



## افزایش سختی بلورپتاسیم کلراید با آلایش نانوذرات الماس

حمیدرضا دهقانپور<sup>1\*</sup>، سیدسلیمان نورآذر<sup>2</sup>

1- استادیار، فیزیک، دانشگاه تفرش، تفرش

2- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران

\*تفرش کدپستی 3951879611، tafreshut.ac.ir@h.dehghanpour

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 28 تیر 1396

پذیرش: 23 مهر 1396

ارائه در سایت: 06 آذر 1396

کلید واژگان:

کلرید پتاسیم

نانوذرات الماس

مقاومت مکانیکی

مقطع شکست بلور

سختی

### چکیده

در میان هالیدهای آلکالیدی، پتاسیم کلراید، KCl، (با آلایش با ناخالصی‌های دو یا تک ظرفیتی) محتملاً دارای بیشترین سهم پژوهشی است. در این مقاله رشد و مشخصه‌یابی خواص مکانیکی بلور KCl با آلایش نانوذرات الماس صورت گرفته است. با توجه به خواص یگانه نانوذرات الماس در بهبود ویژگی‌های مواد، استفاده از آن‌ها در این کار موردنظر قرار گرفته است. بلورها با روش چوکراسکی رشد داده شده و با ناخالصی‌های 0.5، 1 و 1.5 درصد آلاییده شده‌اند. سطح مقطع‌های شکست بلورهای خالص و آلاییده شده با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی مورد بررسی قرار گرفته‌اند به‌عنوان نتیجه، افزایش درصد آلایش نانوذرات الماس در بلور KCl منجر به افزایش ناهمواری سطحی و اتحنای بیشتر خطوط بریدگی سطح مقطع شکست بلور می‌شود. این به معنای افزایش مقاومت مکانیکی بلور در مقابل تنش برشی با افزایش میزان آلایش نانوذرات الماس در آن است. سختی بلورهای خالص و آلاییده شده با روش سختی سنجی ویکرز به‌دست آمدند. بررسی نظری سختی بلورهای آلاییده و خالص به‌صورت نظری صورت گرفت. آنالیز نتایج به‌دست آمده نشان دهنده افزایش مقاومت مکانیکی بلورها پس از آلایش یا نانوذرات الماس است.

## KCl Hardness increase via nano-diamond particle doping

Hamid Reza Dehghanpour<sup>1\*</sup>, Seyed Salman Nourazar<sup>2</sup>

1- Department of Physics, Tafresh University, Tafresh, Iran

2- Department of Mechanical Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran

\* P.O.B. 3951879611, Tafresh, Iran, h.dehghanpour@tafreshut.ac.ir

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 19 July 2017

Accepted 15 October 2017

Available Online 27 November 2017

Keywords:

KCl

Nanodiamond

Mechanical resistance

Fracture cross section

Hardness

### ABSTRACT

In this work growth and characterization of potassium chloride with nanodiamond is studied. Crystals were grown using Czochralski crystal growth method. KCl crystals are doped with 0.5, 1 and 1.5 percent nanodiamond (ND) impurities. Breaking cross sections of the pure and doped crystals were characterized by scanning electron microscopy (SEM). As a result, increasing the doping percentage of the ND in the KCl crystal, leads to increasing the surface roughness and nicks curvature on the fracture cross section of the crystal. It means that ND doping inside KCl crystal caused mechanical hardness of the crystal to increase and increasing the doping percentage results in more mechanical resistant crystal. On the other hand, Vickers microhardness scale is used in this study. Hardness is too complex to be described by first principles. Based on the dielectric chemical bond theory, a semiempirical theoretical formulation of the hardness of pure and doped crystals is introduced. Analysis of the results shows increasing of the nanodiamond doping leads to an increase in mechanical resistance of the samples.

