۸۷/۱/۱۰۳۰۸۲
۸۷/۱۰/۲۵

بسم الله الرحمن الرحیم

۱۰۷۸۹۷

دانشگاه بوعلی سینا

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

پایان نامه:

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک (حالت جامد)

عنوان:

پخش Pd در شبه‌بلور Al-Pd-Mn

واحد اطلاعات مدارک همایش

استاد راهنما:

دکترفریدون سموات

استاد مشاور:

دکتر محمد حسین توکلی

۱۳۸۷/۱۰/۱۳

پژوهشگر:

فاطمه نعمت‌الهی

شهریور ۸۷

۱۰۷۸۹۷

توجه

همه امتیازهای این پایان‌نامه به دانشگاه بوعلی سینا تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب پایان‌نامه در مجلات، کنفرانس‌ها و یا سخنرانی‌ها، باید نام دانشگاه بوعلی سینا (استاد یا اساتید راهنمای پایان‌نامه) و نام دانشجو با ذکر مأخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت پیگرد قانونی خواهد داشت.

دانشکـــده علـــوم پایه

گروه فیزیک

جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

فاطمه نعمت الهی

در رشته فیزیک (گرایش حالت جامد)

تحت عنوان :

پخش Pd در شبه بلور Al-Pd-Mn

به ارزش ۶ واحد در روز شنبه ۱۳۸۷/۶/۲۳ ساعت ۱۱ صبح در سالن آمفی تئاتر ۱ دانشکده علوم پایه و با حضور اعضای هیأت داوران زیر برگزار گردید و با نمره ۱۹/۴۳ درجه عالی ..... به تصویب رسید.

هیات داوران:

۱- **استاد راهنما:** دکتر فریدون سموات ..... استادیار دانشگاه بوعلی سینا

۲- **استاد مشاور** :دکتر محمد حسین توکلی ..... استادیار دانشگاه بوعلی سینا

۳- **استاد مدعو:** دکتر سعید بهروزی نیا ..... استادیار-عضو سازمان انرژی اتمی

۴- **استاد مدعو:** دکتر صفدر حبیبی ..... استادیار دانشگاه بوعلی سینا

دانشکـــده علـــوم پایه
گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک
گرایش حالت جامد

تحت عنوان :

پخش Pd در شبه بلور Al-Pd-Mn

استاد راهنما:
دکتر فریدون سموات

استاد مشاور:
دکتر محمد حسین توکلی

پژوهشگر:
فاطمه نعمت الهی

تصویب و ارزشیابی توسط کمیته ارزیابی پایان نامه:

۱- **استاد راهنما:** دکتر فریدون سموات ..... استادیار دانشگاه بوعلی سینا

۲- **استاد مشاور:** دکتر محمد حسین توکلی ..... استادیار دانشگاه بوعلی سینا

۳- **استاد مدعو:** دکترسعید بهروزی نیا ..... استادیار-عضو سازمان انرژی اتمی

۴- **استاد مدعو:** دکتر صفدر حبیبی .....استادیار دانشگاه بوعلی سینا

تشکر و قدردانی

سپاس خدای سبحان را که فرصتی دیگر برای اندوختن دانشی هرچند اندک عطایم فرمود.

بدین وسیله از استاد راهنمای عزیزم جناب آقای دکتر فریدون سموات که در انجام این مجموعه همواره یار و پشتیبان من بودند کمال تشکر و قدردانی را دارم.

سپاس از اساتید ارجمند جناب آقای دکتر صفدر حبیبی و جناب آقای دکتر سعید بهروزی‌نیا که زحمت مطالعه و داوری پایان نامه را متقبل شدند و از نظرات ایشان استفاده نمودم.

از تمامی اساتید گروه فیزیک به خاطر تمامی نکات علمی، عملی و اخلاقی که از ایشان آموخته‌ام تشکر می‌کنم.

همچنین مساعدتهای مشفقانه مدیریت گروه جناب آقای دکتر توکلی شایسته تقدیر فراوان است.

