

# Anyagismeret

## 2. előadás

### Néhány fogalom

- Térrács: Kiterjedés nélküli pontok szabályos rendje a térben.
- A térelem a térrácsot adja (pontokkal), az elemi cella az anyagot adja (atomokkal).
- Kristálytani adatok: olyan adatok, amely segítségével a kristály térelemeinek, celláinak egyes jellemzőit határozzuk meg.
- Koordinációs szám: azt mutatja meg, hogy egy rácspontnak vagy atomnak hány közvetlen szomszédja van.
- Atomátmérő: két szomszédos atom távolsága

# A kristályrendszerek leírása

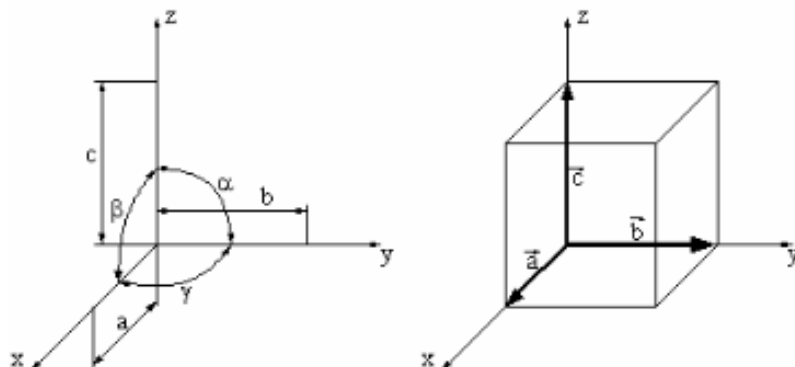
- Bármely kristályrendszer

- Három iránnyal (x,y,z)

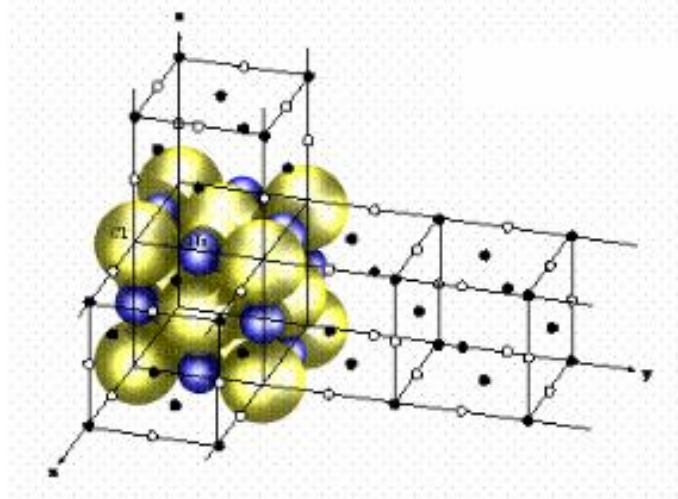
- Három irányban mért távolsággal (a,b,c)

egyértelműen leírható. Ezek a szükséges és elégséges paraméterek, az ún. rácsparaméterek.

## Koordináta-rendszer kristályrendszerek leírására



## A hosszútávú kristályos rendezettség szemléltetése


















## A kristályrendszerek osztályozása

### A Bravais-féle rácsok

Kristályrendszer megnevezése	Rácsparaméterek	
	Távolságok (a, b, c)	Szögek ( $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$ )
Köbös	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonális	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonális	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$
Ortorombos	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Romboéderez	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Monoklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Triklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

## A kristályrendszerek Bravais-féle alaprendszerének geometriai szemléltetése

Kristályrendszer	Elemi sejt		
Köbös	 primitív	 testközpontos	 lapközpontos
Tetragonális	 primitív	 testközpontos	 lapközpontos
Hexagonális	 primitív	 rombusz	
Ortorektus	 primitív	 testközpontos	 lapközpontos
Rhomboédrikus		 primitív	
Monoklin	 primitív	 alaplapközpontos	
Triklin		 primitív	

## Kristályrendszerek elemzése

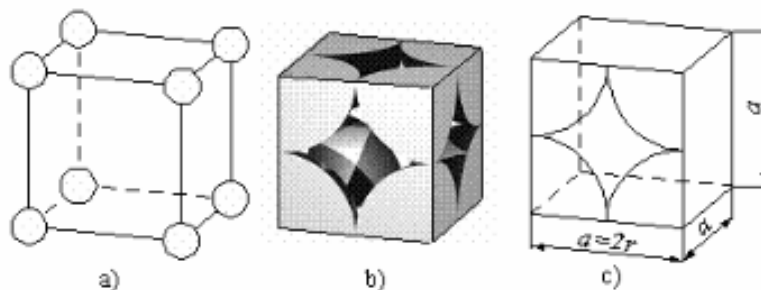
- A szabályos, köbös kristályrendszer
- A térrács geometriai alakzata: szabályos kocka
- A szabályos rendszer módosulatai:
  - Primitív köbös
  - Térben középpontos köbös – térközepes
  - Felületen középpontos köbös – lapközepes
  - A köbös rendszer egy speciális módosulata a gyémántrács

