

Anyagismeret

Kémiai kötések
Ideális kristályrács
Tulajdonságok

Dr. Mészáros István Attila

1

Intrinsic

Kémiai összetétel és kötés típus
Kristály szerkezet

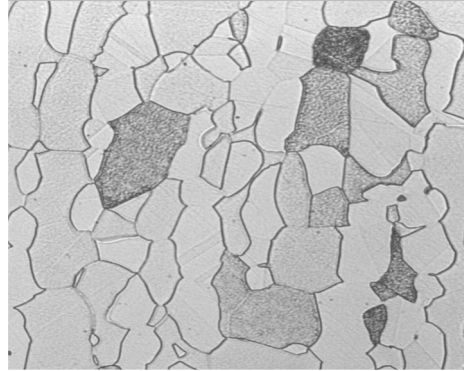
Extrinsic

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

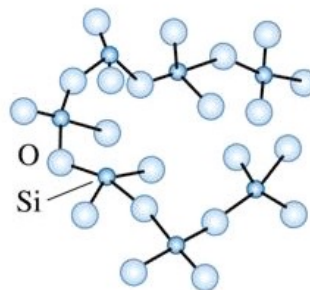
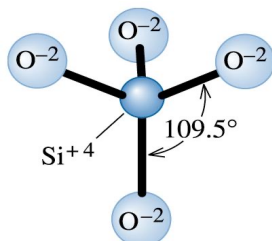
Szilárd (kondenzált anyag)

- 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

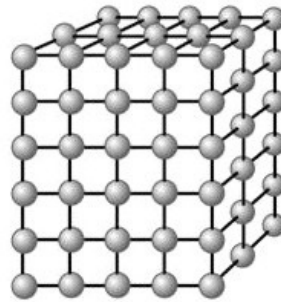
- Rövid távú rend (amorf anyagok)



6

Az atomok elrendeződése

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



7

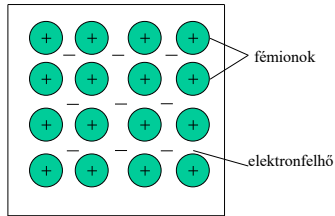
Kötéstípusok és tulajdonságok

Elsődleges (erős)

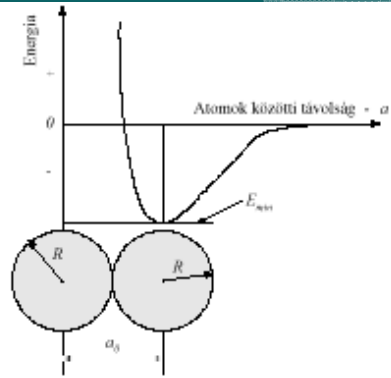
Másodlagos (gyenge) kötések

8

Fémes kötés



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

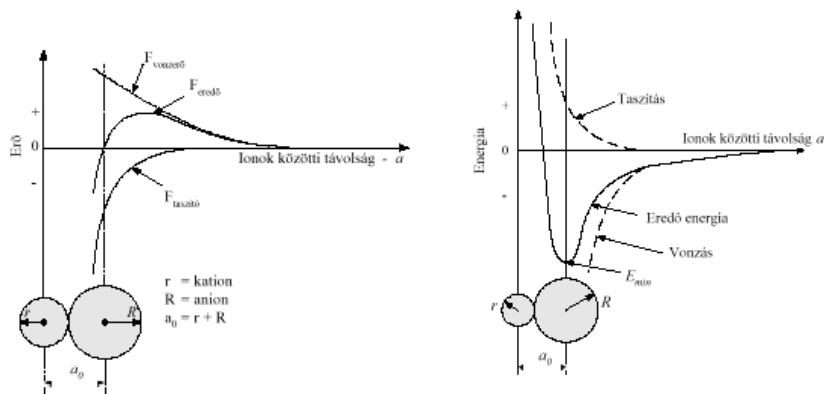
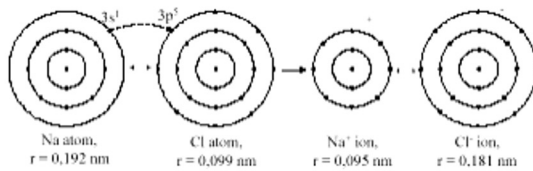


2.3. ábra
A fémes kötésben résztvevő atomok energiájának változása az atomok közötti távolság függvényében