در نهایت از دوستان عزیزم خانم‌ها آرزو مستأجر حقیقی، ماهان محمدرضایی، سهیلا بیات و زهرا توده‌روستا که در طی این دو سال یار و همراه من بودند بسیار سپاسگزارم.

فاطمه نعمت الهی

شهریور ۸۷

تقدیم به آنان که برایم بهترین هستند

پدر عزیزم که در پناه مهر و محبت و حمایت های او راه زندگی برایم هموار و موفقیت ها

دست یافتنی گشت و به مهربانترین ها، مادرم که امید به زندگی را در سیمای پر مهرش

یافتم وجودی که زندگی با حضور او زیبا و خواستنی است

و خواهران دوست داشتنی ام و به برادران مهربانم، که دلشاد از شادیشان و دلگرم

از دیدار وجودشان هستم.

تقدیم به استاد بزرگوارم

جناب آقای دکتر فریدون سموات

که شوق آموختن

عشق به حرکت

توان پیشرفت

و همت خدمت را به من هدیه کردند

نام خانوادگی: نعمت الهی **نام:** فاطمه

عنوان پایان‌نامه: پخش Pd در شبه‌بلور Al-Pd-Mn

استاد راهنما: دکتر فریدون سموات **استاد مشاور:** دکترمحمد حسین توکلی

مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد **رشته:** فیزیک **گرایش:** حالت جامد

دانشگاه: بوعلی‌سینا **دانشکده:** علوم پایه **تاریخ فارغ‌التحصیلی:** ۸۷/۶/۲۳ **تعداد صفحه:**۱۱۲

واژه‌های کلیدی: شبه‌بلور- تکنیک پراکندگی یونهای کم انرژی- انرژی فعال‌سازی پخش- آلومینیوم- پلادیوم

چکیده:

بررسی فرایند پخش در جامدات اطلاعات مفیدی درزمینه ساختار و خواص فیزیکی جامدات فراهم می‌آورد. در این پایان‌نامه خود پخشی عنصر پلادیوم در شبه‌بلور Al-Pd-Mn مورد بررسی قرار گرفته است. شبه‌بلورها درسال ۱۹۸۴ توسط دن شچمان و همکارانش کشف شدند. این مواد معمولاً آلیاژهای دوتایی یا سه‌تایی هستند که اغلب قسمت عمده آنها از آلومینیوم می‌باشد. شبه‌بلورها از خود خواص فیزیکی غیر معمولی همچون سختی بالا، اصطکاک کم، خاصیت غیر چسبندگی و مقاومت پوششی خوب نشان می‌دهند.

از میان تکنیکهای مختلفی که برای مطالعه سطوح وجود دارد، تکنیک پراکندگی یون‌های کم انرژی به دلیل حساسیت زیاد به خارجی‌ترین لایه‌های اتمی به عنوان تکنیک منحصر به فردی در شناسایی ترکیب عناصر سطح مطرح می‌باشد. در این روش از پرتو تک‌انرژی (۱۰۰eV-۱۰KeV) یونهای گاز بی‌اثر یا قلیایی استفاده می‌شود.

ابتدا نمونه در یک اتاقک خلأ بسیار بالا توسط یک سری "بمباران-حرارت" تمیز شد، بعد پلادیوم بوسیله تبخیر کننده پرتو یونی (OS-vap) روی نمونه رسوب داده شد و سپس تغییرات ترکیب سطح بر حسب تابعی از درجه حرارت در گستره حرارتی ۴۴۰K-۷۴۵K مورد بررسی قرار گرفت. در نهایت انرژی فعال‌سازی پخش Pd در شبه‌بلور Al-Pd-Mn به مقدار eV (۰/۰۳ ± ۰/۶۴) تعیین شد.

