

Bevezetés az anyagtudományba

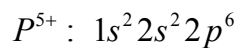
XIV. előadás

Geretovszky Zsolt

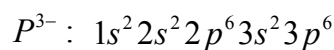
2010. május 13.

Adja meg a következő ionok elektronkonfigurációját!

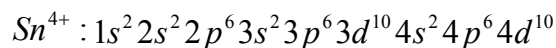
$$N_{e^-} = N - 5 = 15 - 5 = 10$$



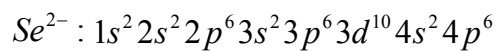
$$N_{e^-} = N + 3 = 15 + 3 = 18$$



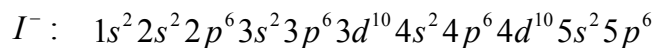
$$N_{e^-} = N - 4 = 50 - 4 = 46$$



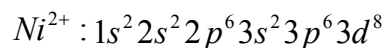
$$N_{e^-} = N + 2 = 34 + 2 = 36$$



$$N_{e^-} = N + 1 = 53 + 1 = 54$$



$$N_{e^-} = N - 2 = 28 - 2 = 26$$



IA		IIA												III A						IV A						V A						VI A						VII A						0					
1	H	2	He											5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne											17	Cl	18	Ar										
3	Li	4	Be											13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar											35	Br	36	Kr										
11	Na	12	Mg											19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
19	K	20	Ca											37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
55	Cs	56	Ba											87	Fr	88	Ra											81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn										
87	Fr	88	Ra											104	Rf	105	Db	106	Sg	107	Bh	108	Hs	109	Mt	110	Ds																						

Metal

Nonmetal

Intermediate

Egy Na^+ és Cl^- ionokból álló ionpár vonzási, illetve taszítási energiái az ionok közötti r távolságtól a következőképp függenek:

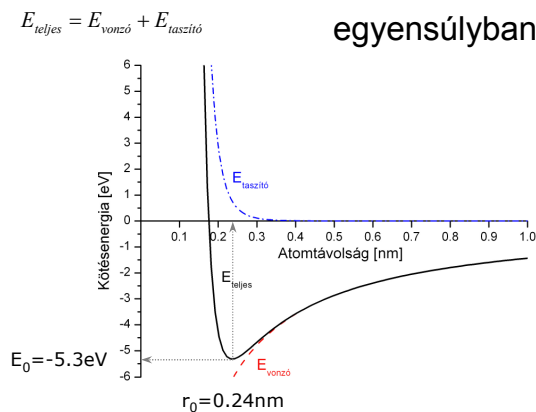
$$E_{\text{vonzó}} = -\frac{1.436 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{r} \quad E_{\text{taszító}} = \frac{7.32 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{nm}^8}{r^8}$$

Ha a fenti összefüggésekbe r -et nanométerben írjuk be, akkor az energiákat - ionpárra vonatkoztatva - elektronvoltban kapjuk meg.

a) Ábrázolja közös grafikonon egy ionpár vonzó, taszító és a teljes energiáját mint az r függvényét! (legalább $r = 1 \text{ nm}$ -ig rajzolja meg a görbéket)

b) A fenti grafikon segítségével határozza meg az egyensúlyi állapothoz tartozó r_0 távolságot, valamint az ionok közötti kötésienergia E_0 értékét!

c) Algebrai úton is számítsa ki r_0 és E_0 értékeit és vesse össze azokat a grafikus úton nyert eredményekkel!



$$\left. \frac{dE_{\text{teljes}}}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \quad \frac{dE_{\text{teljes}}}{dr} = \frac{d(E_{\text{vonzó}} + E_{\text{taszító}})}{dr} = 0$$

$$-(-1) \frac{1.436 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{r_0^2} + (-8) \frac{7.32 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{nm}^8}{r_0^9} = 0$$

$$1.436 \text{ eV} \cdot \text{nm} = 8 \frac{7.32 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{nm}^8}{r_0^7}$$