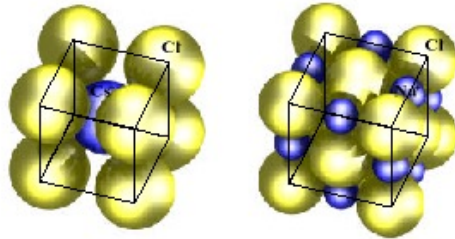
Szabad elektronok \Rightarrow Jó hő és elektromos vezetők (Wiedemann-Franz, kivételek: gyémánt ...)
Ionok elmozdulni képesek, rácspontok távolsága változhat \Rightarrow Jó képlékeny alakíthatóság (szoros illeszkedés, elcsúszási lehetőség)

9

Ionos kötés

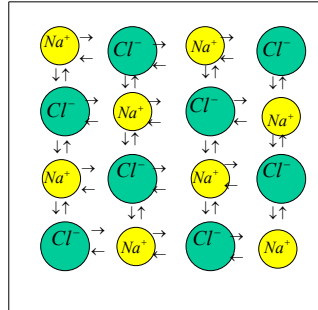


10



2.7. ábra

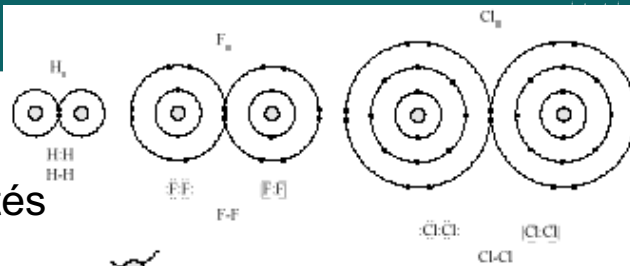
Az ionos kötés-elrendezés a) CsCl b) NaCl vegyületre



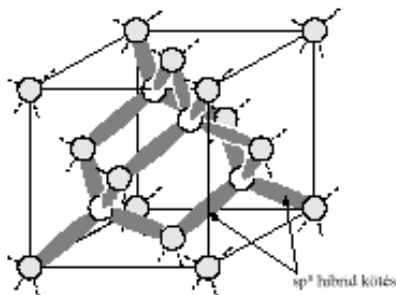
Fémek - nemfémek elemek
 stabil elektronszerkezet
 kation (+) - anion (-)
 Coulomb vonzás
 Szabad elektron nincs

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 elektronegativitási 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

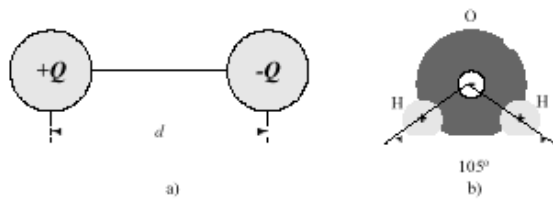
Van der Waals kötés

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

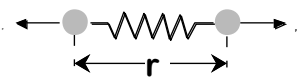
a) Elektromos dipólusok b) A vízmolekula, mint permanens dipólus

13

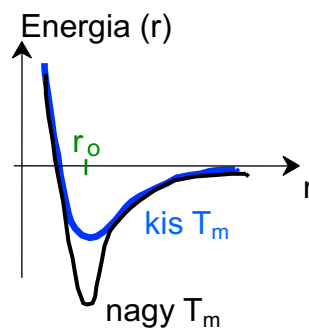
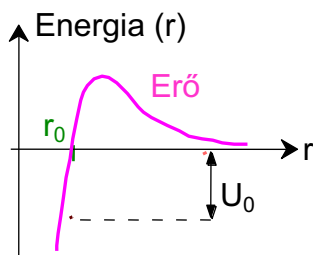
Atomi kötés és makroszkópikus tulajdonságok kapcsolata