فهرست مطالب

فصل اول: پخش

۱-۱ مقدمه ۲

۱-۲ قوانین پخش ۲

۱-۲-۱ قانون اول فیک ۳

۱-۲-۲ قانون دوم فیک ۵

۱-۳ نیروی محرکه پخش ۷

۱-۴ راه‌حل‌های معادله پخش ۷

۱-۵ پخش در یک جامد بی‌نهایت از یک چشمه صفحه‌ای نازک ۸

۱-۶ پخش در یک زوج جامد نیمه بی‌نهایت ۱۰

۱-۷ عوامل موثر بر ضریب پخش D ۱۲

۱-۸ ناراستی و بی‌نظمی در بلور ۱۴

۱-۸-۱ عیوب نقطه‌ای ۱۵

۱-۸-۲ عیوب خطی ۱۹

۱-۸-۳ عیوب صفحه‌ای ۲۰

۱-۸-۴ عیوب فضایی ۲۱

۱-۹ مکانیسم‌های پخش ۲۱

۱-۹-۱ مکانیسم تبادل ۲۲

۱-۹-۲ مکانیسم حلقه‌ای ۲۳

۱-۹-۳ مکانیسم بین شبکه‌ای ۲۳

۱-۹-۴ مکانیسم بین شبکه‌ای غیر مستقیم ۲۴

۱-۹-۵ مکانیسم تجمعی ۲۴

۱-۹-۶ مکانیسم حفره ۲۵

۱-۹-۷ مکانیسم دو حفره ۲۶

۱-۹-۸ مکانیسم رلاکسیون یا سستی موضعی ۲۷

فصل دوم: شبه‌بلورها

۲-۱ مقدمه ۳۰

۲-۲ انواع شبه‌بلورها ۳۱

۲-۳ تقارن‌های ممنوعه کریستالوگرافی ۳۳

۲-۴ دسته‌بندی شبه‌بلورهای شناخته شده ۳۳

۲-۵ هم‌شکلی محلی ۳۴

۲-۶ فضای n بعدی ۳۵

۲-۷ خواص فیزیکی- مکانیکی شبه‌بلورها ۳۵

۲-۸ مطالعه سطح شبه‌بلورها ۳۸

۲-۹ آماده‌سازی سطح تمیز ۳۹

۲-۱۰ ساختار سطح ۴۰

۲-۱۱ ترکیب سطح ۴۱

۲-۱۲ کاربرد شبه‌بلورها ۴۱

۲-۱۲-۱ پوششهای سطحی ۴۲

۲-۱۲-۲ آلیاژهایی با نانو ذرات شبه‌بلوری ۴۲

۲-۱۲-۳ مخزن هیدروژن ۴۲

۲-۱۳ مکانیسم پخش در شبه‌بلورها ۴۳

فصل سوم: تکنیک و دستگاه LEIS

۳-۱ مقدمه ۴۷

۳-۲ تکنیک LEIS ۴۷

۳-۳ تعیین عناصر روی سطح ۴۸

۳-۴ مطالعه کمی سطح (تعیین غلظت عناصر روی سطح) ۵۱

۳-۴-۱ پتانسیل برهمکنش ۵۱

۳-۴-۲ تبادل بار ۵۳

۳-۴-۳ سطح مقطع پراکندگی ۵۷

۳-۵ تعیین غلظت عناصر روی سطح ۵۹

۳-۶ مطالعه ساختار سطح ۶۰

۳-۶-۱ پراکندگی یگانه و چندگانه ۶۱

۳-۶-۲ مخروط‌های سایه و سدکننده ۶۳

۳-۶-۳ اسکن قطبی ۶۶

۳-۶-۴ اسکن سمتی ۶۸

۳-۸ فناوری خلأ در علم سطح کاربردی ۶۹

۳-۹ انواع پمپ‌ها ۷۳

۳-۱۰ دستگاه LEIS ۷۵

۳-۱۱ منبع یونی ۷۶

۳-۱۲ انتقال یونها از منبع به سمت هدف ۷۷

۳-۱۳ اتاقک خلأ ۷۸

۳-۱۴ نگه‌دارنده نمونه ۸۰

۳-۱۵ آنالیزور انرژی الکتروستاتیک ۸۱

۳-۱۶ تبخیر کننده Pd ۸۲

