گویند (شکل ۱-الف)

۲- عیوب جای خالی می تواند در حین فرایند انجماد، تغییر فرم پلاستیک، صعود نابجایی‌ها و یا در اثر تشعشعات اتمی به وجود آید.

۳- جاهای خالی از نوع عیوب تعادلی در ماده هستند بدین معنی که از نظر ترمودینامیکی همواره باید یک غلظت تعادلی جای خالی در ماده وجود داشته باشد.

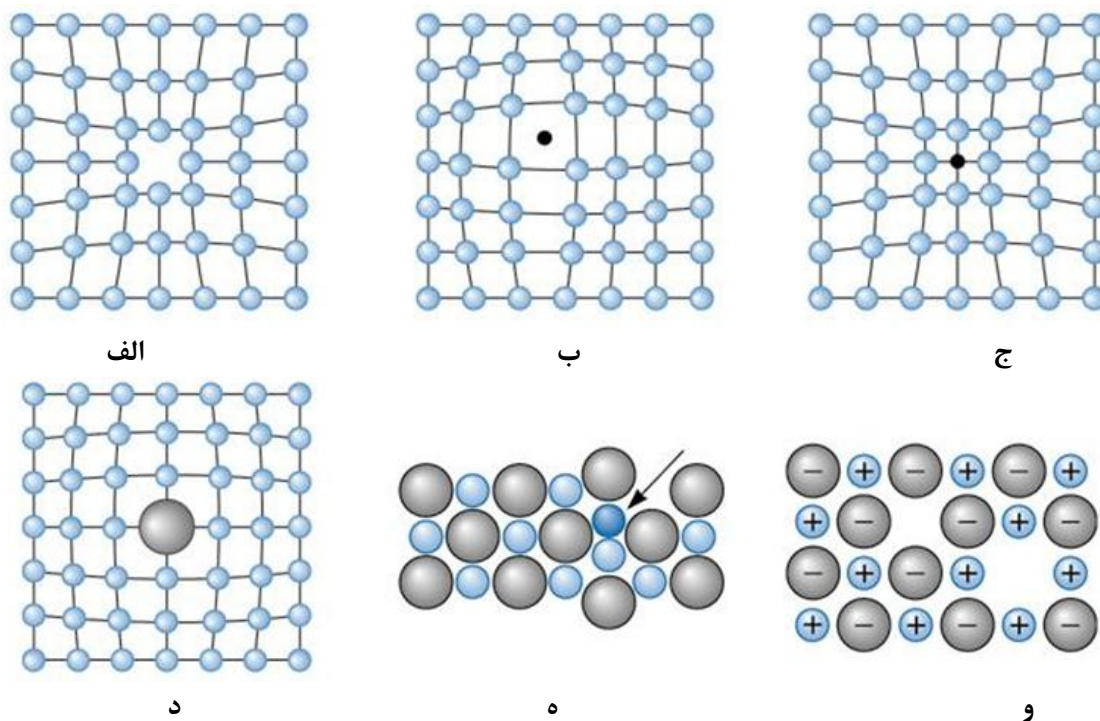
۴- غلظت تعادلی جای خالی در هر دما از رابطه آرینوسی زیر پیروی می کند:

$$N = N_0 \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right)$$

که در آن:

$N$ : تعداد جای خالی در دمای  $T$

$N_0$ : تعداد اتم موجود در شبکه کریستالی در حالت کامل



شکل ۱- عیوب نقطه‌ای در کریستال‌ها: الف) جای خالی (ب) اتم بین نشین (ج) اتم جانشین با اندازه‌ی کوچکتر از اندازه‌ی اتم‌های میزبان (د) اتم جانشین با اندازه‌ی بزرگتر از اندازه‌ی اتم‌های میزبان (ه) عیب فرانکل (و) عیب شاتکی. همه‌ی عیوب موجب به هم خوردن نظم کریستالی و ایجاد اعوجاج در شبکه‌ی اتمی می‌شوند.

Q: انرژی لازم برای تشکیل ۱ مول جای خالی

R: ثابت گازها

T: دمای مطلق

تذکره: در صورتی که رابطه فوق به صورت  $N = N_0 \exp\left(\frac{-Q}{KT}\right)$  نوشته شود، Q انرژی لازم برای تشکیل یک جای خالی خواهد بود.

به نسبت  $\frac{N}{N_0}$  کسر جای خالی ( $n_v$ ) گفته می‌شود.

بنابراین با افزایش دما، کسر جاهای خالی به صورت نمایی افزایش می‌یابد.

۵- حضور جاهای خالی در شبکه کریستالی نقش مهمی در ضریب نفوذ ماده دارد.

#### ۴-۱-۲- اتم خودبین نشین:

۱- اتم خود بین نشین به اتمی گفته می‌شود که از جای خود در شبکه خارج شده و در یک مکان بین نشین قرار می‌گیرد.

۲- در فلزات حضور یک اتم خودبین نشین، منجر به ایجاد اعوجاج نسبتاً زیادی در شبکه می‌شود زیرا اندازه اتم به طور قابل توجهی بیشتر از امکان بین نشین است. بنابراین تشکیل این عیب زیاد محتمل نیست.

## ۴-۱-۳- عیب فرانکل:

- ۱- این عیب در مواد یونی رخ می دهد.
- ۲- عیب فرانکل به یک جفت کاتیون- جای خالی و کاتیون- بین نشین گفته می شود. در واقع عیب فرانکل با ترک کردن یک کاتیون از مکان معمولی خود در شبکه و قرارگیری آن در یک مکان بین نشین تشکیل می شود (شکل ۱-۵).
- ۳- حضور عیب فرانکل موجب تغییر در بار الکتریکی ماده نمی شود.
- ۴- حضور عیب فرانکل در شبکه کریستالی، دانسیته ماده را تغییر نمی دهد.

## ۴-۱-۴- عیب شاتکی:

- ۱- این در مواد یونی رخ می دهد.
- ۲- در مواد یونی از نوع AX یک عیب شاتکی عبارتست از یک زوج جالی خالی کاتیون - جای خالی آنیون. در واقع عیب شاتکی با خروج یک کاتیون و یک آنیون از شبکه کریستالی تشکیل می شود (شکل ۱-۶).
- ۳- در مواد یونی AX<sub>2</sub> عیب شاتکی عبارتست از دو جای خالی آنیون و یک جای خالی کاتیون. در واقع عیب شاتکی در اثر خروج یک یون کاتیون A<sup>+2</sup> و دو آنیون X<sup>-1</sup> رخ می دهد. بدین وسیله تعادل بار الکتریکی در شبکه کریستالی نیز تغییر نمی کند.
- ۴- حضور عیب شاتکی در شبکه کریستالی، دانسیته ماده را کاهش می دهد.

## ۴-۱-۵- اتم‌های ناخالص:

افزودن اتم‌های ناخالص و یا اتم‌های میهمان به شبکه کریستالی عنصر میزبان بسته نوع ناخالص ها، غلظت آنها و دما می تواند منجر به تشکیل یک محلول جامد و یا یک فاز ثانویه جدید شود. در زیر به بررسی محلول جامد می پردازیم.

## ۴-۲- محلول جامد

- ۱- یک محلول جامد هنگامی تشکیل می شود که با افزودن عنصر حل شونده (اتم‌های عنصر میهمان) به عنصر میزبان با ساختار کریستالی حفظ شده و ساختار جدیدی تشکیل نشود.
- ۲- یک محلول جامد از نظر ترکیب شیمیایی همگن است و اتم‌های حل شونده به طور رندوم و یکنواخت در آن توزیع شده اند.
- ۳- افزودن عنصر حل شونده بیش از یک مقدار مشخص به یک عنصر منجر به تشکیل یک ساختار چند فازی می شود. به این مقدار مشخص، حد حلالیت گویند.
- ۴- بسته به محل قرارگیری اتم‌های میهمان در شبکه کریستالی اتم‌های میزبان، دو نوع محلول جامد تعریف می شود:
  - الف- محلول جامدهای جانشین: اتم‌های میهمان جایگزین اتم‌های میزبان می شود (شکل ۱-ج و ۱-د).
  - ب- محلول جامدهای بین نشین: اتم‌های میهمان بین اتم‌های میزبان در مکان‌های بین نشین قرار می گیرد (شکل ۱-ب).

## تذکر

- ۱- اتم‌های بین نشین دارای اندازه بسیار کوچکتری نسبت به اتم‌های میزبان هستند. عناصری که می توانند به طور بین نشین با عناصر دیگر محلول جامد تشکیل دهند عبارتند از: O, B, N, C.
- ۲- حد حلالیت محلول جامدهای بین نشین محدود است.

### ۴-۳- شرایط تشکیل محلول جامد کامل

قوانین هیوم- روتاری اصولی را برای پیش بینی محدوده حلالیت دو عنصر را ارائه می دهد:

(۱) **فاکتور اندازه اتمی:** فاکتور اندازه نسبی را به صورت زیر تعریف می شود:

$$\text{فاکتور اندازه نسبی} = \left| \frac{r_A - r_B}{r_A} \right| \times 100$$

$r_A$ : شعاع اتمی اتم میزبان

$r_B$ : شعاع اتمی اتم میهمان

هر چه مقدار این فاکتور کمتر باشد، حد حلالیت بیشتر خواهد بود.

در صورتی که مقدار نسبی اختلاف شعاع اتمی دو عنصر بیشتر ۱۴-۱۵٪ باشد، مقدار حلالیت در عنصر محدود خواهد بود.

در صورتی که مقدار نسبی اختلاف شعاع اتمی دو عنصر کمتر از ۸٪ باشد، احتمال تشکیل محلول جامد کامل یاد خواهد بود.

در صورتی که مقدار نسبی اختلاف شعاع اتمی دو عنصر بین این دو حد باشد، حلالیت متوسط خواهد بود.

(۲) **فاکتور ساختار کریستالی:** برای حلالیت بالای دو عنصر لازم است ساختار کریستالی مشابهی داشته باشند.

(۳) **اختلاف الکترونگاتیویته:** هر چه اختلاف الکترونگاتیویته بیشتر باشد تمایل به تشکیل ترکیب شیمیایی یا ترکیب بین فلزی

بیشتر خواهد بود.

(۴) **فاکتور ظرفیت نسبی:** دو عنصر با ظرفیت یکسان با تمایل بیشتری به تشکیل محلول جامد دارند.

در شرایطی که تمامی دیگر فاکتورها یکسان باشد با عناصر تمایل بیشتری به حل کردن عنصر با ظرفیت بالاتر از خود را دارند.

اهمیت فاکتورهای فوق از ۱ تا ۴ کاهش می یابد.

### ۴-۴- عیوب خطی:

مهمترین عیب خطی در شبکه‌های کریستالی، عیب نابجایی است.

۱- بسته به زاویه‌ی بین بردار برگرز (b) و بردار خط نابجایی (l) نوع نابجایی متفاوت خواهد بود:

الف- در صورتی که بردار برگرز بر بردار خط نابجایی عمود باشد، نابجایی از نوع لبه‌ای است.

ب- در صورتی که بردار برگرز با بردار خط نابجایی موازی باشد، نابجایی از نوع پیچی است.

پ- در صورتی که بردار برگرز و بردار خط نابجایی نه بر هم عمود باشند نه با هم موازی، نابجایی از نوع مختلط است.

۲- حضور نابجایی‌ها در شبکه‌ی کریستالی موجب تسهیل تغییر فرم پلاستیک می‌شود.

### ۴-۵- عیوب صفحه‌ای (فصل مشترکی)

عیوب فصل مشترکی مرزهای دو بعدی هستند که معمولاً مناطقی از ماده با ساختار کریستالی و/یا جهت گیری کریستالوگرافی

متفاوت را از هم جدا می کنند. این عیوب شامل سطوح خارجی ماده، مرز دانه‌ها، مرزهای دو قلویی، نقص‌های چیده شدن و مرزهای

فازی هستند.

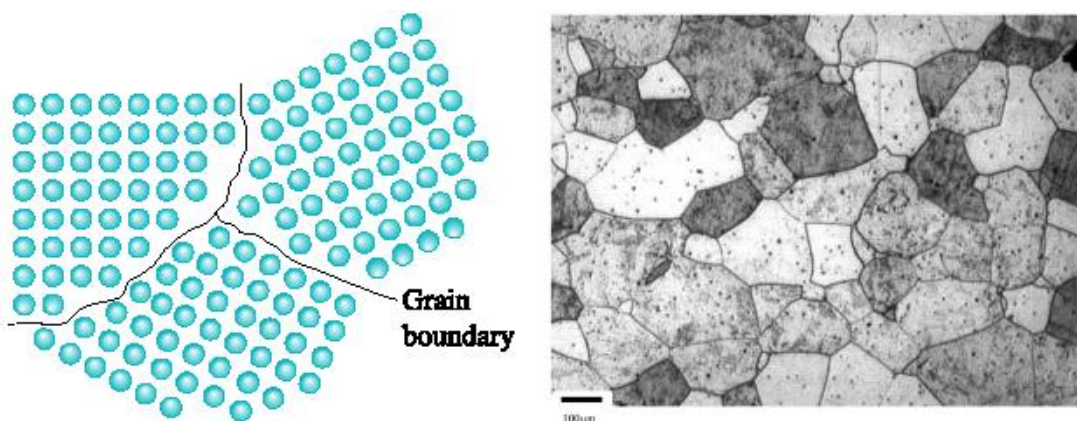


#### ۴-۶-سطوح خارجی:

اتم‌های سطحی نسبت به اتم‌های درون ماده دارای تعداد اتم‌های همسایه کمتر (تعداد پیوند اتمی کمتر) و بنابراین انرژی بیشتری هستند.