## Alapvető kristálytani paraméterek

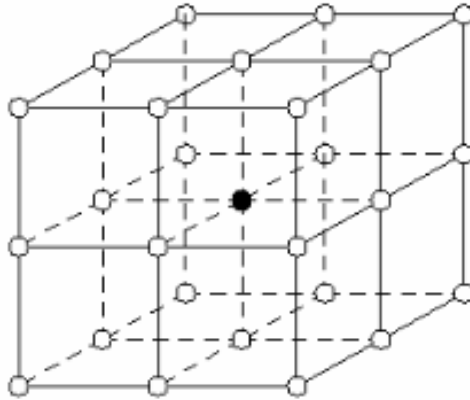
### fogalma és meghatározása

- A rácselemhez tartozó atomok száma:  $N$
- Az atomsugár és a rácsparaméter kapcsolata:  $a = a(r)$
- A térkitöltési tényező:  $T$
- A koordinációs szám:  $K$

## Az egyszerű (primitív) köbös kristályrendszer elemzése



## Vázlat az elemi cellához tartozó atomok számának meghatározásához



## Kristálytani számítások alapösszefüggései

- Az elemi cellához tartozó atomok száma:

$$N = 8 \times \frac{1}{8} = 1$$

- A rácsparaméter és az atomsugár közötti kapcsolat:

$$a = 2r$$

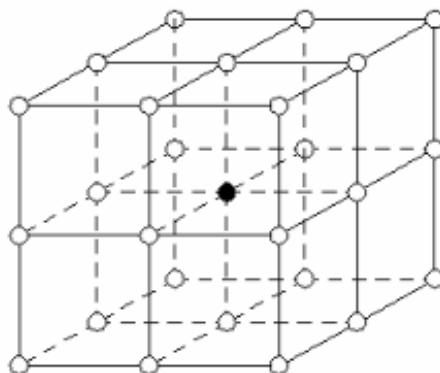
## Kristálytani számítások alapösszefüggései

- A térkitöltési tényező:

$$T = \frac{V_a}{V_c} = \frac{\text{az elemi cellához tartozó atomok térfogata}}{\text{az elemi cella térfogata}}$$

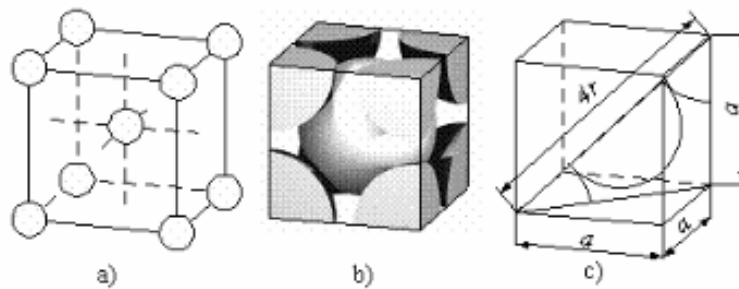
$$T = \frac{N \frac{4r^3\pi}{3}}{8r^3} = \frac{N\pi}{6} = 0,52 \Rightarrow 52 \%$$

## Vázlat a koordinációs szám értelmezéséhez

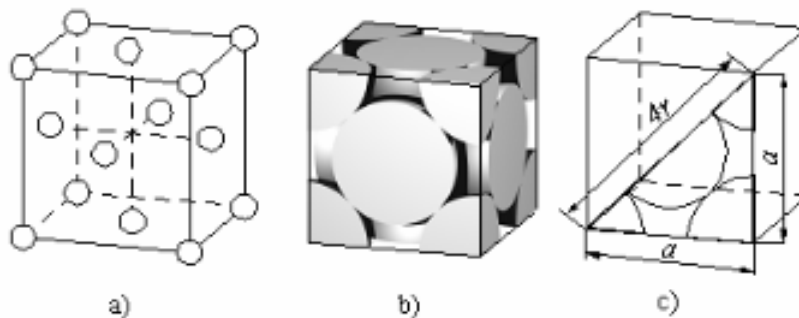


**K = 6**

## Vázlat a térközepes köbös kristályrendszer elemzéséhez



## Vázlat a lapközepes köbös kristályrendszer elemzéséhez





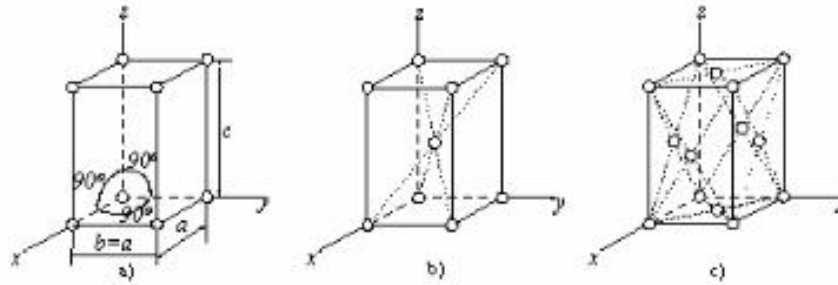
## A köbös kristályrendszer elemzésének összefoglalása

