

Anyagismeret

Kémiai kötések Ideális kristályrács Tulajdonságok

Dr. Mészáros István Attila

1

Intrinsic

Kémiai összetétel és kötés típus
Kristály szerkezet

Extrinsic

Hiba szerkezet

- Ponthibák
- Diszlokációk
- Felületszerű hibák (szemcsehatárok típusai)

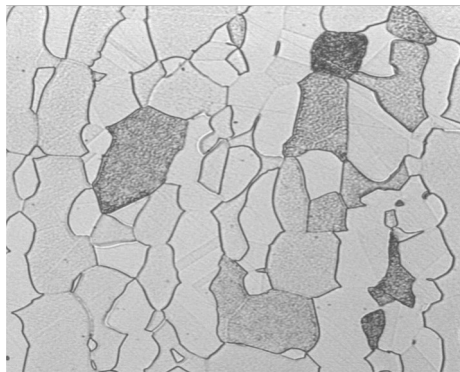
Szövetszerkezet (metallográfiai szerkezet)

Makroszkopikus
anyagtulajdonságok

2

Amorf
Egykristályos
Polikristályos

Rácsállandó: 0,3-0,5 nm
Szemcseméret: 0,1 mm



3



4

Atomos rendezettség, halmazállapotok

Tömegvonzás, elektromos kölcsönhatás $\Rightarrow$ kötési energia

(Plazma) $\rightarrow$ Gáz (1-2 kJ/mol) $\rightarrow$ Folyadék $\rightarrow$ Szilárd (10-4000 kJ/mol)
Stat. rendezetlen $\rightarrow$ Rövidtávú $\rightarrow$ Hosszútávú rendezettség

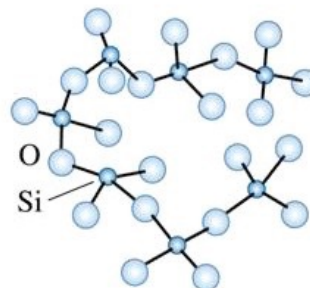
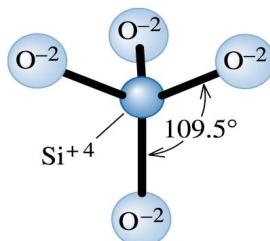
Szilárd (kondenzált anyag)

- Amorf (túlhűtött folyadék, üveg, szurok, poli-szilícium) rövidtávú rend, nincs olvadáspont
- Kristályos (hosszútávú rendezettség) tiszta anyagok esetén van olvadáspont
egykristály, polikristály

5

Az atomok elrendeződése

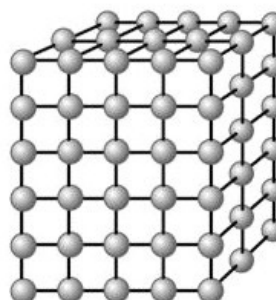
- Rövid távú rend (amorf anyagok)



6

Az atomok elrendeződése

- Hosszú távú rend a 3D térben (kristályok)
- Az atomok elhelyezkedését jól definiált transzlációval írhatjuk le



7

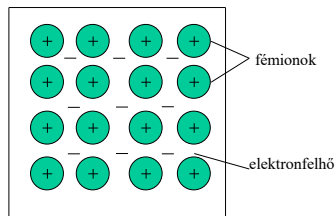
Kötéstípusok és tulajdonságok

Elsődleges (erős)

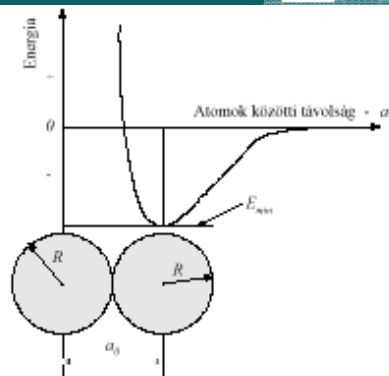
Másodlagos (gyenge) kötések

8

Fémes kötés



Fém 1, 2 - 3 vegyértékelektron
+ Fémion, elektrongáz (felhő)
Szabad elektronok

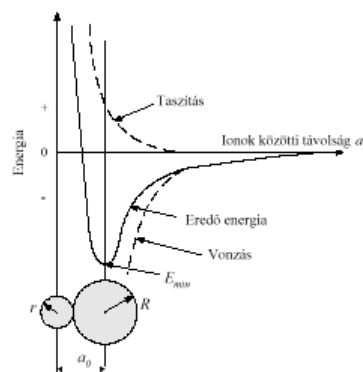
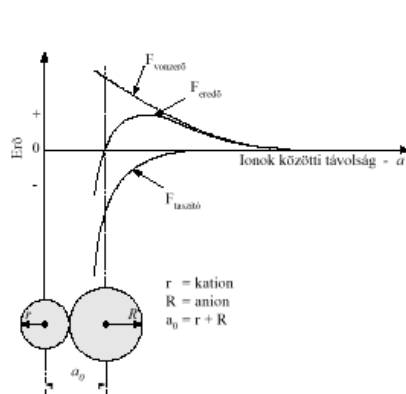
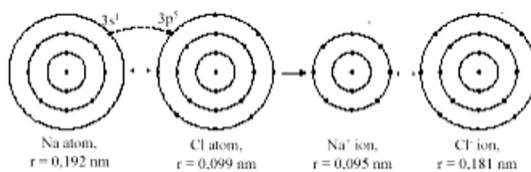


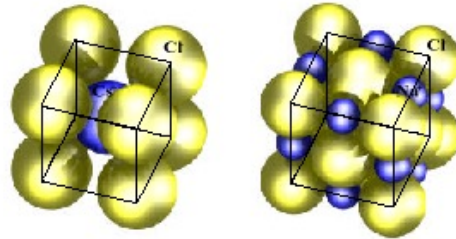
2.3. ábra

A fémes kötésben résztvevő atomok energiájának változása az atomok közötti távolság függvényében

Szabad elektronok $\Rightarrow$ Jó hő és elektromos vezetők (Wiedemann-Franz, kivételek: gyémánt ...)
Ionok elmozdulni képesek, rácspontok távolsága változhat $\Rightarrow$ Jó képlékeny alakíthatóság (szoros illeszkedés, elcsúszási lehetőség)