### 1- مقدمه

است علی‌رغم محکم بودن پیوند، این بلور در مقابل ضربه‌های مکانیکی بسیار شکننده است [6]. این موضوع باعث شده است این بلور به دلیل سختی پایین در دستگاه‌های مکانیکی مورد استفاده قرار نگیرد. با توجه به این که نوع پیوندهای یک بلور مشخص کننده ویژگی‌های آن است، لذا می‌توان با ترندهایی پیوندهای میان اجزای مختلف تشکیل‌دهنده بلور را مستحکم‌تر و در نتیجه سختی آن را بالا برد یکی از راه‌های بیشتر کردن استحکام پیوند های میان اجزای سازنده بلور افزودن ناخالصی است [7,8]. مطالعه و مشخصه‌یابی بسیاری از بلورهای KCl آلاییده شده توسط محققان متعددی صورت گرفته است [9-12]. خواص اپتیکی جالب و نیز قیمت مناسب این بلور سبب شده است که کاربردهای گسترده‌ای در حوزه‌های ترمولومینسانس،

علی‌رغم آن که نانوذرات الماسی (ND) که با روش انفجار تولید می‌شدند در سال 1963 کشف شده بودند، به‌دلایل متعددی این نانوذرات تا اواخر قرن بیستم صرفاً توسط گروهی از پژوهشگران شناخته شده بود [1]. این نانوذرات به‌عنوان یک افزودنی برای بهبود کارایی مواد متعددی به‌صورت گسترده به‌کار رفته است [2]. به دلیل قابلیت پخش بالای پودر نانوذرات الماس این امکان وجود دارد که در یک ماتریس اجزای نانو با چگالی بالا شکل بگیرد [3]. KCl بلوری هالید آلکالیدی است که در بازه وسیع طول موجی امواج الکترومغناطیسی شفاف است [4]. یکی از معایب مهم این بلور مقاومت مکانیکی پایین آن است [5]. به‌علت آن که نوع پیوند شیمیایی این بلور یونی

به‌عنوان نفوذ کننده صورت می‌گیرد. نفوذ کننده با باری حدود 120 kgf بر روی سطح، گودی ایجاد می‌کند. البته اندازه بار برای مواد مختلف متفاوت است [21]. در سنجه ویکرز سختی از نسبت بار اعمالی به مساحت ناحیه نفوذ به دست می‌آید:

$$H = 1.854 \frac{F}{d^2} \quad (3)$$

که در آن  $F$  بار اعمالی برحسب kgf،  $H$  سختی و  $d$  طول خراش بر حسب متر است.

در سنجه نوپ رابطه زیر بیان کننده اندازه سختی بلور است [22]:

$$H(\text{GPa}) = 680.3 \left[ \frac{TS_{ij}^M}{R_{ij}^3} \right]^{2/3} N_v \quad (4)$$

که در آن  $R_{ij}$  طول پیوند میان اتم‌های  $i$  و  $j$ ،  $T$  و  $M$  ثابت،  $S_{ij}$  ظرفیت پیوند و  $N_v$  تعداد پیوندها در واحد حجم است. ظرفیت پیوند<sup>۶</sup> از رابطه زیر به‌دست می‌آید:

$$S_{ij} = \exp\left(\frac{R_0 - R_{ij}}{b}\right) \quad (5)$$

که در آن  $R_0$  پارامتر ظرفیت<sup>۷</sup> و  $b$  ثابتی جهانی برابر با  $0.37 \text{ \AA}$  است.

## 2-2- سختی بلورهای آلاییده

در مطالعات صورت گرفته در خصوص آلایش KCl نتایج به‌دست آمده حاکی از وابستگی سختی به چگالی مولی آلایش ( $C$ ) دارد. بستگی تغییرات سختی به  $C$  به‌صورت  $C^{2/3}$  [23]،  $C^{1/2}$  [24] گزارش شده است و نیز خاطر نشان گردیده که تغییر سختی از شبکه بلوری میزبان مستقل است.

مدل تئوری که توسط گیلمن [25] ارائه گردیده است پیش‌بینی می‌کند که سختی متناسب با  $CB^{1/2}$  است که در آن  $B$  توسط رابطه زیر داده می‌شود:

$$B = 4.7e^2(\epsilon a^4)^{-1} \quad (6)$$

که در آن  $e$  بار الکترون،  $\epsilon$  ثابت دی‌الکتریک استاتیک و  $a$  ثابت شبکه بلور میزبان است. در مورد KCl ثابت دی‌الکتریک برابر 4.81 و ثابت شبکه بلوری 629.2 [26] است. و با قرار دادن این مقادیر و بار الکترون در رابطه (6) به اندازه 0.23 برای  $B$  می‌رسیم.

