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

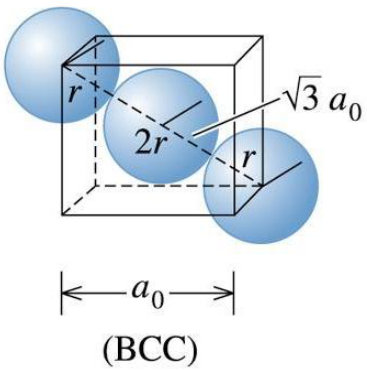
مشخصه‌های مهم شبکه‌ی BCC

الف ـ $N=8\ \frac{1}{8}+-1=2$

ب ـ $C.N=8$

پ ـ ارتباط $a_{\circ}$ و r:

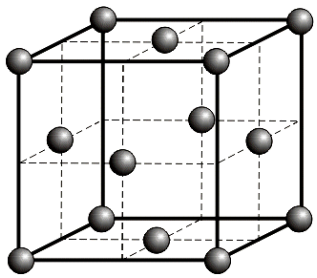
فرض می‌شود اتم‌ها در جهت قطر اصلی مکعب برهم مماس‌اند. $a.\sqrt{3}=4r$



ت ـ $(APF)_{bcc}=0.68$

۳-۳-۳-ساختار مکعبی وجوه مرکزدار FCC

شکل4 ساختار FCC را نشان می‌دهد.



شکل۴- شبکه‌ی مکعبی وجوه مرکزدار

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

ـ موقعیت اتم‌ها $(0,0,0)$ ، $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$ ، $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$ ، $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$

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

برخی مشخصه‌های ساختار FCC

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

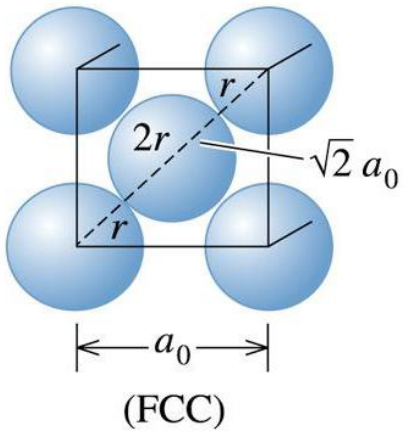
تذکر: سهم هر اتم واقع بر وجوه مکعب در یک سلول واحد با $\frac{1}{2}$ است.

ب ـ $(C.N)_{FCC}=12$

پ ـ ارتباط $a_\circ$ و r:

فرض می‌شود اتم‌ها در جهت قطر فرعی مکعب برهم مماسند.

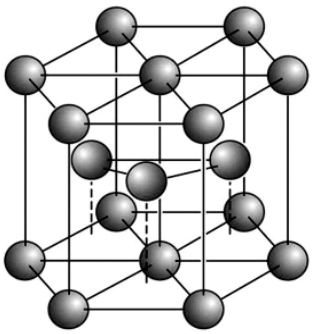
$a_\circ \sqrt{2}=4r$



ت ـ $(A.P.F)_{FCC}=0.74$

۳-۳-۴- ساختار هگزاگونال فشرده (HCP)

شکل ۵ سلول واحد HCP رانشان می‌دهد.



شکل۵- شبکه‌ی منشوری هگزاگونال فشرده

ـ 12 اتم در گوشه‌های 6 ضلعی، 2 اتم در مرکز قاعده‌ی بالا وپائین و هر اتم در وسط شبکه

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

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

چند مشخصه‌ی مهم ساختار HCP:

الف ـ $N_{HCP}=12\ \frac{1}{6}+2\ \frac{1}{2}+3=6$

ب ـ $(C.N)_{HCP}=12$

پ ـ ارتباط بین پارامترهای شبکه و $r_{\circ}$:

۱- برای به‌دست آوردن ارتباط بین $a_{\circ}$ و r فرض می‌شود اتم‌ها در جهت ضلع شش وجهی برهم مماسند پس

۲-در یک شبکه HCP ایده‌آل ارتباط C و $a_{\circ}$ به صورت زیر است؛

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

تذکر: در فلزات HCP واقعی نسبت C/a از مقدار ایده آل انحراف مثبت یا منفی دارد.

ت ـ $(A.P.F)_{hcp}=0.74$

تذکر:

۱ـ APF در ساختارهای کریستالی فلزات مستقل از نوع اتم می‌باشد.

۲ـ فلزات تمایل به افزایش C.N دارند. هرچه A.P.F بیشتر باشد C.N نیز بیشتر است.

۳ـ کوچک‌ترین جزء ساختاری قابل کنترل خواص، ساختار کریستالی است.

۴ـ 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 به‌دست می‌آید:

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

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:

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

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 ΔV حین تحول آلوتروپیک:

فرض کنید در دمای T؛ ساختار کریستالی ماده‌ای از α به β تغییرمی‌کند در صورتی که تعداد اتم به ازای یک سلول واحد ساختار α؛ N_α و تعداد اتم به ازای یک سلول واحد ساختار β، N_β باشد، پس یک سول واحد α به $\frac{N_\alpha}{N_\beta}$ سلول واحد β تبدیل می‌شود :

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

تغییر حجم نسبی بر مبنای یک سلول واحد و با در نظرگرفتن اصل بقای جرم از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید؛

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

که درآن V_α و V_β به ترتیب حجم سلول واحد شبکه‌های α و β هستند.

مثال مس دارای ساختار FCC و شعاع اتمی $1.278\,A^\circ$ و وزن اتمی $63.54\ gr/mol$ می‌باشد. وزن مخصوص آن برحسب $\frac{gr}{cm^3}$ چقدر است؟

پاسخ:

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

مثال ـ 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.

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

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