#### ۴-۷-مرز دانه:

مرز دانه محل تلاقی دو دانه با جهت گیری کریستالوگرافی متفاوت است. در دو طرف مرز دانه با ساختار کریستالی مشابه اما جهت گیری کریستالی متفاوت است. اتم‌ها در منطقه مرزی، نظم کریستالی مشخصی ندارند و فاصله اتم‌ها از مقدار تعادلی آنها انحراف دارد.



#### تذکر (برخی ویژگی‌های مرز دانه)

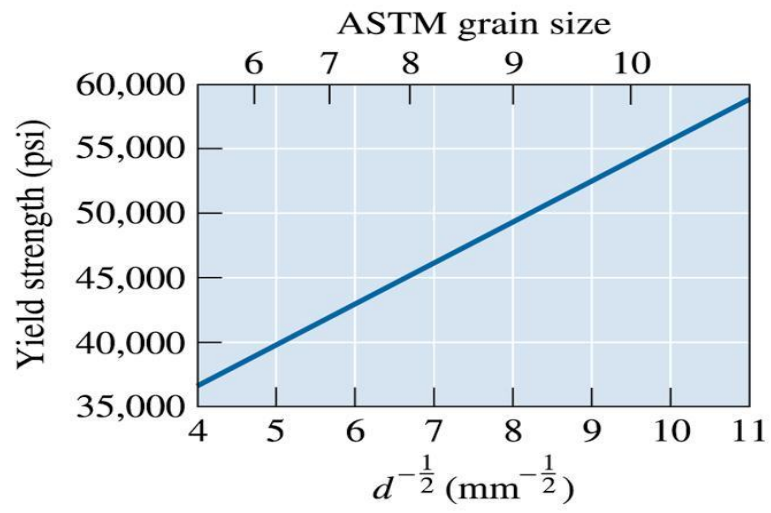
- ۱- مرز دانه محلی است پر انرژی.
- ۲- انرژی مرز دانه متناسب با اختلاف زاویه جهت گیری کریستالوگرافی دو دانه مجاور. هر چه اختلاف جهت گری بیشتر باشد با انرژی مرز دانه نیز بیشتر خواهد بود.
- ۳- مرز دانه‌ها به علت انرژی بالای خود با محل مناسبی برای جدایش اتم‌های ناخالصی هستند.
- ۴- مقاومت به خوردگی مرز دانه کمتر از مقاومت به خوردگی درون دامنه است.
- ۵- فاکور تراکم اتمی در مرز دانه کمتر از درون دانه است.

**تذکر:** اندازه دانه یکی از مهمترین پارامترهای کنترل کننده خواص مکانیکی مواد است:

- ۱- استحکام تسلیم مواد پلی کریستال با کاهش اندازه دانه افزایش می‌یابد. رابطه‌ی هال-پیچ

$$\sigma_y = \sigma_0 + Kd^{-1/2}$$

- ۲- چقرمگی شکست مواد با کاهش اندازه دانه بهبود می‌یابد.
- ۳- ریزدانه کردن یکی از تنها مکانیزم‌هایی است که منجر به افزایش هم‌زمان استحکام و چقرمگی می‌شود.
- ۴- آهنگ خزشی مواد، هنگامی که خزش نفوذی حاکم است، با کاهش اندازه دانه افزایش می‌یابد.



#### ۴-۸-عیوب حجمی:

حفره، تخلخلی، ترک، آخال و فازهای ثانویه جزء عیوب حجمی محسوب می شود.

## فصل پنجم

### دیاگرام‌های فاز

دیاگرام‌های فاز یکی از مهمترین ابزارهای مهندسی مواد است، زیرا یکی از مهمترین عوامل کنترل کننده خواص مواد، ماهیت و مقدار فازهای تشکیل دهنده آنهاست.

تعریف: یک آلیاژ فلزی مخلوطی از یک فلز با دیگر فلزات یا غیر فلزات است.

برای مثال با مخلوط کردن و ذوب کردن Zn, Cu آلیاژ برنج تولید می شود. مخلوط کردن اکسید منیزیم (MgO) و آلومینا ( $Al_2O_3$ ) به نسبت یکسان، آلیاژ اسپینل را تشکیل می دهد.

تعریف: اجزاء یک آلیاژ عناصر شیمیایی تشکیل دهنده آلیاژ هستند.

در برنج با اجزاء Zn, Cu هستند. در اسپینل، O, Al, Mg هستند.

**تذکره:** اجزاء یک آلیاژ را با حروف بزرگ انگلیسی نشان می دهند.

**تعریف:** فاز قسمتی از سیستم می باشد که:

۱- در سرتاسر آن آرایش اتمی یکسان باشد.

۲- خواص فیزیکی و شیمیایی در سرتاسر آن یکسان باشد.

۳- مرز مشخصی با اطراف خود داشته باشد.

#### ۵-۱- قانون گیبس

تعداد فازهای در حال تعادل با هم را می توان توسط رابطه زیر بیان کرد:

$$F=C-P+2$$

که در آن:

C = تعداد اجزاء

P = تعداد فازهای در حال تعادل

F = درجه آزادی یا تعداد متغیرهای حالت مستقل آزاد

**تذکره:** در صورتی که متغیر فشار ثابت باشد (که برای سیستم‌های جامد معمولی است) قانون گیبس به صورت  $F=C-P+1$  در می آید.

**تذکره:** درجه آزادی مقدار متغیرهایی مثل دما، فشار یا ترکیب شیمیایی است که می توانند به طور مستقل تغییر کنند. اما تغییری در تعداد فازهای در حال تعادل به وجد نیاید.

**تذکره:** متغیرهای مستقل

۱- در سیستم تک جزئی:  $P, T$

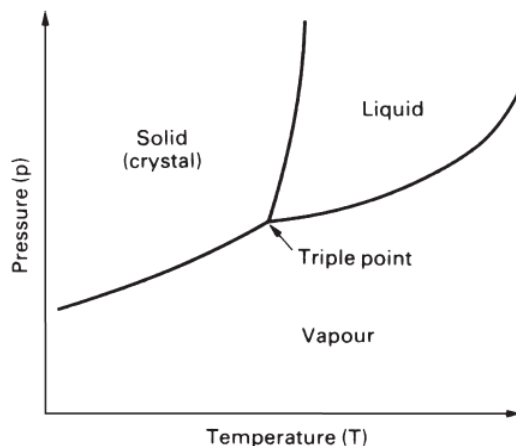
۲- در سیستم دو جزئی  $X_B, P, T$  (ترکیب شیمیایی عنصر B)

۳- در سیستم‌های سه جزئی:  $X_C, X_B, P, T$

۴- در سیستم‌های چهار جزئی:  $X_D, X_C, X_B, T, P$

### ۲-۵- دیاگرام‌های فازی تک جزئی

دیاگرام فازی سیستم‌های تک جزئی، تغییرات فازی بر حسب دما و فشار را نشان می دهند. شکل (۱) دیاگرام فازی عنصری که فقط یک فاز جامد دارد را نشان می دهد.



شکل ۱- دیاگرام دیاگرام فازی تک جزئی عنصری که فقط یک فاز جامد دارد..

**تذکره:**

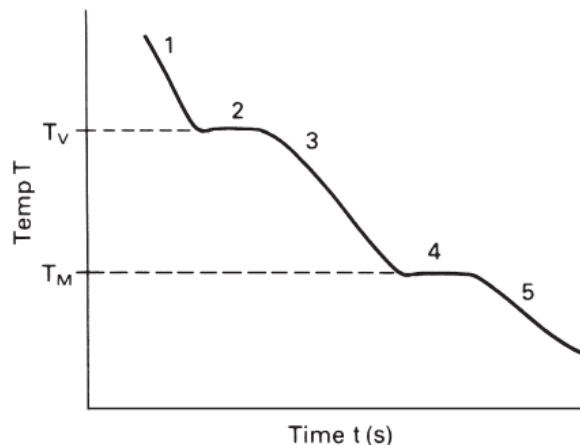
۱- مرز فازی جامد و مایع، تغییرات نقطه ذوب با فشار را نشان می دهد. نقطه ذوب استاندارد، نقطه ذوب در فشار ۱ اتمسفر است.

۲- مرز فازی مایع و بخار تغییرات نقطه جوش با فشار را نشان می دهد. نقطه جوش استاندارد، نقطه جوش در فشار ۱ اتمسفر است.

۳- مرز فازی جامد و بخار تغییرات نقطه تصعید با فشار را نشان می دهد.

۴- در نقطه سه گانه، سه فاز جامد، مایع و بخار در حالت تعادلند.

اگر در فشار ثابت به یک سیستم تک جزئی اجازه سرد شدن داده شود، منحنی تغییرات دما بر حسب زمان (منحنی سرد شدن) به صورت شکل (۲) خواهد بود.



شکل ۲- منحنی سرد شدن عنصر جامدی که فقط یک فاز جامد دارد.

همان طور که ملاحظه می شود منحنی ۵ منطقه دارد.

۱- بخار ، ۲- تغییر فاز از بخار به مایع (مذاب) ، ۳- مایع (مذاب) ، ۴- تغییر فاز از مایع (مذاب) به جامد ، ۵- جامد سیستم در مناطق 1, 3, 5 تک فاز است. تغییرات فازی در دماهای متناظر با مناطق 2, 4 رخ می دهد. هنگامی که یک استحاله فازی رخ می دهد با گرمای پنهان استحاله آزاد می شود (حین سرد شدن) یا جذب می شود (حین گرم کردن). به همین علت دما حین استحاله تقریباً ثابت مانده و سرد شدن فقط هنگامی ادامه می یابد که استحاله کامل شود. قسمت‌های ثابت منحنی سرد شدن بیانگر وقوع استحاله‌های فازی می باشد.

### ۵-۳- معیارهای بیان غلظت و ترکیب شیمیایی:

در اینجا پیش از پرداختن به دیاگرام های فازی دوتایی، ابتدا به روش های بیان غلظت و ترکیب شیمیایی می پردازیم:

#### ۱- درصد وزنی

$$(\% \text{ wt}) = \frac{m_B}{m_A + m_B} \times 100$$

که در آن:  $m_B, m_A$  به ترتیب جرم عنصر A و جرم عنصر B در کل آلیاژ است.

#### ۲- درصد اتمی

$$(\% \text{ at})_B = \frac{\text{تعداد اتم های B}}{\text{تعداد اتم های A} + \text{تعداد اتم های B}} \times 100 = (\% \text{ at}) = \frac{n_B}{n_A + n_B} \times 100$$

که در آن  $n_B, n_A$  به ترتیب تعداد مول از عنصر A و تعداد مول از عنصر B در کل آلیاژ است.

**تذکره:** گاهی اوقات لازم است واحدهای غلظت را به هم تبدیل کنیم. با توجه به ارتباط بین تعداد مول و وزن ماده می توان ارتباط

یعنی درصد وزنی و درصد اتمی را به دست آورد:

$$(\% \text{ Wt})_B = \frac{(\% \text{ at})_B M_B}{(\% \text{ at})_A M_A + (\% \text{ at})_B M_B} \times 100$$

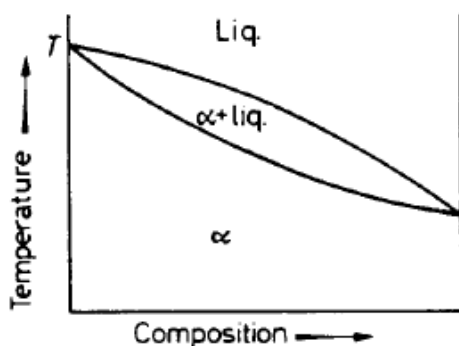
$$(\%at)_B = \frac{\frac{(\%wt)_B}{M_B}}{\frac{(\%wt)_A}{M_A} + \frac{(\%wt)_B}{M_B}} \times 100$$

### ۴-۵- دیاگرام های فازی دو تایی

در سیستم های دو جزئی متغیرهای حالت دما، فشار و ترکیب شیمیایی هستند. معمولاً در بررسی دیاگرام های فازی آلیاژها فشار را ثابت و برابر 1 atm در نظر می گیرند.

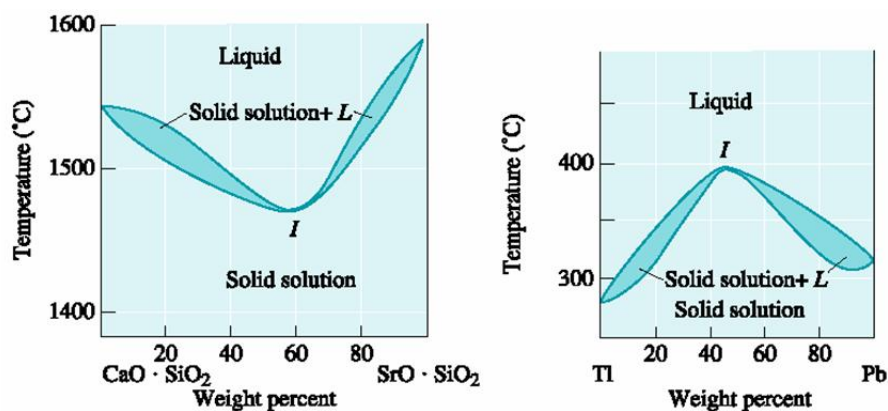
### ۱-۴-۵- دیاگرام فازی نوع اول - حلالیت کامل در حالت مذاب و حالت جامد

قوانین هیوم - روتاری شرایط تشکیل محلول جامد کامل را بیان می کند. بسیاری از سیستم های آلیاژی فلزی (همانند Ni-Cu) و سیستم های سرامیکی (مانند MgO-NiO) تشکیل محلول جامد کامل می دهند. دیاگرام فازی این سیستم های آلیاژی به طور شماتیک مشابه شکل ۳ خواهد بود.



شکل ۳- دیاگرام فازی محلول جامد کامل

**تذکره:** در برخی شرایط خاص، دیاگرام های فازی آلیاژی که محلول جامد کامل تشکیل می دهند، دارای مینیوم و ماکزیمم هستند. به شکل ۴ توجه کنید. در نقطه ی مینیوم یا ماکزیمم رفتار ذوب و انجماد آلیاژ مشابه یک فلز خالص است.



