

# Bevezetés az anyagtudományba

## III. előadás

2010. február 18.

### **Kristályos és nem-kristályos anyagok**

A **kristályos** anyag atomjainak elrendeződése *sok atomnyi távolságig*, a tér mindhárom irányában periodikusan ismétlődő. A mikroszerkezetre a hosszútávú rend jellemző.

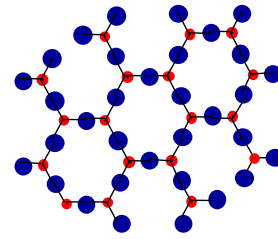
Lehet **egykristály**, ha az atomoknak ez a periodikus ismétlődése tökéletes abban az értelemben, hogy az anyag teljes térfogatára kiterjed.

Lehet **polikristályos** (**mikrokristályos**), ha az anyag több (egy)kristály szemcséből épül fel.

Az anyag **nem-kristályos** (**amorf**), ha az atomok elrendeződésének hosszútávú periódikus ismétlődése hiányzik (csak rövidtávú rend létezik).

A **kristályos** anyagokban az atomok elrendeződése 3D-ban periódikusan ismétlődő.

- fémek
- sok kerámia
- néhány polimer



kristályos SiO<sub>2</sub> (kvarc)

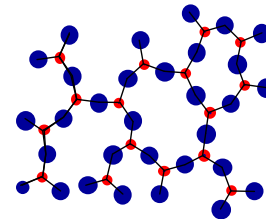


A **nem-kristályos** anyagokban

Nincs hosszútávú rend.

Tipikusan gyors hűtéssel előállított komplex szerkezetek.

"Amorf" = nem-kristályos



amorf SiO<sub>2</sub> (ömlesztett kvarc)

## Kristályszerkezetek

Geometriai leírás: ahogyan a részecskék (atomok, atomtörzsek, ionok, molekulák) a térben elhelyezkednek.

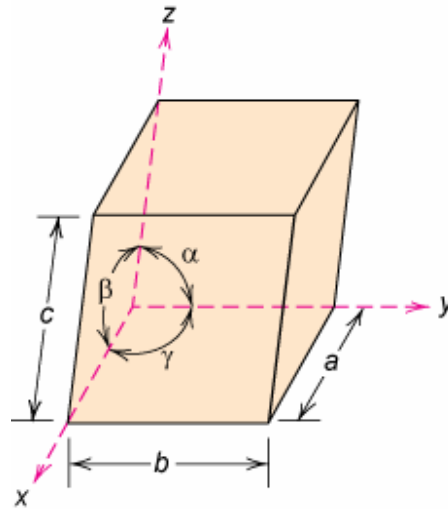
A **merev gömb modell**: a kristályokat gömbként elképzelt egymással érintkező részecskék építik fel.

A **(kristály)rács**: pontok olyan három dimenziós rendszerre, amelyben a pontok térbeli helyzete az részecskékének felel meg.

**Elemi cella**: egy kristály azon legkisebb geometriai egysége, amelynek három irányban való, önmagával párhuzamos eltolásával felépíthető a kristály.

# Az elemi cella

A legalacsonyabb szimmetriájú elemi cellát 6 adattal jellemezhetjük:



A rácsparaméterek:  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ .  
 $a$ ,  $b$  és  $c$  a három ráczállandó.

A legmagasabb szimmetriájú  
elemi cella 2 adattal jellemezhető.

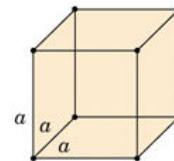
7 féle kombináció lehetséges ->

## A hét kristályrendszer (rácrendszer)

Cubic  
Köbös, szabályos

$$a = b = c$$

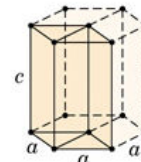
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Hexagonal  
Hexagonális, hatszögös

$$a = b \neq c$$

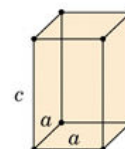
$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$