• **Kötéshossz, r**

Olvadáspont, T_m



• **Kötési energia, U_0**

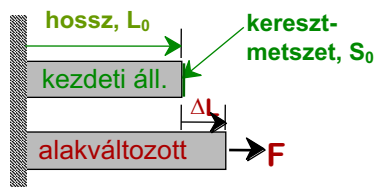


U_0 nagy $\Rightarrow T_m$ nagy

14

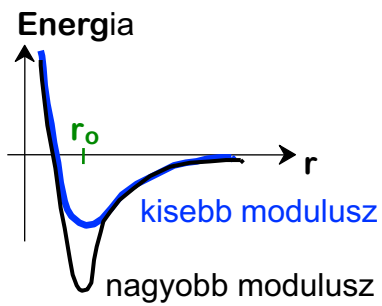
14

• Rugalmassági modulusz, E

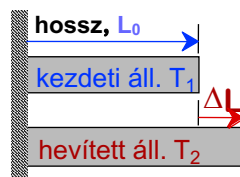


$$\frac{F}{S_0} = E \frac{\Delta L}{L_0}$$

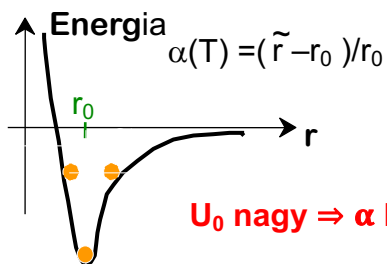
U_0 nagy \Rightarrow E nagy



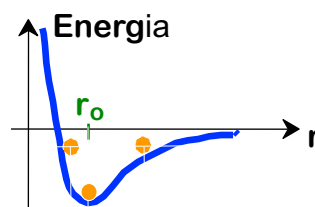
• Hőtágulási tényező, α



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



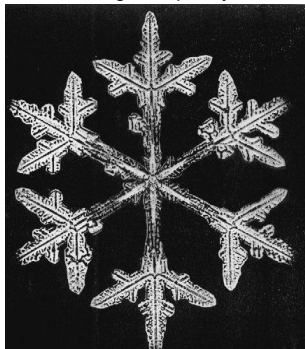
U_0 nagy \Rightarrow α kicsi



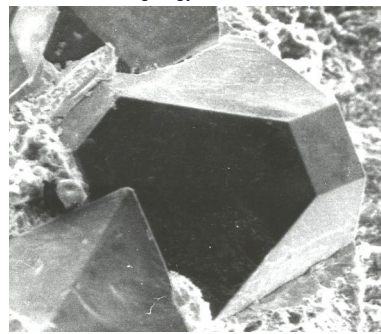
Kristályos szerkezetű anyagok

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

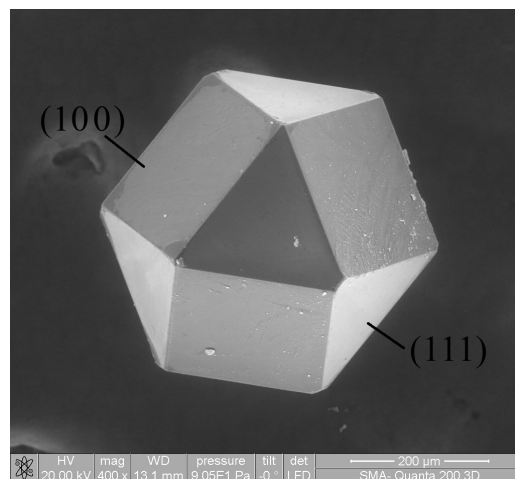
Hatszögös, hópehely



Mesterséges gyémánt BME ATT



17



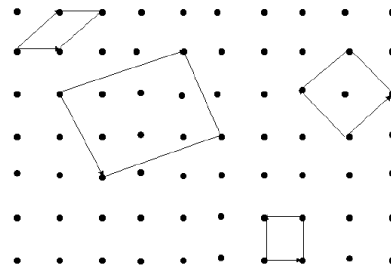
Szintetikus gyémánt kuboktahedron alakú kristálya.
 Laboratory of the High-Temperature Materials of the Moscow Steel and Alloys Institute.

18

Kristálytan alapjai

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

$$r = r_0 + (n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3)$$



- 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.

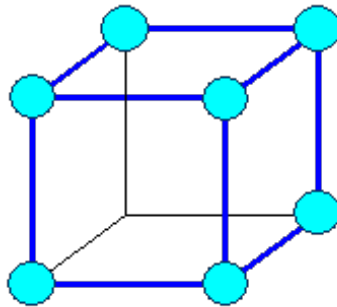
{

p.k, t.k.k, f.k

Köbös		
Tetragonális		Bravais-rácsok
Ortorombos		
Hexagonális		Romboédes
Monoklin		
Triklin		

P - Primitive (egyszerű)
I - Body centered (térben középpontos)
F - Face centered (felületen középpontos)
C - Side centered (oldallapon középpontos)