Paraméterek	Kristályrendszer megnevezése		
	Primitív	Térközepes	Lapközepes
N	1	2	4
T	0,52	0,68	0,74
K	6	8	12
$a = a(r)$	$a = 2r$	$a = 4r/\sqrt{3}$	$a = 4r/\sqrt{2}$
Elemek	P	$\alpha$ -Fe, Cr, W	$\gamma$ -Fe, Al, Au

## A tetragonális kristályrendszer elemzése

- A térrács geometriai alakzata: szabályos négyzetalapú hasáb
- A tetragonális rendszer módosulatai
  - Primitív: gyakorlati fém nem kristályosodik eszerint
  - Térközepes (béta – ón)
  - Lapközepes (indium)

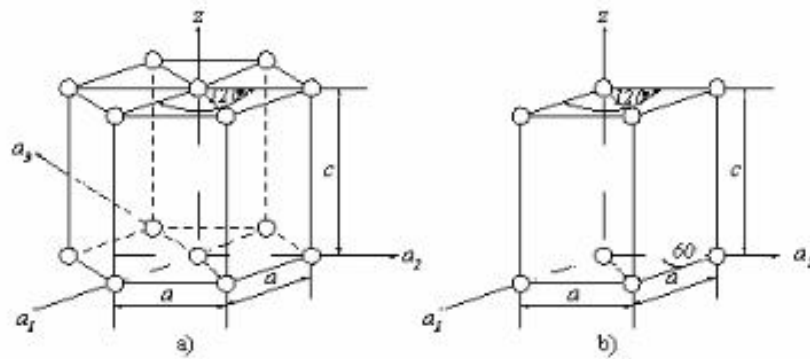
## ***A tetragonális kristályrendszer módosulatai***



## ***A hexagonális kristályrendszer elemzése***

- a térrács geometriai alakzata: szabályos hatszögalapú hasáb (**hexagon**)
- ez a kristályrendszer is leírható a három koordinátás rendszerben: ez az ún. **ortorombos reprezentáció**
- a hatszöges kristályrendszer szimmetriáját azonban jobban tükrözi az ún. **hexagonális reprezentáció**

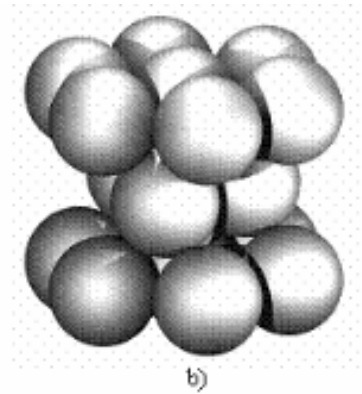
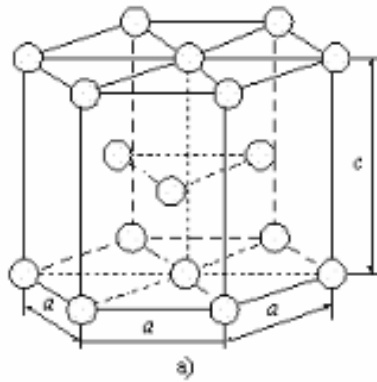
## Az ortorombos és a hexagonális reprezentáció összehasonlítása



## A hexagonális kristályrendszer módosulatai

- A primitív hexagonális kristály (Cd, Be)
  - A kristálytani leírásból származó redundancia következménye: a primitív hexagonális rendszer a lapközepén is tartalmaz atomot
- A tömött hexagonális kristály (Zn, Mg)
  - Egyik legfontosabb jellemzője, hogy ugyanolyan kristálytani síkokból épül fel, mint a lapközepes köbös, de más elrendezésben

## A tömött hexagonális kristályrendszer



## Kristálytani síkok és irányok jelölése

- Kristálytani számításokhoz a kristálytani síkok és irányok jelölése elengedhetetlen
- Síkok jelölésére szolgálnak a Miller-indexek
- Az irányok jelölésére a kristálytani irányvektorokat alkalmazzuk
- Az eltérő kristályszimmetria miatt a köbös és a hexagonális rendszer külön tárgyalása indokolt

## Kristálytani síkok jelölése a köbös rendszerben

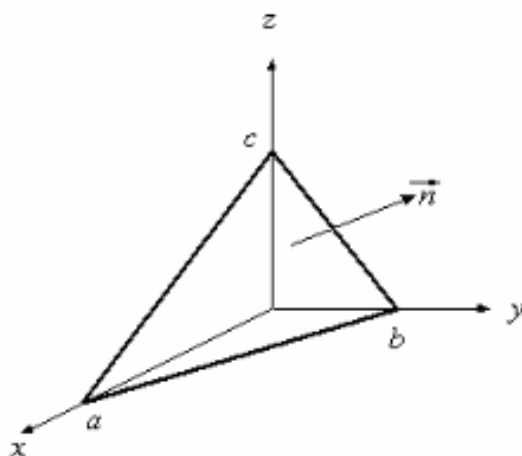
- Egy általános helyzetű sík vektorikus egyenlete

$$(\vec{r} - \vec{r}_o) \cdot \vec{n} = 0$$

- a sík tengelymetszetes alakja

$$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1$$

## Vázlat a kristálytani síkok jelölésének származtatásához



## A síkok Miller indexeinek értelmezése és származtatása

1. A sík önmagával párhuzamos eltolása olymódon, hogy a sík ne menjen át a KR-kezdőpontján
2. Az a, b, c tengelymetszetek meghatározása
3. A reciprok értékek előállítás

$$\frac{1}{a} \rightarrow h, \frac{1}{b} \rightarrow k, \frac{1}{c} \rightarrow l$$