شکل ۴- دیاگرام های فازی محلول جامد که دارای مینیوم و ماکزیمم هستند.

### ۵-۴-۲-اطلاعات قابل استخراج از دیاگرام‌های فازی

**تذکر:** دیاگرام‌های فازی فقط اطلاعات ترمودینامیکی در مورد تعادل فازها به ما می‌دهند و هیچ نوع اطلاعات سینتیکی به ما نمی‌دهد.

#### (۱) اطلاعات در مورد ذوب و انجماد

۱. فرایند ذوب و انجماد در عناصر خالص در یک نقطه مشخص رخ می‌دهد.
۲. بر خلاف فلزات خالص، آلیاژها معمولاً در یک محدوده دمایی منجمد و یا ذوب می‌شوند.
۳. به منحنی که در دماهای بالاتر از آن فقط فاز مذاب پایدار است، منحنی لیکدوس گفته می‌شود و به منحنی که در دماهای پائین تر از آن فقط فاز جامد پایدار است منحنی سالیدوس گفته می‌شود.
۴. دمای لیکدوس ( $T_L$ ) دمای شروع انجماد و دمای پایان ذوب شدن یک آلیاژ است و دمای سالیدوس ( $T_S$ ) دمای پایان انجماد و دمای شروع ذوب شدن یک آلیاژ است.
۵. دامنه انجماد یا برد انجماد یک آلیاژ برابر است با:  $\Delta T_S = T_L - T_S$
۶.  $\Delta T_S$  وابسته به ترکیب شیمیایی یک آلیاژ است.
۷. هر چه  $\Delta T_S$  کمتر باشد احتمال تشکیل ریز تخلخلی‌های بین دندریتی کاهش می‌یابد.

#### (۲) اطلاعات در مورد فازهای موجود

##### الف- تعداد و نوع فازها

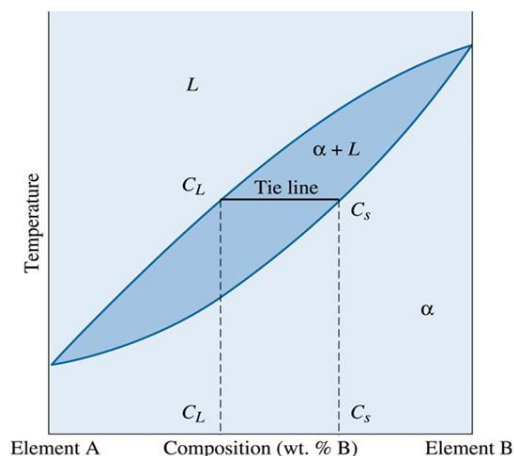
با مشخص کردن نقطه آلیاژ یعنی ترکیب شیمیایی و دمای مورد نظر روی منحنی با منطقه فازی آلیاژ مشخص می‌شود.

##### ب- ترکیب شیمیایی فازهای موجود

**قدم اول:** ابتدا نقطه آلیاژ (ترکیب شیمیایی و دما) روی دیاگرام فازی مشخص شود.

##### قدم دوم:

- الف- اگر در منطقه تک فازی باشیم، ترکیب شیمیایی فاز برابر است با ترکیب شیمیایی آلیاژ.
- ب- اگر در منطقه دو فازی باشیم، یک خط افقی گذرنده از نقطه آلیاژ رسم می‌کنیم، به این خط Tie-Line یا خط رابط گفته می‌شود. سپس محل تقاطع این خط با مرزهای فازی را مشخص می‌کنیم. ترکیب شیمیایی متناظر با محل تقاطع، ترکیب شیمیایی فاز مربوطه است. به شکل ۵ توجه کنید.



شکل ۵-روش پیدا کردن ترکیب شیمیایی فازهای موجود در منطقه‌ی دوفازی

**پ- مقدار نسبی فازهای موجود**

قدم اول: ابتدا نقطه آلیاژ را روی دیاگرام فازی مشخص می‌کنیم.

قدم دوم: الف- اگر در منطقه تک فازی باشیم، درصد وزنی نسبی فاز در آلیاژ برابر با ۱۰۰٪ خواهد بود.

ب- در صورتی که در منطقه دو فازی باشیم:

(۱) ابتدا Line-Tie مورد نظر را رسم می‌کنیم.

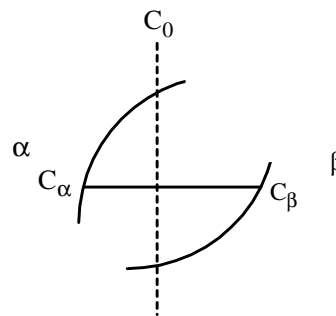
(۲) از قانون اهرم استفاده می‌کنیم:

با توجه به شکل ۶ در یک منطقه دو فازی روابط زیر برقرار است:

$$W_{\alpha} = \frac{C_{\beta} - C_0}{C_{\beta} - C_{\alpha}} \times 100$$

$$W_{\beta} = \frac{C_0 - C_{\alpha}}{C_{\beta} - C_{\alpha}} \times 100$$

$$W_{\alpha} + W_{\beta} = 100$$



شکل ۶- قانون اهرم

**۵-۵- ریز ساختار یک آلیاژ**

بسیاری از خواص آلیاژها وابسته به ریز ساختار آنها است. برای تعیین ریز ساختار یک آلیاژ موارد زیر باید تعیین شود:

۱- اطلاعات قابل استخراج از دیاگرام های فازی:

- تعداد و ماهیت فازهای موجود

- ترکیب شیمیایی فازهای موجود

- درصد نسبی فازهای موجود

۲- اطلاعات وابسته به سینتیک استحاله های فازی، نحوه عملیات حرارتی و یا عملیات های حرارتی - مکانیکی:

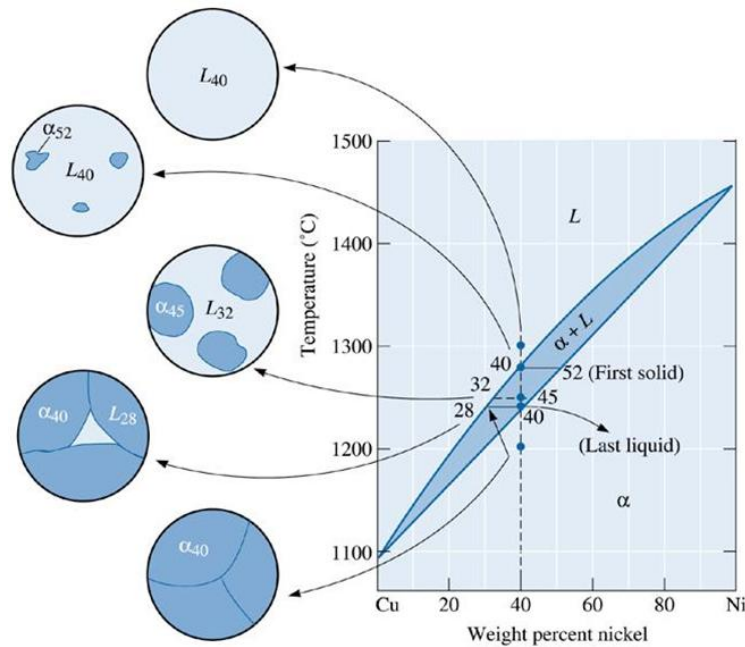
- شکل و اندازه دانه ها

- شکل و اندازه و نحوه توزیع فازهای موجود

**۵-۶- انجماد یک آلیاژ محلول جامد**

برای توضیح تحولات ریز ساختاری حین انجماد تعالی آلیاژهای محلول جامد به مثال زیر توجه کنید. وقتی یک آلیاژ برای مثال Cu-40Ni ذوب شده و سرد می‌شود، فرایند انجماد نیازمند جوانه زنی هسته های جامد اولیه و رشد آنهاست. جوانه زنی هتروژن منجر به این امر خواهد شد که تحت انجماد بسیار کمی برای شروع انجماد نیاز باشد. بنابراین انجماد آلیاژ با رسیدن دمای مذاب به دمای لیکدوس آغاز می‌شود. (دیاگرام فازی شکل ۷) و تای لاین رسم شده در دمای لیکدوس بیانگر این مطلب است که ترکیب شیمیایی «اولین جامد که تشکیل می‌شود» برابر Cu-52Ni است.

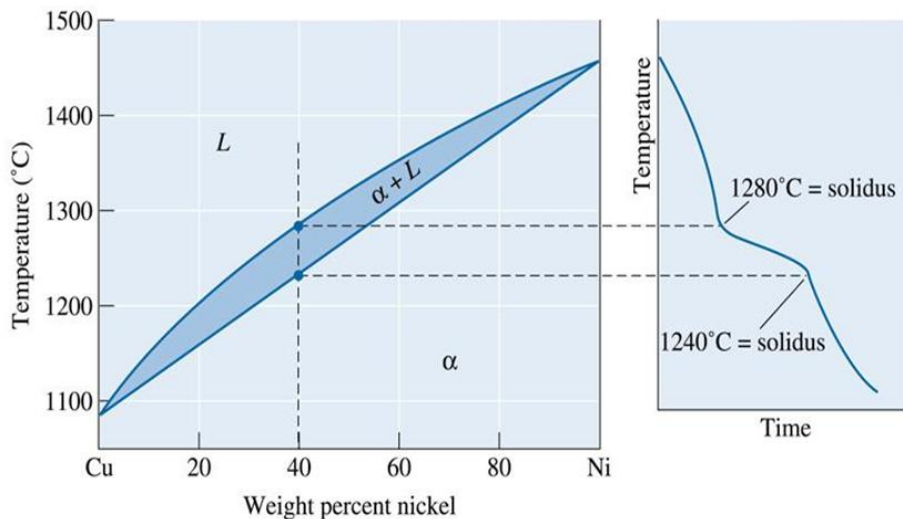




شکل ۷- تغییرات ترکیب شیمیایی و ریزساختار حین انجماد تعادلی یک آلیاژ محلول جامد

برای رشد جامد  $\alpha$  دو شرط لازم است:

- (۱) رشد نیازمند این است که گرمای نهان ذوب ( $\Delta H_f$ ) از فصل مشترک جامد - مذاب خارج شود.
  - (۲) بر خلاف انجماد فلزات خالص، انجماد آلیاژ باید «نفوذ اتمی» رخ دهد به گونه ای که حین سرد شدن ترکیب شیمیایی فازهای جامد و مذاب طبق منحنی های لیکدوس و سالیدوس تعادلی تغییر کند.
- گرمای نهان ذوب در محدوده دمایی انجماد از مذاب خارج می‌شود و منحنی سرد شدن آلیاژها بر خلاف عناصر خالص یک تغییر در شیب نشان می‌دهد (شکل ۸)



شکل ۸- نمودار سرد شدن یک آلیاژ محلول جامد و ارتباط آن با دیاگرام فازی

در ابتدای سرد کردن مذاب آلیاژهای حاوی Cu-40Ni است و اولین جامدی که منجمد می‌شود دارای Cu-52Ni است. اتم‌های نیکل باید به اولین هسته جامد نفوذ کرده تا اولین هسته جامد شود. اما پس از سرد کردن تا دمای  $1250^{\circ}\text{C}$  فرایند انجماد به پیش رفته و دیگرام فازی به ما می‌گوید که در این دما فاز مذاب باید حاوی 32% Ni و فاز جامد باید حاوی 45% Ni باشد. با سرد کردن از دمای لیکدوس به دمای  $1250^{\circ}\text{C}$  با برخی اتم‌های نیکل باید از اولین هسته جامد تشکیل شده به طرف جامد جدید نفوذ کنند و بدین ترتیب غلظت نیکل در اولین جامد را کاهش دهد. اتم‌های نیکل اضافی از مذاب در حال انجماد به طرف جامد جدید نفوذ می‌کنند. به این طریق، اتم‌های مس به دمای سالیدوس می‌رسد، جایی که آخرین مذاب که باید منجمد شود. و حاوی Cu-28Ni است، منجمد شود و به یک جامد ترکیب Cu-40Ni را تشکیل دهد. درست زیر دمای سالیدوس، تمام جامد دارای یک ترکیب شیمیایی یکنواخت برابر Cu-40Ni در سرتاسر خود خواهد بود.

### تذکره:

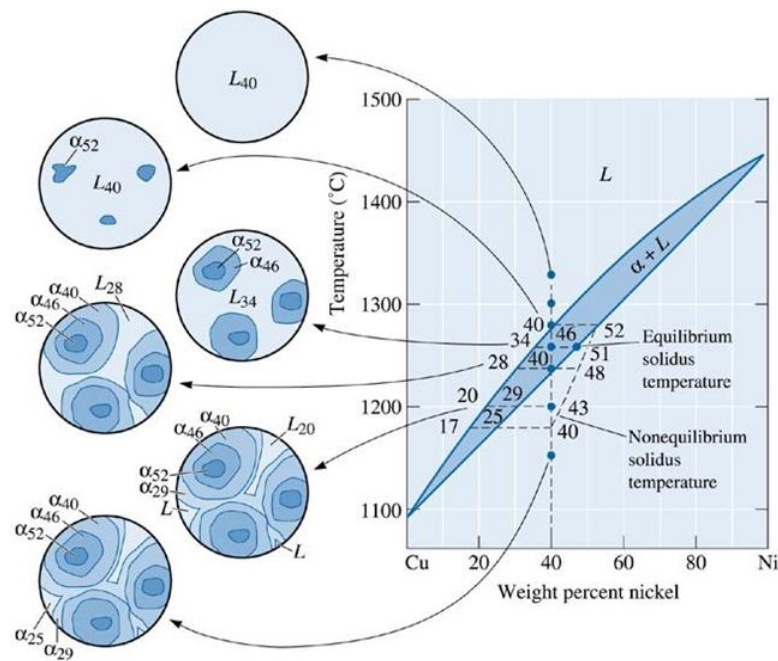
- ۱) هنگام سرد کردن تعادل، ترکیب شیمیایی سرتاسر آلیاژ پس از انجماد برابر خواهد بود با ترکیب شیمیایی مذاب اولیه.
- ۲) برای رسیدن به ساختار تعادلی، سرعت سرد شدن باید بسیار آهسته باشد.