## 3- آزمایش‌ها

پودر KCl با خلوص 99.99% و نانوذرات الماس با اندازه متوسط 80 nm به منظور رشد بلور KCl:ND مورد استفاده قرار گرفتند. 100g پودر KCl و 0.01، 0.05 و 0.15 گرم ND به‌صورت جداگانه رشد داده شدند. این مواد در یک بوته پلاتینی (قطر داخلی 11 cm، عمق 6 cm و وزن 125 g) قرار داده شدند. سپس این بوته در کوره چوکراسکی (قطر داخلی 155 mm، عمق داخلی 300 mm و دمای بیشینه  $1200^\circ\text{C}$ ) گذاشته شد. دانه کوچک بلور خالص به‌عنوان دانه هسته‌زنی به سیستم بالابر-چرخان متصل شد. دمای کوره به صورت تدریجی افزایش یافت تا همه آب درون مواد تبخیر شود. بعد از آن دما در اندازه  $780^\circ\text{C}$  ثابت نگاه داشته شد. برای ذوب شدن کل مواد درون بوته حدود 30 دقیقه زمان موردنیاز بود. پس از آن مواد مذاب با دانه هسته‌زنی متصل شده و همزمان سیستم بالابر-چرخان به راه افتاد. سرعت بالابری 8 mm/h بوده و سرعت زاویه‌ای چرخشی 1 rad/min قرار داده شد. پس از رسیدن اندازه گردن بلور به 3mm برای افزایش قطر بلور دما در هر 15 دقیقه  $2^\circ\text{C}$  کاهش یافت. پس از 230 دقیقه رشد بلور متوقف شد و

دزیمتری و استفاده‌های پزشکی پیدا کند [13]. روش چوکراسکی از جمله روش‌های رشد بلور با استفاده از ماده مذاب بوده و از متداول‌ترین تکنیک‌های آن تکنیک بوته ثابت است. با ریخته شدن ماده اولیه در بوته و ذوب شدن آن، توزیع دمایی ماده مذاب از مرکز بوته تا دیواره‌های آن و از سطح ماده مذاب تا کف بوته روندی افزایشی دارد. با تماس شدن دانه با سطح ماده مذاب رشد بلور آغاز می‌شود و اگر سرعت کشش به اندازه‌ای باشد که بلور رشد داده شده نازکتر از دانه اولیه باشد رشد بلور مناسبی وجود داشته و گردن بلور شکل خواهد گرفت [14]. در این کار ابتدا تک بلور KCl با استفاده از روش چوکراسکی بوته ثابت رشد داده شده و با ناخالصی‌های 0.5، 1 و 1.5 درصد نانوذرات الماس آلاییده شده‌اند. در ادامه با انجام آزمایش‌های سختی‌سنجی و نیز روش‌های تحلیلی نشان داده شده است که با افزودن نانوذرات الماس به بلور KCl می‌توان مقاومت مکانیکی آن را افزایش دهیم.

## 2- مبانی نظری

### 1-2- فرمولاسیون مدل تحلیلی سختی بلورها

سختی یکی از مهمترین ویژگی‌های مکانیکی مواد است. معنای آن مقاومت ماده در مقابل تغییر شکل‌های الاستیکی و پلاستیکی است. تعریف تجربی آن به‌صورت مقاومت ماده در برابر نفوذ یا خراش ماده‌ای سخت‌تر است [15,16]. سختی خاصیتی پیچیده بوده و به پارامترهای مختلفی از قبیل دما، فشار، تخلخل، آلایش، جایجایی شبکه و سایر نقص‌های بلوری بستگی دارد. از سوی دیگر سختی با ویژگی‌های فیزیکی گوناگونی از جمله نقطه ذوب، گاف نوری، انرژی همبستگی و ... مرتبط است [17]. روشن است که با توجه به پیچیده بودن این کمیت، برای توصیف نظری آن نیاز به مدل مناسبی وجود دارد. یکی از روابط پیشنهاد شده برای محاسبه سختی به‌طور نظری رابطه زیر است [18]:

$$H(\text{GPa}) = 350 [N_e^{2/3} e^{-1.191 f_i}] / l^{2.5} \quad (1)$$

که در آن  $N_e$  چگالی الکترون به‌صورت تعداد الکترون‌های ظرفیتی در انگستروم مکعب،  $l$  طول پیوند برحسب آنگستروم و  $f_i$  ضریب یونیدگی پیوند شیمیایی است. از طرف دیگر عبارتی برای سختی بلوری متشکل از ترکیب دو اتم مختلف  $a$  و  $b$  در حجم  $\Omega$  ارائه شده است [19]:

$$H = \left(\frac{C}{\Omega}\right) \sqrt{(e_a e_b)} / d_{ab} n_{ab} e^{-\sigma f_e} \quad (2)$$