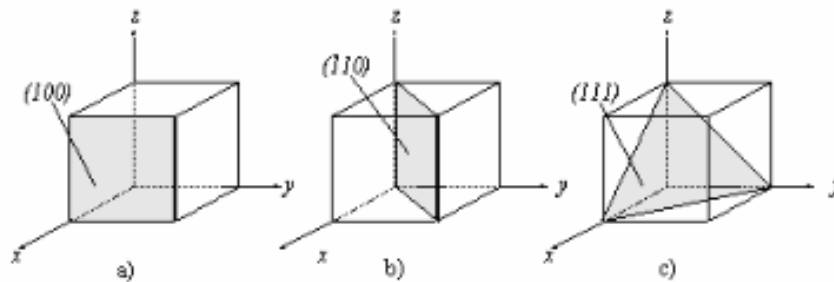
4. A sík Miller-indexének kifejezése matematikai átalakítással a legkisebb egész számokkal  
(h k l)

## A síkcsalád fogalma

- A kristálytanilag egyenértékű síkokat síkcsaládnak nevezzük
- A síkcsalád tagjait azonos számok permutációival képezett Miller-indexek írják le
- A síkcsalád összefoglaló jelölése

$$\{ h k l \}$$

## Jellegzetes kristálytani síkok a köbös rendszerben

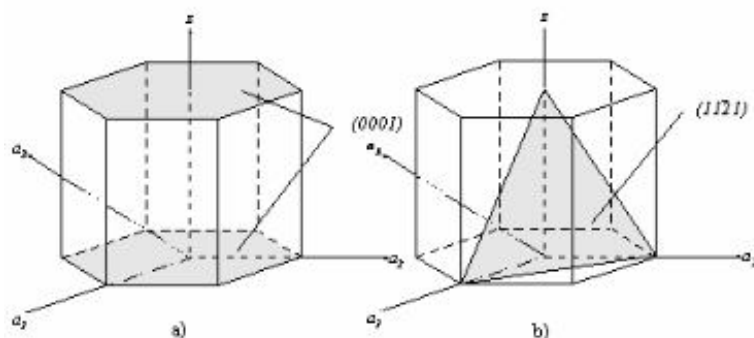


## Kristálytani síkok jelölése a hexagonális rendszerben

- a síkok jelölésére a hexagonális rendszerben a négy koordinátás leírást alkalmazzuk (  $h$   $k$   $i$   $l$  )  
(jobban érvényesül a kristályszimmetria)
- ezeket Miller-Bravais indexeknek nevezzük
- meghatározásuk a köbösnél ismertetett lépések szerint
- a négy koordinátás leírás miatt az indexeknek redundanciája van, azaz érvényes a

$$h + k = -i$$

## Vázlat kristálytani síkok jelöléséhez a hexagonális rendszerben



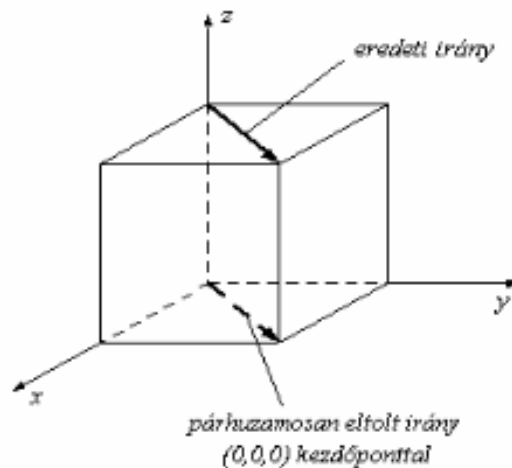
## Kristálytani irányok jelölése a köbös rendszerben

- Az irányok indexeinek (irányvektor komponensek) értelmezése és származtatása:
  1. Az irány önmagával párhuzamos eltolása a KR kezdőpontjába
  2. Az irány végpontjai koordinátáinak meghatározása
  3. Matematikai átalakítással a legkisebb egész számok kombinációjával kifejezhető  $u$ ,  $v$ ,  $w$  számhármassal meghatározása
  4. Az irányvektor felírása  $[u, v, w]$

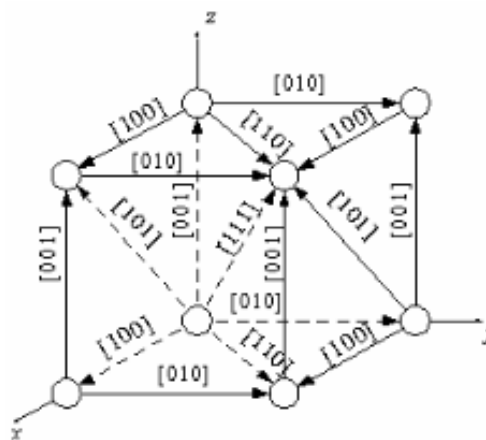
A kristálytanilag egyenértékű irányok iránycsaládot alkotnak. Jelölésük:  $\langle u, v, w \rangle$



## Vázlat az irányvektor komponensek származtatásához



## Kristálytani irányok a köbös rendszerben



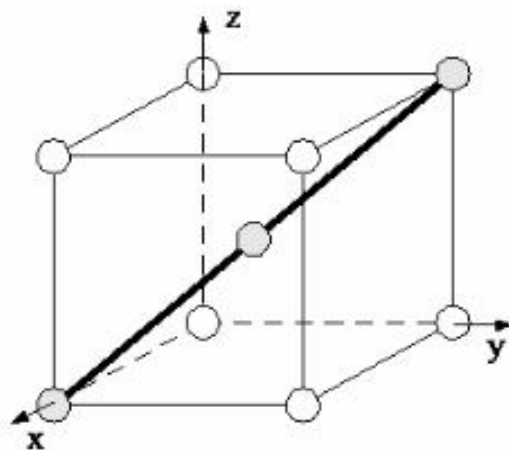
### **Összefüggés síkok Miller indexei és az irányvektor komponensek között a köbös rendszerbe**

- Az azonos számhármassal jellemezhető kristálytani sík merőleges az ugyanazon számhármassal jellemezhető kristálytani irányra, azaz  
ha  $h = u$ ,  $k = v$ , és  $l = w$  teljesül  
**az irány a sík normálisa.**

### **Kristálytani számítások**

- *Vonalmenti atomsűrűség*
- *Síkbeli atomsűrűség*
- *Térbeli atomsűrűség*
- *Kristálytani síkok távolsága*
- *Síkok, irányok bezárt szöge*
- *Beilleszthető gömb helye és mérete*

## Vázlat vonalmenti atomsűrűség számításához



Hosszegységre eső  
atomok száma

## Összefüggések vonalmenti atomsűrűség számításához

A vonalmenti atomsűrűség definíció szerint

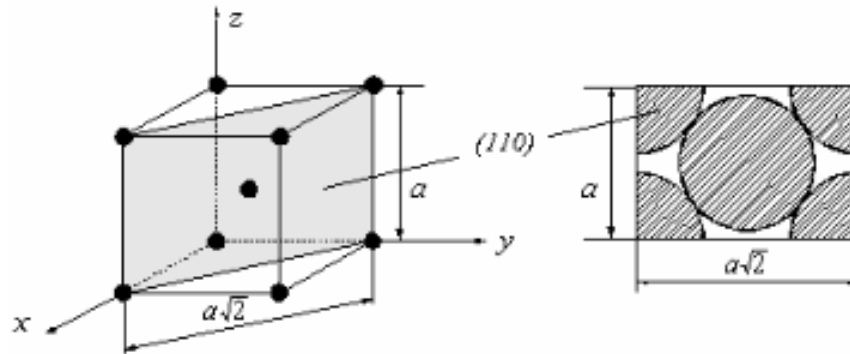
$$\rho_{\text{vonal}} = \frac{N_{\text{vonal}}}{l}$$

konkrét számítás a  $[\bar{1}11]$  irányra

$$\rho_{[\bar{1}11]} = \frac{N_{[\bar{1}11]}}{\ell_{[\bar{1}11]}} = \frac{2}{0,495} = 4,037 \frac{\text{atom}}{\text{nm}} = 4,037 \times 10^6 \frac{\text{atom}}{\text{mm}}$$

## Vázlat síkbeli atomsűrűség számításához

Felületegységre eső atomok száma



## Összefüggések síkbeli atomsűrűség számításához

A síkbeli atomsűrűség definíció szerint

$$\rho_{sík} = \frac{N_{sík}}{A}$$

konkrét számítás az (1 1 0) síkra

$$\rho_{(110)} = \frac{N_{(110)}}{A_{(110)}} = \frac{2}{0,116} = 17,3 \frac{\text{atom}}{\text{nm}^2} = 1,73 \times 10^{13} \frac{\text{atom}}{\text{mm}^2}$$