Tetragonal  
Tetragonális, négyzetes

$$a = b \neq c$$

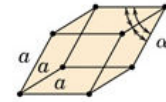
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Rhombohedral  
(Trigonal)  
Trigonális

$$a = b = c$$

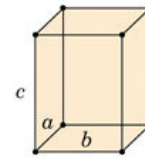
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



Orthorhombic  
Rombos

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

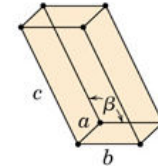


Monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$

Monoklin, egyhajlású

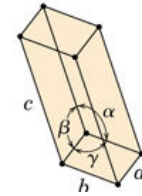


Triclinic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

Triklin, háromhajlású



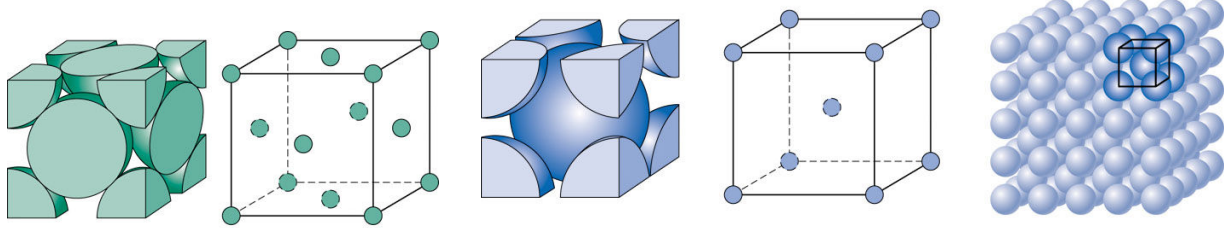
<http://www.theimage.com/crystalinfo/index.htm>

**The Atomic Mac™** Registered to: GREGORY TETRAULT  
For use only on a single machine

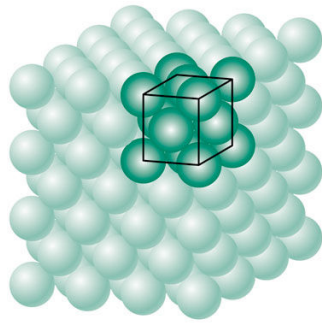
Legend:		Crystal Systems					
	Hexagonal		Cubic face centered		Monoclinic		Rhombohedral
	Cubic body centered		Orthorhombic		Tetragonal		
	Cubic						

H	He																	He
Li	Be																	Ne
Na	Mg																	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo	
La		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
Ac		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

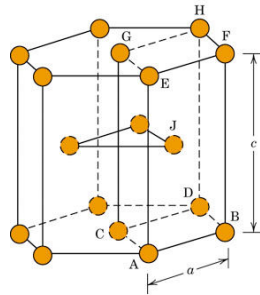
# Három egyszerű típus: a fémek rácsai



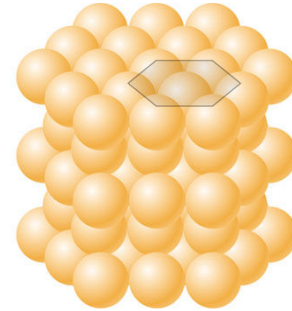
Tércentrált köbös: BCC  
Body Centered Cubic  
Kordinációs szám: 8