که در آن  $e_{a,b} = Z_{a,b} / R_{a,b}$  انرژی مرجع اتم  $a$  ( $b$ ) است و  $Z_{a,b}$  نشان‌دهنده عدد اتمی اتم  $a$  ( $b$ )،  $R_{a,b}$  بیانگر شعاع اتمی اتم  $a$  ( $b$ ) است.  $n_{ab}$  نشان‌دهنده تعداد پیوندها میان اتم‌های  $a$  و  $b$  و  $d_{ab}$  طول این پیوندهاست.  $C$  و  $\sigma$  ثابت‌هایی هستند که با کمک برازش منحنی تجربی سختی مشخص می‌گردند که برای بلور KCl به ترتیب مقدارهای 1550 و 4 را دارند [19].  $f_e$  به صورت  $f_e = [(e_a - e_b) / (e_a + e_b)]^2$  تعریف می‌شود. آنالیز سختی از روش‌های مشخصه‌یابی مخرب است. براساس شکل و سرشت نفوذ کننده<sup>۱</sup>، سنجه‌های متعددی از قبیل ویکرز<sup>۲</sup>، نوپ<sup>۳</sup>، براینل<sup>۴</sup> و راکول<sup>۵</sup> ایجاد شده‌اند. متداول‌ترین سنجه‌ها ویکرز و نوپ هستند که نفوذ کننده آن‌ها الماسی هرمی شکل با قاعده‌های به ترتیب مربعی و لوزی شکل هستند. سختی از نسبت نیروی نفوذ به سطح نفوذ به‌دست می‌آید [20]. آزمایش اندازه‌گیری سختی ایستا با استفاده از افزاره بارگذاری و نیز یک ویکرز الماسی هرمی (با زاویه راس  $136^\circ$ )

<sup>1</sup> Indenter

<sup>2</sup> Vickers

<sup>3</sup> Knoop

<sup>4</sup> Brinell

<sup>5</sup> Rockwell

<sup>6</sup> Bond Valence

<sup>7</sup> Bond Valence Parameter

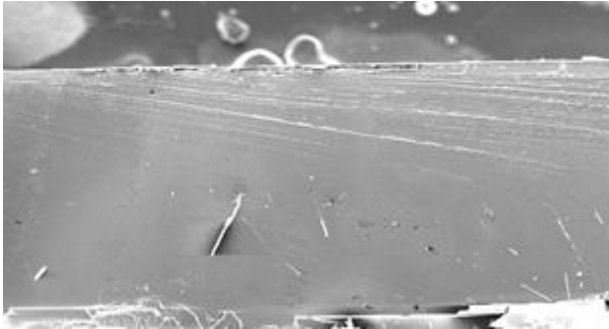


Fig. 2 SEM image of fracture cross section of the pure KCl crystal  
شکل 2 تصویر SEM مقطع شکست بلور خالص KCl

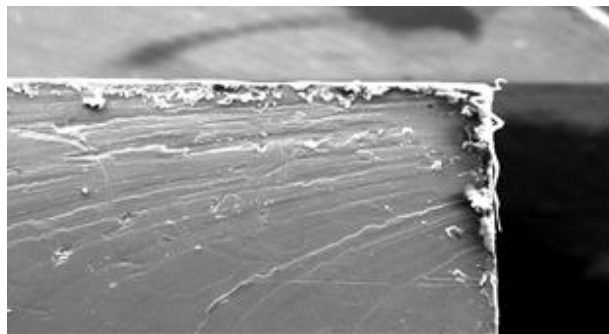


Fig. 3 SEM image of fracture cross section of 0.5% doped KCl:ND crystal  
شکل 3 تصویر SEM مقطع شکست بلور KCl:ND با آلیاژ 0.5 درصد ND

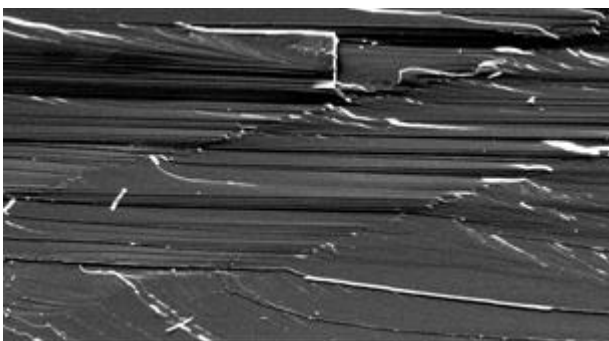


Fig. 4 SEM image of fracture cross section of 1% doped KCl:ND crystal  
شکل 4 تصویر SEM مقطع شکست بلور KCl:ND با آلیاژ 1 درصد ND