# Kristálytani síkok távolsága

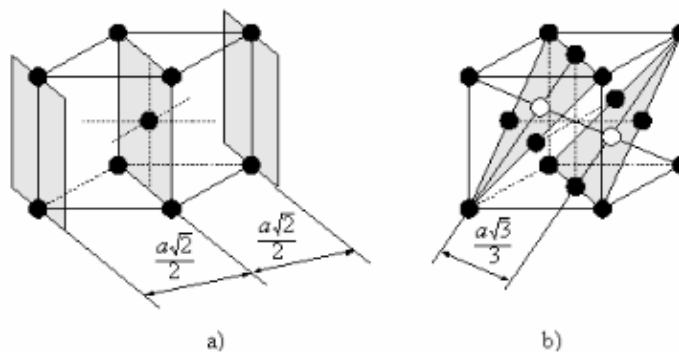
Köbös rendszerre érvényes összefüggés

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

Az  $(\bar{1}10)$  síkok távolsága

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

## Vázlat kristálytani síkok távolságához



# KRISTÁLYOSODÁS

- Kristályosodás: folyékony halmazállapotból szilárd halmazállapotba történő fázisátalakulás
- Termodinamikai törvényszerűségek ismerete nélkülözhetetlen

## **Termodinamikai alapfogalmak** **I.**

- Termodinamikai rendszer alapfogalma, típusai
  - homogén
  - heterogén
  - Az alkotók (komponensek - K) fogalma
    - egyalkotós
    - többalkotós rendszerek
  - A fázis (F) fogalma,

## Termodinamikai alapfogalmak II.

- a fázisok típusai
  - gáz,
  - Folyékony
  - Szilárd
    - színfém
    - szilárd oldat
    - fémes vegyület

## Termodinamikai alapfogalmak III.

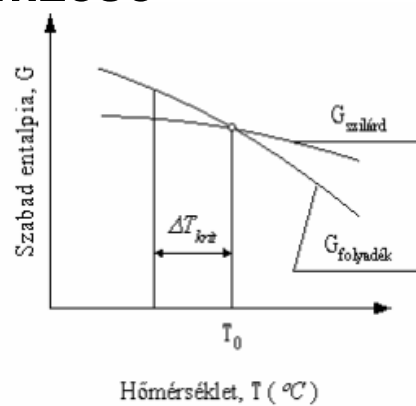
- Az állapot tényezők fogalma, csoportjai
  - hőmérséklet (T),
  - nyomás (p),
  - fajtérfogat (V)
  - koncentráció (c)
- A szabadságfok (SZ) fogalma
- A Gibbs-féle fázis szabály
$$F + SZ = K + 2$$
(bármely termodinamikai rendszerre)
$$F + SZ = K + 1$$
(metallográfiai rendszerre, mivel p=állandó)

## Termodinamikai alaptörvények

- A termodinamika I. főtétele
- A termodinamika II. főtétele (az entalpiára kifejezve)  
 $H = G + TS$ , amiből  $G = H - TS$
- A termodinamikai folyamatok spontán lejátszódásának feltétele  
 $\Delta G = \Delta H - T \Delta S - S \Delta T < 0$
- állandó hőmérsékleten lejátszódó folyamatokra  
 $\Delta G = \Delta H - T \Delta S < 0$

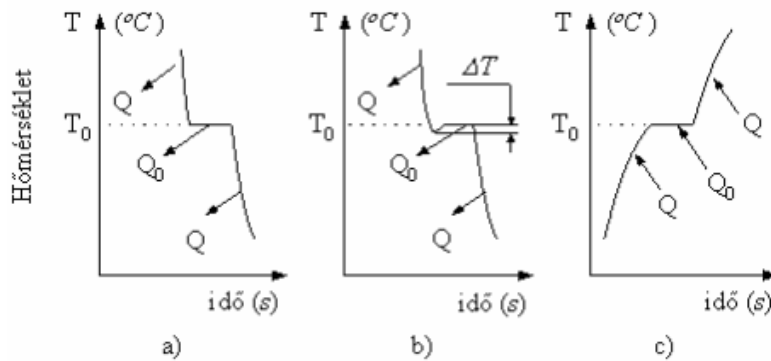
## Színfém kristályosodásának elemzése

- a szabad-entalpiák változása  
– folyékony és  
– szilárd fázisra





## Színfém hűlésgörbéjének elemzése



## A kristályosodás elemi folyamatai

- kristálycsírák keletkezése
  - homogén kristálycsíra
  - heterogén kristálycsíra
- kristálycsírák növekedése
  - kristálynövekedési mechanizmusok
    - poliéderez, szemcsés
    - Dendrites
      - Rendezetlen
      - oszlopos, sugaras
    - szferolitos

## A kristálycsírák keletkezése

- kristálycsírák keletkezése
- a stabilis (homogén) kristálycsíra keletkezésének feltétele  
a rendszer összegezett szabad-entalpiájának csökkenése

