۲-۵-انرژی پیوندی

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

اصول پیوند اتمی را می‌توان با درنظرگرفتن 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)

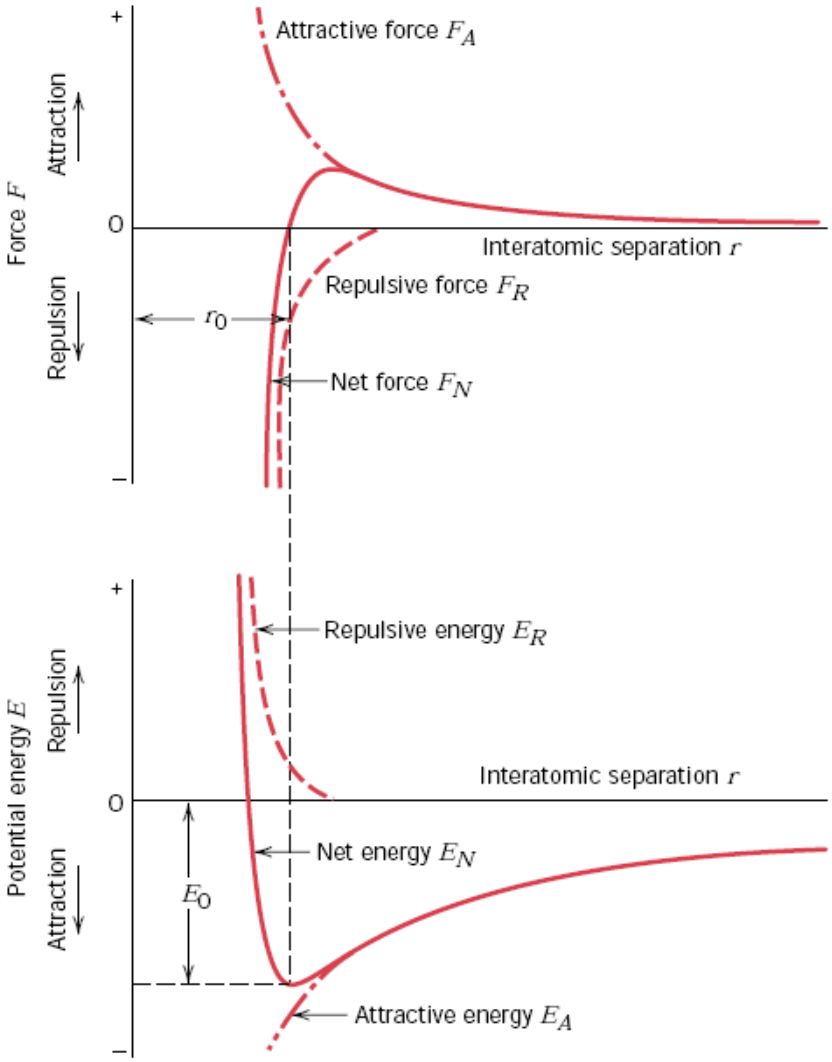
۱. منشأ نیروی جاذبه، بستگی به نوع پیوند اتمی دارد و به‌طور کلی ناشی از نیروی بین مراکز با بار مثبت و منفی است.

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 ببینید)



شکل۵-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 به‌وسیله‌ی رابطه‌ی زیربه نیروی بین اتمی مرتبط می‌شود؛

$$E = \int F\,dr$$

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

۵. مهمترین مشخصه‌ی منحنی انرژی ـ فاصله؛ نقطه مینیمم آن است. انرژی متناظر با فاصله‌ی تعادلی $r_\circ$ انرژی پیوند $(E_\circ)$ است.