Lapcentrált köbös: FCC  
Face Centered Cubic  
Kordinációs szám: 12



Hexagonális: HCP  
Hexagonal Close-Packed  
Kordinációs szám: 12



## A méretek

**Table 3.1 Atomic Radii and Crystal Structures for 16 Metals**

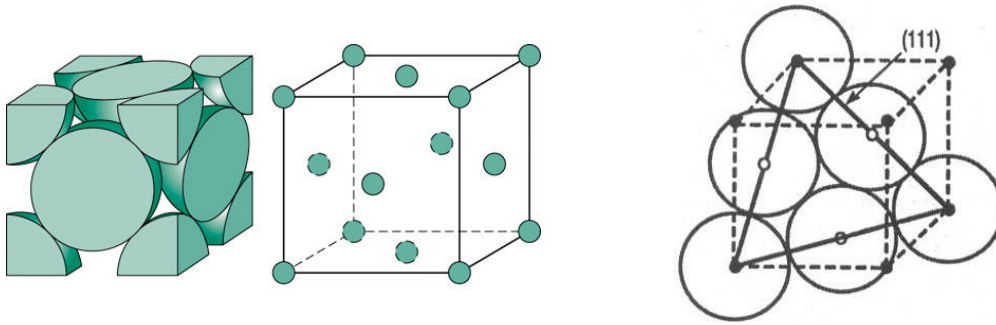
<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure<sup>a</sup></i>	<i>Atomic Radius<sup>b</sup> (nm)</i>	<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure</i>	<i>Atomic Radius (nm)</i>
Aluminum	FCC	0.1431	Molybdenum	BCC	0.1363
Cadmium	HCP	0.1490	Nickel	FCC	0.1246
Chromium	BCC	0.1249	Platinum	FCC	0.1387
Cobalt	HCP	0.1253	Silver	FCC	0.1445
Copper	FCC	0.1278	Tantalum	BCC	0.1430
Gold	FCC	0.1442	Titanium ( $\alpha$ )	HCP	0.1445
Iron ( $\alpha$ )	BCC	0.1241	Tungsten	BCC	0.1371
Lead	FCC	0.1750	Zinc	HCP	0.1332

<sup>a</sup> FCC = face-centered cubic; HCP = hexagonal close-packed; BCC = body-centered cubic.

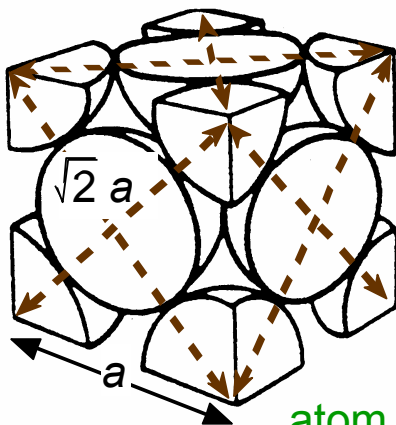
<sup>b</sup> A nanometer (nm) equals  $10^{-9}$  m; to convert from nanometers to angstrom units ( $\text{\AA}$ ), multiply the nanometer value by 10.

# Szoros illeszkedés

pl. FCC rács esetén



## Lapcentrált köbös rács



$$4R = \sqrt{2}a \rightarrow$$

$$a(\text{Cu}) = 0,36 \text{ nm} \text{ (0,36149 nm mért)}$$

$$a(\text{Al}) = 0,41 \text{ nm} \text{ (0,40495 nm mért)}$$

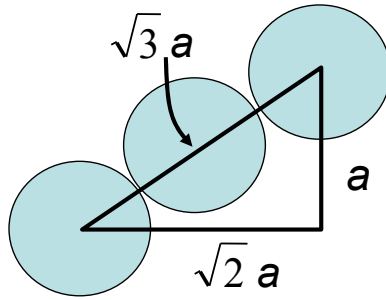
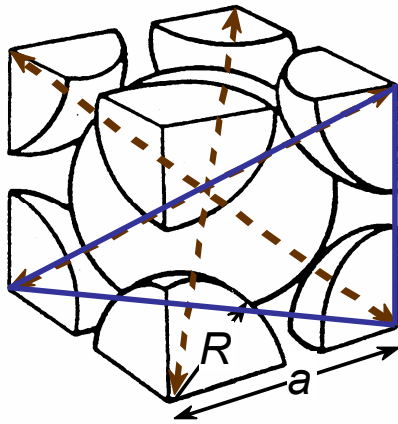
Az elemi cellában  $6 \times 1/2 + 8 \times 1/8 = 4$  atom van.

$$\text{APF} = \frac{\text{atom elemi cella} \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}a}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\text{térfogatom}}{\text{térfogatelemi cella}}$$

Atomi térkitöltési hányad  $(\text{APF})_{\text{FCC}} = 0,74$ .

Egyféle R esetén ez a legnagyobb APF.