### ۵-۷-انجماد غیر تعادلی آلیاژهای محلول جامد

هنگامی که سرعت سرد شدن بالا باشد، زمان کافی برای نفوذ اتمی وجود نخواهد داشت بنابراین ترکیب شیمیایی فازهای تشکیل شونده حین انجماد از دیگرام فازی تعادلی تبعیت نخواهد کرد. در بسیاری از فرایندهای ریختگری کلی ما انتظار تشکیل ساختارهای غیر تعادلی را خواهیم داشت.

اجازه دهید انجماد آلیاژ Cu-40Ni را این بار در شرایط غیر تعادلی بررسی کنیم.

دوباره اولین جامدی که منجمد شود، 52% Ni دارد (شکل ۹). با سرد کردن تا دمای  $1260^{\circ}\text{C}$  تای لاین به ما می‌گوید که فاز مذاب در این دما حاوی 34% Ni و فاز جامد در این دما حاوی 46% Ni است. از آن جایی که نفوذ در حالت مذاب به سرعت رخ می‌دهد، انتظار داریم که خط تای لاین با دقت بالایی ترکیب شیمیایی مذاب را پیش بینی کند. اما، نفوذ در جامدات نسبتاً آهسته صورت می‌گیرد. اولین جامدی که تشکیل می‌شود 52% Ni دارد اما جامد جدید فقط شامل 46% Ni است. می‌توانیم میانگین ترکیب شیمیایی جامد را 51% Ni در نظر بگیریم و در واقع می‌توان یک خط سالیدوس جدید تعریف کرد. با ارائه انجماد، خط سالیدوس غیر تعادلی از سالیدوس تعادلی بیشتر جدا می‌شود. هنگامی که دما به دمای  $1240^{\circ}\text{C}$  (دمای سالیدوس تعادلی) می‌رسد، مقدار قابل توجهی مذاب باقی مانده است. فاز مذاب به طور کامل منجمد نمی‌شود تا زمانی که مذاب تا دمای  $1180^{\circ}\text{C}$  سرد شود. در این دما سالیدوس غیر تعادلی ترکیب شیمیایی اولیه آلیاژ Cu-40Ni را قطع می‌کند. آخرین مذابی که منجمد می‌شود حاوی 17% Ni است و آخرین جامدی که منجمد می‌شود حاوی 25% Ni است. میانگین ترکیب شیمیایی کل آلیاژ 40% Ni است اما ترکیب شیمیایی یکنواخت نیست.

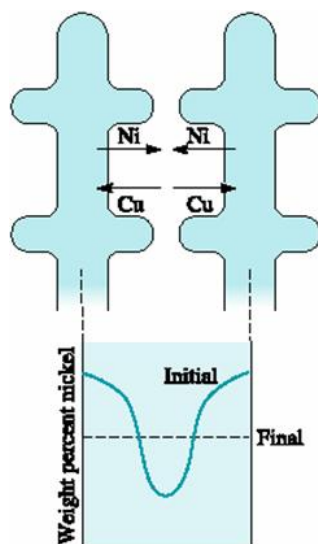


شکل ۹- تغییرات ترکیب شیمیایی و ریزساختار حین انجماد تعادلی یک آلیاژ محلول جامد

به طور خلاصه:

- ۱- حین سرد کردن غیر تعادلی، منحنی لیکدوسبا تقریب خوبی، ترکیب شیمیایی مذاب را پیش بینی می کند اما منحنی سالیدوس به سمت بالاتر عنصر با دمای ذوب بالاتر جابجا می شود. میزان جابجا شدن منحنی سالیدوس تابع نرخ سرد شدن است.
- ۲- دامنه انجماد تغییر تعادلی گسترده تر از دامنه انجماد تعادلی است. دمای پائین انجماد در شرایط غیر تعادلی کمتر از سالیدوس تعادلی است.
- ۳- در شرایط سرد غیر تعادلی ترکیب شیمیایی نقاط مختلف دامنه ثابت نیست و یک گرادیان ترکیب شیمیایی بین مراکز دانه و مرز دانه وجود دارد. مرکز دانه از عنصر با دمای ذوب بالاتر، غنی می شود و مرز دانه از عنصر با دمای ذوب کمتر غنی می شود.

**تذکره:** در رشد دندریتی مرکز دندریت از عنصر با دمای ذوب بالا غنی شده و فضای بین دندریتی از عنصر با دمای ذوب کمتر غنی می شود (شکل ۱۰). به این پدیده میکرو جدایش یا جدایش بین دندریتی یا پدیده Coring (مغزه بندی شدن) گفته می شود.



شکل ۱۰- ریزجدایش بین دندریتی ناشی از انجماد غیرتعادلی، مرکز مناطق بین دندریتی از عنصر با دمای ذوب پایین‌تر ( در این مورد مس نسبت به نیکل) غنی است.

### تذکره:

- ۱- خواص ماده به علت ناهمگنی ترکیب شیمیایی ناشی از جدایش تحت تاثیر قرار می‌گیرد.
- ۲- در هنگام عملیات حرارتی در دماهای پائین تر از دمای سالییدوس تعادلی اما بالاتر از دمای سالییدوس غیر تعادلی، ذوب بین دندریتی خواهیم داشت. به این پدیده Hot shortness گویند.

**تذکره:** برای کاهش جدایش بین دندریتی می‌توان از عملیات حرارتی همگن سازی استفاده کرد. زمان لازم برای همگن سازی یک قطعه ریختگی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد.

$$t = C \frac{\lambda^2}{4D_s}$$

که در آن:

$\lambda$ : فاصله بین دندریت های ثانویه

$D_s$ : ضریب نفوذ عنصر حل شونده در زمینه

C: یک ثابت

با کاهش  $\lambda$  و افزایش دمای عملیات همگن سازی می‌توان زمان لازم برای همگن سازی را کاهش داد.

**تذکره:** دمای عملیات همگن سازی به دمای سالییدوس غیر تعادلی محدود می‌شود.

### ۵-۸- خواص آلیاژهای محلول جامد

طبق مکانیزم محلول جامد استحکام با افزودن عنصر حل شونده افزایش می‌یابد. درجه یا میزان استحکام دهی به روش محلول جامد به دو فاکتور زیر وابسته است.

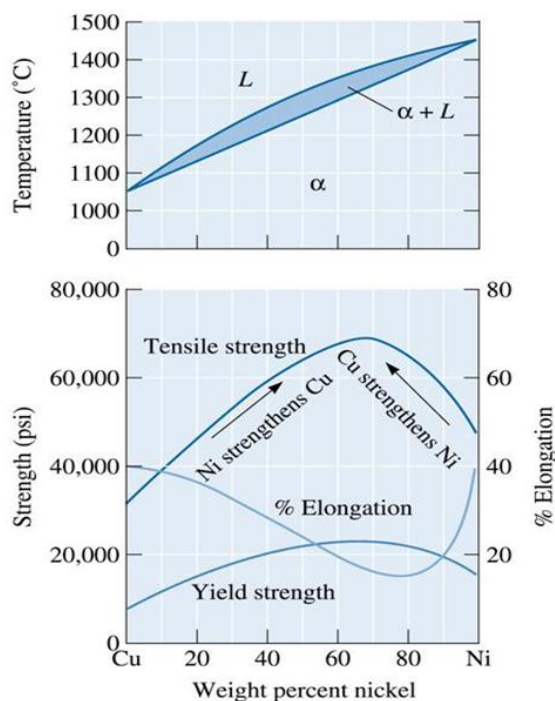
- (۱) فاکتور اندازه نسبی بین عنصر میهمان و میزبان. هر چه فاکتور اندازه نسبی بیشتر باشد، اعوجاج شبکه کریستالی عنصر میزبان بیشتر و در نتیجه حرکت نابجایی ها مشکل تر و استحکام بالاتر خواهد بود.

۲) درصد عنصر حل شونده: هر چه مقدار عنصر حل شونده بیشتر باشد میزان استحکام دهی بیشتر می‌شود. میزان افزایش استحکام با افزایش درصد عنصر حل شونده معمولاً به صورت رابطه  $\Delta\sigma = K\sqrt{C}$  است.

### تذکره: (ارتباط بین دیاگرام فازی و خواص مکانیکی)

به طور کلی در آلیاژهای محلول جامد کامل، ماکزیمم استحکام در ترکیب A-50B رخ می‌دهد زیرا در این حالت کرنش شبکه ماکزیمم است. اما در عمل ماکزیمم استحکام از این ترکیب انحراف دارد. معمولاً محل ماکزیمم استحکام به سمت عنصری که در حالت خالص استحکام بیشتری دارد، جابجا می‌شود.

شکل ۱۱ ارتباط بین دیاگرام فازی و خواص مکانیکی را برای آلیاژهای Cu-Ni نشان می‌دهد.



شکل ۱۱- ارتباط بین خواص مکانیکی و دیاگرام فازی برای آلیاژهای محلول جامد Cu-Ni

### تذکره: (تأثیر مکانیزم استحکام دهی محلول جامد بر خواص)

- ۱- استحکام تسلیم و استحکام کششی آلیاژ افزایش می‌یابد.
- ۲- در اکثر موارد شکل پذیری آلیاژها کاهش می‌یابد.
- ۳- رسانایی الکتریکی کاهش می‌یابد زیرا عناصر محلول جامد منجر به پراکندگی الکترون در شبکه می‌شوند.
- ۴- مقاومت به خزش یا مقاومت به کاهش استحکام در دماهای بالا بهبود می‌یابد.

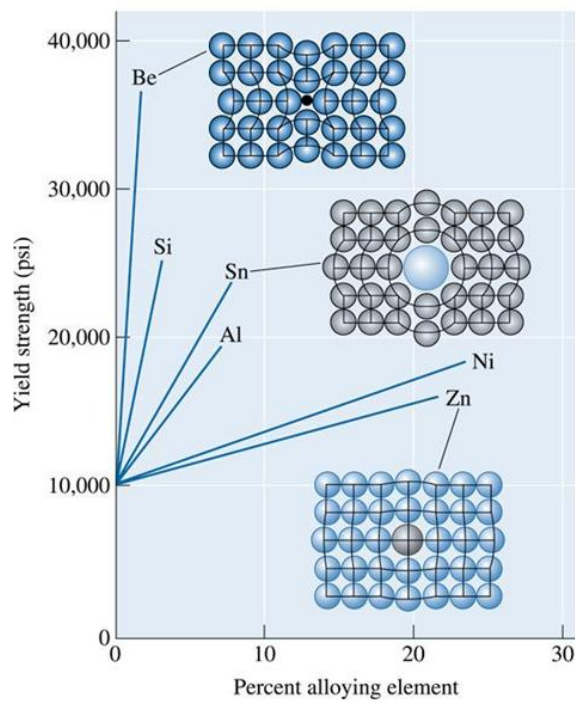
**مثال:** با توجه به جدول زیر افزودن کدام عنصر به مس خالص، استحکام را بیشتر افزایش می‌دهد:

عنصر	Cu	Zn	Al	Sn	Ni	Si	Be
شعاع اتمی (Å°)	1.278	1.332	1.432	1.509	1.243	1.176	1.143

**حل:** برای پاسخ باید فاکتور اندازه نسبی را محاسبه کرد:

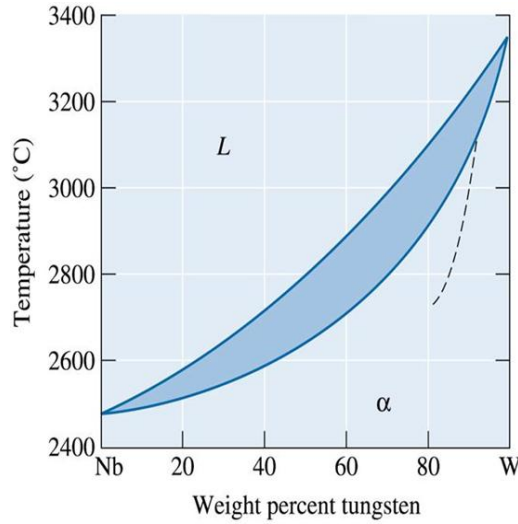
فلز	$\frac{r - r_{Cu}}{r_{Cu}} \times 100$
Zn	+4.2
Al	+12.1
Sn	+18.1
Ni	-2.7
Si	-8
Be	-10.6

برای تمام های بزرگتر از مس، با افزایش فاکتور اندازه نسبی، میزان استحکام دهی افزایش می‌یابد و برای اتم های کوچکتر از مس نیز با افزایش فاکتور اندازه نسبی میزان استحکام دهی افزایش می‌یابد. به شکل ۱۲ توجه کنید.