در این پژوهش میکرو سختی<sup>1</sup> با ویکرز محاسبه شده است. بنابراین در معادله (3) بار اعمالی برحسب grf است. در اندازه‌گیری‌های صورت گرفته از سختی سنج بوهرلر مدل 60044 استفاده شده است. با 15 بار اعمالی در مدت 18 ثانیه اثر عمقی نفوذ کننده هر می الماسی اندازه‌گیری شده و نتایج در جدول 1 گردآوری گردیدند. همان‌طور که از داده‌های جدول ملاحظه می‌گردد سختی بلور با افزایش آلیاژ الماس افزوده می‌شود. از آنجایی که نانوذرات الماس کروی شکل هستند و بیشتر اتم‌های تشکیل‌دهنده آن‌ها در سطحشان قرار گرفته‌اند، می‌توانند جایگزین برخی از اتم‌های و یا جاخلالی‌های شبکه‌ای شوند و در نتیجه سختی را افزایش دهند.

برای به‌دست آوردن سختی بلور KCl با استفاده از رابطه (2)، داده‌های موردنیاز براساس نتایج تجربی و محاسبات نظریه چگالی تابعی<sup>2</sup> و تقریب

عملیات کاهش قطر بلور به منظور جداسازی تدریجی بلور از مواد مذاب آغاز گردید. مراحل این عملیات با افزایش دمای 5 °C آغاز شد. بعد از 15 دقیقه همزمان با افزایش 2 °C دما، سرعت بالابری به 6 mm/h کاهش یافت. 60 دقیقه بعد دما مجدداً 3 °C افزایش یافت. 15 دقیقه بعد از آن ضمن افزایش سرعت بالابری به 10 mm/h، دما 5 °C دیگر افزایش یافت. پس از آن برای جدایش کامل بلور از مواد مذاب 10 دقیقه زمان صرف شد. در نهایت کوره خاموش شده و بلور به‌صورت تدریجی خنک گردید. "شکل 1" نشان‌دهنده بلور (1%) ND:KCl است.

#### 4- نتایج و بحث

نمونه‌های بلورین رشد داده شده بر اثر اعمال ضربات مکانیکی شکسته شدند. به منظور واری مقطع شکست بلورها و چگونگی تغییر مقاومت مکانیکی بلورها با میزان آلیاژ نانوذرات الماس تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی مقاطع شکست بلورها توسط دستگاه فیلیپس ایکس ال 30 برداشته شده و مورد بررسی قرار گرفتند. "شکل 2" تصویر SEM سطح مقطع شکستگی بلور خالص را نشان می‌دهد. همان‌طور که در این شکل قابل تشخیص است سطح مقطع نسبتاً هموار بود و خطوط بریدگی سطحی مستقیم هستند. در "شکل 3" تصویر SEM مقطع شکست بلور KCl:ND با آلیاژ 0.5 درصد نانوذرات الماس نشان داده شده است. سطح مقطع نسبت به بلور خالص ناهموارتر و خطوط بریدگی سطحی دچار انحنای شده‌اند. این انحنای خطوط بریدگی نمایانگر مقاومت بیشتر بلور در مقابل تنش برشی است. در "شکل 4" مقطع شکست بلور KCl:ND با آلیاژ 1 درصد نمایش داده شده است. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود ناهمواری و انحنای خطوط بریدگی سطحی نسبت به حالت آلیاژ 0.5 درصدی افزایش یافته است. افزایش ناهمواری و انحنای خطوط بریدگی سطحی در "شکل 5" نسبت به "شکل 4" دیده می‌شود. "شکل 5" نمایانگر تصویر SEM مقطع شکست بلور KCl:ND با آلیاژ 1.5 درصد ND است. به‌عنوان نتیجه، افزایش درصد آلیاژ نانوذرات الماس در بلور KCl منجر به افزایش ناهمواری سطحی و انحنای بیشتر خطوط بریدگی سطح مقطع شکست بلور می‌شود. این به‌معنای افزایش مقاومت مکانیکی بلور در مقابل تنش برشی با افزایش میزان آلیاژ نانوذرات الماس در آن است.