فصل چهارم: پخش Pd در شبه‌بلور Al-Pd-Mn

۴-۱ مقدمه ۸۴

۴-۲ انرژی فعال‌سازی ۸۵

۴-۳ روش آزمایش ۸۷

۴-۳-۱ تمیز کردن نمونه ۸۷

۴-۳-۲ انتخاب زاویه پراکندگی θ و زاویه فرودی α ۸۸

۴-۳-۳ رسوب یک تک‌لایه Pd روی سطح ۸۹

۴-۳-۴ آنالیز اطلاعات رسوب ۹۲

۴-۳-۵ بررسی تغییر ترکیب سطح با زمان در درجه حرارتهای مختلف ۹۶

۴-۳-۶ اندازه‌گیری پخش Pd در شبه‌بلور Al-Pd-Mn با درجه حرارت ۹۶

۴-۳-۷ تعیین انرژی فعال‌سازی پخش Pd در شبه‌بلور Al-Pd-Mn ۹۷

۴-۴ بحث و نتیجه‌گیری ۹۸

منابع ۱۰۲

پیوست ۱۱۳

چکیده به زبان انگلیسی .....

شکل (۱-۱) : نفوذ اتمهای مس به داخل نیکل، سرانجام،... ۳

شکل (۱-۲) : تغییرات غلظت اتمی نسبت به موقعیت در نفوذ یکنواخت ۴

شکل (۱-۳) : تغییرات غلظت بر حسب موقعیت نسبت به زمان ۵

شکل (۱-۴) : نمایی از پخش یک فیلم نازک در یک جامد نامتناهی بر حسب زمان ۹

شکل (۱-۵) : قبل از پخش ۱۰

شکل (۱-۶) : نمودار C(X,t) برای یک زوج جامد نیمه بی‌نهایت ۱۲

شکل (۱-۷) : حفره یا تهی‌جاها در شبکه کریستالی ۱۵

شکل (۱-۸) : عیب شوتکی در کریستال NaCl ۱۶

شکل (۱-۹) : عیب بین‌نشینی یا میان شبکه‌ای ۱۷

شکل (۱-۱۰) : عیب جانشینی ۱۷

شکل (۱-۱۱) : عیب فرنکل ۱۸

شکل (۱-۱۲) : آرایش اتمی در یک نابجایی لبه‌ای (خطی) ۱۹

شکل(۱-۱۳) : نابجایی پیچی ۲۰

شکل (۱-۱۴) : مکانیسم تبادل ۲۲

شکل (۱-۱۵) : مکانیسم حلقه ۲۳

شکل (۱-۱۶) : مکانیسم بین شبکه‌ای ۲۳

شکل (۱-۱۷) : مکانیسم بین‌شبکه‌ای غیر مستقیم ۲۴

شکل (۱-۱۸) : مکانیسم تجمعی ۲۵

شکل (۱-۱۹) : مکانیسم حفره ۲۶

شکل (۱-۲۰) : مکانیسم دو حفره ۲۶

شکل (۱-۲۱) : مکانیسم رلاکسیون یا سستی موضعی ۲۷

شکل (۲-۱) : محور تقارن پنج‌تایه نمی‌تواند در یک شبکه موجود باشد،... ۳۰

شکل (۲-۲) : شبیه‌سازی الگوی پراش شبه‌بلور ایکوسادرال..... ۳۲

شکل (۲-۳) : شبیه‌سازی الگوی پراش شبه‌بلور پلی‌گونال..... ۳۲

شکل (۳-۱) : ذره‌ای به جرم m_1 از روی هدفی به جرم m_2 تحت،... ..... ۴۹

شکل (۳-۲) : یک نمونه طیف از He^+ (KeV) پراکنده شده از سطح شبه‌بلور Al-Pd-Mn ... ۵۰

شکل (۳-۳) : فرایند خنثی‌سازی اوژه..... ۵۵

شکل (۳-۴) : سطح مقطع پراکندگی..... ۵۷

شکل (۳-۵) : پیکهای ناشی از پراکندگی یگانه و دوگانه هم‌صفحه..... ۶۳

شکل (۳-۶) : مخروط سایه ۶۴

شکل (۳-۷) : مخروط سدکننده..... ۶۵

شکل (۳-۸) : انرژی ذره فرودی برای مخروط سمت راست MeV و،... ..... ۶۶

شکل (۳-۹) : مخروط سایه ناشی از یک اتم سطحی، که با کنترل،... ..... ۶۷

شکل (۳-۱۰) : نمایی از زوایای α، φ، θ ۶۸

شکل (۳-۱۱) : تغییرات تناوبی شدت سیگنال پراکندگی یون هلیوم KeV ۱،... ..... ۶۹

شکل (۳-۱۲) : تصویر لحظه‌ای حجم کوچکی از گاز، ۷۰

شکل (۳-۱۳) : نمایی از سیستم Leybold-Heraeus برای مطالعه LEIS ۷۵

شکل (۳-۱۴) : منبع یونی..... ۷۶

شکل (۳-۱۵) : سیستم انتقال یونها..... ۷۸

شکل (۳-۱۶) : نمایی از اتاقک خلأ UHV ۸۰

شکل (۳-۱۷) : نگهدارنده نمونه..... ۸۱

شکل (۴-۱) : سد انرژی E^* یک اتم خالص در جابجایی از مکان A به C..... ۸۶

شکل (۴-۲) : طیف انرژی از یونهای He^+ پراکنده شده از شبه‌بلور Al-Pd-Mn..... ۸۷

شکل (۴-۳-الف) : شمارش نسبی Mn و Pd به Al در زوایای پراکندگی θ متفاوت ۸۹

شکل (۴-۳-ب) : شمارش نسبی Mn و Pd به Al در زوایای فرودی α متفاوت ۸۹

شکل (۴-۴) : تبخیر کننده Al ۹۰

شکل (۴-۵) : تبخیر کننده Pd ۹۰

شکل (۴-۶) : تبخیر کننده..... ۹۱

شکل (۴-۷) : نمودار تغییرات Al/Pd بر حسب زمان رسوب ۹۲

شکل (۴-۸) : تغییرات لگاریتمی پوشش Pd بر حسب زمان (نرمالیز شده)..... ۹۶

شکل (۴-۹) : تغییرات نرخ پخش بر حسب دما ۹۷

شکل (۴-۱۰) : تعیین انرژی فعال‌سازی پخش Pd..... ۹۸

شکل (۴-۱۱) : نمودار آرنیوس ضریب پخش Pd^{103} (مثلث) و Au^{195} (دایره)،... ..... ۱۰۰

جدول (۲-۱) : دسته‌بندی شبه‌بلورهای شناخته شده ۳۴

جدول (۲-۲) : مقایسه خواص فیزیکی شبه‌بلورها با مواد پایه‌ای در دمای اتاق..... ۳۷

جدول (۳-۱) : اطلاعات مورد استفاده در منبع یونی..... ۷۷

جدول (۴-۱) : شمارش یونی Al و Pd در دماهای متفاوت، قبل و بعد از رسوب ۹۴

جدول (۴-۲) : پوشش Pd و افت و خیز بیم یونی در دماهای متفاوت..... ۹۵

فصل اول

پخش

Diffusion

۱-۱ مقدمه:

یکی از فعل و انفعالات مهمی که در عملیات حرارتی در مواد جامد و در بعضی از فرایندهای تولید انجام می‌گیرد و از اهمیت خاصی برخوردار است پدیده پخش است. عموماً حرکت و انتقال مواد در گازها، مایعات و جامدات که در نتیجه جابجایی گام به گام اتمها تا رسیدن به حالت همگن انجام می‌گیرد را پخش می‌نامند. نیروی محرکه یا علت عمده این حرکت اتمها (پخش) وجود اختلاف غلظت اتمی در قسمتهایِ از این مواد می‌باشد [۱].

