http://physicsweb.org/article/news/10/3/7
2006/03/09

محاسبه یِ سختی

وقت ی کار به سنجش ِ سختی یِ یک ماده می‌رسد، بیش‌تر ِ آزمون‌ها از نوع ِ فناوری‌یِ‌نه‌چندان‌پیش‌رفته اند: اساساً به این شکل که یک نک ِ الماسی را رو یِ سطح می‌فشارند و اندازه یِ فرورفته‌گی یِ حاصل را می‌سنجند. یک گروه فیزیک‌پیشه در جمهوری یِ چک روش ِ جدید ی بار آورده اند که با آن می‌شود بدون ِ نیاز به آزمایش‌گاه سختی یِ مواد را پیش‌بینی کرد. این نتایج (که از فقط محاسبات ِ براساسِ‌اصولِ‌اولیه به دست آمده) به‌خوبی با داده‌ها یِ تجربی سازگار است و شاید دانش‌پیشه‌ها با استفاده از آن بتوانند مواد ِ سخت‌تر ی بسازند [1].

سختی مقیاس ی است از مقاومت ِ مواد در برابر ِ خراش یا فرورفته‌گی. این کمیت را با استفاده از روش‌ها یِ تجربی یِ گوناگون ی می‌سنجند، از جمله با آزمون‌ها یِ ویکِر [2] و کْنُپ [3]. اما مقدارها یِ حاصل غالباً به روش ِ به‌کاررفته بسته‌گی دارند. مثلاً الماس ِ کْنُپ تیزتر از الماس ِ ویکِر است و سختی یِ کوچک‌تر ی می‌دهد. در واقع مقدارها یِ تجربی یِ مختلف برا یِ سختی یِ یک ماده تا بیش از 10% با هم متفاوت اند. به همین خاطر دانش‌پیشه‌ها مشتاق بوده اند روش ی نظری بار آورند که سختی یِ ماده را با قطعیت ِ بیش‌تر ی پیش‌بینی کند.

سه سال پیش، گروه ی به سرپرستی یِ فامینگ گائو [4] از دانش‌گاه ِ یانشان [5] در چین یک رابطه‌یِ نیمه‌تجربی برا یِ تعیین ِ سختی یِ مواد بار آورد و به این ترتیب گام ِ مهم ی در این راه بر داشت. این رابطه بر اساس ِ طول ِ پی‌وند ِ بین ِ اتم‌ها یِ سازنده، تعداد ِ الکترون‌ها یِ درگیر در پی‌وند، و یونیت است. یونیت معیار ی از چه‌گونه‌گی یِ تقسیم ِ الکترون‌ها یِ مشترک بین ِ زوجِ‌اتم‌ها است: در مواد ِ کووالانسی مثل ِ سیلیسیم، الکترون‌ها به‌طور ِ مساوی بین ِ اتم‌ها تقسیم شده اند؛ اما در مواد ِ یونی یک اتم تقریباً به

طور ِ کامل الکترون ِ اتم ِ هم‌سایه را می‌گیرد. مواد ِ کووالانسی قطبی بین ِ این دوحد اند.

سیمونِک [6] و واکار [7] این کار را یک گام پیش‌تر برده اند و روش ی بار آورده اند برا یِ محاسبه یِ سختی یِ تک‌بلورها (چه کووالانسی و چه یونی) بر اساس ِ اصول ِ اولیه. نکته یِ کار ِشان این است که یک عبارت ِ جدید برا یِ سختی وارد کرده اند که قدرت ِ پی‌وند را بر اساس ِ کمیت‌ها یی توصیف می‌کند که ذاتاً به ساختار ِ اتمی یِ ماده مربوط اند. تا کنون دانش‌پیشه‌ها نتوانسته بودند به‌ساده‌گی سختی در مقیاس ِ اتمی را تعریف کنند.

بر اساس ِ این نظریه یِ جدید، سختی یِ یک تک‌بلور ِ ایده‌آل به قدرت ِ پی‌وندها یِ آن و تعداد ِ پی‌وندها در یک یاخته یِ واحد ِ آن بلور بسته‌گی دارد. سیمونِک و واکار، با استفاده از این داده‌ها و با ریاضیات ی ساده سختی یِ ماده را حساب می‌کنند. این پژوهش‌گران، با استفاده از معادله یِشان به نتیجه یِ غیرِمنتظره ای رسیدند که با شهود ِ سنتی ناسازگار است: ساختارها یی که اتم‌ها یِشان با تعداد ِ نسبتاًکم ی اتم ِ دیگر احاطه شده اند (یعنی آن‌ها یی که عدد ِ کوئوردیناسیون ِشان کم‌تر است) سخت‌تر از ساختارها یی اند که اتم‌ها یِشان با تعداد ِ زیاد ی اتم احاطه شده اند.

سیمونِک به فیزیکس‌وِب [8] گفت: "کار ِ ما به درک ِ عمیق‌تر ی از سختی خواهد انجامید. این ره‌یافت برا یِ اول‌ین بار به دانشِ‌موادپیشه‌ها هم می‌گوید اتم‌ها را چه‌گونه بیارایند تا ساختار ی سخت به دست آید." این گروه امیدوار است بتواند یک نظریه یِ کامل هم برا یِ پی‌وندها یِ فلزی بار آورد.

[1] Physical Review Letters **96** 085501

[2] Vicker

[3] Knoop

[4] Faming Gao

[5] Yanshan

[6] Simunek

[7] Vackar

[8] PhysicsWeb