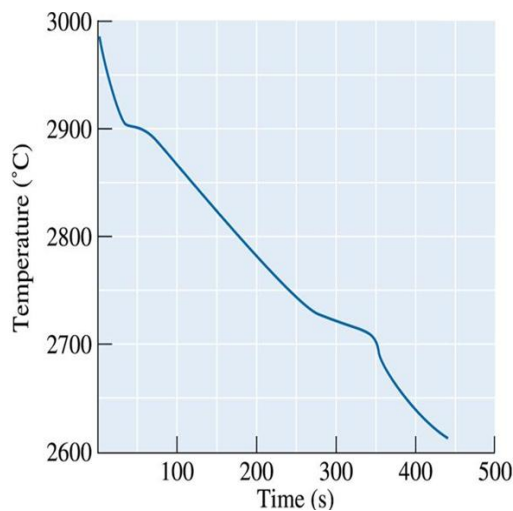
شکل ۱۲-تاثیر عناصر آلیاژی مختلف بر استحکام مس

**مثال:** با توجه به دیاگرام فازی Nb-W (شکل ۱۳) به سئوالات زیر پاسخ دهید.



شکل ۱۳- دیاگرام فازی Nb-W

- ۱) فرض کنید 12-kg از آلیاژ Nb-40%wtW در دمای  $2800^{\circ}\text{C}$  نگه داشته شده است چه مقدار تنگستن می‌توان به مذاب اضافه کرد بدون آن که هیچ جامدی تشکیل نشده باشد؟ چه مقدار تنگستن باید به مذاب اضافه کرد تا تمام مذاب منجمد شود.
- ۲) یک کامپوزیت زمینه فلزی Nb با الیاف تقویت کننده W را در نظر بگیرید. کامپوزیت حاوی ۷۰٪ حجم تنگستن است. فرض کنید دمای کاری کامپوزیت برای چندین سال  $12600^{\circ}\text{C}$  باشد. چه اتفاقی برای کامپوزیت خواهد افتاد؟ چگالی تنگستن و چگالی نایبیوم است.
- ۳) منحنی سرد شدن یک آلیاژ Nb-W در شکل زیر رسم شده است. اولاً دمای لیکدوس و سالدوس این آلیاژ را تعیین کنید. ثانياً درصد نسبی فازهای موجود در دمای  $2800^{\circ}\text{C}$  را محاسبه کنید.



شکل ۱۴-منحنی سرد شدن یک آلیاژ از سیستم Nb-W

- ۴) در شرایط انجماد غیر تعادلی آلیاژ Nb-80%wt W ترکیب شیمیایی اولین و آخرین جامدی که تشکیل می‌شود و ترکیب شیمیایی آخرین مذابی که منجمد می‌شود را تعیین کنید.

### ۵-۹- واکنش های متالورژیکی سه جزئی:

جدول ۱ واکنش های سه جزئی را خلاصه کرده است.

به طور کلی واکنش های متالورژیکی را می توان به دو دسته کلی تقسیم کرد:

الف- واکنش های حالت مذاب: در این واکنش ها حداقل یک فاز مذاب شرکت دارد، برای مثال واکنش های یوتکتیک، پرتیکتیک، مونوتکتیک و ... این واکنش ها حین انجماد آلیاژ رخ می دهند.

ب- واکنش های حالت جامد: در این واکنش ها همه فازهای درگیر جامد هستند، برای مثال واکنش های یوتکتوئید، پرتیکتوئید و ...

جدول ۱- واکنش های سه جزئی به همراه نمای کلی آنها.

Eutectic-type reactions	Eutectic	$Liq \rightleftharpoons \alpha + \beta$		Al-Si, Pb-Sn, Cu-Ag Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> , Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -ZrO <sub>2</sub>
	Eutectoid	$\gamma \rightleftharpoons \alpha + \beta$		Fe-C, Cu-Zn
Peritectic-type reactions	Monotectic	$Liq_1 \rightleftharpoons \alpha + Liq_2$		Cu-Pb, Ag-Ni SiO <sub>2</sub> -CaO
	Peritectic	$\alpha + Liq \rightleftharpoons \beta$		Cu-Zn, Ag-Pt
	Peritectoid	$\alpha + \beta \rightleftharpoons \gamma$		Ag-Al
	Syntectic	$Liq_1 + Liq_2 \rightleftharpoons \alpha$		Na-Zn

**تذکر ۱:** واکنش های سه جزئی در یک دمای ثابت و در یک ترکیب ثابت رخ می دهند و درجه آزادی در این نقاط صفر است.

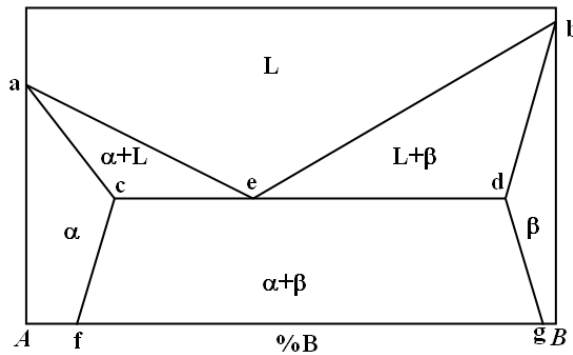
**تذکر ۲:** برای تشخیص نوع واکنش باید ابتدا خطوط افقی روی دیاگرام فازی را تعیین کرد (خطوط افقی بیانگر دمای استحاله های سه جزئی هستند). سپس فازهای موجود در بالا و پائین خط را تعیین کرد و واکنش را بنویسید و آن را با واکنش های موجود در جدول ۱ مقایسه کنید.

**تذکر ۳:** درجه آزادی در سیستم های آلیاژی دوتایی در شرایط فشار ثابت، در مناطق دوفازی ۲، در مناطق تک فازی ۱ و در نقطه ی واکنش سه جزئی صفر است.

### ۵-۱۰- واکنش یوتکتیک

دیاگرام فازی یک سیستم آلیاژی فرضی A-B که شامل یک واکنش یوتکتیک است را در نظر بگیرید (شکل ۱۶).





شکل ۱۶- دیاگرام فازی یک سیستم آلیاژی فرضی A-B که شامل یک واکنش یوتکتیک است ( دیاگرام یوتکتیکی ساده)

در این دیاگرام فازی:

$\alpha$ : محلول جامد B در A (غنی از A)

$\beta$ : محلول جامد A در B (غنی از B)

منحنی لیکدوس: aeb

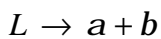
منحنی سالیدوس: acedb

خط حلالیت حالت جامد B در A: خط cf (مرز بین منطقه تکفازی  $\alpha$  و منطقه ۲ فازی  $\alpha + \beta$ )

خط حلالیت حالت جامد A و B: خط dg (مرز بین منطقه تکفازی  $\beta$  و منطقه دو فازی  $\alpha + \beta$ ).

**تذکره:** ماکزیمم حد حلالیت A در B و B در A در دمای یوتکتیک است.

نقطه‌ی e، نقطه‌ی یوتکتیک است که در آن واکنش زیر رخ می‌دهد:



**تذکره:**

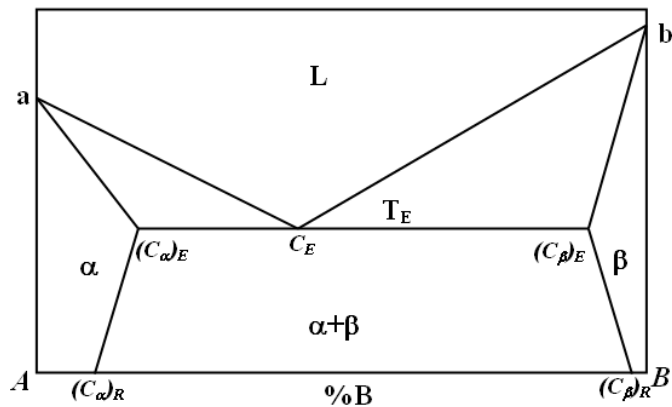
۱- دما و ترکیب شیمیایی نقطه یوتکتیک ثابت است.

۲- برد انجماد آلیاژ یوتکتیک صفر است.

۳- در یک سیستم یوتکتیکی آلیاژ یوتکتیک کمترین دمای لیکدوس را در بین تمام آلیاژهای آن سیستم دارد.

۴- به علت برد انجماد صفر و دمای ذوب پائین با آلیاژهای یوتکتیک قابلیت ریختگری مناسبی داشته و همچنین از جمله مناسبترین آلیاژها برای استفاده به عنوان ماده لحیم هستند.

**تذکر:** آلیاژهای موجود در یک سیستم آلیاژی یوتکتیک ساده را می توان به ۴ گروه تقسیم کرد. (به شکل ۱۷ توجه کنید).



شکل ۱۷- دیاگرام فازی یک سیستم یوتکتیکی ساده:  $C_E$  ترکیب شیمیایی نقطه یوتکتیک،  $(C_a)_E$  و  $(C_b)_E$  به ترتیب حد حلالیت B در A و A در B در دمای یوتکتیک،  $(C_a)_R$  و  $(C_b)_R$  به ترتیب حد حلالیت B در A و A در B در دمای اتاق است.

۱- آلیاژهای محلول جامد.

ریز ساختار آلیاژهای  $(C_a)_R < C_0 < 100$ ,  $0 < C_0 < (C_b)_R$  در دمای اتاق تکفاز است.

۲- آلیاژهایی که حد حلالیت را عبور کرده اند:

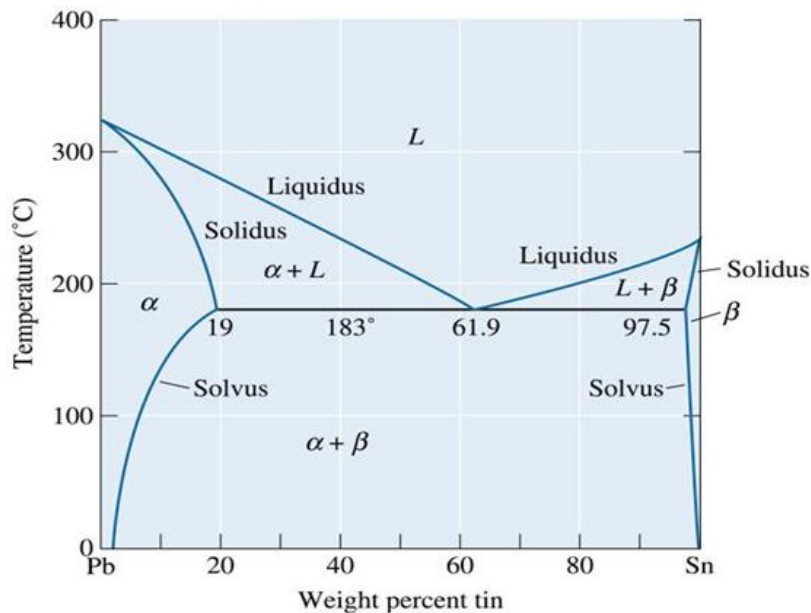
ریز ساختار آلیاژهای  $(C_a)_R < C_0 < (C_a)_E$ ,  $(C_b)_R < C_0 < (C_b)_E$  در دمای اتاق متشکل از یک فاز محلول جامد زمینه به همراه رسوباتی از ذرات فاز ثانویه است.

۳- آلیاژ یوتکتیک ( $C_0 = C_E$ )

۴- آلیاژهای هیپویوتکتیک ( $(C_\alpha)_E < C_0 < C_E$ ) و آلیاژهای هایپر یوتکتیک ( $C_E < C_0 < (C_b)_E$ ).

### ۱۱-۵- تحولات ریز ساختار در سیستم های آلیاژی شامل یوتکتیک:

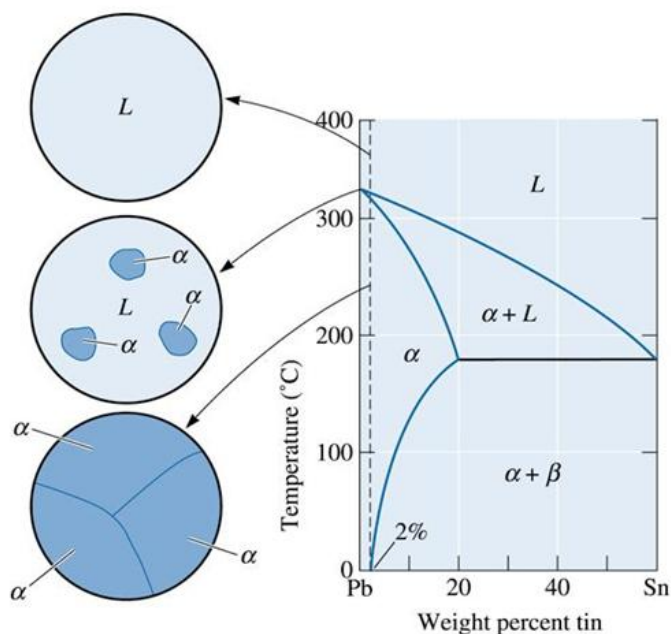
در اینجا به بررسی تحولات ریز ساختاری در ۴ گروه آلیاژی در سیستم Pb-Sn (شکل ۱۸) می پردازیم.



شکل ۱۸- دیاگرام فازی Pb-Sn

### الف- آلیاژهای محلول جامد

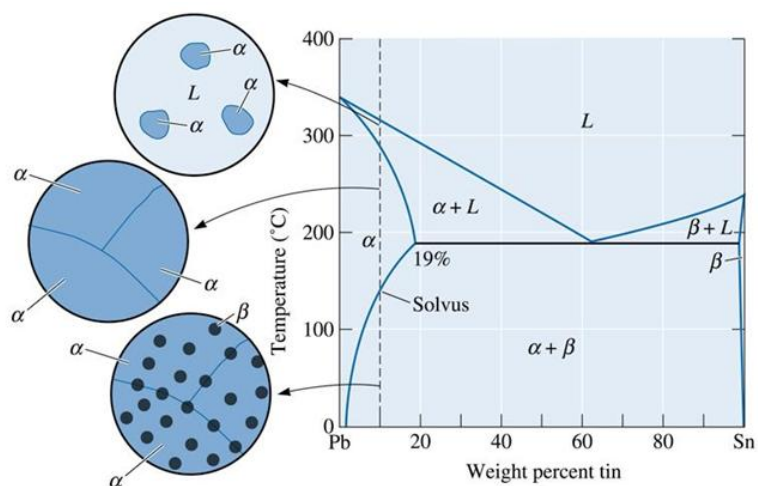
برای مثال آلیاژهای حاوی ۰ تا ۲٪ Sn را در نظر بگیرید. انجماد این آلیاژها مشابه دیگر آلیاژهای محلول جامد است. (شکل ۱۹)



شکل ۱۹- تحولات ریز ساختاری حین سرد شدن آلیاژهای محلول جامد در یک سیستم یوتکتیکی ساده

**ب- آلیاژهایی که هنگام سرد شدن خط حلالیت را قطع می کنند.**

برای مثال آلیاژهای حاوی ۲% تا ۱۹% Sn را در نظر بگیرید (شکل ۲۰) این آلیاژها نیز به صورت محلول جامد منجمد می شوند. اما با ادامه سرد شدن و با کاهش حد حلالیت Sn در Pb (مطابق خط حلالیت) هنگامی که خط حلالیت قطع می شود، رسوبات فاز  $\beta$  در اثر یک واکنش حالت جامد در فاز  $\alpha$  تشکیل می شوند.