# Tércentrált köbös rács



$$4R = \sqrt{3}a \rightarrow$$

$$a (\text{Cr}) = 0,29 \text{ nm}$$

(0,291 nm mért)

$$a (\text{Fe}) = 0,29 \text{ nm}$$

(0,28665 nm mért)

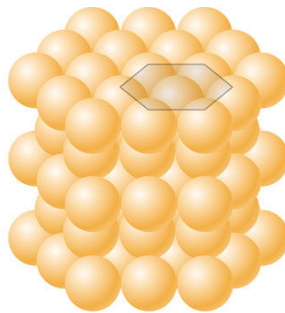
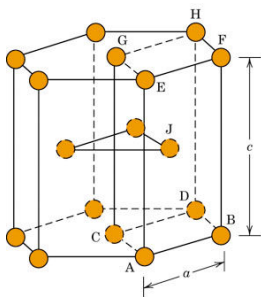
Az elemi cellában  $1 \times 1 + 8 \times 1/8 = 2$  atom van.

$$\text{APF} = \frac{\text{atom elemi cella} \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3}{a^3}$$

← térfogatom
← térfogatelemi cella

Atomi térkitöltési hányad (APF)<sub>BCC</sub> = 0,68

# Hexagonális szoros illeszkedésű rács



$$\frac{c}{a} = 1.633$$

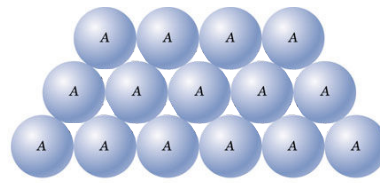
kellene legyen, de ettől az értéktől egyes fémeknél eltérés lehet.

Mutassák meg, hogy ezen rács esetén:

$$\text{Atomi térkitöltési hányad (APF)}_{\text{HCP}} = 0,74$$

Koordinációs szám: 12

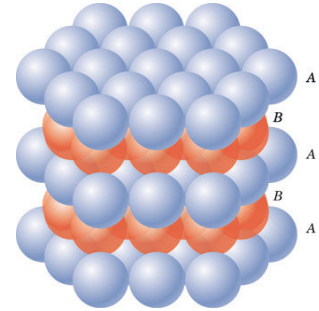
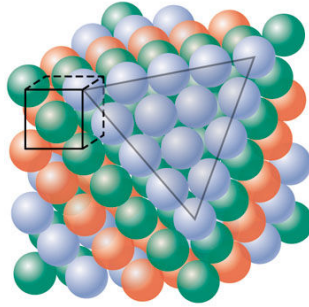
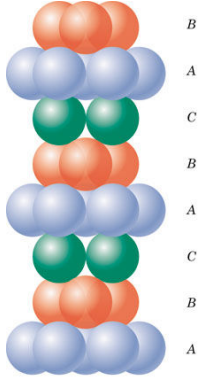




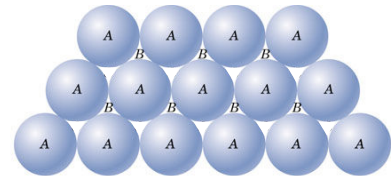
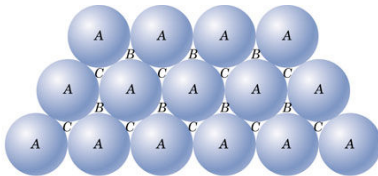
Ilyen szoros illeszkedésű síkok kétféleképp rétegezhetők egymás fölé.