$$r_0^7 = \frac{58.56 \cdot 10^{-6} \text{ nm}^7}{1.436}$$

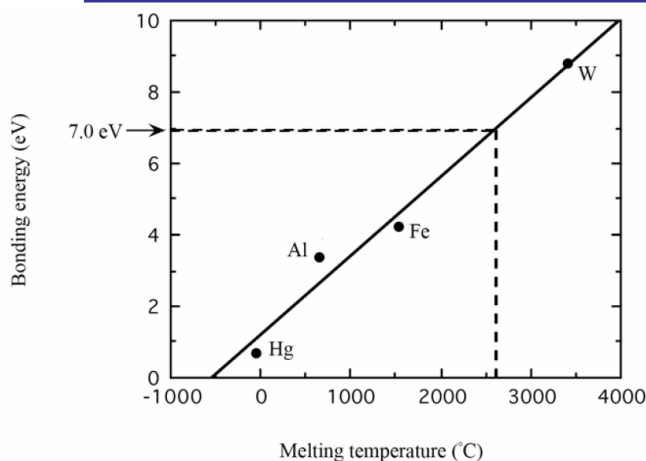
$$r_0 = \sqrt[7]{\frac{5.856 \cdot 10^{-5} \text{ nm}^7}{1.436}} = 0.236 \text{ nm}$$

$$E_0 = E_{\text{teljes}}(r_0) = E_{\text{vonzó}}(r_0) + E_{\text{taszító}}(r_0)$$

$$E_0 = -\frac{1.436 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{0.236 \text{ nm}} + \frac{7.32 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{nm}^8}{(0.236 \text{ nm})^8} = -5.32 \text{ eV}$$

Ábrázolja a kötési energiát mint a olvadáspont függvényét a következő fémek esetén: Hg, Al, Fe és W. A grafikon segítségével becsülje meg a Mo kötésienergiáját, melynek olvadáspontja 2617°C !

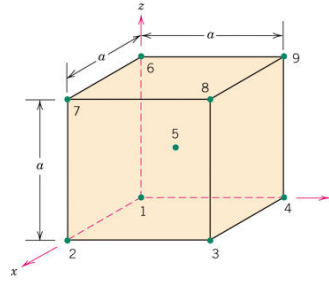
	E [kJ/mol]	E [eV/atom]	T_{op} [$^\circ\text{C}$]
Hg	68	0.7	-39
Al	324	3.4	660
Fe	406	4.2	1538
W	849	8.8	3410



A Mo kísérletileg mért kötési energiája 6.8 eV , ami jó egyezést mutat a grafikon alapján becsült 7.0 eV értékkel.

Rácspontok indexelése

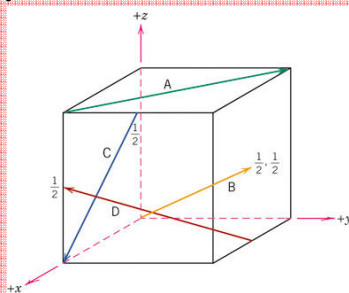
Hf: Mik a BCC rács elemi cellájában levő 9 pont koordinátái?



Pont	Töredék hosszak			Kristálytani koordináta
	x irányban	y irányban	z irányban	
1	0	0	0	0 0 0
2	1	0	0	1 0 0
3	1	1	0	1 1 0
4	0	1	0	0 1 0
5	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
6	0	0	1	0 0 1
7	1	0	1	1 0 1
8	1	1	1	1 1 1
9	0	1	1	0 1 1

Kristálytani irányok Miller indexei

Hf: Mik az indexei az ábrán színes nyilaknak?



A vektor haladjon át az origón!

Határozzuk meg a vektor vetületének hosszait!

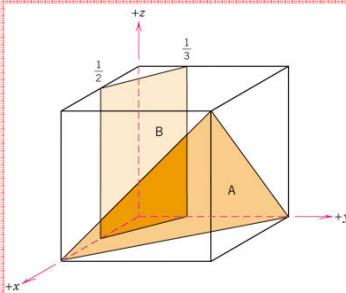
E három vetületet egy közös szorzófaktor segítségével a legkisebb egész számokká alakítjuk.

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

Vektor	A vektor vetületének hossza			Miller index
	x irányban	y irányban	z irányban	
A	$(-1) \cdot a$	$(+1) \cdot b$	$0 \cdot c$	$[\bar{1} 1 0]$
B	$(+\frac{1}{2}) \cdot a$	$(+1) \cdot b$	$(+\frac{1}{2}) \cdot c$	$[1 2 1]$
C	$0 \cdot a$	$(-\frac{1}{2}) \cdot b$	$(-1) \cdot c$	$[0 \bar{1} \bar{2}]$
D	$(+\frac{1}{2}) \cdot a$	$(-1) \cdot b$	$(+\frac{1}{2}) \cdot c$	$[1 \bar{2} 1]$

Kristálytani síkok Miller indexe

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



A sík NE haladjon át az origón!