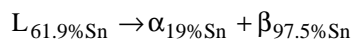


شکل ۲۰ - تحولات ریزساختاری حین سرد شدن آلیاژهایی که هنگام سرد شدن خط حلالیت را قطع میکنند.

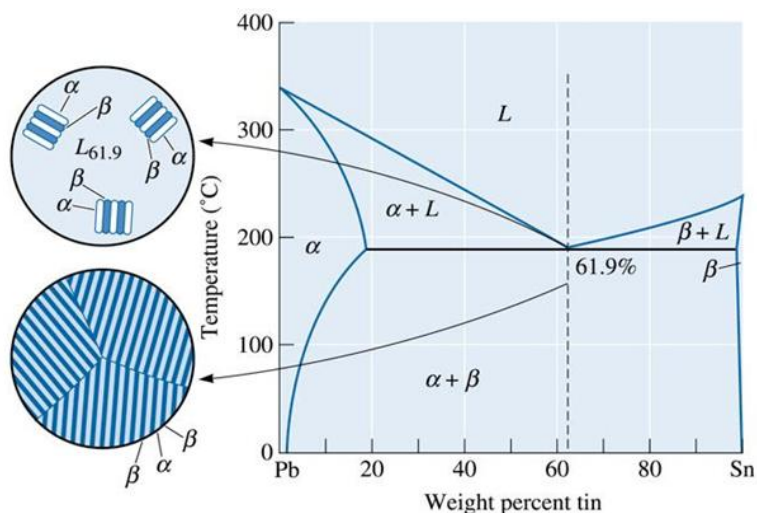
**ب- آلیاژ یوتکتیک**

آلیاژ Pb-61.9% Sn را در نظر بگیرید:

در دماهای بالای دمای یوتکتیک،  $183^{\circ}\text{C}$ ، مذابی با ترکیب شیمیایی Pb-61% Sn وجود دارد. با رسیدن به دمای یوتکتیک واکنش زیر آغاز می شود:



دو محلول جامد  $\alpha, \beta$  باید همزمان از مذاب منجمد شود. رشد یوتکتیک نیازمند استخراج حرارت نهان ذوب از فاز مذاب و توزیع مجدد دو نوع اتم متفاوت به وسیله نفوذ است.



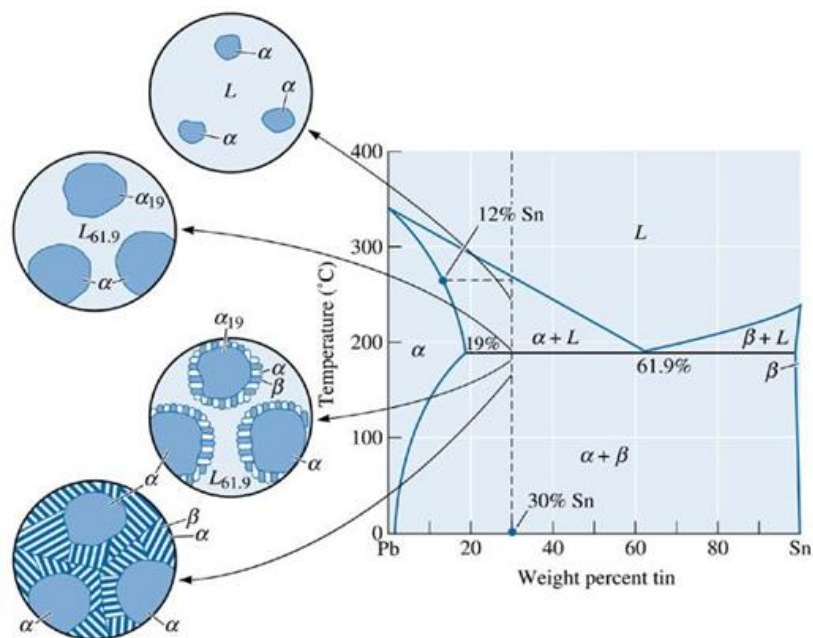
شکل ۲۱ - تحولات ریزساختاری حین انجماد یک آلیاژ یوتکتیکی

منحنی سرد شدن یک آلیاژ یوتکتیک مشابه منحنی سرد شدن یک فلز خالص است. از آن جایی ترکیب شیمیایی دو فاز جامدی که باید هنگامی سرد شدن زیر دمای یوتکتیک تشکیل شوند بسیار متفاوت با ترکیب شیمیایی مذاب یوتکتیک است پس انجماد نیازمند توزیع مجدد اتمی و نفوذ اتمی است. این امر موجب شکل‌گیری یک ریز ساختار مشخصه در بسیاری از آلیاژهای یوتکتیک می‌شود. فرض کنید ابتدا فاز  $\alpha$  با ترکیب  $Pb-19\% Sn$  از مذاب  $Pb-61.9\% Sn$  تشکیل شود. برای این کار، اتم‌های  $Sn$  در محل تشکیل فاز  $\alpha$  باید به اطراف نفوذ کرده و درصد  $Sn$  در آن منطقه را پائین بیاورند. این کار موجب افزایش غلظت  $Sn$  در مجاورت فاز  $\alpha$  می‌شود و بدین ترتیب شرایط برای تشکیل فاز  $\beta$  که غنی از  $Sn$  است ( $Pb-97.5\% Sn$ ) مهیا می‌شود. این فرآیند به همین ترتیب ادامه می‌یابد (شکل ۲۱)

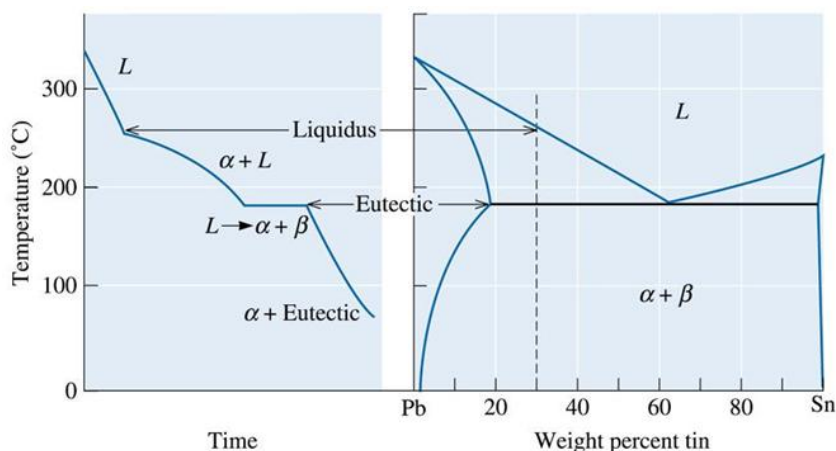
**تذکره:** به منظور افزایش سرعت واکنش و کوتاه شدت مسیر نفوذ اتمی ساختار بسیاری از آلیاژهای یوتکتیک لایه ای است.

### ت- آلیاژهای هیپوهایپروتکتیک

برای مثال تحولات ریز ساختاری یک آلیاژ هیپو یوتکتیک  $Pb-12\% Sn$  را در نظر بگیرید. با کاهش دما تا زیر دمای لیکدوس، ابتدا هسته‌های فاز  $\alpha$  جوانه زده و با کاهش بیشتر دما هم مقدار فاز  $\alpha$  و مذاب و هم ترکیب شیمیایی آنها تغییر می‌کند. درست پیش از دمای یوتکتیک هنوز مقداری فاز مذاب با ترکیب  $Pb-61.9\% Sn$  وجود دارد که با سرد کردن آلیاژ، درست زیر دمای یوتکتیک، مشابه یک آلیاژ یوتکتیک منجمد می‌شود. (شکل ۲۲). منحنی سرد شدن این آلیاژ در شکل ۲۳ نشان داده شده است.



شکل ۲۲- تحولات ریزساختاری حین انجماد یک آلیاژ هیپو یوتکتیکی



شکل ۲۳- منحنی سرد شدن یک آلیاژ هیپویوتکتیک و ارتباط آن با دیاگرام فازی

**تذکر ۱:** آنالیز فازی تمام آلیاژهایی که استحاله یوتکتیک را پشت سر می‌گذارند متشکل از دو فاز  $\alpha, \beta$  است. اما آلیاژهای هیپویوتکتیک شامل دو جزء ریز ساختاری فاز اولیه  $\alpha$  و جزء یوتکتیکی هستند و آلیاژهای هایپریوتکتیک شامل دو جزء ریز ساختاری فاز اولیه  $\beta$  و جزء یوتکتیکی هستند. آلیاژ یوتکتیک از یک جزء ریز ساختاری یوتکتیک تشکیل شده است.

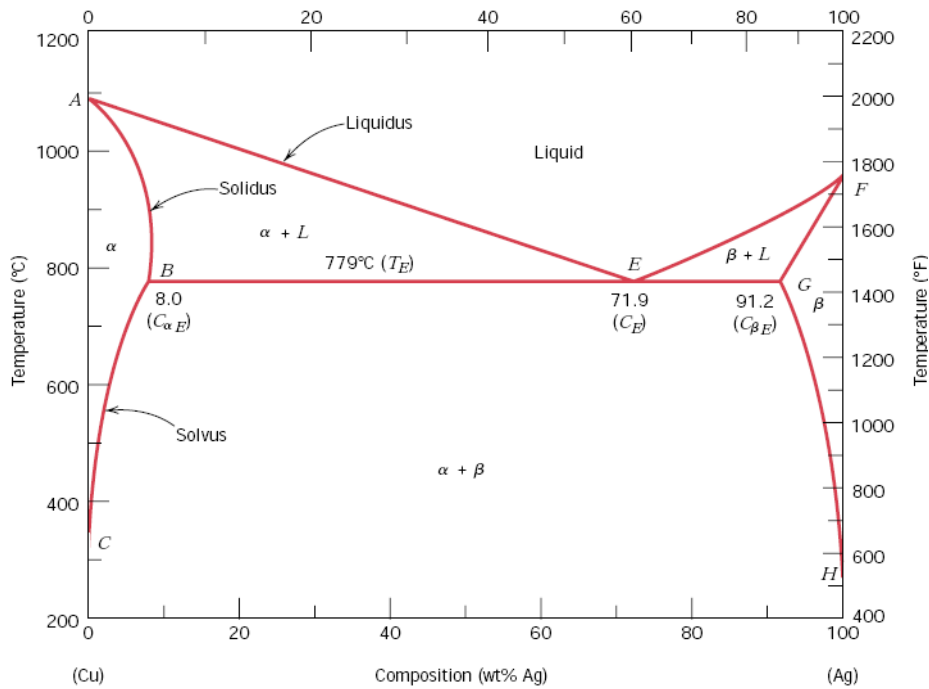
**تذکر ۲:** جزء ریز ساختاری یوتکتیک یک فاز نیست! بلکه متشکل از دو فاز است.

**تذکر ۳:** مقدار درصدی از کل آلیاژ که به صورت یوتکتیکی منجمد می‌شود برابر است با مقدار درصد مذابی که درست در بالای دمای یوتکتیک به ترکیب شیمیایی یوتکتیک رسیده است.

**تذکر ۴:** آلیاژهای یوتکتیکی همواره به صورت لابه ای منجمد نمی‌شوند.

**مثال:** با توجه به دیاگرام Ag-Cu در آلیاژ Ag-20% Cu مقادیر زیر را محاسبه کنید:

- ۱) درصد فازهای موجود درست در بالای دمای یوتکتیک
- ۲) درصد فازهای موجود درست در پائین دمای یوتکتیک
- ۳) درصد اجزای ریز ساختاری سازنده آلیاژ درست در پائین دمای یوتکتیک
- ۴) درصدی از آلیاژ که به صورت یوتکتیکی منجمد شده است.
- ۵) مقدار فاز  $\alpha$  حامل از واکنش یوتکتیکی



شکل ۲۴

حل:

(۱) یک تایی لاین درست در بالای دمای یوتکتیک رسم می‌کنیم، داریم:

$$\% \alpha = \frac{28.1 - 20}{28.1 - 8.8} \times 100 = 41.9\%$$

$$\% L = 100 - 41.9 = 58.1\%$$

(۲) یک تایی لاین درست در پائین دمای یوتکتیک رسم می‌کنیم، داریم:

$$\% \alpha = \frac{93 - 20}{93 - 8.8} \times 100 = 86.7\%$$

$$\% \beta = 100 - 86.7 = 13.3\%$$

آنالیز فازی آلیاژی درست در پائین دمای یوتکتیک به صورت فوق است.

۳ و ۴) ریز ساختار این آلیاژ هیپویوتکتیک متشکل از دو جزء ریز ساختاری  $\alpha$  اولیه و ساختار یوتکتیکی است.