Fig. 1 the grown KCl crystal with 1% nanodiamond doping  
شکل 1 بلور رشد داده شده KCl با آلیاژ 1% نانوذرات الماس

<sup>1</sup> Microhardness

<sup>2</sup> Density Functional Theory (DFT)

آن که این نانوذرات در مقیاس نانو هستند نسبت سطح به حجم آن‌ها بالاست که این موضوع باعث می‌شود با ورودشان به شبکه بلوری KCl و جایگزینی در مکان‌های یون‌ها و تهی جاهای ساختار بلوری پیوندهای مستحکم‌تری را با یون‌های مجاور خود تشکیل دهند. این موضوع منجر به افزایش قابل ملاحظه‌ای در سختی بلور آلییده شده نسبت به بلور خالص خواهد گردید و باعث می‌شود که بتوان از بلور آلییده شده در کاربردهای مکانیکی استفاده نمود.

**5- نتیجه‌گیری**

در تحقیق حاضر، بلور با استفاده از روش چوکراسکی و با آلیش درصد‌های مولی متفاوت آلیش نانوذرات الماس رشد داده شدند و مقاومت مکانیکی بلورها با درصد‌های مختلف آلیش اندازه‌گیری شده و نتایج به‌دست آمده مورد مقایسه قرار گرفتند. نتایج زیر به صورت خلاصه از تحقیق حاضر بدست آمده است:

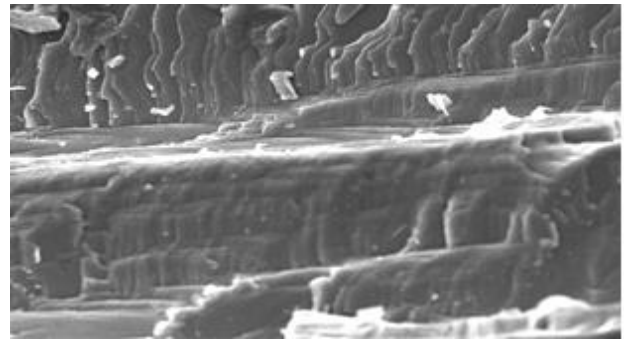
- آلیش نانوذرات الماس سبب افزایش مقاومت مکانیکی بلور KCl شده است.
- مقاومت مکانیکی بلور KCl در مقابل تنش برشی با افزایش میزان آلیش نانوذرات الماس در آن افزایش می‌یابد.
- تغییرات سختی بلور آلییده برحسب درصد مولی آلیش به‌صورت توان 1/2 درصد مولی آلیش تغییر می‌کند.

**6- فهرست علائم**

<i>a</i>	ثابت شبکه بلور میزبان (A°)
<i>C</i>	چگالی مولی آلیش
<i>d</i>	طول خراش (m)
<i>d<sub>a,b</sub></i>	طول پیوندها میان اتم‌های <i>a</i> و <i>b</i> (A°)
<i>e</i>	بار الکترون
<i>e<sub>a,b</sub></i>	انرژی مرجع اتم <i>a</i> ( <i>b</i> )
<i>F</i>	بار اعمالی (kgf)
<i>f<sub>i</sub></i>	ضریب یونیدگی پیوند شیمیایی
<i>H</i>	سختی (GPa)
<i>l</i>	طول پیوند (A°)
<i>N<sub>e</sub></i>	چگالی الکترون‌های ظرفیتی (Number/A <sup>3</sup> )
<i>n<sub>a,b</sub></i>	تعداد پیوندها میان اتم‌های <i>a</i> و <i>b</i>
<i>N<sub>v</sub></i>	تعداد پیوندها در واحد حجم
<i>R<sub>0</sub></i>	پارامتر ظرفیت
<i>R<sub>a,b</sub></i>	شعاع اتمی <i>a</i> ( <i>b</i> ) (A°)
<i>R<sub>ij</sub></i>	طول پیوند میان اتم‌های <i>i</i> و <i>j</i> (A°)
<i>S<sub>ij</sub></i>	ظرفیت پیوند
<i>Z<sub>a,b</sub></i>	عدد اتمی <i>a</i> ( <i>b</i> )
<i>ε</i>	ثابت دی‌الکتریک استاتیک

**7- مراجع**

[1] E. Osawa, Monodisperse single nanodiamond particulates, *Pure and Applied Chemistry*, Vol. 80, No. 7, pp. 1365-1379, 2008.  
 [2] Q. Chen, S. Yun, Nano-sized diamond obtained from explosive detonation and its application, *Materials Research Bulletin*, Vol. 35, No. 12, pp. 1915-1919, 2000.