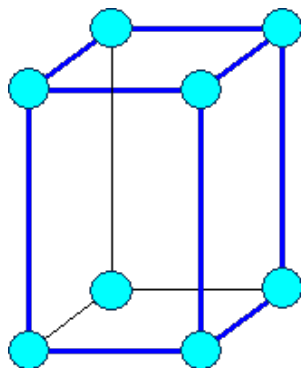
Köbös rács



- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- P_0

21

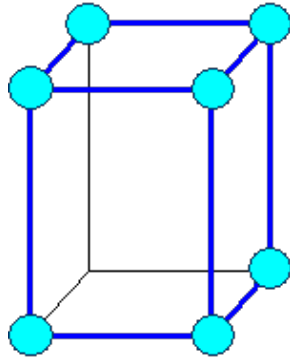
Tetragonális rács



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

22

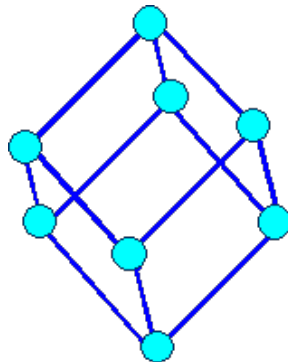
Ortorombos rács



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

23

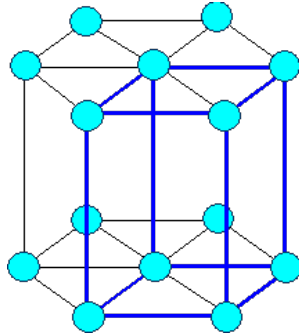
Romboédéres rács



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

24

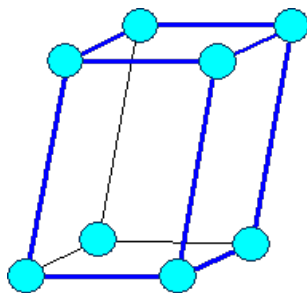
Hexagonális rács



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

25

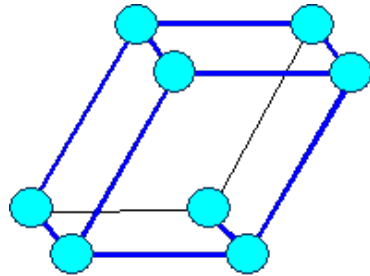
Monoklin rács



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

26

Triklin rács

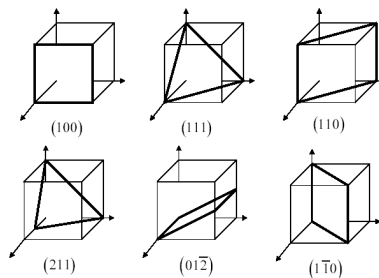


- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Se, Te

27

Miller-indexek

- Pontok
- Irányok
- Síkok



28

Írányok Miller-indexei

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

$$[uvw]$$

$$\langle uvw \rangle$$

29

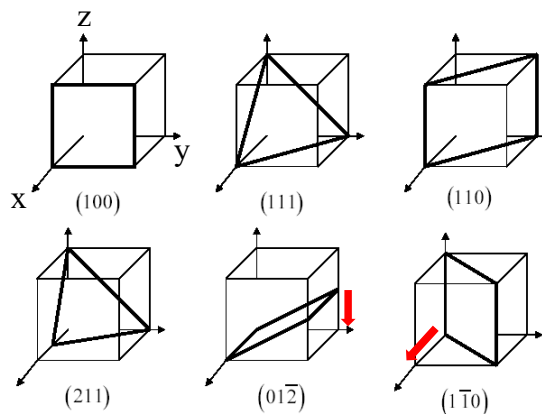
Kristálytani síkok Miller-indexei

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

$$hx + ky + lz = q$$

$$(hkl)$$

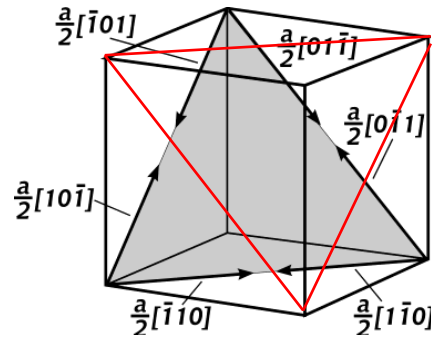
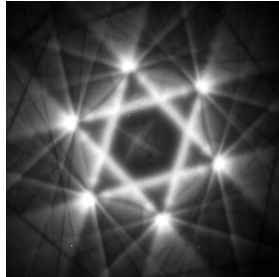
$$\{hkl\}$$



Mindig a legkisebb egész számok.

Kristálytanilag ekvivalens síkok, irányok.

30

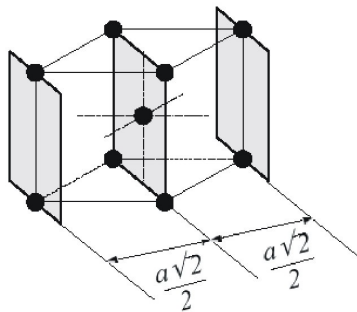


Convergent beam electron diffraction (CBED) transmission electron micrograph of a [111] zone axis of an austenitic stainless steel.