A cellaparaméterek arányaiban írjuk le a metszéspontokat!

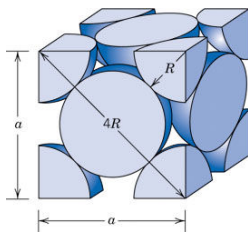
Képezzük ezen arányszámok reciprokait!

Ha kell – közös faktor segítségével – alakítsuk egész számokká az indexeket.

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

Sík	A sík és a koordináta tengely metszéspontjai			Miller index
	x irányban	y irányban	z irányban	
A	$(+1) \cdot a$	$(+1) \cdot b$	$(-1) \cdot c$	$(1 \ 1 \ \bar{1})$
B	$(+\frac{1}{2}) \cdot a$	$(+\frac{1}{3}) \cdot b$	$(\infty) \cdot c$	$(2 \ 3 \ 0)$

A lapcentrált köbös rácsban kristályosodó réz atomsugara 0.128nm , atomsúlya pedig 63.5g/mol . Számítsa ki a réz elméleti sűrűségét és hasonlítsa össze azt a kísérletileg mért 8.94g/cm^3 -es értékkel!



A lapcentrált köbös rács elemi cellájának térfogata:

$$a^2 + a^2 = (4R)^2$$

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

$$V_c = a^3 = (2\sqrt{2}R)^3 = 16\sqrt{2}R^3$$

Egy elemi cella $4 \times 0.5 + 8 \times 0.25 = 4$ db atomot tartalmaz.

$$\rho = \frac{nM}{V_c N_A} = \frac{4 \text{ atom/cella} \cdot 63.5 \text{ g/mol}}{16\sqrt{2}(0.128\text{nm})^3 \cdot 6.023 \cdot 10^{23} \text{ atom/mol}} = 8.89 \text{ g/cm}^3$$

Azaz a relatív hiba:

$$\delta = \frac{|\rho_e - \rho_k|}{\rho_k} = \frac{|8.89 \text{ g/cm}^3 - 8.94 \text{ g/cm}^3|}{8.94 \text{ g/cm}^3} = 0.0056 = 0.56\%$$

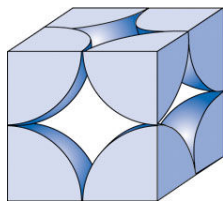
/A fentiek ismeretében az APF, atomic packing factor is könnyen kiszámítható:

$$APF = \frac{\text{az elemi cella atomjainak térfogata}}{\text{az elemi cella térfogata}} = \frac{4 \frac{4R^3\pi}{3}}{16\sqrt{2}R^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.7405 \quad /$$

Az alábbi táblázat három képzeletbeli ötvözet esetében mutatja az atomsúly, sűrűség és atomsugár értékeket. Határozza meg, hogy az ötvözetek lapcentrált köbös, tércentrált köbös, vagy egyszerű köbös rácsban kristályosodnak-e!

$$\rho = \frac{nM}{V_c N_A}$$

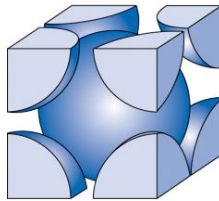
	M [g/mol]	ρ [g/cm ³]	R [nm]	
A	43.1	6.40	0.122	BCC
B	184.4	12.30	0.146	SC
C	91.6	9.60	0.137	BCC