FCC

HCP



Felülnézet



## Tájékozódás egy rácsban

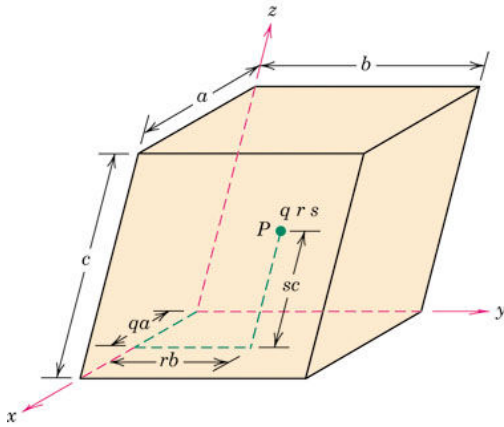
- Pontok megadása
  - jelölés: indexek zárójellezés nélkül
- Irányok megadása
  - jelölés: egész indexek []-ben  
vagy ekvivalens irányok <> között
- Síkok kitűzése
  - jelölés: egész indexek ()-ben  
vagy ekvivalens síkok {} között

szögletes

íves

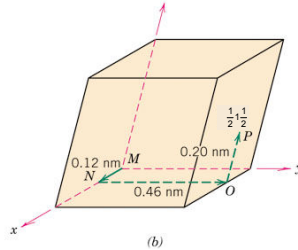
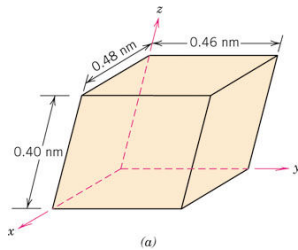


# Pontok indexelése

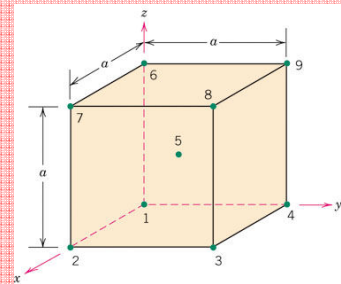


P koordinátáit a  $q r s$  törtekkel adjuk meg.

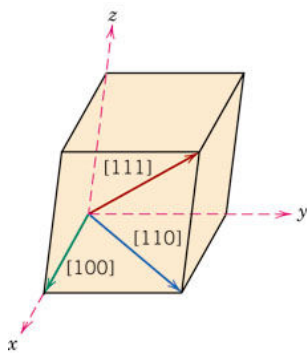
pl. Hol helyezkedik el az  $\frac{1}{2} 1 \frac{1}{2}$  pont?



Hf: Mik a BCC rács elemi cellájában levő 9 pont koordinátái?



# Írányok indexelése



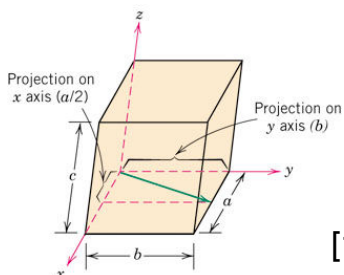
A vektor haladjon át az origón! (ha nem így lenne, eltolás)  
Határozzuk meg a vektor vetületének hosszait a rácsállandók többszöröseiként!

E három vetületet egy közös szorzófaktor segítségével a legkisebb egész számokká alakítjuk.

(az index negatív is lehet, ilyenkor fölé írjuk a - jelet)

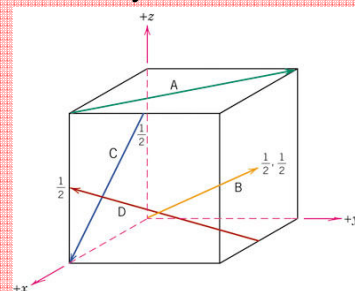
Az így kapott indexek a vektor **Miller indexei**.

pl. Milyen indexekkel írható le az alábbi ábra zöld vektora által jelölt irány?



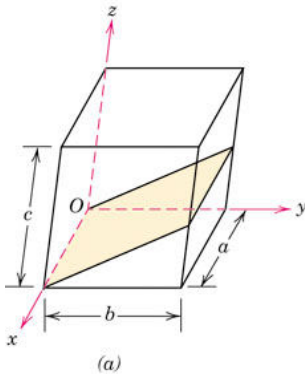
[120]

Hf: Mik az indexei az ábrán jelölt színes nyilaknak?