Author: C.A. Regalado

31

Rácssíkok közötti távolság



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

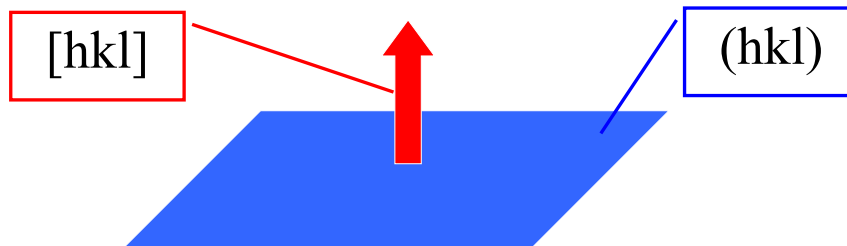
$TKK(\bar{1}10)$

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

32

Köbös rendszerben:

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



33

Síkok szöge köbös rendszerben

Két sík által bezárt szög:

mivel

$$(h_1k_1l_1) \perp [h_1k_1l_1] \text{ és } (h_2k_2l_2) \perp [h_2k_2l_2],$$

valamint

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

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

34

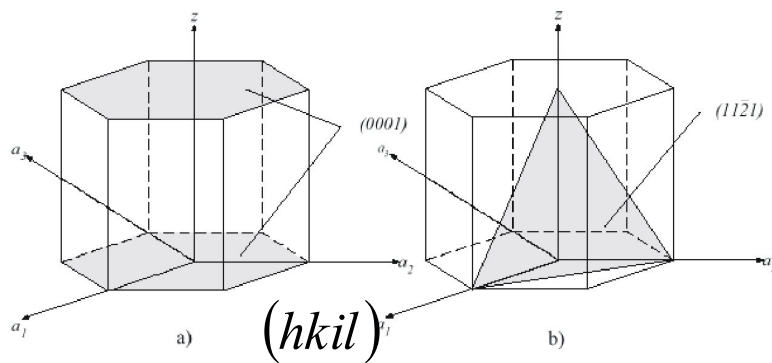
Síkok metszésvonala köbös rendszerben

Két sík metszésvonala a síkok normálisainak vektoriális szorzata:

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

35

Miller-indexek hexagonális rendszerben (sík)



$$h + k = -i$$

36

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.

37

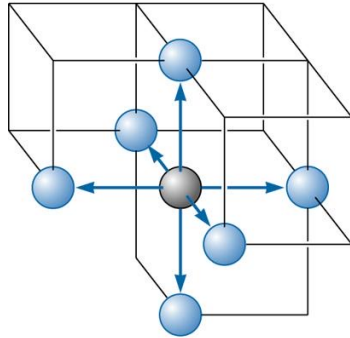
Kristálytani adatok

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)

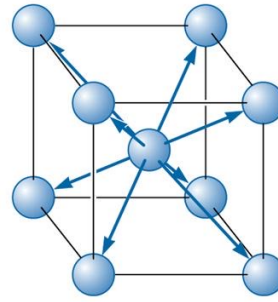
38

Koordinációs szám, PK, TKK



(a)

Primitív köbös

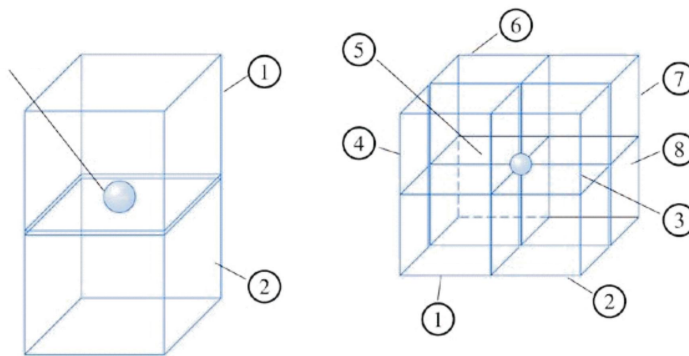


(b)

Térben középpontos köbös

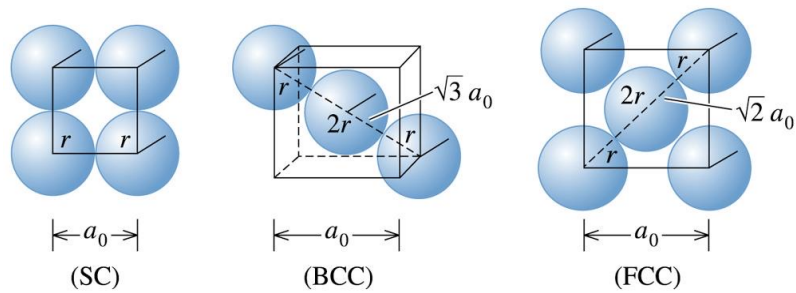
39

Atomok száma az elemi cellában



40

Atomátmérő és rácsállandó kapcsolata



SC = Simple Cubic = primitív köbös
 BCC = Body Centered Cubic = térben középpontos köbös
 FCC = Face Centered Cubic = felületen középpontos köbös