SC
n=1

$$a = 2R$$

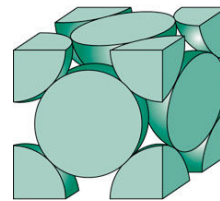
$$V_c = a^3 = 8R^3$$



BCC
n=2

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

$$V_c = a^3 = \frac{64}{3\sqrt{3}} R^3$$



FCC
n=4

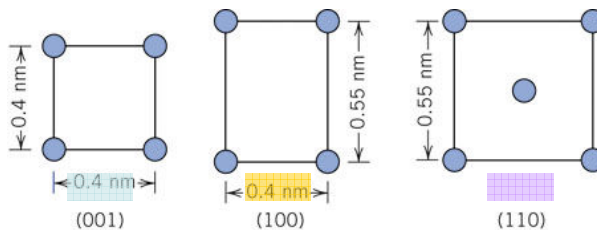
$$a = 2\sqrt{2}R$$

$$V_c = a^3 = 16\sqrt{2}R^3$$

R, V és n behelyettesítésével számíthatóak sűrűségek az A, B és C anyagokhoz

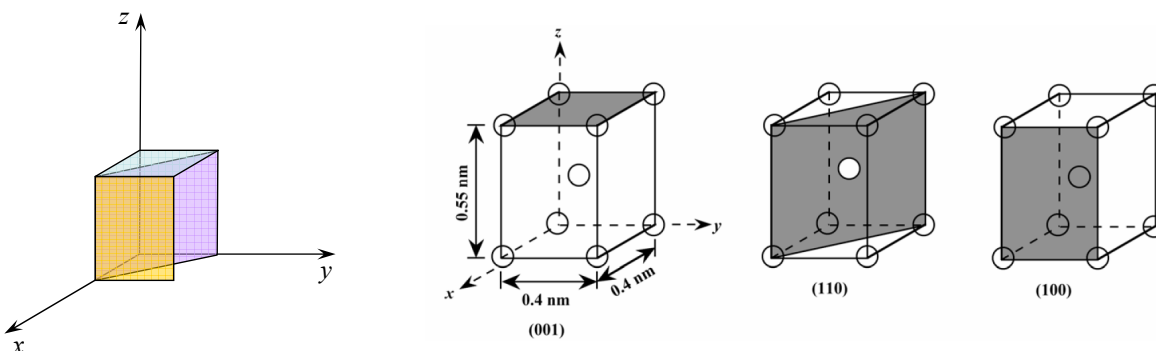
Az anyag olyan kristályrácsban kristályosodik, melynél a kísérleti sűrűség egyezik a számolttal.

A következő három ábra egy képzeletbeli fém elemi cellájának három kristálytani síkján mutatja az atomok elrendeződését.



a) Milyen kristálytani rendszerhez tartozik ez a fém?

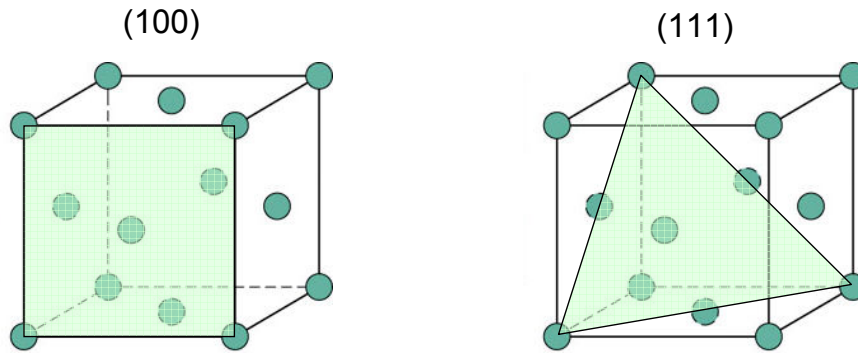
b) Hogyan hívhatnánk ezt a kristályszerkezetet?



a) Mivel $a=b \neq c$ és minden szög $90^\circ \Rightarrow$ tetragonális rendszer

b) Tércentrált tetragonális.

Egy lapcentrálalt köbös rácsban kristályosodó anyag esetében az (100), vagy az (111) síkok esetében várná a felületi energiát nagyobbak? Miért?



Egy kristálytani sík felületi energiája attól függ, hogy mennyire sűrűn van tele részecskékkel. Utóbbi mértéke a síkbeli atomsűrűség, vagy PD:

$$PD = \frac{\text{a síkra eső középpontú atomok száma}}{\text{a sík területe}}$$

$$PD_{(100)} = \frac{1 + 4 \cdot 0.25}{a^2} = \frac{2}{a^2} < PD_{(111)} = \frac{3 \cdot 0.5 + 3 \cdot \frac{1}{6}}{s^2 \frac{\sqrt{3}}{4}} = \frac{2}{2a^2 \frac{\sqrt{3}}{4}} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{2}{a^2}$$

Ha PD nagyobb, akkor a részecskéknek több legközelebbi szomszédjuk van, s így csökken a részecske le nem kötött „vegyértéke”, s ezzel együtt a kristálytani sík felületi energiája. Jelen problémában tehát az (111) sík alacsonyabb felületi energiájú, mint az (100)-ás.

Mutatják-e az allotrópiát a nemkristályos anyagok?

Az allotrópia, vagy polimorfizmus az a jelenség, amikor egy anyag különböző kristálytani módosulatokban létezik (s a kristálytani különbözőség miatt az allotrópok eltérő tulajdonságokkal rendelkeznek). Mivel a nemkristályos anyagoknak nincs definit kristályszerkezete, így allotrópiát sem mutathatnak.

Hibahelyek mennyisége

Mennyi vakancia van 1m³ szobahőmérsékletű rézben?

($\rho_{Cu}=1085^{\circ}C$)

20°C-on $\rho = 8,96 \text{ g/cm}^3$ $M_{Cu} = 63,5 \text{ g/mol}$

$Q_V = 0,9 \text{ eV/atom}$ $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ atom/mol}$

$$\frac{N_V}{N} = \exp\left(\frac{-Q_V}{kT}\right) = 3,34 \times 10^{-16}$$

0,9 eV/atom
293K
 $8,62 \times 10^{-5} \text{ eV/(atom}\cdot\text{K)}$

1 m³ rézben, $N = \rho \times \frac{N_A}{M_{Cu}} \times 1 \text{ m}^3 = 8,49 \times 10^{28}$ rácspont van

$N_V = (3,34 \times 10^{-16})(8,49 \times 10^{28} \text{ rácspont}) = \underline{\underline{2,84 \times 10^{13} \text{ vakancia}}}$

Megjegyzés: 1m³ 1000°C-os rézben $2,15 \times 10^{25}$ vakancia van

A Hume – Rothery szabály

Ni mátrixban várhatóan melyik fém oldódik korlátlanul?

Melyik korlátozottan?

1. Az atomsugarak eltérése < 15%

$$0,1059 \text{ nm} < r < 0,1433 \text{ nm}$$

2. Hasonló elektronegativitás

3. Megegyező kristályszerkezet

4. Vegyérték

1-3 teljesülése esetén a fém mátrixba könnyebben épül be egy magasabb vegyértékű szennyező mint egy alacsonyabb vegyértékű.

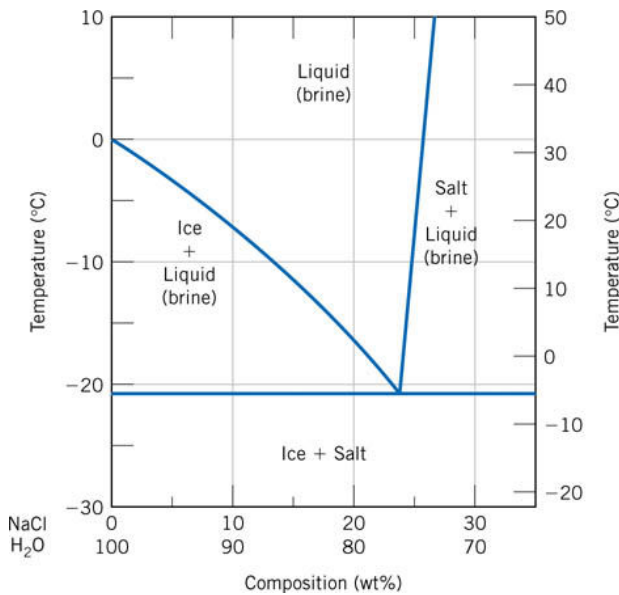
Elem	Atom sugár (nm)	Kristály szerkezet	Elektro-negativitás	Vegyérték
Ni	0.1246	FCC	1.8	+2
C	0.071			
H	0.046			
O	0.060			
Ag	0.1445	FCC	1.9	+1
Al	0.1431	FCC	1.5	+3
Co	0.1253	HCP	1.8	+2
Cr	0.1249	BCC	1.6	+3
Fe	0.1241	BCC	1.8	+2
Pt	0.1387	FCC	2.2	+2
Zn	0.1332	HCP	1.6	+2

Ni mátrixban egyedül a Pt oldódik korlátlanul.

Korlátozottan oldódik az Ag, Al, Co, Cr, Fe és Zn.

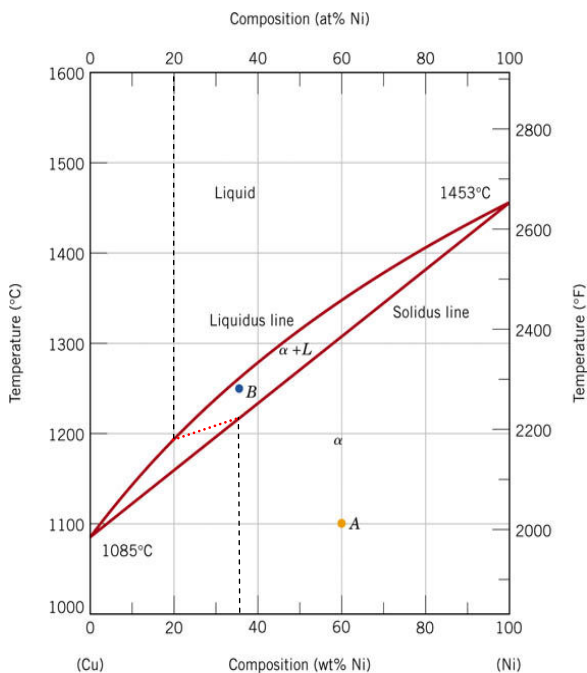
(A C, H (és O) intersticiális szilárd oldatot képes alkotni a Ni-lel.)

Az alábbi kétpomponensű ($H_2O-NaCl$) fázisdiagram részlet segítségével magyarázza el a) miként lehet sózással megolvasztani a jeget? b) milyen hőmérséklet alatt hatástalan a sózás?



- A sok jégre szórt só összetétele a grafikon bal oldali tengelyéhez lesz közel. Az ilyen rendszerek olvadáspontja $0^\circ C$ alatti, tehát a jég felszíne megolvad, majd a rendszer jég és eutektikum rendszerré alakul. Utóbbi $-21^\circ C$ -ig folyadék.
- Az eutektikumnak megfelelő $-21^\circ C$ hőmérséklet alatt a sózás hatástalan, hisz ennél alacsonyabb hőmérsékleten folyadékfázis nem lehet jelen az egyensúlyi rendszerben.

Elképzelhető-e egy olyan egyensúlyban levő Ni-Cu rendszer, melyben egy 37 m/m% Ni-63 m/m% Cu α fázis van egyensúlyban egy 20 m/m% Ni-80 m/m% Cu összetételű folyadék fázissal? Amennyiben elképzelhető ilyen rendszer, úgy adja meg annak hőmérsékletét! Amennyiben ilyen rendszer nem létezik, magyarázza meg miért gondolja így!

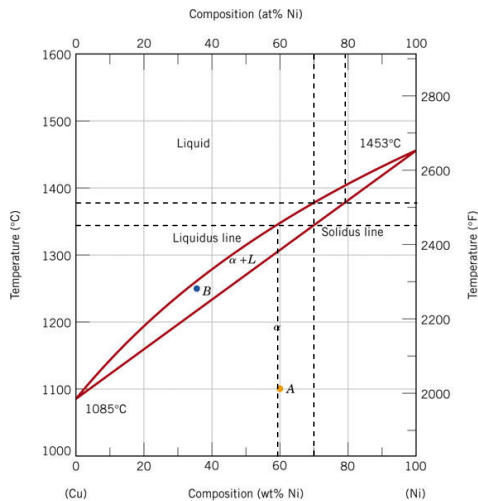


Lévén, hogy a megadott összetételű fázisok pontjait a Cu-Ni rendszer egyensúlyi fázisdiagramján nem lehet egyetlen vízszintes (azaz állandó hőmérsékletű) egyenessel összekötni, így a feltételeknek megfelelő (egyensúlyi) rendszer **nem** létezik.

(kb. $25-30^\circ C$ az eltérés)

Egy 70m/m% nikkelt és 30m/m% rezet tartalmazó ötvözetet 1300°C hőmérsékletre lassan melegíteni kezdünk.

- Milyen hőmérsékleten jelenik meg az első folyadék fázis?
- Mi ennek a folyadék fázisnak az összetétele?
- Mekkora hőmérsékleten olvad meg az egész ötvözet?
- Mi az összetétele a teljes megolvadás előtt jelen lévő szilárd fázisnak?



A grafikonra berajzolt segédvonalak segítségével a hőmérsékletek, illetve összetételek a következők:

- 1350°C;
- 59 m/m% Ni;
- 1380°C;
- 78 m/m% Ni.