## A kritikus csíraméret függvény elemzése

- 1 A szabad-entalpia összegezett változása

$$\Delta G_o = \Delta G_f + \Delta G_v$$

- 1 a felületi szabad-entalpia növekedése

$$\Delta G_f = 4r^2 \pi \sigma$$

- 1 a térfogati szabad-entalpia csökkenése

$$\Delta G_v = - \frac{4r^3 \pi L \Delta T}{3 T_o}$$

## A kritikus csíraméret függvény elemzése

- 1 A szabad-entalpia összegezett változása

$$\Delta G_o = 4r^2\pi\sigma - \frac{4r^3\pi}{3} \frac{L\Delta T}{T_o}$$

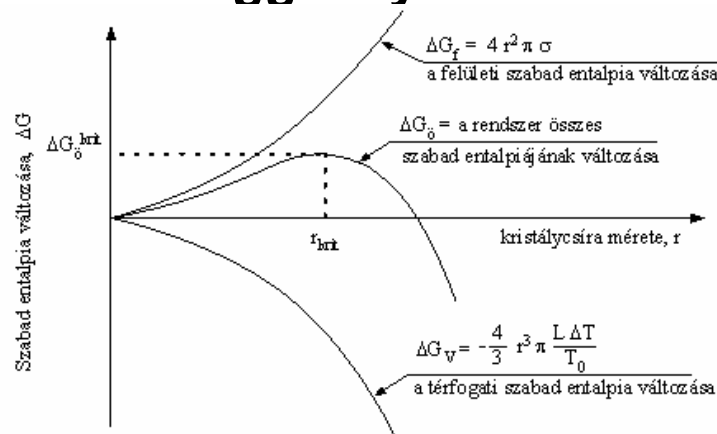
- 1 a függvény szélsőértékének (minimumának) meghatározása (r-szerinti deriválással)

$$\frac{d}{dr}(\Delta G_o) = 8r\pi\sigma - 4r^2\pi \frac{L\Delta T}{T_o} = 0$$

- 1 amiből a kritikus csíraméret

$$r_{krit} = \frac{2\sigma T_o}{L\Delta T}$$

## A szabad-entalpia változása a kristálycsíra méretének függvényében



# A kristályosodási képesség elemzése

## 1 a kristályosodási képesség definíciója

$$K_k [1/\text{mm}^3 \cdot \text{s}]$$

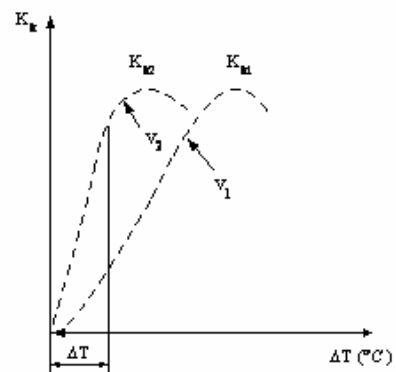
## 1 befolyásoló paraméterek

a túlhűtés mértéke

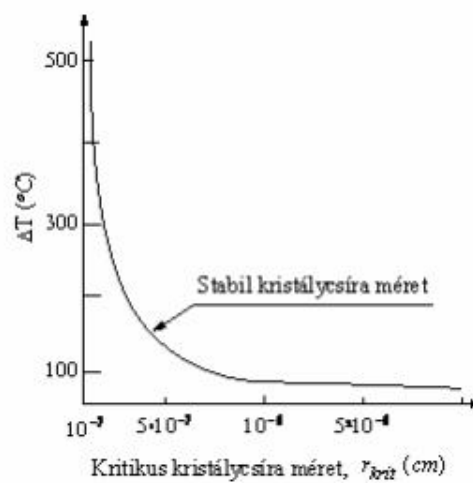
$$\Delta T [^\circ\text{C}]$$

a hűtési sebesség

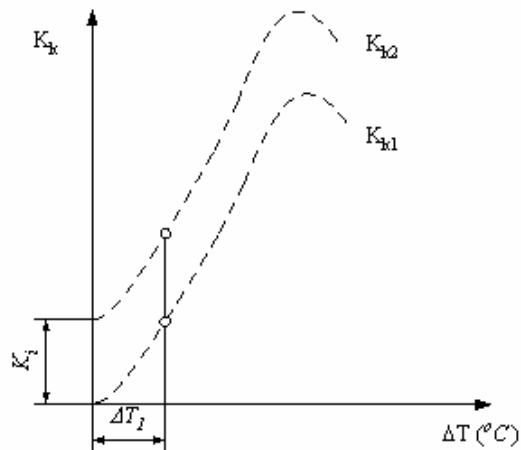
$$v [^\circ\text{C}/\text{s}]$$



# A kritikus kristálycsíra méret változása a túlhűtéssel



## Heterogén kristály csíra képződési mechanizmus



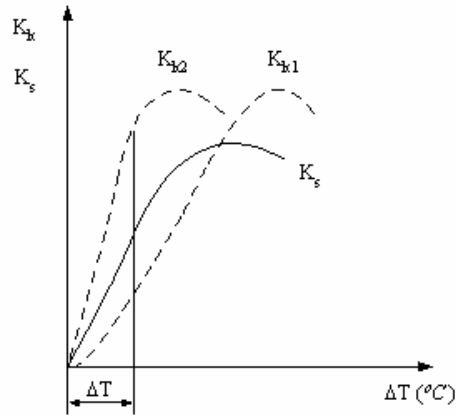
## A kristálycsírák növekedése, kristályosodási mechanizmusok

- a kristályosodás elemi folyamatai
  - stabilis (növekedésre képes) kristálycsírák keletkezése ( $K_k$ )
  - a kristálycsírák növekedése
    - a kristályosodás sebessége -  $K_s$  [mm/s]
    - a kristályosodás módja