درصد فاز جامد درست در بالای دمای یوتکتیک = درصد فاز اولیه منجمد شده پس

$$\% \alpha_p = 41.9\% = \text{درصد } \alpha \text{ ی اولیه}$$

درصد ساختار یوتکتیکی (یا قسمتی از آلیاژ که به صورت یوتکتیکی منجمد شده است) را می‌توان به دو روش محاسبه کرد:

**روش اول:** ساختار یوتکتیکی متشکل از  $\alpha$ ,  $\beta$  حاصل از واکنش یوتکتیک است.

$$\text{درصد ساختار یوتکتیکی} = \alpha_E + \beta_E$$

$$\alpha_E = \alpha_t - \alpha_p = \text{درصد فاز } \alpha \text{ درست پائین خط یوتکتیک}$$

$$\alpha_E = \text{درصد فاز } \alpha \text{ حاصل از واکنش یوتکتیک} = 86.7 - 41.9 = 44.8$$

$$\beta_E = \text{درصد فاز } \beta \text{ درست پائینی خط یوتکتیک} = 13.3\%$$

پس

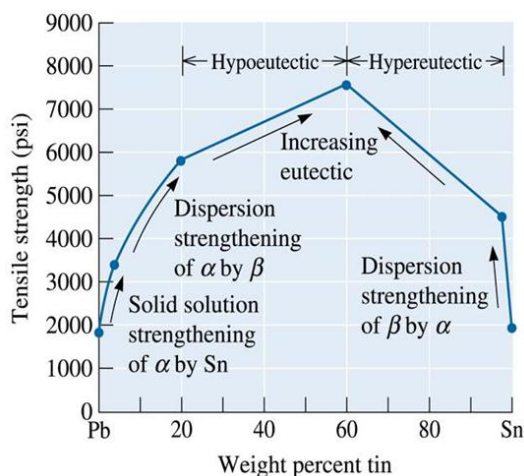
$$\alpha_E + \beta_E = 44.8 + 13.3 = 58.1\%$$

**روش دوم:** در واقع قسمتی از آلیاژ که درست بالای دمای یوتکتیک به ترکیب یوتکتیک رسیده است به صورت یوتکتیکی منجمد می شود. پس:

$$L = 58.1\% = \text{درصد ساختار یوتکتیکی}$$

### ۵-۱۲- تغییرات استحکام در یک سیستم آلیاژی یوتکتیکی ساده بر حسب ترکیب شیمیایی

شکل ۲۵ تغییرات استحکام کششی بر حسب ترکیب شیمیایی در یک سیستم یوتکتیکی ساده را نشان می دهد. چند نکته در مورد این دیاگرام حائز اهمیت است.



شکل ۲۵- تغییرات استحکام کششی بر حسب ترکیب شیمیایی در یک سیستم یوتکتیکی

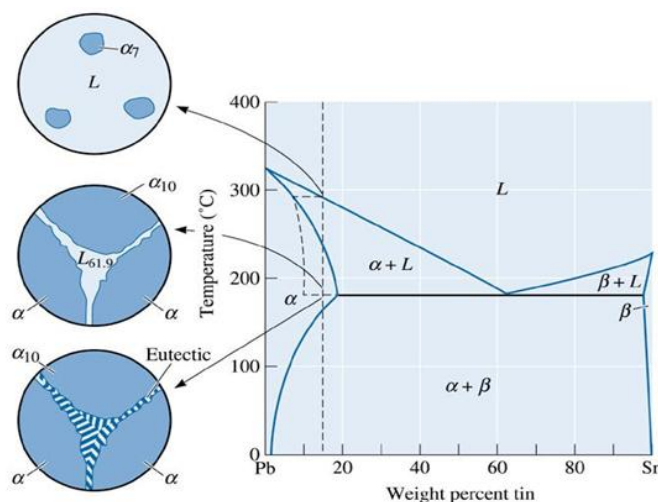
- ۱- تغییرات استحکام تسلیم با ترکیب شیمیایی ( $C_B$ %) در آلیاژهای محلول جامد معمولاً به صورت  $\sigma_{ys} = k\sqrt{C}$  است.
- ۲- استحکام آلیاژهای دو فازی از قانون مخلوطها پیروی می کند. برای مثال برای استحکام تسلیم داریم:
 
$$\sigma_{\text{alloy}} = \sigma_{\alpha} f_{\alpha} + \sigma_{\beta} f_{\beta}$$
 که در آن:  $\sigma_{\alpha}$ ,  $\sigma_{\beta}$  به ترتیب استحکام تسلیم فازهای  $\alpha$  و  $\beta$  هستند و  $f_{\alpha}$  و  $f_{\beta}$  به ترتیب کسر حجمی فازهای  $\alpha$  و  $\beta$  هستند.
- ۳- استحکام آلیاژهایی که از دو جزء زیر ساختاری تشکیل شده اند نیز از قانون مخلوطها پیروی می کند.
- ۴- هر چه درصدی ساختار یوتکتیکی در آلیاژهای که استحاله یوتکتیکی را پشت سر می گذارند بیشتر باشد با استحکام آلیاژ بیشتر است.
- ۵- بیشترین استحکام در یک سیستم یوتکتیکی ساده با استحکام آلیاژ یوتکتیک است. استحکام یک آلیاژ یوتکتیک به عوامل مختلفی همچون فاصله بین لایه ها و اندازه بسته های یوتکتیکی بستگی دارد. هر چه فاصله بین لایه ها و اندازه بسته های یوتکتیکی کمتر باشد. استحکام بیشتری می شود. با افزایش سرعت سرد شدن می توان این دو پارامتر را کاهش داد.



### ۵-۱۳- انجماد غیر تعادلی در سیستم‌های یوتکتیکی:

سرد شدن غیر تعادلی آلیاژهایی که در شرایط تعادلی استحاله یوتکتیکی را پشت سر نمی‌گذارند می‌تواند منجر به پشت سر گذاشتن این استحاله حین انجماد شود.

برای مثال آلیاژ Pb-15%Sn که در حالت عادی به صورت یک آلیاژ محلول جامد منجمد می‌شود را در نظر بگیرید. آخرین مذاب باید در دمای حدود  $230^{\circ}\text{C}$  (بالاتر از دمای یوتکتیک) منجمد شود. با این وجود، اگر آلیاژ سریعاً سرد شود یک منحنی سالیدوس تولید می‌شود (شکل ۲۶) فاز  $\alpha$  اولیه تا بالای دمای  $183^{\circ}\text{C}$  رشد می‌کند و در این دما مذاب غیر تعادلی باقیمانده حاوی 61.9% Sn خواهد بود.



شکل ۲۶- تحولات ریزساختاری حین انجماد غیر تعادلی آلیاژ Pb-15%Sn

بنابراین این مذاب به ساختار یوتکتیکی منجمد می‌شود. با توجه به شکل، مقدار یوتکتیک غیر تعادلی در این شرایط برابر است با:

$$\% \text{ یوتکتیک} = \frac{15 - 10}{61.9 - 10} \times 100 = 9.6\%$$

### تذکره: در انجماد غیر تعادلی در این شرایط

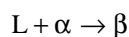
$$(1) \Delta T_s \text{ افزایش می‌یابد.}$$

(۲) دمای سالیدوس آلیاژ به دمای یوتکتیک کاهش می‌یابد؛ بنابراین دمای عملیات حرارتی حالت جامد کاهش می‌یابد.

(۳) مذاب انتهایی به ساختار یوتکتیکی تبدیل می‌شود. بنابراین ساختار یوتکتیکی در مرز دانه به صورت پیوسته تشکیل می‌شود. بنابراین در صورتی که یوتکتیک حاصله ترد باشد با آلیاژ ترد خواهد شد.

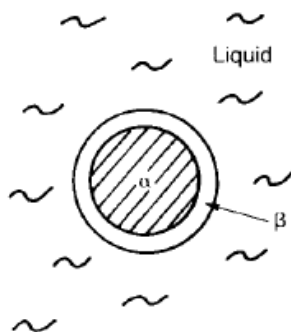
### ۵-۱۴- استحاله پریکتیک

در استحاله پریکتیک یک فاز جامد با یک فاز مذاب واکنش داده و یک فاز جامد تولید می‌شود.



استحاله با تشکیل لایه فاز  $\beta$  به دوره فاز  $\alpha$  آغاز می‌شود (شکل). بنابراین دو فازی که باید با هم واکنش دهند ( $L, \alpha$ ) بوسیله یک لایه  $\beta$  از هم جدا می‌شوند. برای پیشروی واکنش پریکتیک با اتم‌ها باید از میان یک لایه جامد  $\beta$  به درون فاز مذاب نفوذ کنند. اما سرعت نفوذ در جامدات بسیار کمتر از سرعت نفوذ در مایعات است. از طرف دیگر هر چه ضخامت فاز  $\beta$  بیشتر شود با سرعت واکنش

بیشتر کمتر می‌شود. بنابراین معمولاً آلیاژهای پرتیکتیک، ساختار تعادلی تک فاز ندارند و مقداری فاز منجمد شده اولیه نیز در ساختار آنها دیده می‌شود.



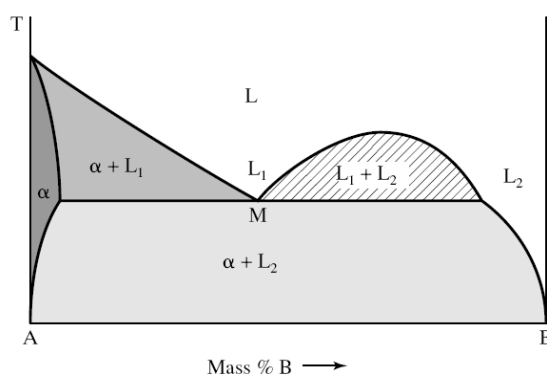
شکل ۲۷- سرعت رشد لایه β در استحالتهای پرتیکتیکی بوسیله‌ی لایه‌ی جامد فاز α محدود می‌شود.

### تذکره:

- ۱- سرعت واکنش تعادلی یوتکتیک بیشتر از سرعت واکنش پرتیکتیک است.
- ۲- آلیاژهای ریختگی پرتیکتیک، معمولاً ساختار غیرتعادلی دارند.

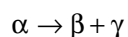
### ۵-۱۵- استحالتهای مونوتکتیک

برخی از فلزات مشابه با برخی مایعات در یک محدوده‌ی دمایی و ترکیب شیمیایی در حالت مذاب حلالیت ندارند و به عبارتی دارای «منطقه نقص در حلالیت» هستند. وجود این منطقه یک مشخصه‌ی دیگرام فازی آلیاژهایی است که واکنش مونوتکتیک را پشت سر می‌گذارند (شکل ۲۸).



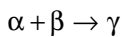
شکل ۲۸- استحالتهای مونوتکتیک

### ۵-۱۶- استحالتهای یوتکتوئید



این استحالتهای مسئول استحکام‌دهی بسیاری از سیستم‌های آلیاژی می‌باشد از جمله سیستم آهن - کربن سیستم‌های آلیاژی که استحالتهای یوتکتوئیدی دارند، عملیات حرارتی پذیر هستند.

### ۵-۱۷- استحالہ پرتیکتیوئید



۱. ویژگی این استحالہ غیر تعادلی بودن ساختار نهایی این آلیاژها است.
۲. مشابه با واکنش پرتیکتیک با آغاز استحالہ با سرعت واکنش بوسیله نفوذ حالت جامد از یک لایه جامد کنترل می‌شود.
۳. از آنجا که این استحالہ حالت جامد است، سرعت استحالہ پرتیکتیوئید کمتر از سرعت استحالہ پرتیکتیک است.

### ۵-۱۸- فازهای میانی:

بجز محلول‌های جامد که هیچ گونه نظم اتمی در قرارگیری اتم‌های حلال در شبکه‌ی اتم‌های محلول رعایت نمی‌شود، فازهای دیگری وجود دارد که به طور کلی فازهای میانی نامیده می‌شوند. این فازها را می‌توان به چند دسته تقسیم کرد:

#### ۱- ترکیبات بین فلزی:

در این ترکیبات قوانین ظرفیت شیمیایی رعایت می‌شود. برای مثال در  $Mg_2Sn$ ,  $Mg_2Pb$ ,  $Mg_3Bi_2$  و ... این ترکیبات ظرفیتی معمولاً بین یک عنصر با خواص فلزی قوی (مثل Mg) و یک عنصر فلزی دیگر که داری خواص فلزی ضعیف است (مانند Sn, Bi یا Sb)، تشکیل می‌شود. معمولاً این ترکیبات دمای ذوبی بالاتر از عناصر سازنده‌ی خود دارد. پیوند اتمی حاکم در این مواد، یونی است. به همین علت این ترکیبات اغلب ترد و شکننده هستند.

#### ۲- ترکیبات الکترونی:

در ترکیبات الکترونی قوانین والانس معمول رعایت نمی‌شود، در عوض یک نسبت ثابت بین تعداد کل الکترون‌های والانسی که در پیوند شرکت می‌کنند به تعداد کل اتم‌های درگیر در ترکیب وجود دارد.

برای مثال در ترکیب  $Cu_{31}Sn_8$ ، ظرفیت مس ۱ و ظرفیت قلع ۴ است. بنابراین تعداد کل الکترون‌های والانسی شرکت کننده در پیوند برابر خواهد بود با  $4 \times 8 = 32 + 31 \times 1$ . همچنین در مجموع  $39 = 31 + 8$  اتم در فرمول تجربی این ترکیب وجود دارد. بنابراین "نسبت

الکترون به اتم" در این ترکیب برابر است با  $\frac{63}{39}$  یا  $\frac{21}{13}$ .

به طور کلی ۳ نسبت از این نسبت‌ها وجود دارد که به نسبت‌های هیوم روتاری معروف هستند:

الف- نسبت  $\frac{3}{2} \left( \frac{21}{14} \right)$ : ساختاری  $\beta$ ، برای مثال:  $CuZn$ ,  $Cu_3Al$ ,  $Cu_5Sn$ ,  $Ag_3Al$  و غیره.

ب- نسبت  $\frac{21}{13}$  - ساختارهای  $\gamma$ ، برای مثال  $Cu_5Zn_8$ ,  $Cu_{31}Sn_8$ ,  $Cu_9Al_4$  و غیره.