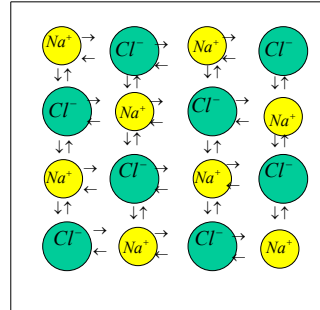
Ionos kötés





2.7. ábra

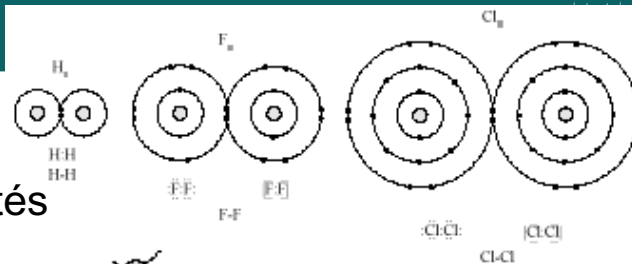
Az ionos kötés-elrendezés a) CsCl b) NaCl vegytültre



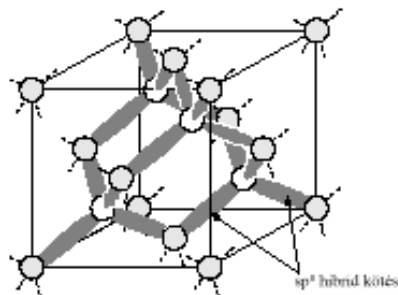
Fémek - nemfémek elemek
stabil elektronszerkezet
kation (+) - anion (-)
Coulomb vonzás
Szabad elektron nincs

Rossz hő- és elektromos vezetők
Rideg, képlékeny alakváltozra nem képes
Kötési E nagy $\Rightarrow$ magas op.

11



Kovalens kötés



2.9. ábra

A karbon gyémánt módosulatának kovalens kötésű szerkezete

Legerősebb kötés
Kis elektronnegativitási különbség
"megosztott" s, p elektronok
Stabil elektron szerkezet

Rossz elektromos vezetők
Rideg, képlékeny alakváltozra nem képes
Kötési E nagy $\Rightarrow$ magas op.
Nagy keménység (szimmetrikus kötés)

Vegyes kötés (kovalens-ionos) pl.: GaAs

12

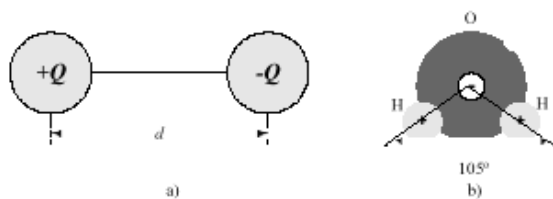
Van der Waals kötés

4 - 40 kJ/mol kötési E

A tömegközéppont és a töltésközéppont nem esik egybe. Dipólusok (polarizált molekulák) közötti kölcsönhatás.

hidrogén-kötés

nagy molekulatömeg esetén jelentős (polimerek)



2.12. ábra

a) Elektromos dipólusok b) A vízmolekula, mint permanens dipólus

13

Kötési energia

Fémes kötés:	200-400 kJ/mol
Ionos kötés:	400-1200 kJ/mol
Kovalens kötés:	160-1500 kJ/mol
Másodlagos kötések: (Van der Waals)	4-40 kJ/mol

Kötési energia - Tulajdonságok

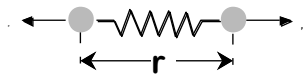
Olvadáspont
Rugalmassági modulus
Kúszási hőmérséklet
Hőtágulási együttható

...

14

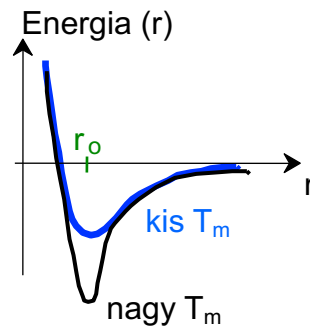
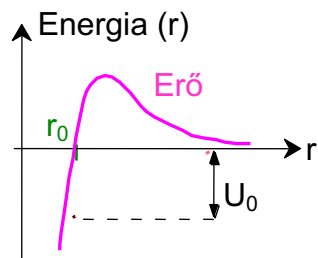
Atomi kötés és makroszkópikus tulajdonságok kapcsolata

- Kötéshossz, r



- Olvadáspont, T_m

- Kötési energia, U_0

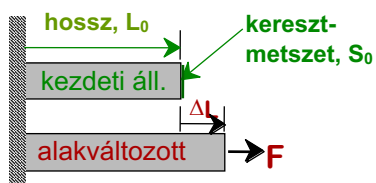


U_0 nagy $\Rightarrow T_m$ nagy

15

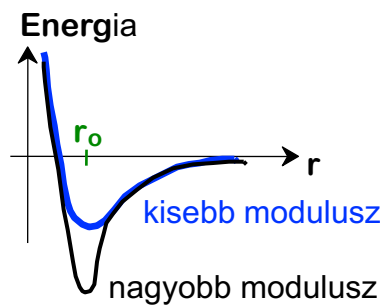
15

- Rugalmassági modulusz, E



$$\frac{F}{S_0} = E \frac{\Delta L}{L_0}$$

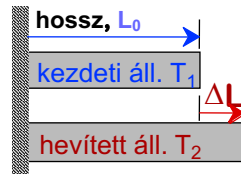
U_0 nagy $\Rightarrow E$ nagy



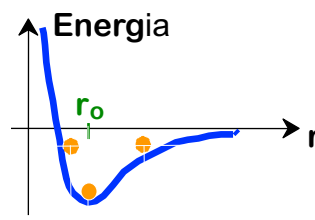
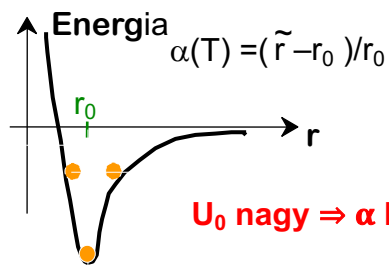
16

16

• Hőtágulási tényező, α



$$\frac{\Delta L}{L_0} = \alpha (T_2 - T_1)$$



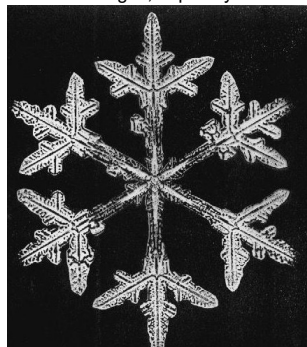
17

17

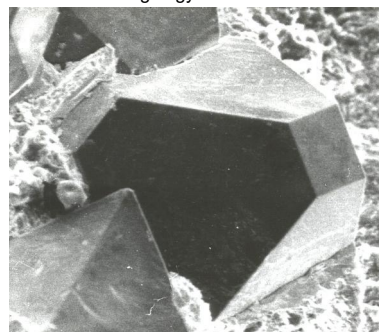
Kristályos szerkezetű anyagok

Rácspontok, ideális rend, periodikus szerkezet
 Rendezettség az atomok között $\Rightarrow$ tulajdonságok
 Szimmetria, síklapok, hasadás, anizotrópia

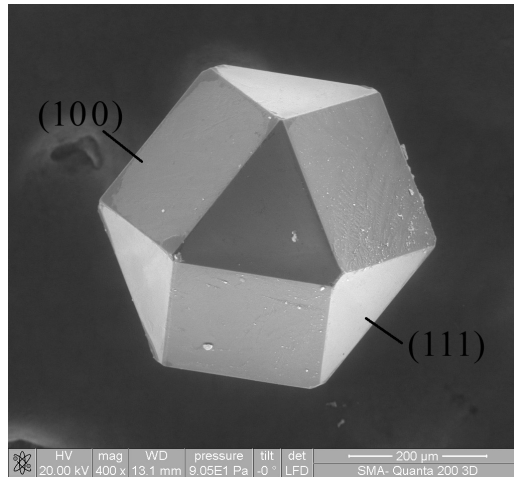
Hatszöges, hópehely



Mesterséges gyémánt BME ATT



18



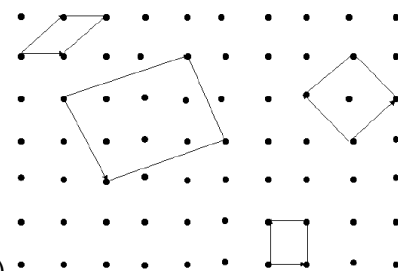
Szintetikus gyémánt kuboktahedron alakú kristálya.
Laboratory of the High-Temperature Materials of the Moscow Steel and Alloys Institute.

19

Kristálytan alapjai

Térrács
Transzlációs vektor
Transzlációs egységvektor
Rácsállandó, rácsparaméter
Elemi cella
Primitív cella

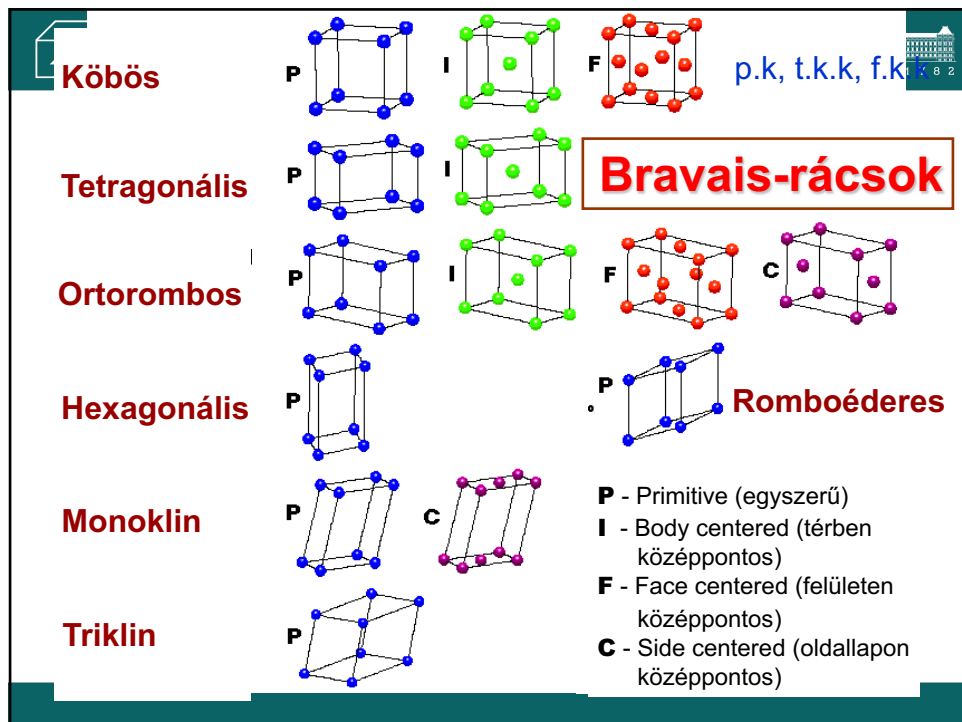
$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3)$$



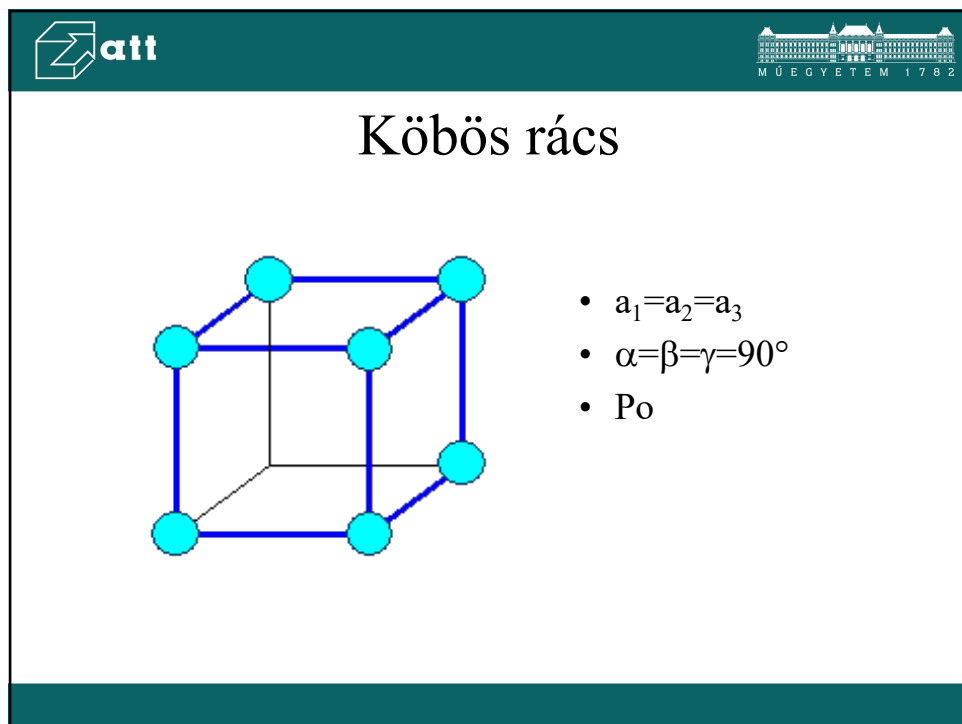
Matematikailag: 230 féle pontrács
7-féle rácstípus (nincs több lehetőség)
14 Bravais-rács

Alap feltételezés: Az atomok/ionok gömbök, amik egymást érintik a szoros illeszkedésű irány mentén.

20

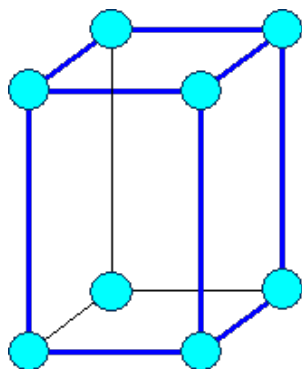


21



22

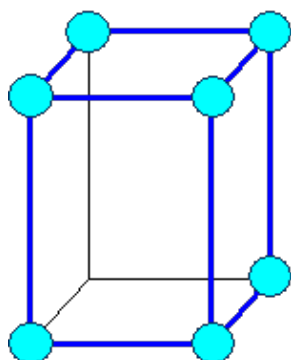
Tetragonális rács



- $a_1 = a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- In, Sn (ha $T > 13^\circ$)

23

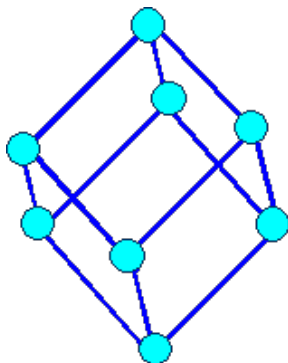
Ortorombos rács



- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- Ga, U

24

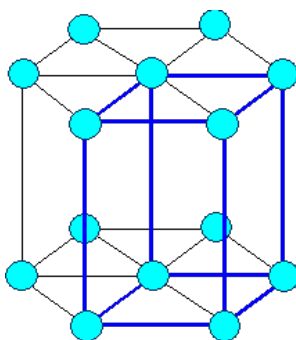
Romboéderes rács



- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Hg, Bi, As

25

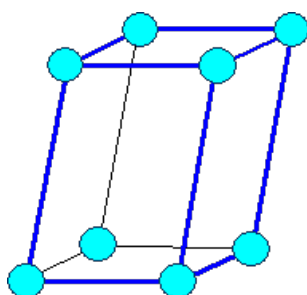
Hexagonális rács



- $a_1 = a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- elemi cella: rombusz alapú egyenes hasáb
- Cd, Mg, Zn, grafit

26

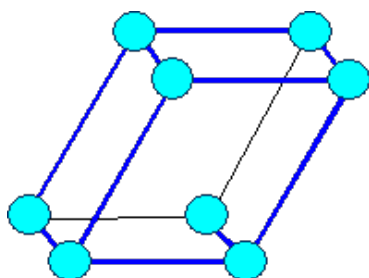
Monoklin rács



- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma = 90^\circ$
- kén

27

Triklin rács

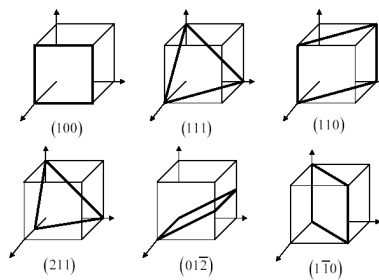


- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Se, Te

28

Miller-indexek

- Pontok
- Irányok
- Síkok



29

Irányok Miller-indexei

$$\bar{T} = u\bar{a}_1 + v\bar{a}_2 + w\bar{a}_3$$

$$[uvw]$$

$$\langle uvw \rangle$$

30

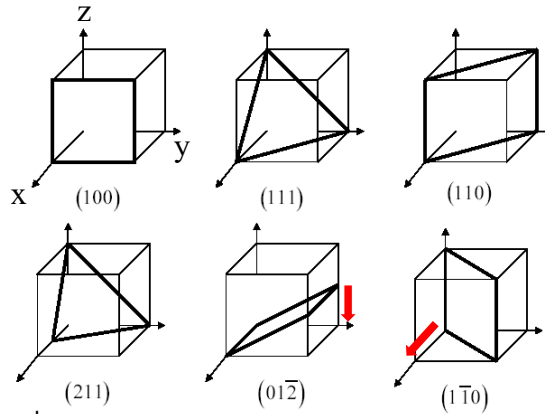
Kristálytani síkok Miller-indexei

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

$$hx + ky + lz = q$$

$$(hkl)$$

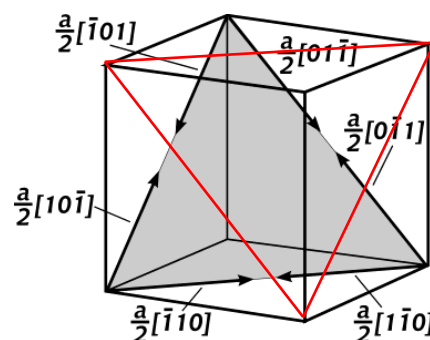
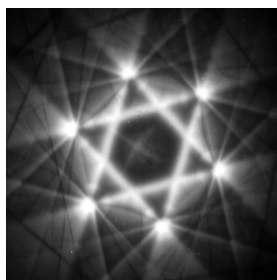
$$\{hkl\}$$



Mindig a legkisebb egész számok.

Kristálytanilag ekvivalens síkok, irányok.

31

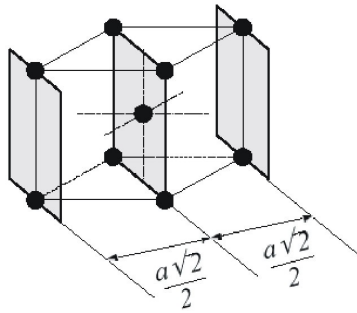


Convergent beam electron diffraction (CBED) transmission electron micrograph of a [111] zone axis of an austenitic stainless steel.

Author: C.A. Regalado

32

Rácssíkok közötti távolság



$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

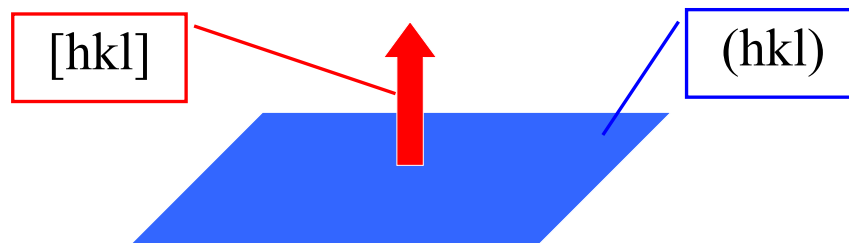
TKK($\bar{1}10$)

$$d_{\bar{1}10} = \frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

33

Köbös rendszerben:

ha egy sík Miller indexei (hkl) akkor a sík normálisának Miller indexei [hkl].



34

Síkok szöge köbös rendszerben

Két sík által bezárt szög:

mivel

$$(h_1 k_1 l_1) \perp [h_1 k_1 l_1] \text{ és } (h_2 k_2 l_2) \perp [h_2 k_2 l_2],$$

valamint

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = |\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2| \cos \varphi,$$

$$\cos \varphi = \frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{|\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2|} = \frac{h_1 \cdot h_2 + k_1 \cdot k_2 + l_1 \cdot l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

35

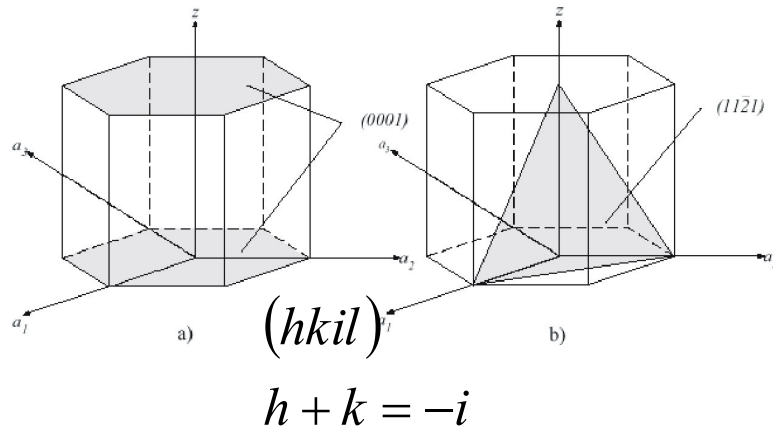
Síkok metszésvonala köbös rendszerben

Két sík metszésvonala a síkok normálisainak vektoriális szorzata:

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} = \vec{i}(k_1 l_2 - l_1 k_2) - \vec{j}(h_1 l_2 - l_1 h_2) + \vec{k}(h_1 k_2 - k_1 h_2)$$

36

Miller-indexek hexagonális rendszerben (sík)



37

Miller-indexek használata

Határozzuk meg a köbös rácsban, azon $[h_1 \ k_1 \ 2]$ és $[h_2 \ k_2 \ 1]$ kristálytani irányok Miller-indexeit, amelyek az $(1\bar{1}0)$ síkban fekszenek és egymásra merőlegesek!

Egy tetragonális kristályrács rácsállandói $a = b = 0,3 \text{ nm}$, $c = 0,4 \text{ nm}$. Keressük annak a síknak a Miller-indexeit amely a tengelyeket $0,5 \text{ nm}$ távolságban metszi.

Köbös rendszerben az $[1 \ 2 \ 3]$ irány mekkora szöget zár be az $x+3y-2z+2=0$ kristálytani síkkal?

38

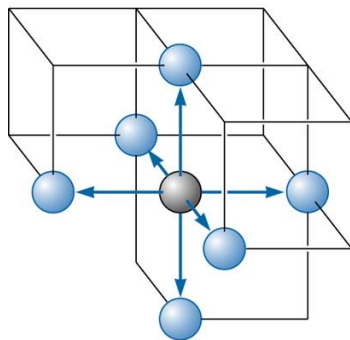
Kristálytani adatok

koordinációs szám
 atomok száma az elemi cellában
 atomátmérő $\leftrightarrow$ rácsállandó
 térkitöltési tényező (APF)
 legnagyobb rácshézag (nagyság, hely)
 legszorosabb illeszkedésű irány, sík

síkbeli kitöltési tényező (PD)
 irányment kitöltési tényező (LD)

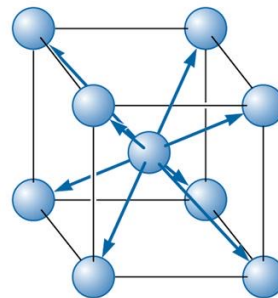
39

Koordinációs szám, PK, TKK



(a)

Primitív köbös

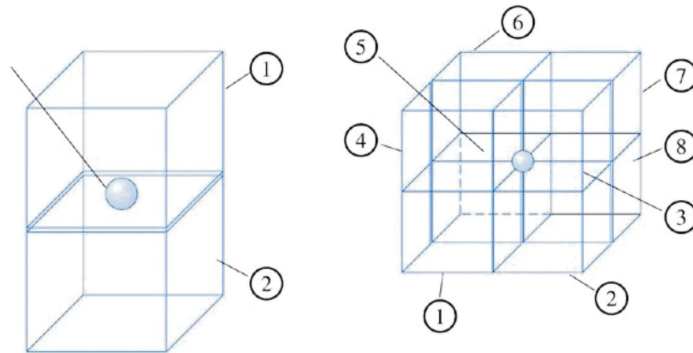


(b)

Térben középpontos köbös

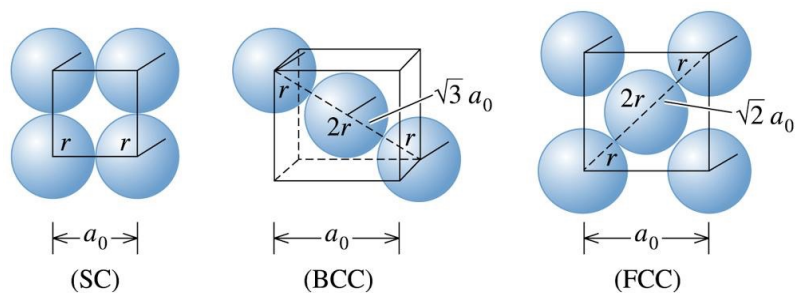
40

Atomok száma az elemi cellában



41

Atomátmérő és rácsállandó kapcsolata



SC = Simple Cubic = primitív köbös

BCC = Body Centered Cubic = térben középpontos köbös

FCC = Face Centered Cubic = felületen középpontos köbös

42

Térkitöltési tényező

TT = atomok össztérfogata / cella térfogata

a = rácsállandó = elemi cella élhosszúsága

d = atomátmérő

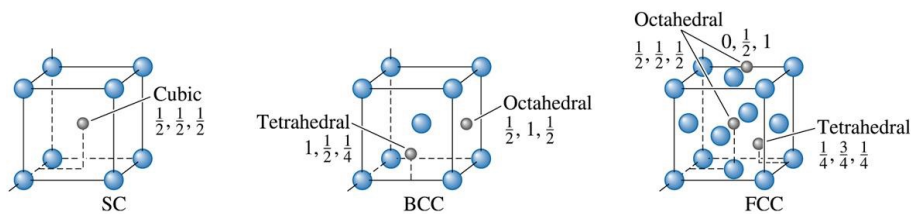
PI. TKK → 2 atom a cellában

$$TT = \frac{2 \left(\frac{d^3 \pi}{6} \right)}{a^3} = \frac{\left(\frac{a\sqrt{3}}{2} \right)^3 \pi}{3a^3} = \frac{a^3 \pi \sqrt{3}}{8a^3} = \frac{\pi \sqrt{3}}{8} \approx 0.68$$

68%

43

Legnagyobb rácshézag

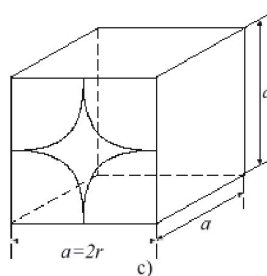
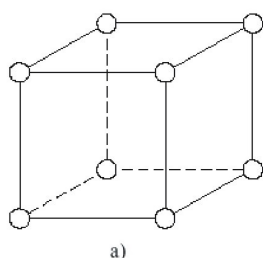


44

- Mechanikai
 - Elektromos
 - Hőfizikai
 - Mágneses
 - Optikai
 - Korroziós
 - Radiológiai
 - ...
- **Intrinsic** („szerkezet érzéketlen”, szövet- és hibaszerkezettől független). **Kizárólag a kémiai összetétel és a kristályrács határozza meg.**
 - **Extrinsic** („szerkezet érzékeny”, szövet- és hibaszerkezettől függő)

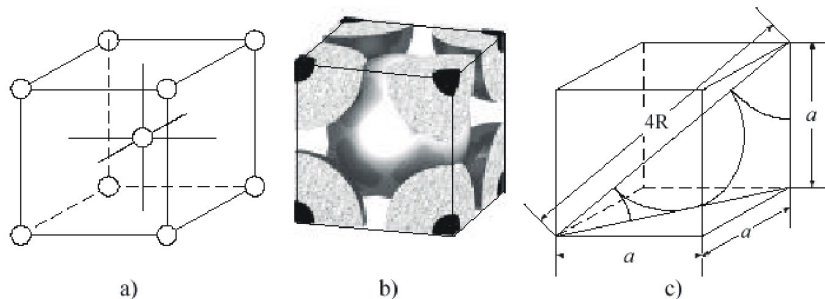
45

Primitív köbös



Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
PK	Po	6	a	1	0,52	0,73 a középen	{100} <100>

46

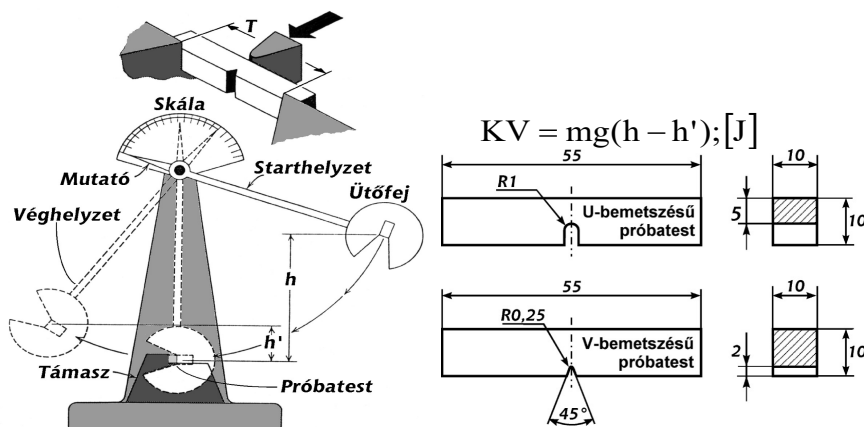


Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
TKK	Na, K, Cr, Mo, W, β Ti, α Fe	8	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	2	0,68	0,252 a	$\{111\}$ $\{110\}$

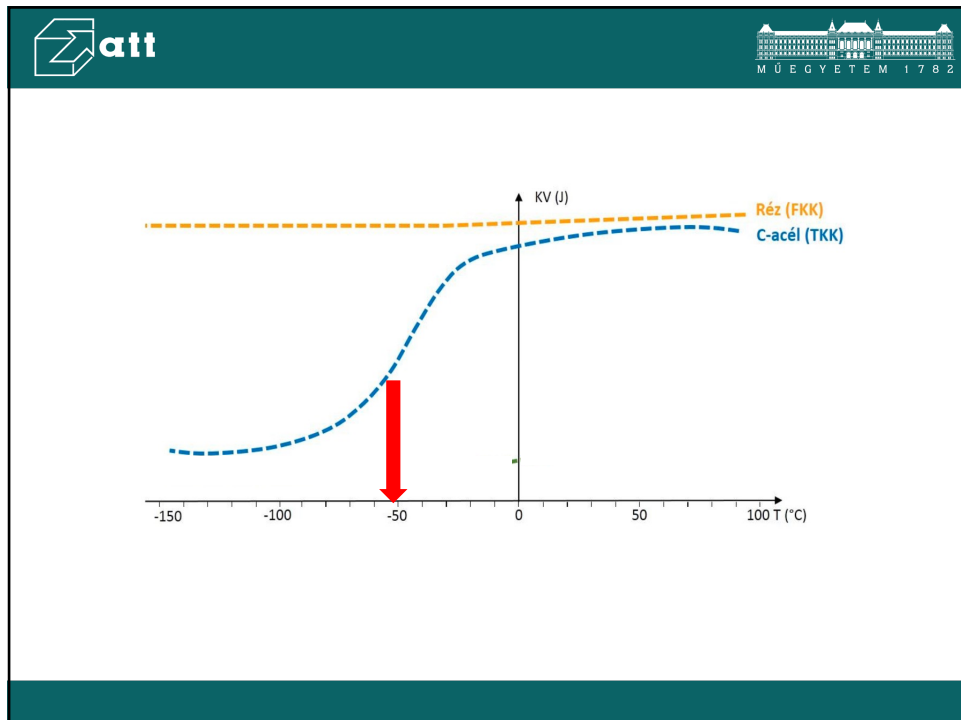
Kismértékű alakíthatóság, oxidációs hajlam, viszonylag kis vezetőképesség, rideg-képlékeny átmenet, kifáradási határ, alakítási írek képződésére hajlamos

47

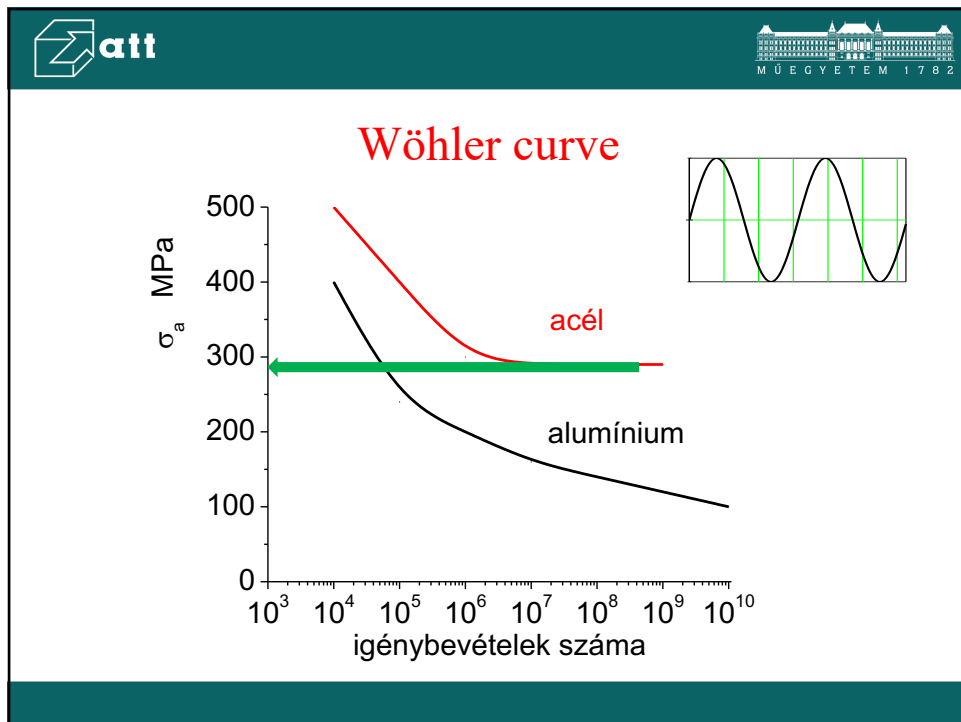
Charpy-féle ütőmunka vizsgálat



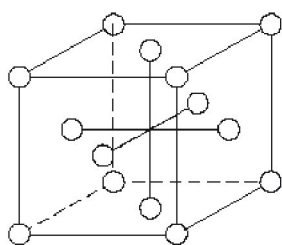
48



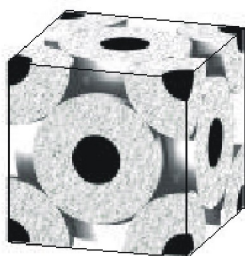
49



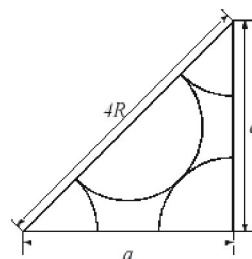
50



a)



b)



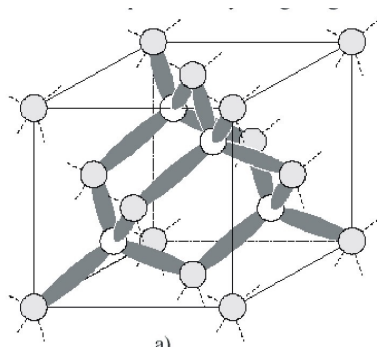
c)

Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
FKK	Cu, Au, Ag, Pb, Ni, Pt, γ Fe	12	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$	4	0,74 Maximális!	0,293 a $\frac{1}{2} 0 0$ $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	{111} <110>

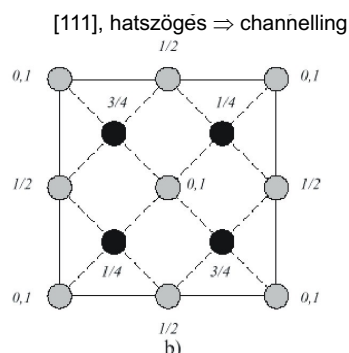
Jól alakítható, kémiai stabil, jó hő- és elektromos vezető, újrakristályosodási ikrek képződésére hajlamos (az alakítás nem hoz létre ikreket az FKK-ban)

51

Gyémántrács (szfalerit, wurzit)



a)



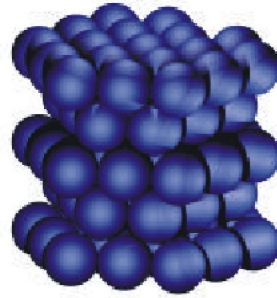
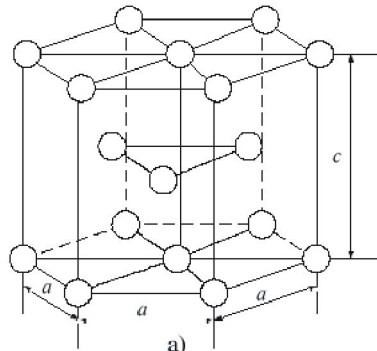
b)

Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legszorosabb illeszkedések
Gyémánt	C, Si, Ge, α Sn	4	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	8	0,34 Kicsi!	{111} <110> Nem érintik egymást!

Szimmetrikus tetraéderez kötés $\Rightarrow$ kemény, rideg. Kötési szög = $109,47^\circ$, sp^3 hibridizáció, Si – (111), GaAs – (100)

52

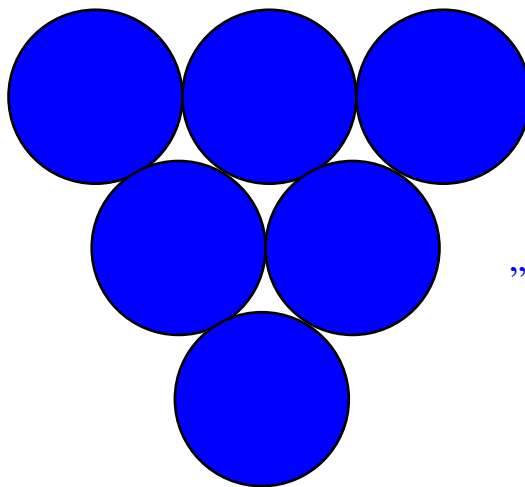
Szorosan pakolt hexagonális rács



Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
HCP	Be, Mg, Zn, Cd, α Ti	12	$d=a$ $c/a=1,63$	6	0,74 Maximális!	0,235 a	{0001} <11 $\bar{2}$ 0>

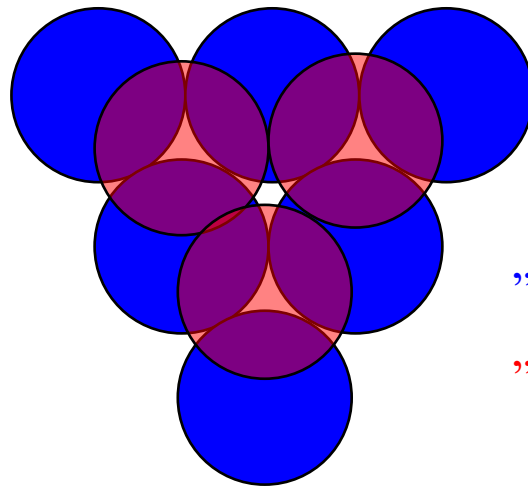
53

A legszorosabb illeszkedésű sík



„A” réteg

54

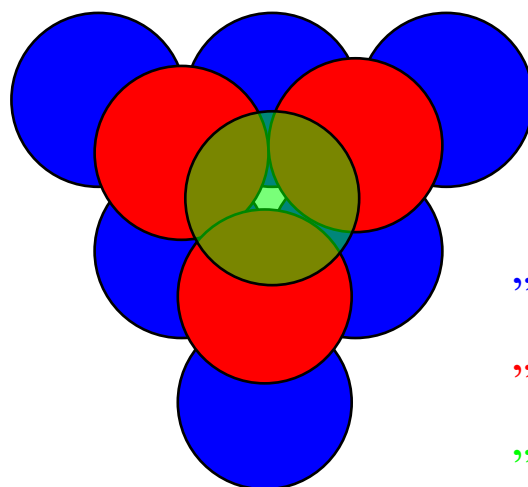


„A” réteg

„B” réteg

55

Felületen középpontos köbös rács



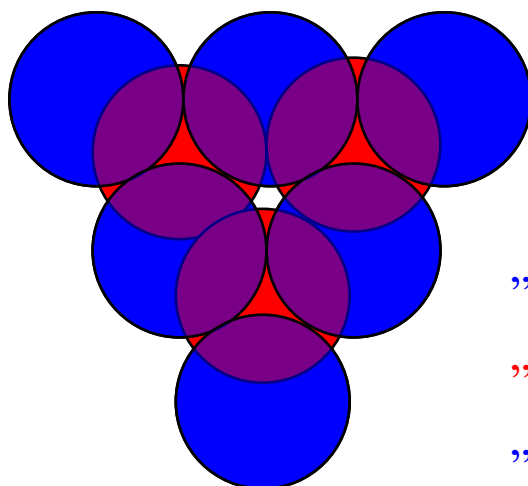
„A” réteg

„B” réteg

„C” réteg

56

Szorosan pakolt hexagonális rács



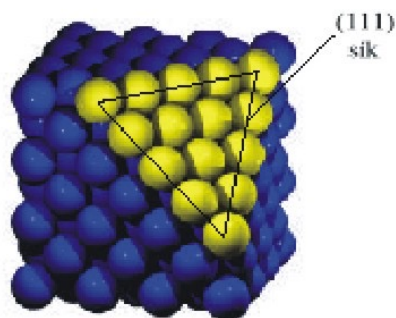
„A” réteg

„B” réteg

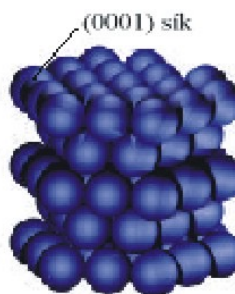
„A” réteg

57

FKK és szorosan pakolt hexagonális rács összehasonlítása



ABCABC



ABABAB

58