# A kristályosodási sebesség

1 Fogalma:  
a kristály lineáris  
növekedési sebes-  
sége

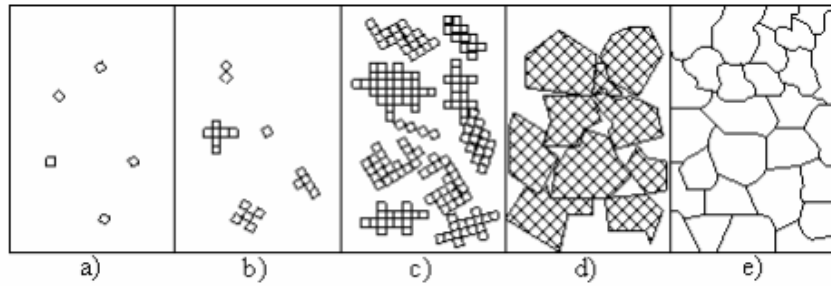
1 Mértéke  
 $K_s$  [mm/s]



## A polikristallin kristályosodás módjai

- poliéderez, szemcsés
- dendrites
  - rendezetlen dendrites
  - oszlopos, sugaras dendrites
- szferolitos
  - a gömbgrafitos öntöttvas, mint  
gyakorlati példa

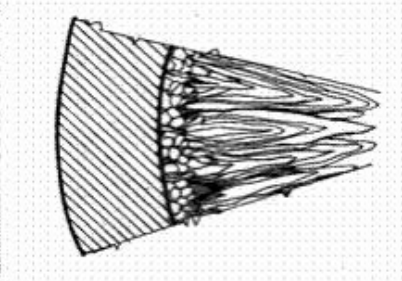
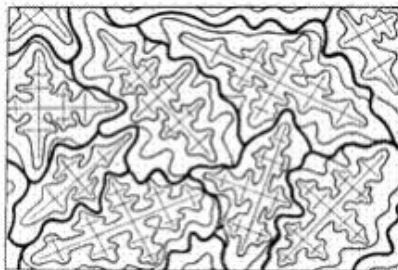
## A poliédres, szemcsés kristályosodás



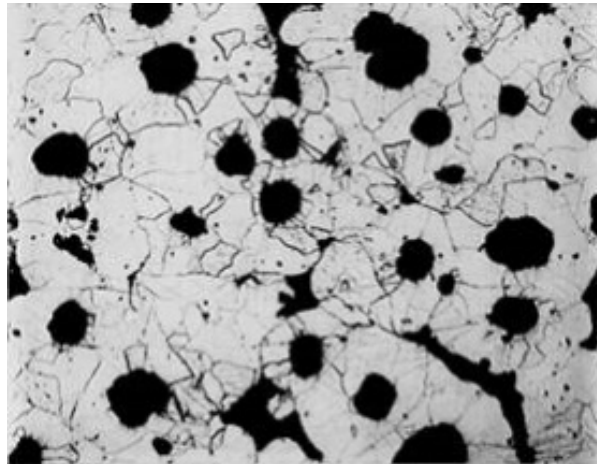
## A dendrites kristályosodás

rendezetlen dendrites

oszlopos dendrites



## A szferolitos kristályosodás a gömbgrafitos öntöttvas kristályosodása



## A kristályos szerkezet módosítása

alapvető a kristályosodási képesség és a  
kristályosodási sebesség viszonya

- a finomszemcsés szerkezet előállítása

$$K_k \gg K_s$$

a jó mechanikai tulajdonságok (elsősorban a  
**szívósság**) szükséges feltétele

- a durvaszemcsés szerkezet előállítása

$$K_k \ll K_s$$

egykristályok előállítására

speciális elektrotechnikai célokra (Si

egykristály)

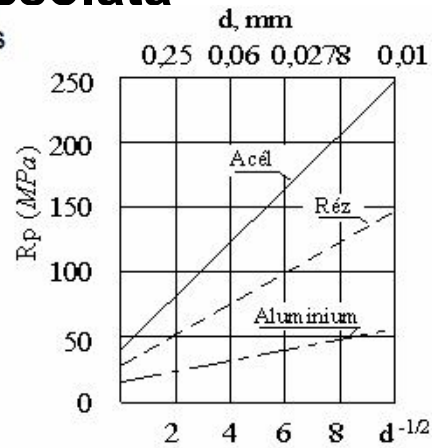
térfogatalakítás előgyártmány előállításra



## A szemcseszerkezet és a mechanikai tulajdonságok kapcsolata

a Hall-Petch összefüggés

$$R_p = R_0 + k d^{-\frac{1}{2}}$$



## Polimorfizmus és allotrópia

- a polimorfizmus fogalma: *különböző hőmérséklet-tartományokban más kristályrendszer szerinti kristályosodás*  
**többalakúság**
  - fémek polimorfizmusa: az **allotrópia**
  - allotróp módosulatok
  - allotróp átalakulások

# A vas allotróp átalakulása és módosulatai