# Síkok indexelése

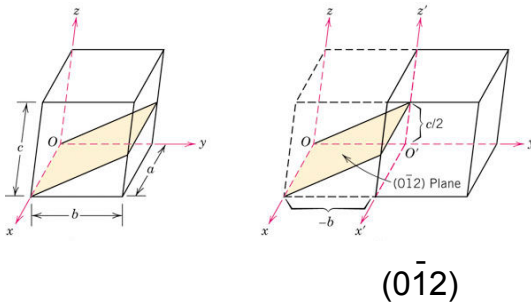
hexagonálistól eltérő rácsrendszerekre



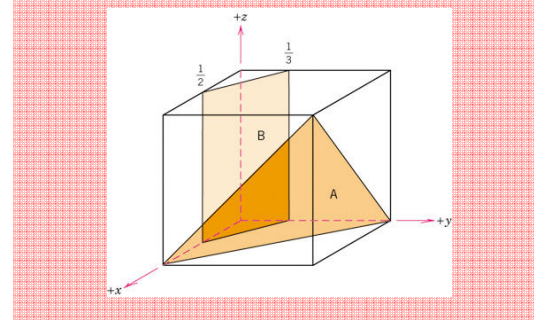
A sík NE haladjon át az origón! (ha nem így lenne, eltolás)  
 A rácsállandók arányaiban írjuk le a sík és a tengelyek metszéspontjait!  
 Képezzük ezen arányszámok reciprokait!  
 Ha kell – közös faktor segítségével – alakítsuk egész számokká az indexeket.

Az így kapott indexek a sík ún. **Miller indexei**.

pl. Mi a Miller indexe a sárga síknak?



Hf: Milyen indexekkel írható le az A és B sík?



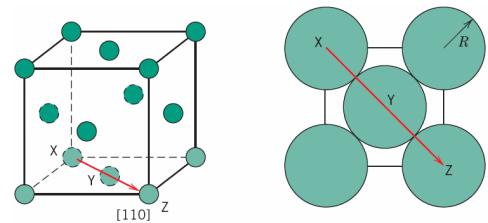
# Atomsűrűségek

**Vonalmenti atomsűrűség:**

$$LD = \frac{\text{a szakaszra eső rácspontok száma}}{\text{a szakasz hossza}}$$

$$[LD] = m^{-1}$$

pl. az FCC rács [110] iránya mentén az LD



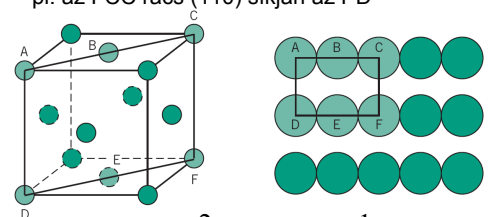
$$LD_{[110]} = \frac{2 \text{ atom}}{4R} = \frac{1}{2R}$$

**Síkbeli atomsűrűség:**

$$PD = \frac{\text{a síkon levő rácspontok száma}}{\text{a sík területe}}$$

$$[PD] = m^{-2}$$

pl. az FCC rács (110) síkján az PD



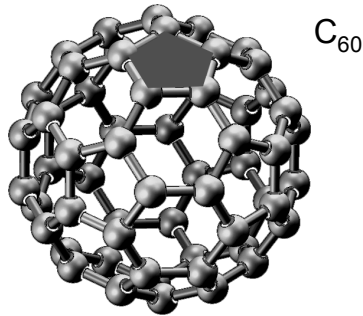
$$PD_{(110)} = \frac{2 \text{ atom}}{4R \cdot 2R\sqrt{2}} = \frac{1}{4\sqrt{2}R^2}$$

Az LP és PD a rugalmatlan alakváltozás csúszási mechanizmusánál lesz majd fontos.

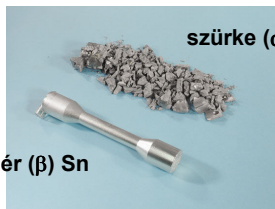
# Allotrópia, polimorfia

Ugyanaz az anyag (különböző hőmérsékleten és nyomáson) különböző rácsszerkezetben kristályosodhat: [allotrópia/polimorfia](#).