**Fig. 5** SEM image of fracture cross section of 1.5% doped KCl:ND crystal

شکل 5 تصویر SEM مقطع شکست بلور KCl:ND با آلیش 1.5 درصد ND

**جدول 1** میکروسختی‌های به‌دست آمده برای بلورهای KCl براساس سنجه ویکرز  
**Table 1** KCl Crystal Microhardness Obtained by Vickers Scale

بلور	<i>H<sub>v</sub></i>
KCl خالص	13.1
KCl:ND (آلیش 0.5 درصد)	27.3
KCl:ND (آلیش 1 درصد)	44.7
KCl:ND (آلیش 1.5 درصد)	54.3

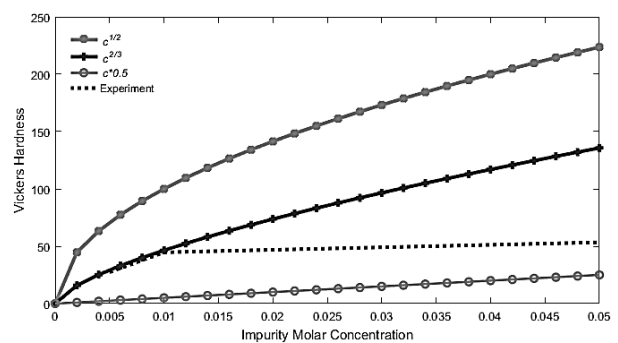
**جدول 2** میکروسختی‌های به‌دست آمده برای بلورهای KCl براساس سنجه نوپ  
**Table 2** KCl Crystal Microhardnesses Obtained by Knoop Scale

نتیجه تجربی	نتیجه محاسبه شده از رابطه (2)	نتیجه محاسبه شده از رابطه (4)
سختی KCl	0.2	0.7

چگالی محلی<sup>1</sup> از مرجع [15] استخراج شده و نتایج در جدول 2 گردآوری شده‌اند. از طرف دیگر با استفاده از داده‌های ارائه شده در مرجع [18] سختی بلور KCl بر مبنای معادله (4) محاسبه و در جدول 2 آورده شده است.

نمودارهای بستگی سختی به چگالی مولی آلیش صورت  $C^{2/3}$ ،  $C^{1/2}$  و رابطه (6) به همراه نتایج تجربی در "شکل 6" نشان داده شده‌اند. نتایج تجربی به‌دست آمده برای بلور KCl بیشتر نزدیک به منحنی رابطه (6) است.

نتایج به‌دست آمده نشان داد آلیش بلور KCl با نانوذرات الماس برحسب درصد آلیش باعث افزایش میزان سختی بلور می‌شود. با توجه به



**Fig. 6** Comparison between theoretical results of impurity effect on the KCl crystal hardness and the empirical results

شکل 6 مقایسه میان نتایج نظری و تجربی تاثیر ناخالصی بر سختی بلور KCl

<sup>1</sup> Local Density Approximation (LDA)