41

Térkitöltési tényező

TT = atomok össztérfogata / cella térfogata

a = rácsállandó = elemi cella élhosszúsága

d = atomátmérő

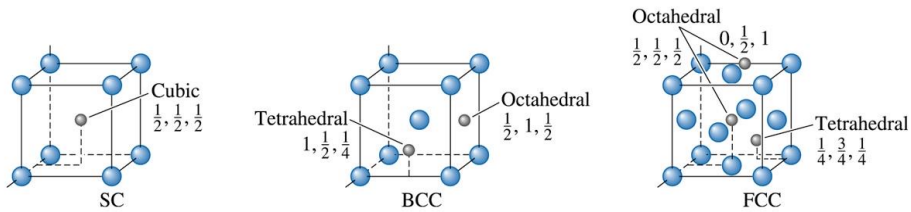
PI. TKK → 2 atom a cellában

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

68%

42

Legnagyobb rácshézag

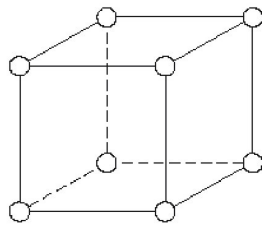
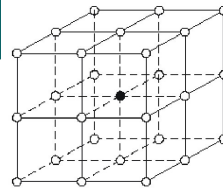


43

- 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)

44

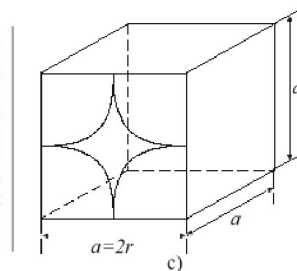
Primitív köbös



a)



b)

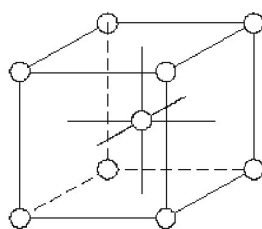


c)

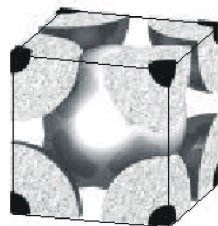
Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
PK	Po	6	a	1	0,52	0,73 a középen	{100} <100>

45

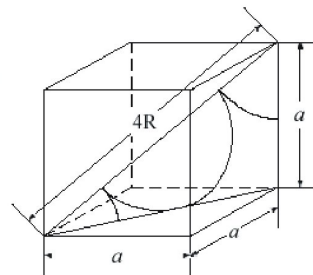
Térben középpontos köbös



a)



b)



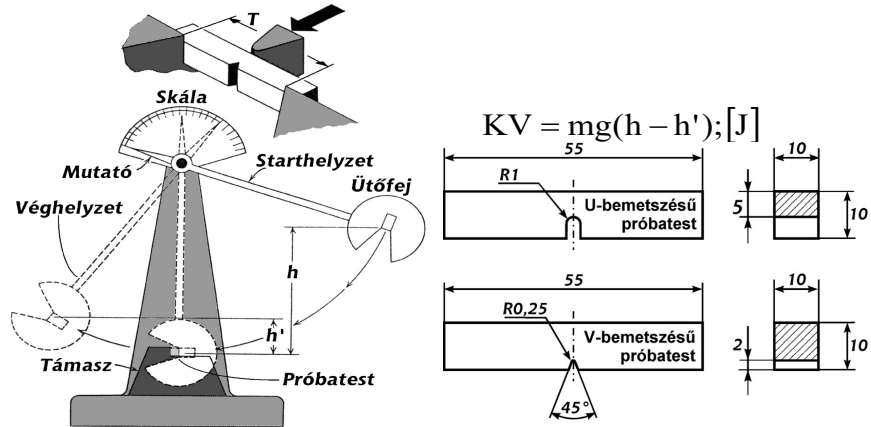
c)

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 $\frac{1}{2} \frac{1}{4} 0$	{1 1 1} {1 1 0}

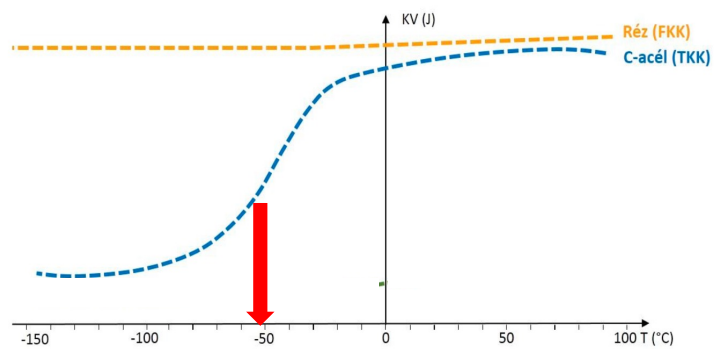
Kismértékű alakíthatóság, oxidációs hajlam, viszonylag kis vezetőképesség, rideg-képlékeny átmenet, kifáradási határ, alakítási ikrek képződésére hajlamos

46

Charpy-féle ütőmunka vizsgálat

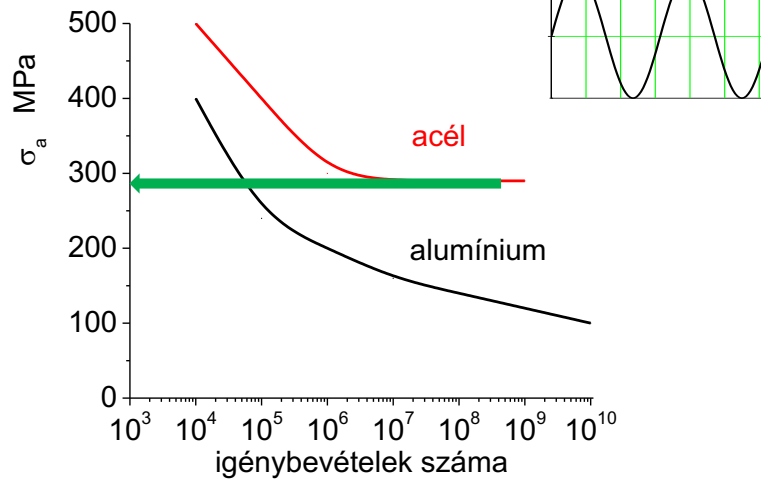


47



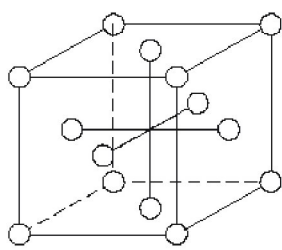
48

Wöhler curve

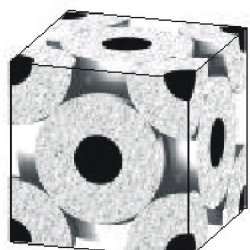


49

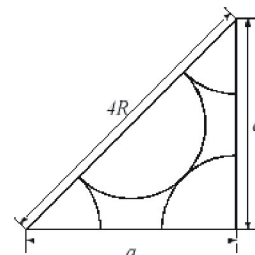
Felületen középpontos köbös



a)



b)



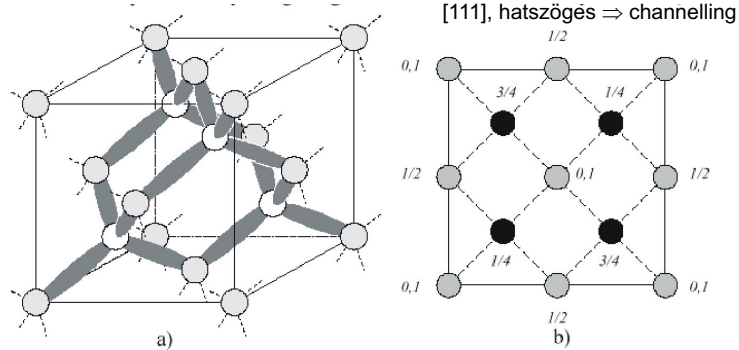
c)

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, kémiaailag stabil, jó hő- és elektromos vezető, újrakristályosodási ikek képződésére hajlamos (az alakítás nem hoz létre ikeket az FKK-ban)

50

Gyémántrács (szfalerit, wurzit)

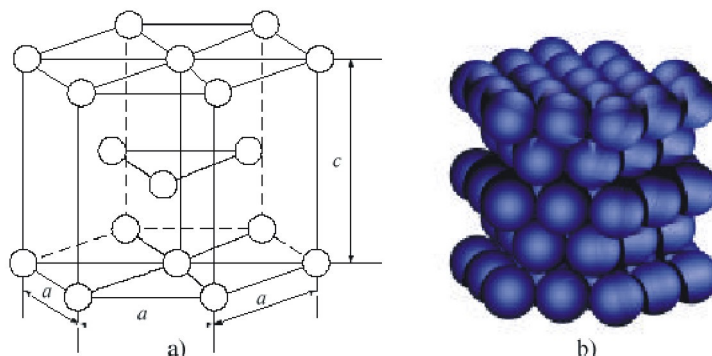


Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legszorosabb illeszkedések
Gyémánt	C, Si, Ge, α Sn	4	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	8	0,34 Kicsi!	{111} <110> Nem érintik egymást!