A szén allotróp módosulatai:  
gyémánt, grafit,  
amorf szén, fullerének



Sn

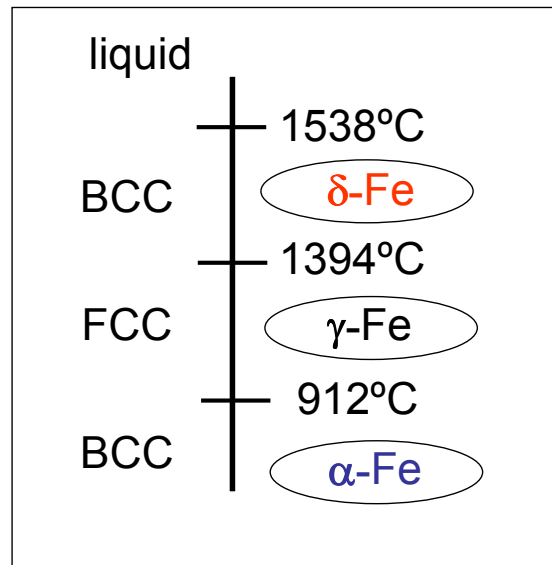


szürke (α) Sn

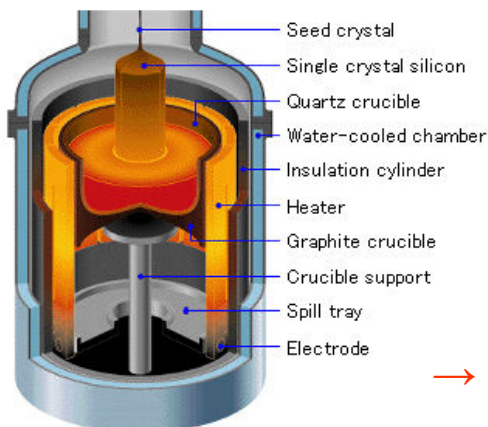
fehér (β) Sn

13,2°C alatt a szürke allotróp stabilis  $\rho_{\alpha-Sn} = 0.79 \cdot \rho_{\beta-Sn}$

Fe



# Egykristály - polikristály



A Czochralski módszer



Si egykristály



Frekvencia kétszerezésére készült, túlteltett oldatból növesztett KDP kristály. (LLNL, USA)



Gyémánt mikrokristályok (GE Superabrasives)

Turbinalapát (Pratt and Whitney)

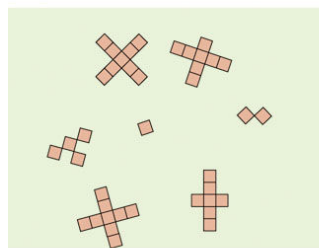


Az anyagok többségét **polikristályos** formájukban használjuk.

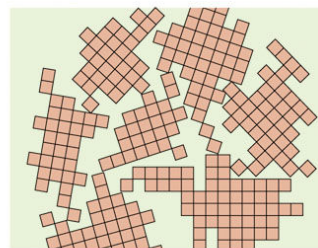


- Nb-Hf-W lap elektronsugaras hegesztéssel.
- Minden „szemcse” egykristály.
- Az anyagban a szemcsék random módon rendezettek.  
→ Az anyag tulajdonságai izotrópok.
- A hegesztési varratban a szemcsék orientáltak.  
→ Az anyag tulajdonságai anizotrópok.
- A szemcseméretetek (általában) 1 nm és több cm között változnak (néhánytól néhány millió atomi réteg).

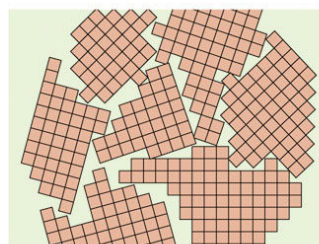
## Polikristály növekedése



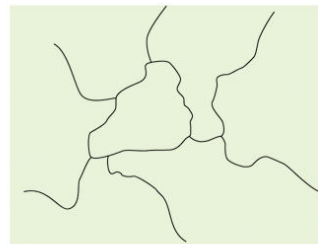
(a)



(b)



(c)



(d)