پ- نسبت  $\frac{7}{4} \left( \frac{21}{12} \right)$  - ساختارهای  $\epsilon$ ، برای مثال  $CuZn_3$ ,  $Cu_3Sn$ ,  $AgCd_3$  و غیره.

#### ۳- ترکیبات فاکتور اندازه:

این دسته از فازهای میانی، ترکیباتی هستند که ترکیب شیمیایی و ساختارهای کریستالی آنها به گونه‌ی است که به اتم‌های سازنده‌ی آنها اجازه می‌دهد که به طور فشرده در کنار هم قرار بگیرند. دو گروه از مهمترین ترکیبات این دسته عبارتند از:

- فازهای لایه با فرمول کلی  $AB_2$  (برای مثال  $MgNi_2$ ,  $MgCu_2$ ,  $TiCr_2$  و غیره)

- ترکیبات بین‌نشین که بین برخی فلزات انتقالی و برخی عناصر غیر فلزی کوچک تشکیل می‌شود. وقتی مقدار عنصر شونده‌ی بین نشین در زمینه از حد حلالیت تجاوز می‌کند، یک ترکیب در زمینه رسوب می‌کند. در این حالت هنوز هم عنصر غیرفلزی بین نشین

مکان‌های بین نشین را اشغال می‌کند اما ساختار کریستالی با ساختار کریستالی محلول جامد بین نشین اولیه متفاوت است. این ترکیبات خواص فلزی از خود نشان می‌دهند و شامل هیدریدها، نیتريد‌ها، بوریدها و کاربیدها می‌باشد. برای مثال  $TiH_2$ ،  $TiN$ ،  $TaC$ ،  $WC$ ،  $Fe_3C$ . این ترکیبات به شدت سخت هستند. بسیاری از این کاربیدها به شدت دیرگداز هستند و دمای ذوبی بالاتر از ۳۰۰۰ درجه سانتیگراد دارند.

**تذکره:** در صورتی ترکیب میانی بدون تغییر در ترکیب شیمیایی ذوب و یا منجمد شود، به این نوع ذوب شدن، کانگروینت (Congruent) گفته می‌شود، در غیر این صورت ذوب غیرکانگروینت گفته میشود.

**تذکره:** با داشتن فرمول شیمیایی یک ترکیب بین فلزی، می‌توان درصد عناصر سازنده‌ی آنرا محاسبه کرد و بالعکس. اگر فرمول کلی ترکیبی به صورت  $A_nB_m$  باشد، درصد اتمی و درصد وزنی عنصر B در این ترکیب به صورت زیر خواهد بود:

$$(\%at)_B = \frac{m}{m+n} \times 100$$

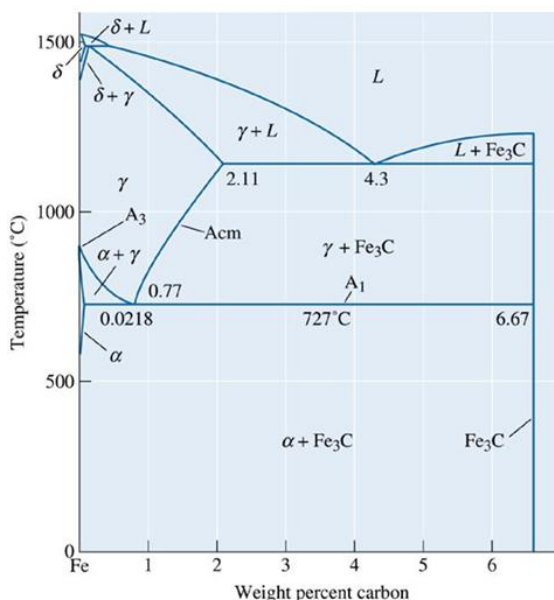
$$(\%Wt)_B = \frac{m \times M_B}{m \times M_B + n \times M_A} \times 100$$

که در آن  $M_B$  و  $M_A$  جرم اتمی عناصر A و B است.

## ۵-۱۹-دیاگرام فازی آهن-کربن

### الف- فولادها:

تحولات ریزساختاری حین سرد شدن تعادلی فولادها از دیاگرام تعادلی Fe-Fe<sub>3</sub>C پیروی می‌کند.



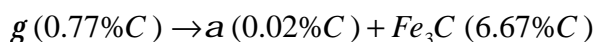
شکل ۲۹- دیاگرام تعادلی آهن-سمنتیت

### ۱- فازهای موجود در دیاگرام آهن-کربن

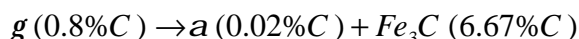
الف- فاز  $\alpha$  ( فریت): محلول جامد بین نشین کربن در آهن با ساختار BCC که ماکزیمم حد حلالیت آن ۰/۰۲ است. این فاز، فازی نرم و شکل پذیر است.

ب-فاز  $\gamma$  (آستنیت): محلول جامد بین نشین کربن در آهن با ساختار FCC که ماکزیمم حد حلالیت آن ۲/۱۱ است.  
 پ-فاز  $\delta$  (فریت دلتا): محلول جامد بین نشین کربن در آهن با ساختار BCC که هنگام انجماد تشکیل می‌شود.  
 ت- فاز  $Fe_3C$  (سمنتیت یا کاربید آهن): یک ترکیب از آهن و کربن که دقیقا ۶/۶۷٪ وزنی کربن دارد و ساختار کریستالی آن پیچیده و فازی سخت و شکننده است. در صورتی که به خوبی در ریزساختار پراکنده شود می‌تواند موجب اسنجم‌دهی فولاد شود.

### ۲- واکنش یوتکتویدی:



البته قابل ذکر است که گاهی واکنش فوق به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:



محصول واکنش یوتکتویدی فولادها که شامل لایه‌های متناوب  $\alpha$  و  $Fe_3C$  است، پرلیت دارد. به علت اینکه مکانیزم رشد پرلیت، رشد همزمان دو فاز  $\alpha$  و  $Fe_3C$  (دو فاز با درصد کربن بسیار متفاوت) است و نیاز به نفوذ متقابل بین این فازهاست، بنابراین سیستم ترجیح می‌دهد که مورفولوژی محصول لایه‌ای باشد.

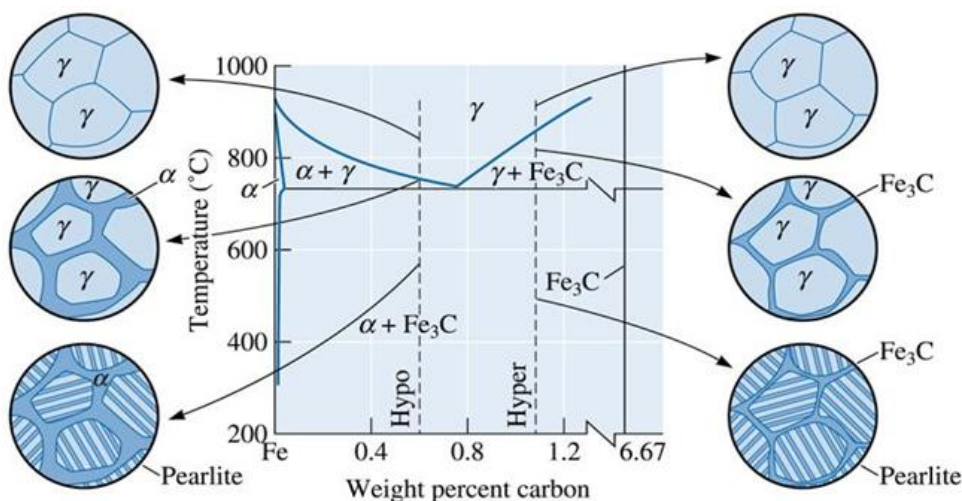
### ۳- تقسیم بندی فولادها از نظر واکنش یوتکتویدی:

الف- آلیاژ یوتکتویدی: ریزساختار این آلیاژها متشکل از پرلیت است.

ب- آلیاژهای هیپویوتکتویدی: ریزساختار این آلیاژها متشکل از پرلیت و فریت پرویوتکتویدی (فریت اولیه) است.

پ- آلیاژهای هایپریوتکتویدی: ریزساختار این آلیاژ متشکل از پرلیت و سمنتیت پرویوتکتویدی (سمنتیت اولیه) است.

شکل ۳۰ تحولات ریزساختاری حین سرد شدن تعادلی فولادهای هیپو و هایپریوتکتویدی را نشان می‌دهد.



شکل ۳۰- تحولات ریزساختاری حین سرد شدن تعادلی فولادهای هیپو و هایپریوتکتویدی

### تذکره:

- ۱- در آلیاژهای دو فازی، جزء ریزساختاری پیوسته کنترل کننده‌ی خواص مکانیکی آلیاژ است.
- ۲- در فولادهای هایپریوتکتویدی، سمنتیت ترد فاز پیوسته است بنابراین قابل انتظار است که این فولادها انرژی ضربه کمی داشته باشند.

**تذکر:**

۱- آنالیز فازی تمام فولادهایی که استحاله یوتکتوئید را پشت سر می‌گذارند متشکل از دو فاز  $Fe_3C, a$  است. اما آلیاژهای هیپویوتکتوئید شامل دو جزء ریز ساختاری فاز اولیه  $\alpha$  و پرلیت هستند و آلیاژهای هایپریوتکتوئید شامل دو جزء ریز ساختاری فاز اولیه  $Fe_3C$  و پرلیت هستند. آلیاژ یوتکتوئید از یک جزء ریز ساختاری پرلیت تشکیل شده است.

۲- پرلیت یک فاز نیست! بلکه متشکل از دو فاز است.

۳- درصد پرلیت فولاد برابر است با مقدار درصد آستنیتی که درست در بالای دمای یوتکتوئید به ترکیب شیمیایی یوتکتوئید رسیده است.

۴- در صورتی که درصد کربن نقطه‌ی یوتکتوئید را 0.8 فرض کنیم، پرلیت متشکل از 88% فریت و 12% سمنتیت است. در صورتی که کربن نقطه‌ی یوتکتوئید را 0.77 فرض کنیم، پرلیت متشکل از 89% فریت و 11% سمنتیت است.

**مثال:**

د

رصد فازهای موجود و اجزای ریزسازنده‌ی فولاد Fe-0.3C را درست زیر خط یوتکتوئید محاسبه کنید.

**حل:** درصد فازها: با استفاده از یک تای لاین درست در پایین دمای یوتکتوئید داریم:

$$\% \alpha = \frac{6.67 - 0.3}{6.67 - 0.02} \times 100 = 96\%$$

$$\% Fe_3C = 4\%$$

درصد اجزای ریزسازنده: با استفاده از یک تای لاین درست در بالای دمای یوتکتوئید داریم:

$$\% \text{Pearlite} = \% \gamma = \frac{0.3 - 0.02}{0.8 - 0.02} \times 100 = 36\%$$

$$\% \text{Primary } \alpha = 1 - 36\% = 64\%$$

**تذکر:** در مثال فوق درصد فریت یوتکتوئیدی را می‌توان با کم کردن درصد فریت اولیه از فریت کل محاسبه کرد.

بنابراین در مثال فوق داریم:

$$\% \text{Eutectoid } \alpha = 96 - 64 = 32\%$$

همچنین درصد فریت یوتکتوئیدی را می‌توان به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\% \text{Eutectoid } \alpha = 0.88 \times (\% \text{Pearlite})$$

**مثال-** درصد فریت پرویوتکتوئید و فریت یوتکتوئید در یک فولاد با 0.2% C که به صورت تعادلی تا زیر دمای یوتکتوئید سرد شده است، چقدر است؟ (درصد کربن در فریت 0.025، در یوتکتوئید 0.77 و در سمنتیت 6.67% است.)

**حل:**

$$\% \text{Primary } \alpha = \frac{0.8 - 0.2}{0.8 - 0.025} \times 100 = 36\%$$

$$\% \alpha \text{ total} = \frac{6.67 - 0.2}{6.67 - 0.025} \times 100 = 97\%$$

درصد فریت یوتکتوئیدی را می‌توان با کم کردن درصد فریت اولیه از فریت کل محاسبه کرد.

بنابراین داریم:

$$\% \text{Eutectoid } \alpha = 97 - 76.5 = 20.5\%$$

### ب-چدن‌ها

چدن‌ها به آلیاژهای آهن-کربنی گفته می‌شود که استحاله‌ی یوتکتیکی را پشت سر گذارند.

چدن‌ها به دو دسته تقسیم می‌شوند:

۱- چدن‌های غیرگرافیتی یا چدن سفید که تحولات ریرساختاری آنها حین سرد شدن از دیاگرام Fe-Fe<sub>3</sub>C پیروی می‌کند.

۲- چدن‌های گرافیتی که تحولات ریرساختاری آنها حین سرد شدن از دیاگرام Fe-C پیروی می‌کند.

#### تذکره:

۱- استحاله‌ی یوتکتیکی در چدن‌های غیرگرافیتی به صورت  $L(4.3\%C) \rightarrow g(2.1\%C) + Fe_3C(6.67\%C)$  است.

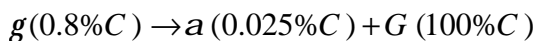
۲- استحاله‌ی یوتکتیکی در چدن‌های گرافیتی به صورت  $L(4.26\%C) \rightarrow g(2.08\%C) + G(100\%C)$  است.

۳- محصول واکنش یوتکتیکی چدن‌ها، لدبوریت نام دارد.

۴- در چدن‌های گرافیتی هاپیر یوتکتیکی، فاز اولیه گرافیت کیش نامیده می‌شود.

#### تذکره: نوع زمینه در چدن‌ها حین استحاله یوتکتوئید تعیین می‌شود.

استحاله یوتکتوئید حین تشکیل چدن گرافیتی با زمینه‌ی فریتی به صورت زیر است:



استحاله یوتکتوئید حین تشکیل چدن گرافیتی با زمینه‌ی پرلیتی به صورت زیر است:

