

KAI

m.saghavezhian@ph.iut.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۸۹/۹/۸ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۰/۳/۱۹)

%

باید خواص مکانیکی آن مورد بررسی دقیق قرار گیرد. مس، نقره و طلا از جمله فلزاتی هستند که از دیرباز مورد توجه خاص بوده‌اند. این گروه از فلزات که جزو عناصر واسطه هستند، به علت رسانایی الکتریکی و گرمایی بالا از جایگاه ویژه‌ای در صنایع الکترونیک برخوردارند. طلا و نقره مقاومت بالایی در برابر خوردگی و اکسید شدن دارند و به همین دلیل در محیط‌های مرطوب کاربرد دارند و مس به علت ارزانی و رسانندگی الکتریکی و گرمایی بالا، به صورت خالص یا آلیاژی در ساخت تراشه‌های الکترونیکی به کار می‌رود. اما خواص مکانیکی بسیار عالی آنها در طراحی قطعات ظریف (ریز و دقیق)، ارزش آنها را دو چندان کرده است. از این رو، طراحان قطعات ظریف، علاقه بسیار زیادی برای استفاده از این فلزات در صنعت دارند؛ به ویژه مس که ارزان‌تر از طلا و نقره است. برای مثال، ساخت لایه نازک

امروزه، یکی از زمینه‌هایی که به‌طور جدی مورد توجه قرار گرفته و به سرعت در حال پیشرفت است طراحی هوشمندانه مواد برای استفاده در شرایط سخت و خاص است. به جرات می‌توان گفت که مهمترین خاصیتی که در هر ماده برای استفاده در صنایع مختلف باید مورد توجه قرار گیرد، خواص مکانیکی آن ماده است. در طراحی قطعاتی که به علل مختلف (گرما، فشار و ...) تحت تنش هستند، توجه به خواص مکانیکی از اهمیت فوق العاده‌ای برخوردار است، به عنوان مثال، در مهندسی کرنش از طریق اعمال تنش‌های کنترل شده در جهات خاص، تقارن سیستم را تغییر داده و در نتیجه گاف نواری و تحرک‌پذیری الکترون‌ها تغییر می‌یابد و قطعه تحت تنش خواص الکترونیکی متفاوتی از خود نشان می‌دهد [۱]. بنابراین قبل از طراحی هر گونه قطعه‌ای

فلزات پرکاربرد شود. در این مقاله خواص و رفتار مکانیکی تک‌بلورهای مس، نقره و طلا را از دیدگاه میکروسکوپی و با استفاده از اصول اولیه کوانتومی مورد بررسی قرار می‌دهیم. رفتار مکانیکی در واقع پاسخ مکانیکی بلور (تنش) به انواع کرنش‌های مختلف است. بنابراین ابتدا تنش را از دیدگاه مکانیک کوانتومی بررسی خواهیم کرد و سپس مبانی توصیف توپولوژی بلورها را ارائه می‌کنیم. در ادامه خواص مکانیکی و منحنی‌های تنش-کرنش محاسبه شده ارائه خواهند شد و سپس به بررسی تغییرات توپولوژی چگالی بار در اثر اعمال تنش خواهیم پرداخت.

تنش را در مکانیک کلاسیک، می‌توان به صورت نسبت بردار نیرو به بردار عمود سطح تعریف کرد. در حقیقت تنش تعمیم تعریف فشار است که در حالت کلی یک تانسور متقارن مرتبه دو بوده و دارای نه مؤلفه است. اگر یک جزء مکعبی از ماده در نظر گرفته شود به گونه‌ای که بردارهای عمود صفحات آن  $x, y, z$  باشند و نیروی وارد بر این جزء، به مؤلفه‌های عمود بر صفحات تجزیه شود آنگاه تانسور تنش به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\sigma_{ij} = \frac{F_j}{A_i} = \frac{-\partial U}{\partial r_i} = \frac{-r_i}{\Omega} \frac{\partial U}{\partial r_j}, \quad (1)$$

$F_j$  مؤلفه  $j$ ام نیروی وارد بر جزء،  $A_i$  مساحت وجه  $i$ ام،  $r_i$  بردار در راستای عمود بر این وجه،  $\Omega$  حجم جزء و  $U$  پتانسیل نیروی  $F$  است که مربوط به اثرات خارجی می‌باشد. تغییر شکل سیستم در اثر تنش، کرنش ( $\epsilon_{kl}$ ) نام دارد که به صورت تغییر طول به طول اولیه تعریف می‌شود و در حالت کلی یک تانسور مرتبه دو است. تنش و کرنش از طریق تانسور مرتبه چهار ضرایب الاستیک ( $C_{ijkl}$ ) به هم مرتبط می‌شوند:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (2)$$

در شبکه‌های مکعبی، به علت تقارن، ۸۱ مؤلفه تانسور ضرایب الاستیک به ۳ مؤلفه مستقل کاهش می‌یابد. در نماد گذاری ویگت<sup>۵</sup> رابطه تنش و کرنش برای شبکه‌های مکعبی ناهمسانگرد به صورت زیر است:

از این فلزات نسبتاً آسان است، از این رو در طراحی سیستم خنک کننده بوردهای الکترونیکی و مدارهای چاپی از این مواد استفاده می‌شود. جذب بالای انرژی کرنش در این فلزات که به دلیل چقرمگی<sup>۱</sup> آنها است سبب دیر شکستن و تحمل فشار بالا می‌شود. از طرفی دمای گذار چقرمگی به تدریج<sup>۲</sup> پایین این فلزات، این امکان را فراهم می‌کند تا در سیستم‌های فوق سرد به کار گرفته شوند.

در محاسبات ابتدا به ساکن به بررسی تک‌بلورهای خالص مواد پرداخته می‌شود. تک‌بلورها بدون نابه‌جایی یا ترک هستند و به همین دلیل استحکام ایده‌آل مواد از طریق بررسی این مواد به دست می‌آید. اخیراً مسئله استحکام ایده‌آل مواد مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. یکی از علل این توجه، توسعه روش‌های نانو-تورفتگی<sup>۳</sup> است، زیرا در نواحی با اندازه نانو، رفتار مکانیکی ویژه‌ای دیده می‌شود که به علت تعداد اندک نابه‌جایی و یا ترک در ناحیه زیر توپرنده<sup>۴</sup> است. علت دیگر مربوط به پیشرفت روش‌های اندازه‌گیری استحکام نانو ساختارها مثل نانولوله‌ها و نانوسیم‌ها است که اساساً بدون نابه‌جایی و ترک هستند [۳] و همچنین توسعه روش‌های فرآوری مواد برای تولید نانو-میکرو-بلور فلزی باعث شده تا بلورهایی با کیفیت بالا و چگالی نابه‌جایی متحرک پایین در هر دانه ساخته شود [۴]. در تمامی موارد بالا نمونه‌های مذکور دارای استحکام بالایی بوده که به دلیل عدم حضور نابه‌جایی و ترک می‌باشد، در نتیجه استحکام ایده‌آل مواد در تک‌بلورهای کامل به عنوان حد بالای استحکام، از اهمیت خاصی برخوردار است. هر چند اندازه‌گیری‌های گسترده و مشاهدات آزمایشگاهی فراوانی [۵] روی رفتار مکانیکی تک‌بلورهای مس، نقره و طلا انجام شده است اما بررسی منحنی تنش-کرنش براساس تغییرات چگالی بار در جایی گزارش نشده است. تحلیل میکروسکوپی می‌تواند منجر به آشکار شدن خواص جدید و متعاقباً درک عمیق تری از ویژگی‌های مکانیکی این

۱. ductility

۲. brittleness

۳. nano-indentation

۴. indenter

۵. Voigt representation

$$\langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) \left[ \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2}{d((\mathbf{1}+\varepsilon)\mathbf{r})^2} + V_{tot}((\mathbf{1}+\varepsilon)\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \psi^*(\mathbf{r}) \left\{ \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m_i} [\mathbf{p}_i^2 - 2 \sum_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} p_{i\alpha} p_{i\beta}] + V_{tot}((\mathbf{1}+\varepsilon)\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (8)$$

که داریم  $V_{tot} = V_{int} + V_{ext}$ . انتگرال رابطه بالا با تبدیل  $\mathbf{r} \rightarrow (\mathbf{1}+\varepsilon)\mathbf{r}$  محاسبه شد که  $\mathbf{1}$  نماد ماتریس همانی است. از طرفی طبق اصل وردش، انرژی در حالت پایه کمینه است یعنی  $\langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle$  در  $\varepsilon=0$  باید کمینه شود، بنابراین:

$$\left. \frac{\partial \langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right|_{\varepsilon=0} = 0 \Rightarrow \sum_i \left\langle \psi \left| \frac{p_{i\alpha} p_{i\beta}}{m_i} - r_{i\beta} \nabla_{i\alpha} (V_{int} + V_{ext}) \right| \psi \right\rangle = 0, \quad (9)$$

این معادله، معادله اصلی برای به دست آوردن تنش ماکروسکوپی است. طبق رابطه (۱) تنش از مشتق انرژی پتانسیل نسبت به کرنش به دست می آید. بنابراین تنش ناشی از پتانسیل خارجی  $V_{ext}$  عبارت است از:

$$T_{\alpha\beta} = - \sum_i \left\langle \psi \left| r_{i\beta} \nabla_{i\alpha} (V_{ext}) \right| \psi \right\rangle. \quad (10)$$

تانسور تنش  $T_{\alpha\beta}$  برای یک سیستم در حال تعادل و بدون گشتاور خارجی، یک تانسور متقارن است. با توجه به معادلات (۹) و (۱۰) تنش وارد بر سیستم به صورت زیر با متغیرهای درونی سیستم مرتبط است:

$$T_{\alpha\beta} = - \sum_i \left\langle \psi \left| \frac{p_{i\alpha} p_{i\beta}}{m_i} - r_{i\beta} \nabla_{i\alpha} (V_{int}) \right| \psi \right\rangle, \quad (11)$$

معادله (۱۱) یک صورت از نظریه تنش است که تنش ماکروسکوپی کل را به مقادیر چشمداشتی عملگرهای درونی سیستم ربط می دهد. در یک سیستم ماکروسکوپی که حجم ( $\Omega$ ) خوش تعریف باشد، چگالی متوسط تنش ( $\sigma_{\alpha\beta}$ ) به صورت زیر تعریف می شود:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{T_{\alpha\beta}}{\Omega}. \quad (12)$$

با توجه به معادله های (۹) و (۱۱)، برای محاسبه تنش از پاسخ انرژی درونی سیستم نسبت به کرنش استفاده می کنیم یعنی از

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (3)$$

پس برای توصیف رفتار مکانیکی مواد مکعبی دانستن سه ضریب الاستیک  $C_{11}$ ،  $C_{12}$  و  $C_{44}$  کافی است.

تنش کل در یک سیستم را می توان با اصل وردش و تبدیل تابع موج به دست آورد که توسط مارتین و همکارانش [۶] ارائه شد. در این رهیافت هامیلتونی سیستم به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V_{int} + V_{ext}, \quad (4)$$

در این رابطه پتانسیل کل سیستم به دو سهم  $V_{int}$  که پتانسیل داخلی بین اتمی ذرات است و  $V_{ext}$  که سهم ناشی از عوامل خارجی مثل نیروهای وارد بر سطوح سیستم است، تجزیه شده است. پس از حل معادله بس ذره ای شرودینگر، تابع موج بس ذره ای حالت پایه ( $\psi_0$ ) به دست می آید. با استفاده از تابع موج حالت پایه، انرژی حالت پایه سیستم به صورت زیر محاسبه می شود:

$$E_0 = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle. \quad (5)$$

برای محاسبه تنش، یک کرنش یکنواخت به سیستم اعمال می شود که در اثر آن مختصات تمام ذرات به صورت زیر با تانسور متقارن کرنش  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  تبدیل می یابند:

$$r_{i\alpha} \rightarrow r_{i\alpha} + \sum_{\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} r_{i\beta}. \quad (6)$$

با توجه به بهنجار بودن توابع موج، به راحتی می توان دید که پس از اعمال کرنش بالا، تابع موج حالت پایه تحت تبدیل زیر تغییر می کند:

$$\psi_\varepsilon(\mathbf{r}) \rightarrow \det(\mathbf{1}+\varepsilon)^{-\frac{1}{2}} \psi_\varepsilon((\mathbf{1}+\varepsilon)^{-1}\mathbf{r}). \quad (7)$$

با محاسبه مقدار چشمداشتی هامیلتونی نسبت به  $\psi_\varepsilon(\mathbf{r})$  انرژی سیستم تحت کرنش به دست می آید:

انرژی درونی سیستم (حاصل از متغیرهای درونی) نسبت به کرنش مشتق می‌گیریم. در نظریه تابعی چگالی ثابت می‌شود که انرژی درونی سیستم (مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی مربوط به متغیرهای درونی سیستم) تابعی‌ای از چگالی بار الکترونی و مکان هسته‌ها  $E = E[\{\mathbf{R}_i\}, \rho(\mathbf{r}, \{\mathbf{R}_i\})]$  است که  $\{\mathbf{R}_i\}$  مکان هسته‌ها و  $\rho(\mathbf{r}, \{\mathbf{R}_i\})$  چگالی بار الکترون‌هاست. در نتیجه، خواص کشسانی ماکروسکوپی نیز از وردش انرژی نسبت به حرکت دسته‌جمعی هسته‌ها از حالت پایه به دست می‌آید. این اختلال از حالت پایه (کرنش) را می‌توان با استفاده از فضای برداری شش‌بعدی  $\varepsilon_{ij}$  به طور کامل توصیف کرد. در نتیجه انرژی کشسانی را به جای نوشتن برحسب تابعی از مکان هسته‌ها، می‌توان بر حسب کرنش اعمالی بیان کرد و به صورت زیر در نظر گرفت:

همان‌طور که توضیح داده شد تانسور تنش از مشتق انرژی درونی نسبت به کرنش به دست می‌آید. تانسور تنش را می‌توان به شکل زیر نیز بازنویسی کرد:

$$E = E\left[\left\{\mathbf{R}_i\left(\varepsilon_{ij}\right)\right\}, \rho\left(\mathbf{r}, \varepsilon_{ij}\right)\right], \quad (13)$$

رابطه بالا در حقیقت تعمیم قضیه هلمن-فاینمن است. طبق قضیه دوم هوهنبرگ-کوهن، وردش انرژی نسبت به چگالی در حالت پایه صفر است و بنابراین قسمت دوم رابطه (۱۴) صفر می‌شود. تغییر در تنش به علت کرنش یا پاسخ کشسان، از محاسبه مشتق تنش نسبت به کرنش حاصل می‌شود:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{ij}} + \int dV \frac{\partial \rho(r)}{\partial \varepsilon_{ij}} \frac{\delta E}{\delta \rho(r)}, \quad (14)$$

دقت کنید که در رابطه (۱۵)، برخلاف رابطه (۱۴)، جمله دوم صفر نیست زیرا مشتق دوم انرژی نسبت به چگالی در حالت پایه می‌تواند مقداری غیر صفر داشته باشد. جمله اول رابطه (۱۵) مربوط به حرکت دسته‌جمعی هسته‌هاست در حالی که چگالی بار ثابت است (کرنش هسته‌ها). قسمت دوم از وردش در چگالی بار ناشی می‌شود (توزیع مجدد چگالی بار برای کمینه کردن انرژی). دو کسر اول در انتگرالده  $\frac{\partial \rho(\mathbf{r})}{\partial \varepsilon_{ij}}$  و

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} + \iint dV dV' \frac{\partial \rho(r)}{\partial \varepsilon_{ij}} \frac{\partial \rho(r')}{\partial \varepsilon_{kl}} \frac{\delta^2 E}{\delta \rho(r) \delta \rho(r')}, \quad (15)$$

دقت کنید که در رابطه (۱۵)، برخلاف رابطه (۱۴)، جمله دوم صفر نیست زیرا مشتق دوم انرژی نسبت به چگالی در حالت پایه می‌تواند مقداری غیر صفر داشته باشد. جمله اول رابطه (۱۵) مربوط به حرکت دسته‌جمعی هسته‌هاست در حالی که چگالی بار ثابت است (کرنش هسته‌ها). قسمت دوم از وردش در چگالی بار ناشی می‌شود (توزیع مجدد چگالی بار برای کمینه کردن انرژی). دو کسر اول در انتگرالده  $\frac{\partial \rho(\mathbf{r})}{\partial \varepsilon_{ij}}$  و

تغییرات همبسته بار در دو نقطه  $\mathbf{r}$  و  $\mathbf{r}'$  است. علامت قسمت اول رابطه (۱۵) همیشه مثبت است، زیرا برای حرکت دادن هسته‌ها در میان توزیع چگالی الکترونی باید کار انجام شود. در اثر حرکت هسته‌ها، چگالی بار به گونه‌ای تغییر می‌کند تا انرژی دستگاه کمینه شود، در حقیقت حرکت هسته‌ها باعث تغییر در پتانسیل خارجی می‌شود که طبق قضیه هوهنبرگ-کان منجر به چگالی بار حالت پایه جدیدی خواهد شد. از آنجا که تغییر در چگالی بار صورت خودبه‌خودی است، لذا قسمت دوم این رابطه همیشه منفی است و نیاز به انجام کار نیست. پس در حقیقت توزیع دوباره چگالی بار در اثر کرنش، همیشه ثابت‌های کشسانی بلور را کم می‌کند و بلور نرم می‌شود. یعنی هر چه توزیع دوباره بار بیشتر باشد، ضرایب کشسانی کمتر می‌شوند. از این رو مشاهده می‌شود که سختی بلور، ارتباط تنگاتنگی با نحوه توزیع چگالی بار (توپولوژی چگالی بار) دارد [۷].

بیدر در سال ۱۹۶۴ به بررسی چگالی بار به دست آمده از محاسبات کوانتمی پرداخت و نشان داد که توپولوژی چگالی بار حاوی اطلاعات مهمی از خواص ماده است [۸]. چگالی بار مثل هر میدان اسکالر دیگری دارای یک توپولوژی یکتاست که با توجه به نقاط بحرانی<sup>۱</sup> توصیف می‌شود. نقاط بحرانی یک میدان اسکالر که همان ریشه‌های گرادیان آن میدان هستند، از رابطه زیر به دست می‌آیند:

$$\nabla \rho = i \frac{\partial \rho}{\partial x} + j \frac{\partial \rho}{\partial y} + k \frac{\partial \rho}{\partial z} = 0 \quad (16)$$

با در نظر گرفتن مشتق دوم چگالی، به طور کلی چهار نوع نقطه بحرانی تعریف می‌شود: کمینه موضعی، بیشینه موضعی و دو نوع نقطه زینی. مشتق دوم چگالی بار دارای ۹ مؤلفه است، از این رو ماتریس هسیان<sup>۲</sup> نامیده می‌شود:

۱. critical points

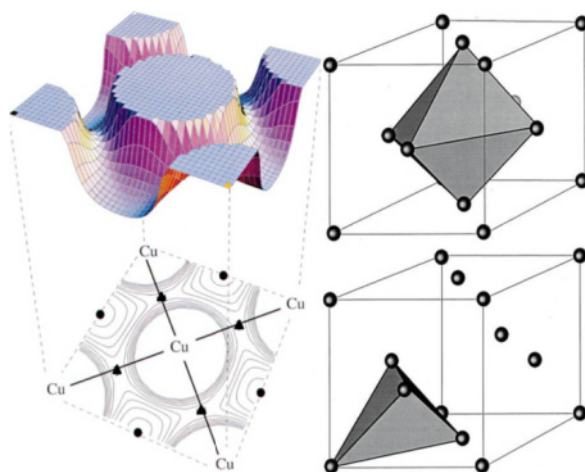
۲. Hessian matrix

در صورتی که همه ویژه مقادیر مثبت باشند نقطه بحرانی یک کمینه موضعی است و قفس (Cage) نامیده می‌شود. تعداد نقاط بحرانی در یک بلور از رابطه توپولوژی زیر، به نام رابطه مورس، تبعیت می‌کند:

$$n_{NCP} + n_{RCP} = n_{BCP} + n_{CCP}, \quad (18)$$

که اندیس‌های  $NCP$ ,  $BCP$ ,  $RCP$  و  $CCP$  به ترتیب نماد نقاط بحرانی هسته، پیوند، حلقه و قفس هستند. توپولوژی چگالی بار به صورت یکتا با مشخص شدن نقاط بحرانی تعیین می‌شود. شکل ۱ ساختار بلوری مس را به همراه نقاط بحرانی و چگالی بار در صفحه (۱۰۰) نشان می‌دهد. این توپولوژی به طور کیفی مشخصه تمام فلزات با ساختار fcc است و فقط مقدار عددی چگالی در آنها متفاوت است. نقاط زینی در شکل ۱ نشان دهنده پیوند میان اتم‌های همسایه می‌باشد. اگر اتم‌های پیوند خورده، دو به دو به هم وصل شوند دو نوع چندوجهی به وجود می‌آید، چهاروجهی و هشت‌وجهی (شکل ۱). در مرکز هر کدام از این چندوجهی‌ها یک نقطه قفس وجود دارد و رئوس آنها را اتم‌ها می‌سازند. در مرکز هر وجه چندوجهی یک نقطه حلقه و در وسط هر ضلع آن یک نقطه پیوند وجود دارد. با استفاده از این دو نوع چندوجهی، می‌توان به طور کامل حجم یک سلول واحد fcc را پر کرد. پس توپولوژی چندوجهی را می‌توان با تعداد رأس، ضلع و وجه توصیف کرد. مثلاً چهار وجهی دارای ۴ رأس و ۶ ضلع و ۴ وجه است. در نتیجه هر ساختاری که چگالی بار آن منجر به ساخت یک چهاروجهی و یک هشت‌وجهی شود، دارای ساختار fcc است.

بخش عمده محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی، با روش بسط امواج تخت و استفاده از شبه پتانسیل در تقریب چگالی موضعی (LDA) و تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) با استفاده از پارامترسازی پردو-بورک-ارنزهوف (PBE) [۹] انجام شد. تمام محاسبات مربوط به منحنی‌های تنش-کرنش و محاسبه ضرایب الاستیک با استفاده از بسته محاسباتی QUANTUM ESPRESSO انجام شد [۱۰]. از آنجا که برای محاسبه تنش باید مشتقات انرژی کل محاسبه شود تعداد نقاط  $k$  زیادی مورد نیاز است. همچنین



شکل ۱. ساختار fcc بلور مس و چندوجهی‌هایی که ساختار fcc را می‌سازند (راست). چگالی بار (منحنی سه بعدی) و توپولوژی (نمودار پربندی) مس در صفحه (۱۰۰). دایره‌ها نشان‌دهنده نقطه قفس و مثلث‌ها نشانگر نقاط پیوند هستند (چپ).

$$A(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial z} \\ \frac{\partial^2 \rho}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} & \frac{\partial^2 \rho}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial^2 \rho}{\partial z \partial x} & \frac{\partial^2 \rho}{\partial z \partial y} & \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \end{bmatrix}, \quad (17)$$

ماتریس هسیان را می‌توان به علت حقیقی و متقارن بودن قطری کرد. سه ویژه مقدار این ماتریس در هر نقطه بحرانی، انحنای چگالی بار را در سه جهت عمود برهم در آن نقطه بحرانی مشخص می‌کنند و ویژه بردارهای آن، محورهای اصلی انحنا را نشان می‌دهند. یک ویژگی مهم ماتریس هسیان این است که رد آن تحت چرخش محورهای مختصات، ناورداست. رد ماتریس هسیان، لاپلاسی چگالی نام دارد و معیاری از تمرکز بار در نقطه بحرانی است.

نقاط بحرانی با توجه به ویژه مقادیر ماتریس هسیان در آن نقاط مشخصه یابی و طبقه‌بندی می‌شوند. اگر هر سه ویژه مقدار منفی باشند، نقطه بحرانی یک بیشینه موضعی است و هسته‌ای (Nuclear) نامیده می‌شود. اگر دو تا از ویژه مقادیر منفی و یکی مثبت باشد نقطه بحرانی یک نوع نقطه زینی به نام پیوند (Bond) است. چنانچه یکی از ویژه مقادیر منفی و بقیه مثبت باشند نوع دیگری از نقطه زینی داریم که حلقه (Ring) نام دارد.

جدول ۱. پارامترهای بهینه محاسباتی برای محاسبه تنش با دقت ۰/۰۱ GPa.

تعداد نقاط نمونه k	انرژی قطع تابع موج (Ry)	انرژی قطع بسط چگالی الکترونی (Ry)	مس
۴۵×۴۵×۴۵	۴۴	۴۲۰	مس
۴۵×۴۵×۴۵	۴۴	۴۴۰	نقره
۴۵×۴۵×۴۵	۴۲	۴۲۰	طلا

جدول ۲. خواص ساختاری و مکانیکی بلورهای مس، نقره و طلا که با استفاده از تابعی های LDA و GGA محاسبه شده اند. نتایج تجربی برای مقایسه ارائه شده اند. a: ثابت شبکه تعادلی،  $E_c$ (eV): انرژی همدوسی، B(GPa) و  $E_{100}$ : مدول حجمی و مدول یانگ در جهت [۱۰۰]،  $C_{11}$  و  $C_{12}$  و  $C_{33}$ : ثابت های کشسانی.

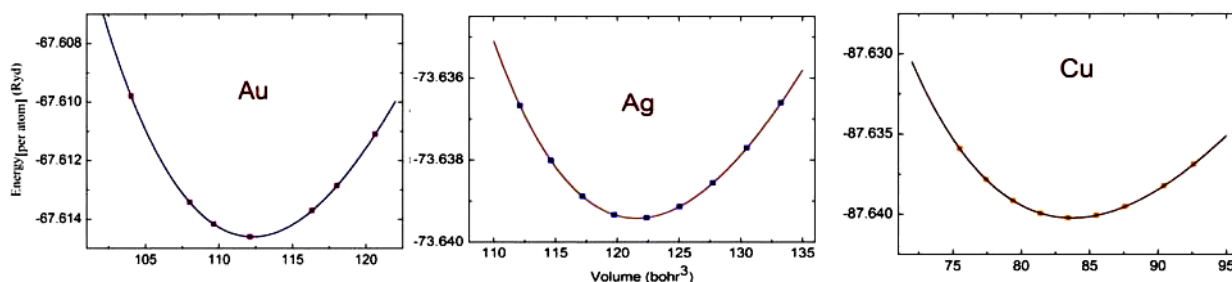
C <sub>33</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>11</sub>	B	E <sub>100</sub>	E <sub>c</sub>	a	
۷۳	۱۳۸	۱۸۷	۱۲۷	۷۰	-۳/۵	۳/۶۷	GGA
۹۴	۱۶۶	۲۲۷	۱۷۰	۸۶	-۴/۵۱	۳/۵۵	LDA
۷۵[۹]	۱۲۵[۹]	۱۷۶[۹]	۱۳۷[۹]	۷۲[۸]	-۳/۵ [۱۵]	۳/۶۱[۱۴]	تجربی
۴۳	۸۰	۱۰۹	۹۳	۴۳	-۲/۷	۴/۱۶	GGA
۵۹	۱۲۱	۱۶۳	۱۳۵	۵۹	-۳/۷۳	۴/۰۳	LDA
۴۶	۹۳	۱۲۴	۱۰۰	۴۴	-۲/۹	۴/۰۹	تجربی [۹]
۲۹	۱۳۳	۱۵۷	۱۴۱	۳۵	-۳/۱۳	۴/۱۶	GGA
۳۸	۱۸۲	۲۱۰	۱۹۰	۴۱	-۴/۴	۴/۰۵	LDA
۴۲	۱۷۰	۲۰۱	۱۷۳	۴۲	-۳/۷	۴/۰۸	تجربی [۹]

اتمی از پایه های اتمی و هماهنگی های کروی و در ناحیه بین جایگاهی از توابع موج تخت استفاده می شود. همان طور که گفته شد مزیت اصلی این روش عدم نیاز به استفاده از شبه پتانسیل است، در نتیجه تمام چگالی الکترونی در دسترس است و سیستم به طور کامل بررسی می شود. از آنجا که در این روش الکترون های مغزه که پر انرژی هستند در چارچوب محاسبات نسبی کامل دیراک-فاک و الکترون های ظرفیت که انرژی کمتری دارند در رهیافت نسبی اسکالر محاسبه می شوند اتم های سنگین نیز به خوبی توصیف می شوند و چگالی بار از دقت بالایی برخوردار است. پارامترهای محاسباتی برای محاسبه چگالی بار عبارتند از: شعاع کره موفین-تین ۲/۴، پارامتر قطع در بسط چگالی، ۲۴ و پارامتر قطع در بسط تابع موج، ۹.

با استفاده از پارامترهای بهینه شده، ثابت شبکه تعادلی، انرژی

برای جلوگیری از به وجود آمدن نوفه و عدم همگرایی در تنش، انرژی قطع بسط تابع موج با استفاده از تنش همگرا شد. پس از آزمایش های همگرایی، پارامترهای محاسباتی مناسب برای رسیدن به دقت مورد نظر (همگرایی تنش تا ۰/۰۱ GPa) بهینه و مطابق جدول ۱ انتخاب شدند.

چگالی بار با استفاده از روش FP-LAPW با استفاده از بسته محاسباتی Wien2k [۱۱] به دست آمد. این روش نیز براساس فرمالیسم کوهن-شم و در چارچوب نظریه تابعی چگالی است و در حال حاضر دقیق ترین روش بررسی ساختار الکترونی مواد است چون در نزدیکی هسته ها تقریباً هیچ گونه تقریبی در پتانسیل بلور به کار نمی رود. در روش FP-LAPW فضای یاخته واحد بلوری به دو ناحیه تقسیم می شود: کره هایی به مرکز اتم ها (کره های اتمی) و فضای باقی مانده بین کره ها (ناحیه بین جایگاهی). در هر کدام از این نواحی از یک نوع توابع پایه برای بسط تابع موج استفاده می شود. درون کره های



شکل ۲. نمودارهای انرژی-حجم برازش یافته با معادله حالت مورناگون در بلورهای Au, Ag, Cu.

دست آمده از مسیر محاسبه تنش، توافق بسیار خوبی با مقدار تجربی آن دارد. البته مشخصه‌های مکانیکی (ضرایب الاستیک، مدول‌های مختلف و ...) سه فلز مورد مطالعه قبلاً توسط گروه‌های دیگری مورد مطالعه قرار گرفته بود [۱۳]، اما در کار حاضر به منظور یافتن بهترین تابعی تبادل-همبستگی برای توصیف منحنی‌های تنش-کرنش و همچنین اطمینان از صحت محاسبات، مشخصه‌های مکانیکی این سه فلز دوباره محاسبه شد. در مجموع، برای طلا تابعی LDA و برای مس و نقره تابعی GGA منجر به نتایج سازگارتری با یافته‌های تجربی شده‌اند.

در ادامه به محاسبه و بررسی منحنی‌های تنش-کرنش، که حاوی اطلاعات زیادی از رفتار مکانیکی سیستم هستند، می‌پردازیم. برای محاسبه منحنی تنش برحسب کرنش در سیستم‌های مورد مطالعه، در هر مرحله یک کرنش در جهت [۱۰۰] به ماده وارد و در دو جهت عمود دیگر به ماده اجازه واهلش داده شد به گونه‌ای که تنش در جهات عمود تا دقت ۰/۰۱ GPa واهلیده شد.

نمودارهای محاسبه شده تنش برحسب کرنش برای هر سه فلز مورد بررسی در شکل ۳ رسم شده‌اند. حوزه‌های مکانیکی مختلف و خصوصیات مکانیکی قابل استخراج از این نمودارها به صورت طرح‌وار در بخش راست همین شکل ارائه شده است. همان طور که مشاهده می‌شود به طور کلی نمودار تنش-کرنش به دو حوزه اصلی الاستیک و پلاستیک تقسیم می‌شود. رفتار ماده در هر کدام از این حوزه‌ها توصیف کننده نوع پاسخ مکانیکی ماده است. از مبدأ تا جایی که نمودار رفتار

همدوسی، مدول ینگ (تک بلور در جهت [۱۰۰])، مدول حجمی و ضرایب الاستیک  $C_{11}$  و  $C_{12}$  با استفاده از دو تابعی تقریب چگالی موضعی (LDA) و تقریب گرادین تعمیم یافته (GGA) محاسبه و در جدول ۲ ارائه شده‌اند. مقادیر تجربی کمیات محاسبه شده نیز برای مقایسه نمایش داده شده‌اند. مدول حجمی و پارامتر شبکه تعادلی با محاسبه سیستم در حجم‌های مختلف و سپس برازش منحنی‌های انرژی-حجم به دست آمده با معادله حالت مورناگون استخراج شده‌اند. نمودارهای مربوط به این برازش در شکل ۲ نمایش داده شده است.

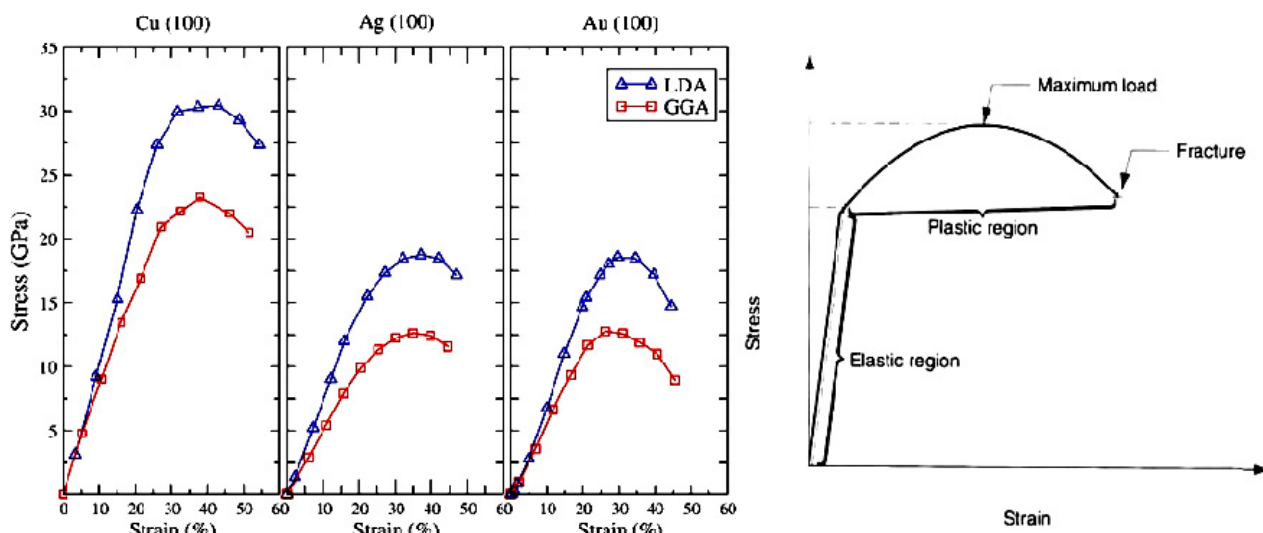
برای محاسبه ضرایب کشسانی  $C_{11}$  و  $C_{12}$ ، ابتدا باید با واهلش دقیق سیستم، تنش را با دقت مطلوبی صفر کرد و پارامتر شبکه تعادلی عاری از تنش را یافت. سپس با اعمال یک کرنش کوچک به سیستم، تنش شبکه تحت کرنش را محاسبه کرد. در رابطه (۱۳)،  $\epsilon_{11}$  کرنش کوچک اعمال شده به شبکه تعادلی است که در کار حاضر برابر با ۰/۰۰۰۴ در نظر گرفته شد. با استفاده از مولفه محوری تنش،  $C_{11}$  و با استفاده از مولفه عمودی تنش،  $C_{12}$  به دست می‌آید:

$$C_{11} = \frac{\sigma_{11}}{\epsilon_{11}}, \quad C_{12} = \frac{\sigma_{12}}{\epsilon_{11}} \quad (19)$$

با توجه به کوچک بودن مقدار کرنش، نیازی به واهلش شبکه در جهت عمود بر کرنش نیست. پس از محاسبه ضرایب کشسانی، مقدار مدول ینگ در جهت ۱۰۰ از رابطه زیر به دست آمد [۱۲]:

$$E_{100} = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (20)$$

همان‌طور که در جدول ۲ مشاهده می‌شود، مدول ینگ به



شکل ۳. راست: نمودار طرح وار منحنی تنش-کرنش. چپ: نمودارهای محاسبه شده تنش برحسب کرنش در جهت  $[100]$  در بلورهای مس، نقره و طلا.

ماده در جذب انرژی تنش (سطح زیر نمودار در ناحیه الاستیک) بیشتر و به اصطلاح ماده محکم تر می شود در حالی که هر چه کرنش UTS بیشتر باشد ماده قابلیت مفتول شدگی بیشتری دارد و چغرمه تر است.

با استفاده از تقریب های چگالی موضعی (LDA) و گرادیان تعمیم یافته (GGA)، منحنی های تنش-کرنش فلزات مس، نقره و طلا در جهت بلوری  $[100]$  محاسبه شده اند (شکل ۳). می بینیم که تقریب چگالی موضعی منجر به مقادیر بزرگ تری برای تنش می شود و در واقع مواد را سخت تر نشان می دهد. علت این است که در این تقریب توزیع چگالی الکترونی به صورت موضعی یکنواخت فرض می شود و در نتیجه پیوندها معمولاً قوی تر از مقدار واقعی پیش بینی می شوند. بنابراین نمودارهای محاسبه شده در تقریب LDA مدول یانگ بیشتر و نقطه UTS بالاتری را نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود، کرنش تسلیم در هر سه فلز در حدود ۲۰ تا ۲۵٪ است و در مس اندکی از طلا و نقره بیشتر به نظر می رسد. تنش تسلیم و متعاقباً مدول یانگ فلز مس به مقدار قابل توجهی از نقره و طلا بیشتر است. این رفتار نشان از سخت تر بودن مس نسبت به طلا و نقره دارد. علاوه بر آن به نظر می رسد که نمودار تنش-کرنش مس با شیب بیشتری از محدوده الاستیک به حوزه پلاستیک وارد می شود. این رفتار شاید نشان دهنده تردتر بودن

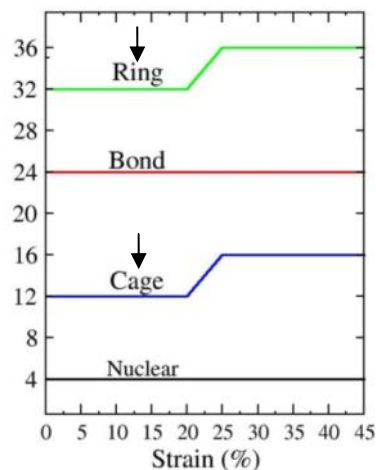
خطی دارد (نقطه تسلیم: Yield) حوزه الاستیک و بعد از آن حوزه پلاستیک نام دارد. در حوزه الاستیک، شیب تغییرات خطی تنش بر حسب کرنش نشان دهنده مدول یانگ در جهت مشخص است و هر چه این شیب بیشتر باشد ماده سخت تر است. اما مدول یانگ به تنهایی رفتار مکانیکی ماده را تعیین نمی کند چرا که در موادی مثل شیشه مدول یانگ بسیار زیاد است، اما ماده به شدت شکننده و ترد است در حالی که برخی مواد دیگر با مدول یانگ بالا، به علت کم بودن تنش تسلیم مواد نرمی هستند و سریع رفتار الاستیک را از دست داده، تغییر شکل دائم می یابند. در نتیجه برای توصیف کامل رفتار مکانیکی ماده، بررسی روند تغییرات تنش بر حسب کرنش در هر دو حوزه الاستیک و پلاستیک لازم است. در یک تنش ثابت، هر چه کرنش تسلیم بزرگ تر باشد ماده نرم تر می شود در حالی که در یک کرنش ثابت، با افزایش تنش تسلیم، رفتار ماده ضمن کشسان بودن سخت تر می شود و ماده در مقابل کرنش مقاومت زیادی از خود نشان می دهد. حوزه پلاستیک نشان دهنده رفتار ماده تحت تغییر شکل است و در واقع به نوعی قدرت شکل پذیری ماده در این حوزه بررسی می شود. مهمترین نقطه در این حوزه، نقطه قدرت کششی بیشینه (UTS) است که معادل بیشترین تنشی است که ماده می تواند تحمل کند و اگر تنشی بالاتر از آن به ماده وارد شود، بلافاصله ماده می شکند. هر چه این تنش بالاتر باشد، قدرت



و سیستم گذار توپولوژی انجام می‌دهد. در شکل ۴ تغییر تعداد نقاط بحرانی برحسب افزایش کرنش برای طلا نشان داده شده است. در کرنش ۲۵٪، طلا گذار توپولوژی انجام می‌دهد.

در شکل ۵ منحنی‌های پربندی چگالی الکترونی و گرادیان چگالی در صفحه ۱۰° برای فلز مس تحت مقادیر مختلف کرنش ارائه شده‌اند. در فلزات طلا و نقره نیز رفتار مشابهی رخ می‌دهد. مشاهده می‌کنیم که با افزایش کرنش از مقادیر کم، ابتدا تغییرات چگالی بار از نوع هندسی است یعنی شکل و تراکم خطوط هم‌بار و گرادیانی تغییر می‌کند اما تعداد و محل نقاط بحرانی بدون تغییر باقی می‌ماند و چگالی بار تا جایی که امکان دارد بدون گذار توپولوژی به کرنش پاسخ می‌دهد. در حوزه پاسخ هندسی، افزایش کرنش منجر به فشردگی شدن خطوط گرادیان منتهی به نقطه قفس (درون هشت‌وجهی) می‌شود که بیانگر تمرکز تأثیر تنش در این نقطه است. در کرنش ۲۵٪، تعداد و محل نقاط قفس تغییر کرده و یک نقطه حلقه نیز به وجود می‌آید و بنابراین گذار توپولوژی رخ می‌دهد. با توجه به اینکه کرنش ۲۵٪ در حدود کرنش تسلیم فلز مس است (شکل ۳) نتیجه می‌گیریم که گذار الاستیک-پلاستیک در این فلز با یک گذار توپولوژی در چگالی بار همراه است. با افزایش کرنش تا ۴۵٪ سیستم توپولوژی جدید خود را حفظ می‌کند که نشان از عدم تردی ماده یا چغرمگی بالای آن دارد.

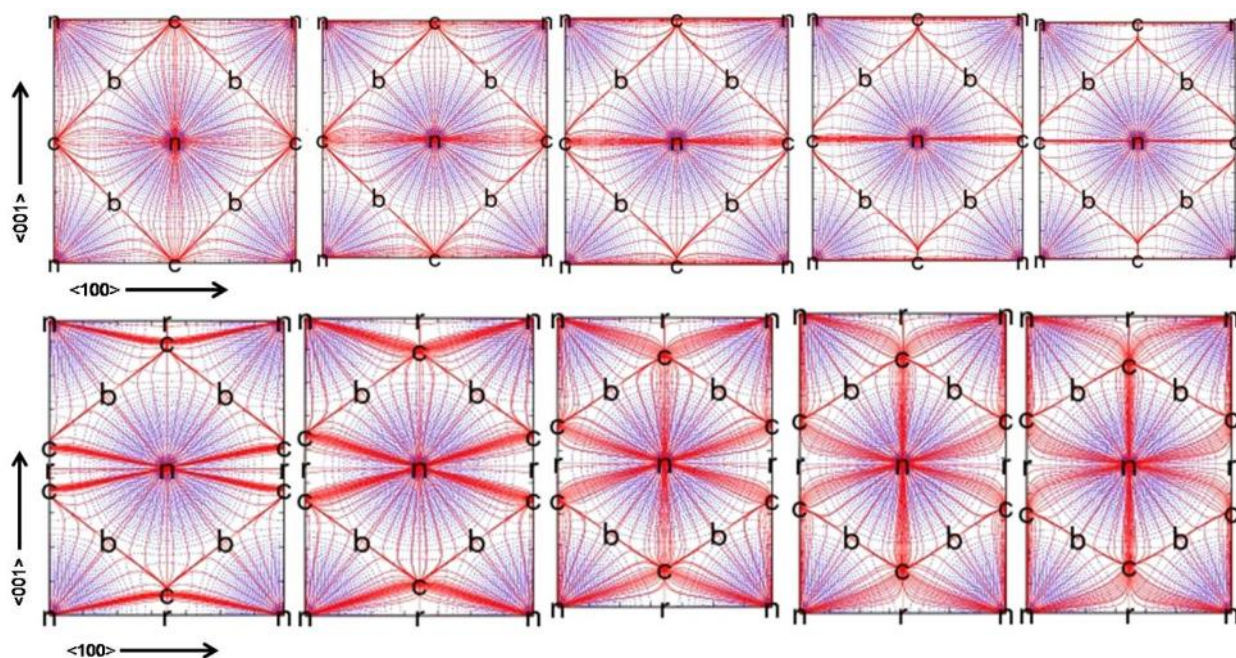
در شکل ۶ چگالی بار در محل پیوند در فلزات مس، نقره و طلا مورد بررسی قرار گرفته‌است. حضور بار در نقطه پیوند در حین اعمال کرنش باعث پایداری مکانیکی بیشتر پیوند شده و به آن اجازه می‌دهد که به آسانی تغییر شکل دهد. با کشیده شدن سیستم (اعمال کرنش در جهت ۱۰۰) توزیع چگالی بار شروع به تغییر می‌کند و مقدار آن در نقطه پیوند کم می‌شود. تغییرات چگالی بار غیرخطی است یعنی با نزدیک شدن به محدوده پلاستیک، نرخ کاهش آن کم می‌شود به گونه‌ای که در حوزه پلاستیک، نرخ کاهش تقریباً به صفر می‌رسد. این رفتار نشان می‌دهد که پیوندها در حوزه پلاستیک (قبل از شکست) تقریباً بدون تغییر می‌مانند. طلا و نقره از این حیث رفتاری بسیار مشابه دارند، اما چگالی و در نتیجه پایداری مکانیکی



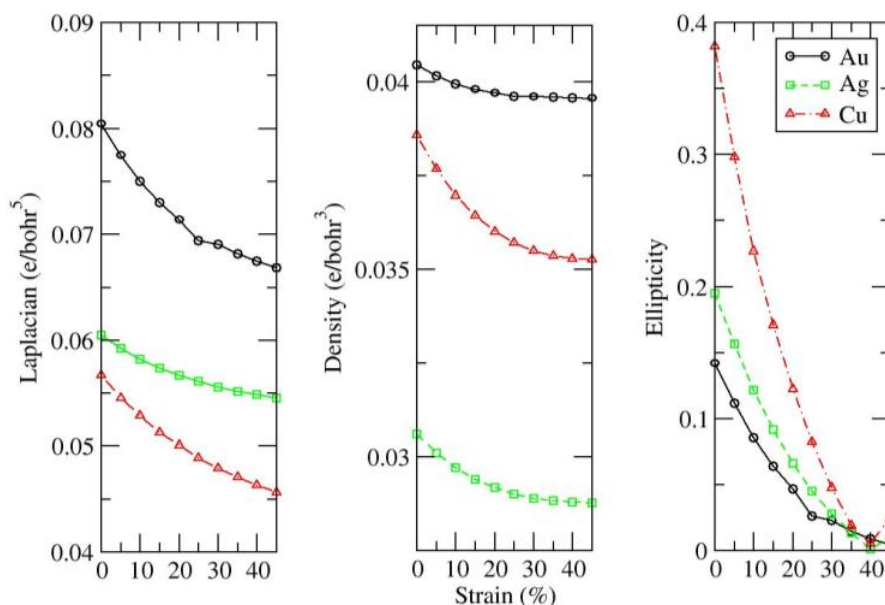
شکل ۴. تغییر تعداد نقاط بحرانی در گذار الاستیک به پلاستیک برای طلا. جهش در تعداد نقاط قفس و حلقه در کرنش گذار نشان داده شده است. با توجه به رابطه ۱۸ مشاهده می‌شود که تعداد نقاط بحرانی از رابطه مورس پیروی می‌کنند.

تک‌بلور مس نسبت به تک‌بلور طلا و نقره باشد. نکته دیگر که از منحنی‌های تنش-کرنش مشهود است، گذار نرم (برخلاف گذار ترد) از محدوده الاستیک به پلاستیک است. اگر ماده پس از ورود به حوزه الاستیک و قبل از رسیدن به UTS بشکند، گذار ترد رخ داده است و اگر نقطه UTS در نمودار تنش-کرنش دیده شود، ماده دستخوش گذار نرم شده است. هر سه فلز با گذار نرم وارد حوزه پلاستیک می‌شوند و این نشان‌دهنده شکل‌پذیری بالای این فلزات است.

در این قسمت به بررسی توپولوژی چگالی بار الکترونی در نقاط مختلف منحنی تنش-کرنش در فلزات گروه ترابرد پرداخته می‌شود. از کرنش صفر تا ۴۵٪ با گام‌های ۵٪ توپولوژی چگالی بار این سه فلز مورد محاسبه و بررسی قرار گرفت. در اثر کرنش، دو نوع پاسخ در چگالی الکترونی مشاهده می‌شود: تغییر هندسی و تغییر توپولوژی. در پاسخ هندسی، تعداد نقاط بحرانی تغییر نمی‌کند و چگالی بار توسط نقاط بحرانی، محدود یا به عبارتی "میخ" شده است. در حالی که در پاسخ پلاستیک تعداد نقاط بحرانی و متعاقباً توپولوژی چگالی بار تغییر می‌کند



شکل ۵. نمایش پربندی چگالی بار و خطوط گرادیان چگالی بار در صفحه ۰۱۰ برای مس. کرنش در جهت ۱۰۰ از حالت تعادل تا ۴۵٪ در گام‌های ۵٪ به سیستم اعمال شده است. ردیف‌های بالا و پایین از چپ به راست، به ترتیب کرنش صفر تا ۲۰٪، ۲۵٪ تا ۴۵٪ را نشان می‌دهد. ردیف بالا، حوزه الاستیک و ردیف پایین حوزه پلاستیک را نشان می‌دهد. حروف n, b و c در شکل‌ها به ترتیب محل نقاط بحرانی هسته‌ای، حلقه، پیوند و قفس را نشان می‌دهند.



شکل ۶. منحنی‌های چگالی بار، لاپلاسی چگالی بار و بیضویت در نقطه پیوند برحسب کرنش. همه نمودارها در نقطه پیوند محاسبه و رسم شده‌اند. چگالی مس در نقطه پیوند بیش از نقره است، در نتیجه مس بار بیشتری نسبت به نقره برای پیوند می‌گذارد.

پیوند در مس با شیب بیشتری کاهش می‌یابد. این رفتار حاکی از حساسیت بیشتر پیوندها به کرنش و متعاقباً دلیل دیگری بر تردتر بودن تک‌بلور مس می‌باشد. رفتار لاپلاسی چگالی بار نیز تقریباً غیر خطی است، اما به شدت چگالی بار تغییر نمی‌کند. با افزایش کرنش، لاپلاسی چگالی بار کاهش می‌یابد که نشان از تهی شدن تدریجی ناحیه پیوند از بار دارد.

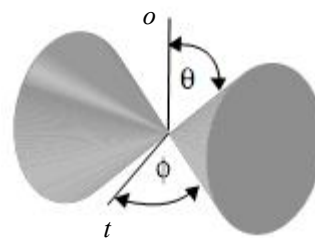
تقریباً غیر خطی است، اما به شدت چگالی بار تغییر نمی‌کند. با افزایش کرنش، لاپلاسی چگالی بار کاهش می‌یابد که نشان از تهی شدن تدریجی ناحیه پیوند از بار دارد.

مخروط‌های با مقطع بیضی حول محور پیوند تشکیل می‌دهند که محورهای اصلی این مخروط همان ویژه‌بردارهای هسیان هستند (شکل ۷). جهت دو محور عمود بر مسیر پیوند، به سمت هشت‌وجهی و چهاروجهی‌های مشخص شده در شکل ۱ است. ویژه‌برداری که به سمت هشت‌وجهی جهت‌گیری کرده است در صفحه ۱۰۰ قرار دارد، در حالی که ویژه‌بردار دیگر (در جهت چهاروجهی) عمود بر صفحه ۱۰۰ است. در نتیجه بیضویت، کشیده شدن چگالی بار (در نقطه پیوند) را به سمت قفس درون چهاروجهی یا هشت‌وجهی نشان می‌دهد. مطابق شکل ۷، زاویه‌ای را که خط مماس بر این مخروط (که از نقطه پیوند می‌گذرد) با ویژه‌بردار به سمت چهاروجهی می‌سازد،  $\phi$ ، و زاویه‌ای را که با ویژه‌بردار به سمت هشت‌وجهی می‌سازد را  $\theta$  می‌نامیم که با رابطه زیر نشان داده می‌شوند:

$$\tan(\phi) = \left( \frac{\lambda_{II}}{\lambda_{II}} \right)^{1/2}, \quad \tan(\theta) = \left( \frac{\lambda_{00}}{\lambda_{II}} \right)^{1/2}, \quad (21)$$

در این رابطه،  $\lambda_{00}$  و  $\lambda_{II}$  انحنای جهت چهاروجهی و هشت‌وجهی هستند. این زوایا همسانگردی پیوند را نشان می‌دهند و بررسی آنها در مس، نقره و طلا (شکل ۸) نشان می‌دهد که پیوندها (در جهت کشش)، ابتدا ناهمسانگرد بوده و مخروط دارای مقطع بیضوی است، اما در نهایت با افزایش کرنش مقطع مخروط دایروی می‌شود.

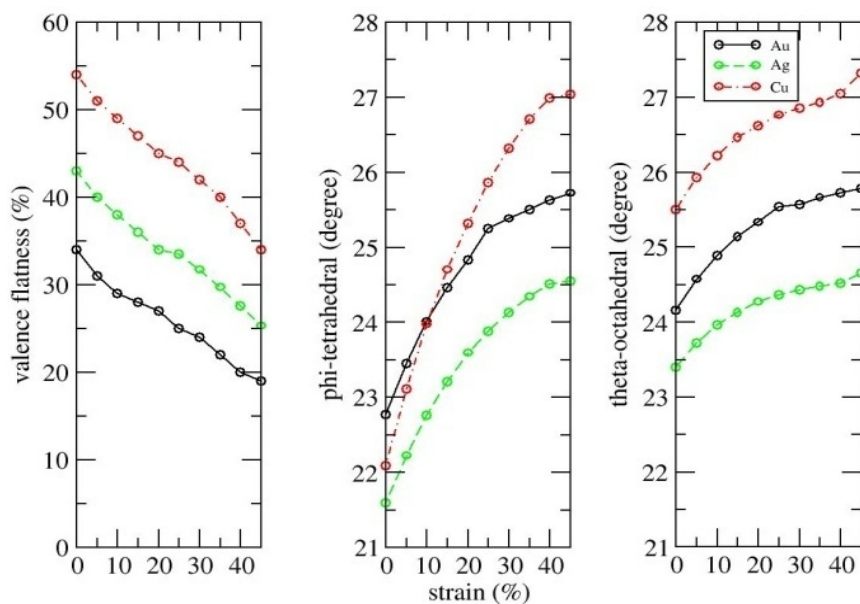
همان‌طور که در شکل ۸ مشاهده می‌شود، زوایای سمتی هشت و چهار وجهی در کرنش صفر مقدار کاملاً متفاوتی دارند و با افزایش کرنش تقریباً برابر می‌شوند. نرخ افزایش زاویه چهاروجهی با رسیدن به ناحیه پلاستیک کاهش می‌یابد. افزایش زوایای  $\phi$  و  $\theta$  در حقیقت بیانگر نقش قفس‌های چهاروجهی و هشت‌وجهی است. مشاهده می‌شود که شکل کلی نمودار تغییرات  $\phi$  بر حسب کرنش مثل نمودار تنش-کرنش است. این تشابه به این علت است که دو ضلع از اضلاع چهاروجهی، در صفحه [۱۰۰] است که متأثر از کشش می‌شوند، در حالی که قفس هشت‌وجهی این رفتار را از خود نشان نمی‌دهد. پس می‌توان نتیجه گرفت که در اثر کشش در جهت [۱۰۰]، کشش بار در قفس چهاروجهی بیشتر بوده و پیوندها تأثیر بیشتری از



شکل ۷. محورهای  $t$  و  $o$  به ترتیب در جهت هشت‌وجهی و چهاروجهی هستند.

کمیت دیگری که مورد بررسی قرار گرفته است، بیضویت پیوند است که به صورت  $1 - \lambda_1 / \lambda_2$  تعریف می‌شود.  $\lambda_1$  و  $\lambda_2$  ویژه مقادیر هسیان در جهات عمود بر پیوند هستند. این کمیت معیاری از نحوه توزیع بار حول پیوند است. هر چه بیضویت به صفر نزدیکتر باشد، مقطع پیوند (در صفحه عمود بر مسیر پیوند) به دایره نزدیکتر می‌شود و هر چه بزرگتر شود مقطع پیوند به بیضی با نسبت قطر بیشتر نزدیک می‌شود. نمودار تغییرات بیضویت بر حسب کرنش در شکل ۶ آورده شده است. مس بیشترین میزان تغییر در بیضویت بر اثر افزایش کرنش را دارد و البته مس در این گروه بیشترین مدول یانگ و تنش تسلیم را دارد. پس از آن نقره و طلا به ترتیب بیشترین شیب کاهش بیضیت را دارند. نکته جالب توجه این است که نظم مشاهده شده در نمودارهای بیضویت پیوند با نظم مشاهده شده در مدول یانگ این سه فلز سازگار است. یعنی سرعت کاهش شیب بیضویت پیوند به نوعی معادل افزایش مدول یانگ به نظر می‌رسد. علت این اتفاق به ماهیت مدول یانگ و بیضویت باز می‌گردد. مدول یانگ معیاری از سخت یا نرم بودن میانگین اثر کشش پیوندها در یک جهت مشخص است و پاسخ الاستیک سیستم به تنش اعمالی است و از طرفی بیضویت پیوند نشان ناهمسانگردی آن است. نرخ تغییرات بیضویت پیوند نشان می‌دهد که پیوندها در کدام عنصر شدیدتر و بیشتر به تنش اعمالی پاسخ می‌دهد پس مس با شدیدترین پاسخ، بیشترین مدول یانگ را دارد.

ویژه‌مقادیر و ویژه‌بردارهای هسیان به ترتیب مقدار و جهت انحنای را تعیین می‌کنند. رویه‌های چگالی ثابت در نزدیکی پیوند،



شکل ۸. منحنی‌های زوایای  $\theta$  و  $\phi$  و تختی چگالی بر حسب کرنش. تغییرات هندسه چگالی بار در جهت چهاروجهی سریعتر از جهت هشت وجهی است.

از چگالی بار کمتری برخوردارند و پیوندها چگالی بار بیشتری دارند یعنی بار در نقاطی توزیع شده که خاصیت الاستیکی طلا را افزایش می‌دهند، که این خود توجیه دیگری برای چغرمگی بالای طلا نسبت به نقره و مس است و همچنین به علت تمرکز بیشتر بار در نقاط پیوند، طلا خاصیت الاستیکی بیشتری از خود نشان می‌دهد. بر خلاف طلا، مس بیشترین تختی چگالی را دارد پس در نقاط پیوند بار کمتری حضور دارد و در نقاط قفس بار بیشتری موجود است، در نتیجه مس نسبت به نقره و طلا، تردتر است و به علت کسری بار در نقاط پیوند زودتر می‌شکند.

در این مقاله منحنی‌های تنش-کرنش برای تک‌بلورهای سه ماده مس، نقره و طلا به صورت ابتدا به ساکن در جهت [۱۰۰] محاسبه شد. حوزه‌های الاستیک و پلاستیک در این نمودارها بررسی شد و خواص مکانیکی این مواد استخراج شد. توپولوژی چگالی بار برای این سه فلز نیز بررسی شد و گذار الاستیک به پلاستیک نشان داده شد و مشخص شد که در کرنش گذار مکانیکی، گذار توپولوژی نیز رخ می‌دهد.

این قفس می‌گیرند. مس در این گروه سریع‌ترین تغییرات را دارد، در حالی طلا و نقره باز هم رفتاری مشابه دارند. تغییرات زاویه  $\phi$  نسبت به کرنش به وضوح تنش تسلیم بالای مس و تا حدودی تردی آن را نسبت به نقره و طلا نشان می‌دهد.

کمیت دیگری که مورد بررسی قرار گرفته و در شکل ۸ ارائه شده "تختی چگالی" است که برابر است با نسبت چگالی کمینه سیستم به چگالی بیشینه در نقطه پیوند [۱۶]:

$$f = \frac{\rho_c^{\min}}{\rho_b^{\max}}, \quad (22)$$

حضور بار در نقطه پیوند در حین اعمال کرنش باعث پایداری بیشتر پیوند شده و به آن اجازه می‌دهد که به آسانی تغییر شکل دهد. با افزایش کرنش بار از نقاط پیوند به سمت نقاط حلقه جریان می‌یابد و همزمان بار در نقاط قفس نیز کاهش می‌یابد. در نتیجه با توجه به شکل ۸ و رابطه ۲۰ مشاهده می‌کنیم که تختی چگالی با افزایش کرنش کاهش می‌یابد. زیرا پیوندها ضعیف شده و اتم‌ها به سمت اتم منزوی حرکت می‌کنند و چگالی بار، همواری خود را از دست می‌دهد و ماده به سمت شکست می‌رود. تختی چگالی در طلا از نقره و مس کمتر است این امر بیانگر این واقعیت است که در طلا قفس‌ها

11. P Blaha, K Schwarz, G Madsen, D Kvaniscka, and J Luitz, *Wien2k, An Augmented Plane Wave+Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* Vienna University of Technology, Austria (2001).
12. J F Nye, *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*, Oxford University Press, New York (1985).
13. H Wang and M Li, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 224102.
14. M Cerny and J Pokluda, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 024115.
15. C Kittel, "Introduction to Solid State Physics", 8<sup>th</sup> ed, Wiley, New York (2005).
16. P Mori-Sanchez et al., *J. A. Chem. Soc.*, **124** (2002) 14721.
1. S E Thompson, et al., *IEEE Electron Dev. Lett.*, **25**, 4 (2004), 191.
2. A Gouldstone, et al., *Acta Mater.* **55** (2007) 4015.
3. J R Greer, *Rev. Adv. Mater. Sci.* **13** (2006) 59.
4. X Huang, et al., *Science* **312** (2006) 249.
5. S Ogata, et al., *Phys. Rev. B* **70** (2004) 104104
6. R M Martin and O H Nielsen, *Phys. Rev. B.* **32** (1985) 3780.
7. M E Eberhart, *Acta. Mater.* **44** (1996) 2495.
8. R F W Bader, *Atoms in Molecules, a Quantum Theory*, Oxford 1990.
9. J P Perdew, K Becke, M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
10. P Giannozzi et al., *J. Phys. Condens Matter* **21** (2009)395502.