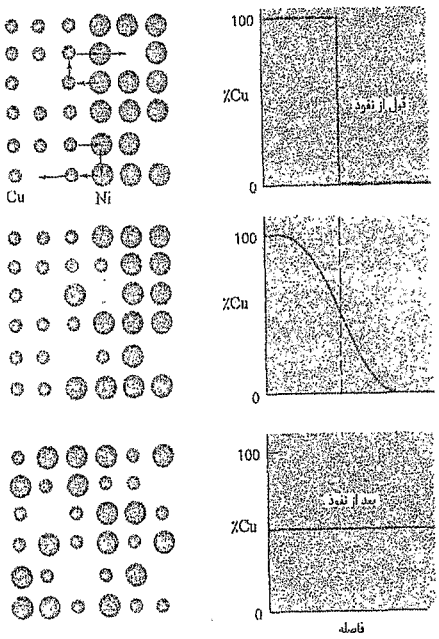
پخش در جامدات به دو دلیل اصلی مورد مطالعه قرار می‌گیرد. دلیل اول این است که با دانستن این پدیده، می‌توان تغییراتی که در دماهای بالا در جامدات روی می‌دهد را درک کرد. دلیل دوم برای مطالعه پخش، آگاهی یافتن از چگونگی حرکت اتمها در جامدات است. دلیل دوم ارتباط مستقیمی با مطالعه نقص‌ها و در رفتگی‌ها در جامدات دارد. با استفاده از این واقعیت که پخش در امتداد این نواقص سریعتر صورت می‌گیرد می‌توان اطلاعات مفیدی درباره چگونگی حرکت اتمها از طریق این نواقص به دست آورد [۱].

تغییرات ریز ساختار مواد و رابطه آنها با خواص فیزیکی و مکانیکی یکی از زمینه‌های مهم در مهندسی مواد است. اکثر تغییرات ریز ساختارها به وسیله حرکت اتم‌ها اتفاق می‌افتد. پخش اتم‌ها همچنین کنترل کننده سینتیک یا سرعت بیشتر تغییر حالت‌های فازی است و تقریباً تمام پیشرفت‌ها در تئوری سرعت واکنش‌ها در جامدات با استفاده از تئوری پخش بوده است.

۱-۲ قوانین پخش:

در فرآیند پخش، یک نوع اتم (مانند A) در شبکه اتمی نوع دیگری (مانند B) حرکت می‌کند و می‌تواند فاصله‌ای را که قابل اندازه‌گیری است طی کند. البته شرط اولیه برای انجام این فعل و انفعالات حلالیت یکی در دیگری (A در B) است. نیروی محرکه برای وقوع حرکت اتم‌ها همان اختلاف غلظت اتمی بین قسمت‌هایی از کریستال که در همسایگی یکدیگر است، می‌باشد. پخش

همیشه در جهتی انجام می‌گیرد که در آن جهت آنتالپی آزاد سیستم کاهش یابد، یعنی در جهت افت آنتالپی آزاد سیستم که اغلب با همان مسیر حرکت غلظت زیاد به کم در جهت رسیدن به حالت تعادل غلظت مطابقت می‌کند. بنابراین فرآیند پخش زمانی پایان می‌پذیرد که اتم‌های A به صورت یکنواخت در محلول جامد B توزیع شود شکل (۱-۱) [۱].



شکل (۱-۱): نفوذ اتمهای مس به داخل نیکل، سرانجام اتمهای مس تقریباً یکنواخت در شبکه نیکل توزیع می‌شوند.

۱-۲-۱ قانون اول فیک[1]:

دو صفحه اتمی موازی به فاصله $\Delta x = a$ از یکدیگر را مطابق شکل زیر در نظر می‌گیریم.

[1] Fick's First Law