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

51

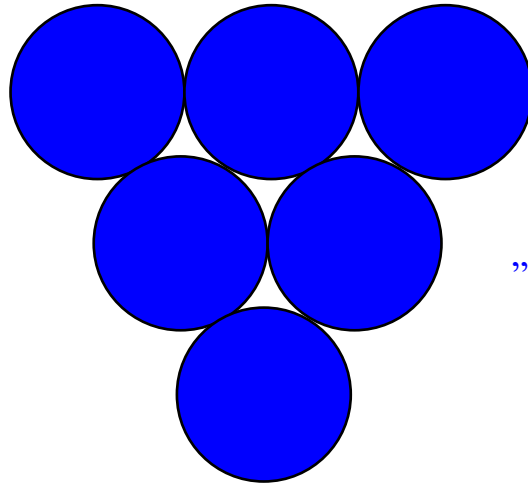
Szorosan pakolt hexagonális rács



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} <1120>

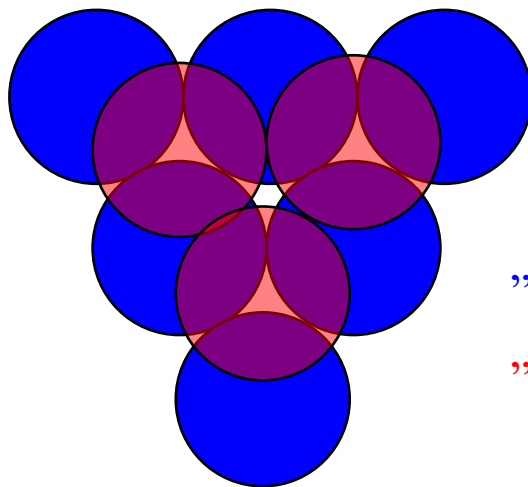
52

A legszorosabb illeszkedésű sík



„A” réteg

53

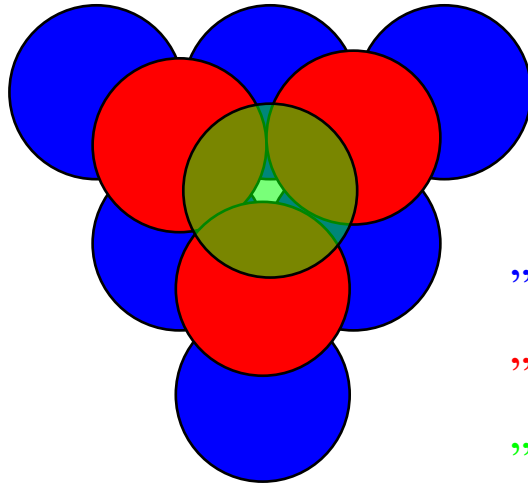


„A” réteg

„B” réteg

54

Felületen középpontos köbös rács



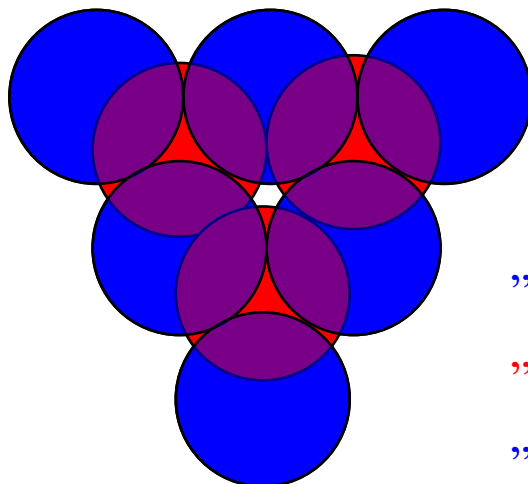
„A” réteg

„B” réteg

„C” réteg

55

Szorosan pakolt hexagonális rács



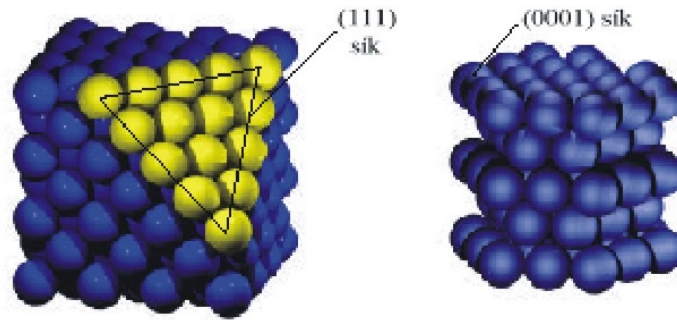
„A” réteg

„B” réteg

„A” réteg

56

FKK és szorosan pakolt hexagonális rács összehasonlítása



ABCABC

ABABAB