- [15] F. Gao, Hardness estimation of complex oxide materials, *Physical Review B*, Vol. 69, No. 9, pp. 094113 1-6, 2004.
- [16] C. G. Meng, J. T. Guo, X. Y. Liu, Z. Q. Hu, A new criterion of hardness for materials with rocksalt structure, *Material Letters*, Vol. 17, No. 1-2, pp. 54-58, 1993.
- [17] M. Hebbache, Shear modulus and hardness of crystals: Density functional calculations, *Solid State Communications*, Vol. 113, No. 8, pp. 427-432, 2000.
- [18] F. M. Gao, J. L. He, E. D. Wu, S. M. Liu, D. L. Yu, D. C. Li, S. Z. Zhang, Y. J. Tian, Hardness of covalent crystals, *Physical Review Letters*, Vol. 91, No. 1, pp. 015502 1-4, 2003.
- [19] A. Simunek, J. Vackar, Hardness of covalent and ionic crystals: first-principle calculations, *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 8, pp. 085501 1-4, 2006.
- [20] Y. Tian, B. Xu Z. Zhao, Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals, *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, Vol. 33, pp. 93-106, 2012.
- [21] J. Manika, J. Maniks, K. schwartz, C. Trautmann, Hardening and formation of dislocation structures in LiF crystals irradiated with MeV-GeV ions, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, Vol. 196, No. 3-4, pp. 299-307, 2002.
- [22] X. Liu, H. Wang, W. Wang, Z. Fu, Simple method for the hardness estimation of inorganic crystals by the bond valence model, *Inorganic Chemistry*, Vol. 55, No. 21, pp. 11089-11095, 2016.
- [23] J. S. Dryden, S. Marimoto, J. S. Cook, The hardness of alkali halide crystals containing divalent ion impurities, *Philosophical Magazine*, Vol. 12, No. 116, pp. 379-391, 1965.
- [24] G. Y. Chin, L. G. Van Uitert, M. L. Green, G. J. Zydzik, T. Y. Kometani, Strengthening of alkali halides by divalent-ion additions, *Journal of American Ceramic Society*, Vol. 56, No. 7, pp. 369-372, 1973.
- [25] J. J. Gilman, Theory of solution strengthening of alkali halide crystals, *Journal of Applied Physics*, Vol. 45, No. 2, pp. 508-509, 1974.
- [26] D. B. Sirdeshmukh, L. Sirdeshmukh, K. G. Subhadra, *Alkali Halides: A Handbook of Physical Properties*, pp. 453-459, Berlin: Springer, 2001.
- [3] C. H. Cheng, H. Zhang, Y. Zhao, Y. Feng, X. F. Rui, P. Munroe, H. M. Zeng, N. Koshizuka, M. Murakami, Doping effect of nano-diamond on superconductivity and flux pinning in MgB<sub>2</sub>, *Superconductivity Science & Technology*, Vol. 16, No. 10, pp. 1182-1186, 2003.
- [4] S. Pan, B. Jiang, X. Jiang, J. Qiu, C. Zhu, Near infrared ultra-fast intense laser induced colour centers in KCl crystal, *Journal of Crystal Growth*, Vol. 263, No. 1-4, pp. 648-649, 2004.
- [5] D. C. Harris, Durable, 3-5 mm transmitting infrared window materials, *Infrared Physics & Technology*, D. C. Harris: Durable, 3-5 mm transmitting infrared window materials, *Infrared Physics & Technology*, Vol. 39, No. 4, pp. 185-201, 1998.
- [6] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Eighth Edition, pp. 60-67, New York: John Wiley & Sons, 2005.
- [7] D. Sirdeshmukh, T. Kumara swamy, P. Geeta Krishna, K. Subhadra, Systematic hardness measurements on mixed and doped crystals of rubidium halides, *Bulletin of Material Sciences*, Vol. 26, No. 2, pp. 261-265, 2003.
- [8] T. Thaila, S. Kumararaman, Effect of NaCl and KCl doping on the growth of sulphamic acid crystals, *Spectrochimica Acta*, Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Vol. 82, No. 1, pp. 20-24, 2011.
- [9] S. Bangaru, G. Muralidaran, Luminescence studies on gamma irradiated KCl:Ce<sup>3+</sup> crystals, *Physica B*, Vol. 407, No. 12, pp. 2185-2189, 2012.
- [10] G. Tanir, M. H. Bölükdemir, S. Çathı, E. Tel, IRSL characteristics of NaCl and KCl relative to dosimeter, *Radiation Measurements*, Vol. 42, No. 1, pp. 29-34, 2007.
- [11] P. M. Bhujbal, S. J. Dhoble, KCl:Dy phosphor for thermoluminescence dosimetry of ionizing radiation, *Luminescence*, Vol. 28, No. 6, pp. 879-881, 2013.
- [12] R. Mele'ndreza, R. Pe' rez-Salasa, Dosimetric properties of KCl:Eu<sup>2+</sup> under  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , x ray, and ultraviolet Irradiation, *Applied Physics Letters*, Vol. 68, No. 24, pp. 3398-3400, 1996.
- [13] B. F. Scott, J. E. Stovell, CO<sub>2</sub> lasers as a heat source for engineering applications, *Optical Technology*, Vol. 1, No. 3, pp. 224-231, 1968.
- [14] H. Faripur, E. Khoddoost, The crystal growth by czochralski method of fixed and moving crucible, *Proceeding of The second Crystal growth conference Iran, Semnan, Iran, May 9, 2012.* (in Persian فارسی)