A táblázatban feltüntetett fémek melyike

- szenvedi el a legnagyobb harántösszehúzódást? Miért?
- a legerősebb? Miért?
- a legmerevebb (leginkább alaktartó)? Miért?
- a legkeményebb? Miért?

Material	Yield Strength (MPa)	Tensile Strength (MPa)	Strain at Fracture	Fracture Strength (MPa)	Elastic Modulus (GPa)
A	310	340	0.23	265	210
B	100	120	0.40	105	150
C	415	550	0.15	500	310
D	700	850	0.14	720	210
E	Fractures before yielding			650	350

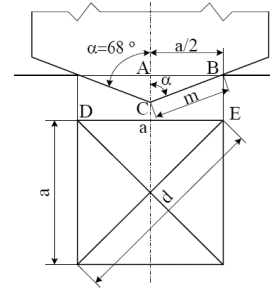
- A B elem, mert ennek a legnagyobb a szakadáshoz tartozó relatív alakváltozása, tehát ez a legduktilisabb.
- A D anyag, mert ennek a legnagyobb a yield-je és a szakítószilárdsága.
- Az E anyag, mert ennek legnagyobb a Young modulusa.
- A D anyag, mert ennek a legnagyobb a szakítószilárdsága, s a keménység a szakítószilárdsággal arányos.

Egy minta keménységét méréssel határoztuk meg. Az alábbi táblázat mutatja a különböző erők hatására létrejövő nyomatok átlóinak átlagos hosszát. Ezen adatok segítségével számítsa ki a minta Vickers-féle keménységét mind Pa-ban, mind kilopond per négyzetmilliméter egységekben!

Erő [N]	Átló [μm]	HV [Pa]	HV [kp/mm ²]
0,10788	10,7919	1717704808	175.15
0,27768	17,4011	1700570392	173.41
0,36258	21,2141	1494025601	152.35
0,44748	22,4851	1641297852	167.37
0,61728	25,2813	1790963850	182.63
0,78708	29,8569	1637317366	166.96

számolt értékek

$$HV = \frac{F}{A} = \frac{F}{4 \frac{am}{2}} = \frac{F}{4 \frac{a}{2} \frac{a}{2 \sin \alpha}} = \frac{F}{\frac{a^2}{\sin \alpha}} = 2 \sin \alpha \frac{F}{d^2} \approx 1,8544 \frac{F}{d^2}$$



$$1 \text{ kp/mm}^2 = 9,80665 \cdot 10^6 \text{ Pa}$$

A Vickers-keménység értékek megadása a következő formátumú: 169 HV/10/10, ahol a vizsgált anyag Vickers keménysége 169, melyet 98,1 N (10 kp) vizsgálati terheléssel, 10 s terhelési idővel határoztak meg.

Mi lesz a hatása annak, ha a keménységmérés során egy korábbi mérési helyhez nagyon közel mérünk?

Az anyag keménységénél nagyobb keménységet mérünk, mert az előző benyomódás hidegmegmunkálta a felületet.

Mekkora a mágnesezettség és az indukció telítési értéke a 8.9kg/m³ sűrűségű nikkal esetében? (Minden Ni atom 0,6 Bohr magneton momentummal bír.)

A térfogategységben levő Ni atomok száma:

$$N = \frac{\rho N_A}{M_{Ni}} = \frac{8.9 \cdot 10^6 \text{ g/m}^3 \times 6.023 \cdot 10^{23} \text{ atom/mol}}{58.71 \text{ g/mol}} = 9.13 \cdot 10^{28} \text{ atom/m}^3$$

A mágnesezettség telítése esetén már minden atom momentuma beállt a külső mágneses térnek megfelelően, tehát:

$$M_s = 0,6 \cdot \mu_B \cdot N$$

$$\underline{M_s = 0.6 \times 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2 \times 9.13 \cdot 10^{28} \text{ atom/m}^3 = 5.1 \cdot 10^5 \text{ A/m}}$$

A telítési indukció a telítési mágnesezettség értékéből számítható:

$$B_s = \mu_0 \cdot M_s$$

$$\underline{B_s = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H/m} \times 5.1 \cdot 10^5 \text{ A/m} = 0.64 \text{ T}}$$

Jó felkészülést kívánok!