۶. انرژی پیوندی $(E_\circ)$ 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

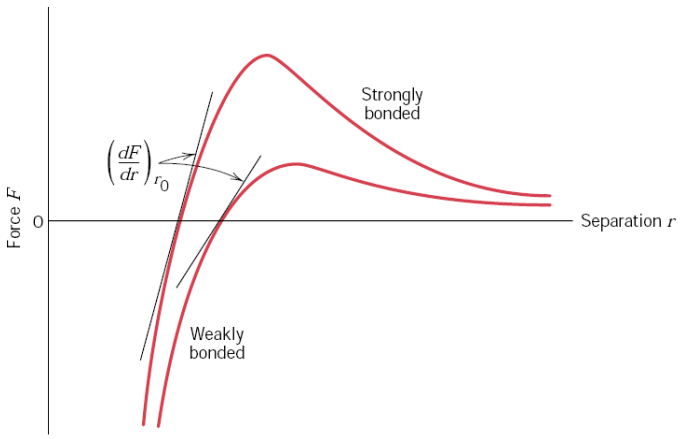
تذکر: برخی خواص مواد وابسته به انرژی پیوندی و شکل منحنی انرژی ـ فاصله است:

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 بینی اتمی ـ فاصله در نقطه‌ی $r_\circ$:

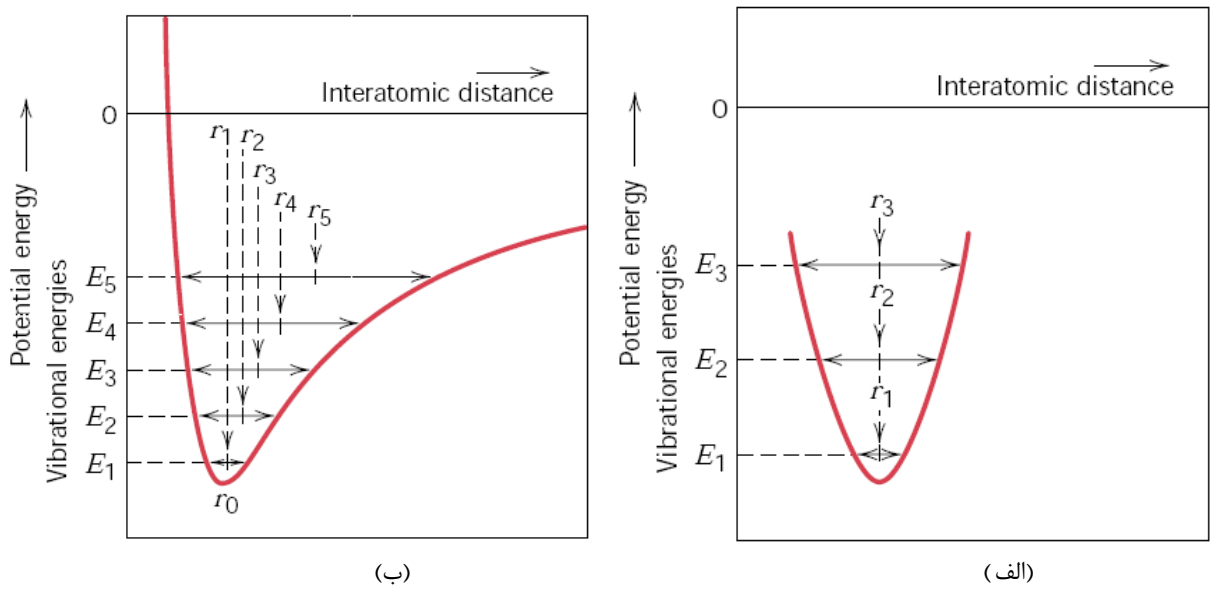
$$E \alpha \left(\frac{dF}{dr_\circ}\right)_{r=r_\circ}$$

به شکل ۶ توجه کنید:



شکل۶ ـ نمودار نیرو ـ فاصله برای دو ماده با مدول الاستیسیته‌ی بالا و پائینی

۳- ضریب انبساط حرارتی (α) وابسته به شکل منحنی انرژی ـ 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 ـ 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 α 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، فاصه‌ی 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: به‌طورکلی 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:

۱ـ مواد بی‌نظم: مثل گازها

۲ـ مواد با نظم بلند دامنه (کریستال): در این مواد (کریستال‌ها)، اتم‌ها در طی فاصله‌های طولانی اتمی دارای نظم تکرار شونده یا آرایش پریودی 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.

۳ـ 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:

۱ -در بحث زیر اتم‌ها یا یون‌ها به صورت کره‌های جامد با قطر مشخص در نظر گرفته می‌شوند.

۲- در توصیف ساختارهای کریستالی از کوچکترین جزء تکرارشونده (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: