

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

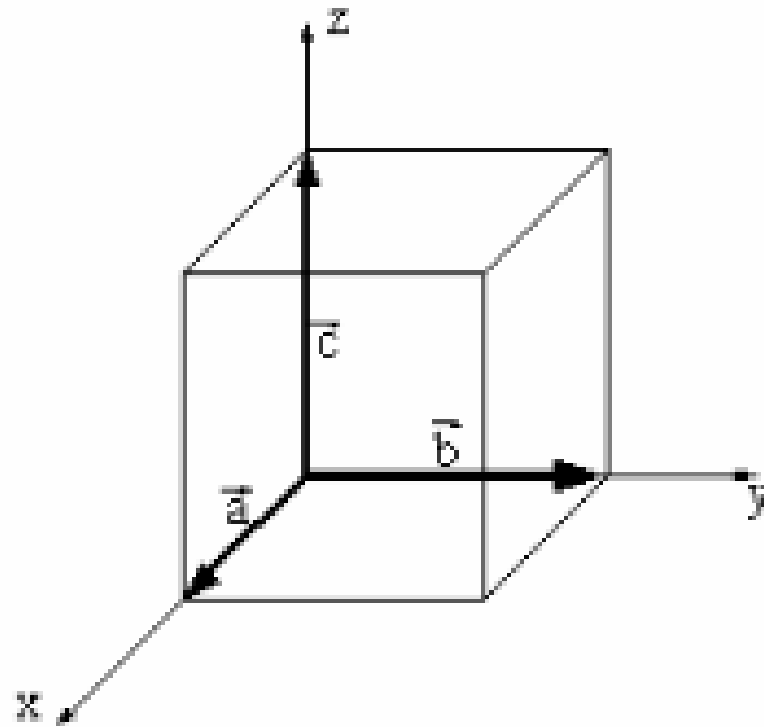
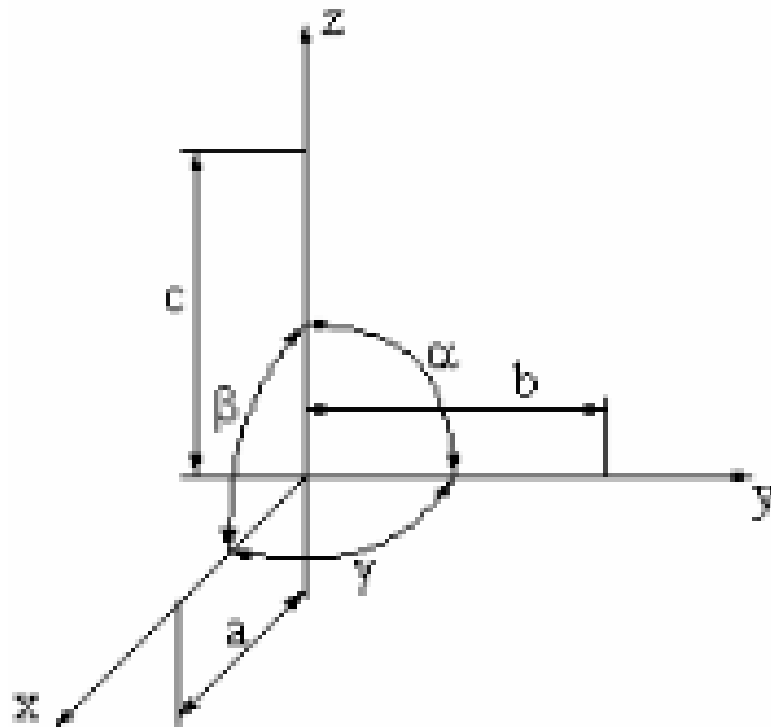
- Bármely kristályrendszer

- Három iránnyal (x, y, z)

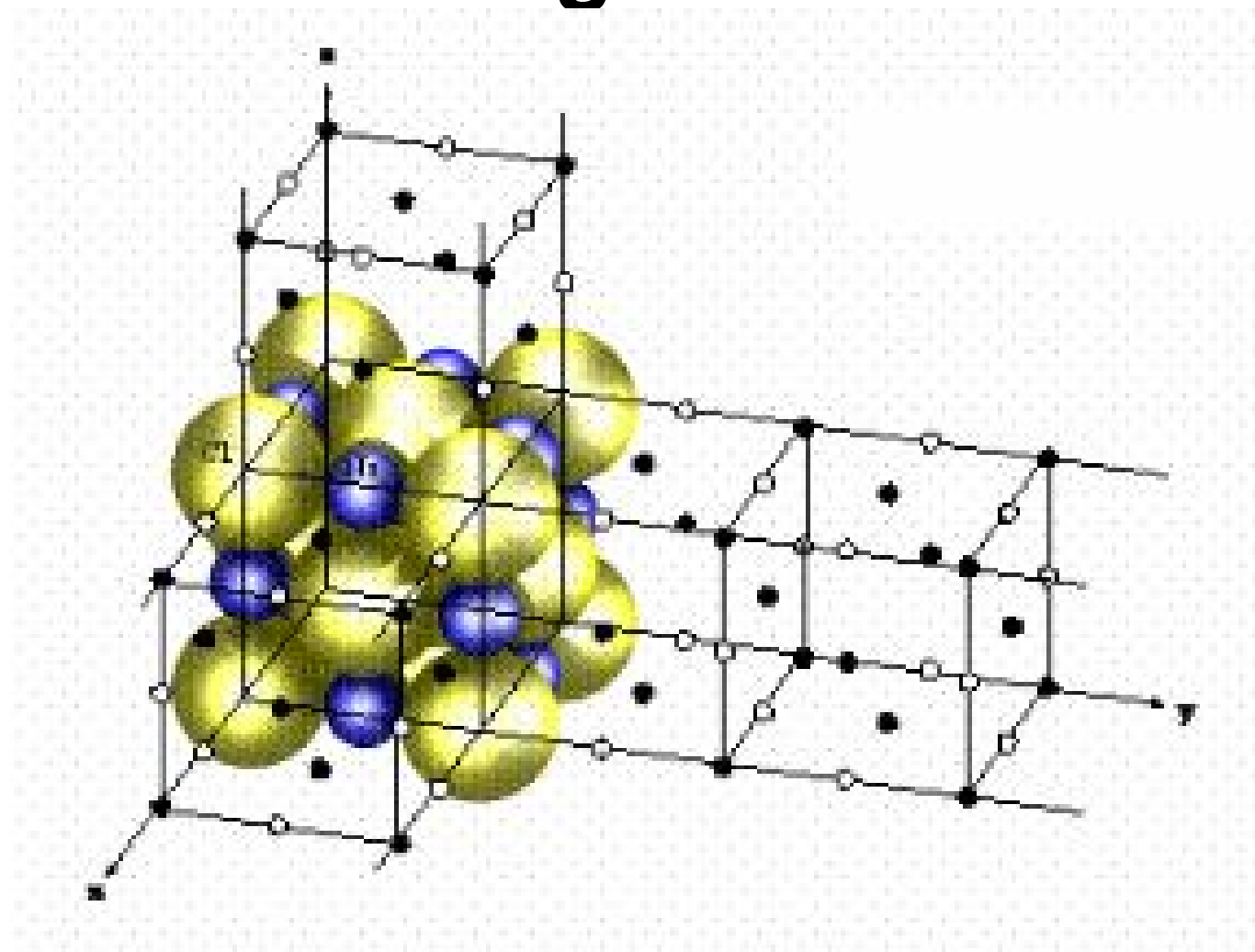
- Három irányban mért távolsággal (a, b, c)

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 (α, β, γ)
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	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Romboédere	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
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	Ezzerféle cella			
Kubikus	 primitív	 testközpontú	 felületközpontú	
Tetragonális	 primitív	 testközpontú	 felületközpontú	
Hexagonális	 primitív		 rhomboéd	
Ortorektángos	 primitív	 testközpontú	 felületközpontú	 alaplappontú
Rhomboédrikus	 primitív			
Monoklin	 primitív	 alaplappontú		
Triklin	 primitív			

Kristályrendszerek elemzése

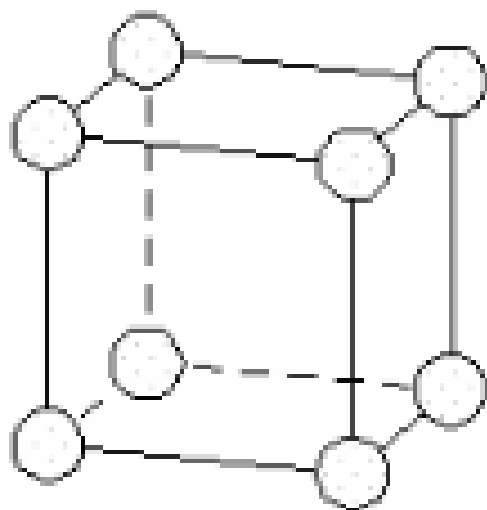
- A szabályos, köbös kristályrendszer
- A térrács geometriai alakzata: szabályos kocka
- A szabályos rendszer módosulatai:
 - Primitív köbös
 - Térben középpontos köbös – térközepes
 - Felületen középpontos köbös – lapközepes
 - A köbös rendszer egy speciális módosulata a gyémántrács

Alapvető kristálytani paraméterek

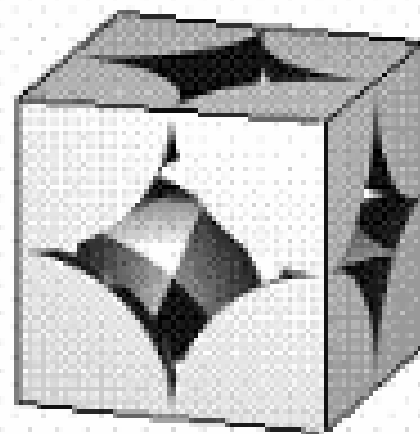
fogalma és meghatározása

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

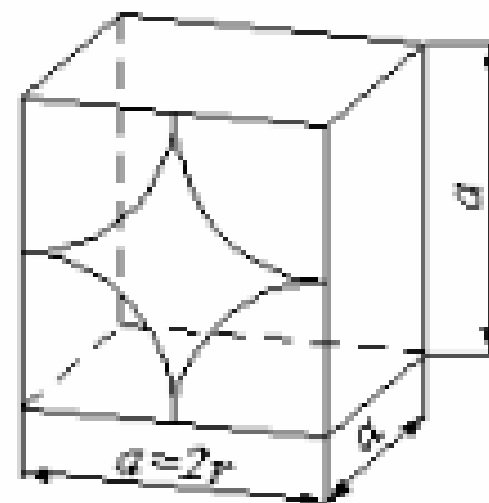
Az egyszerű (primitív) köbös kristályrendszer elemzése



a)

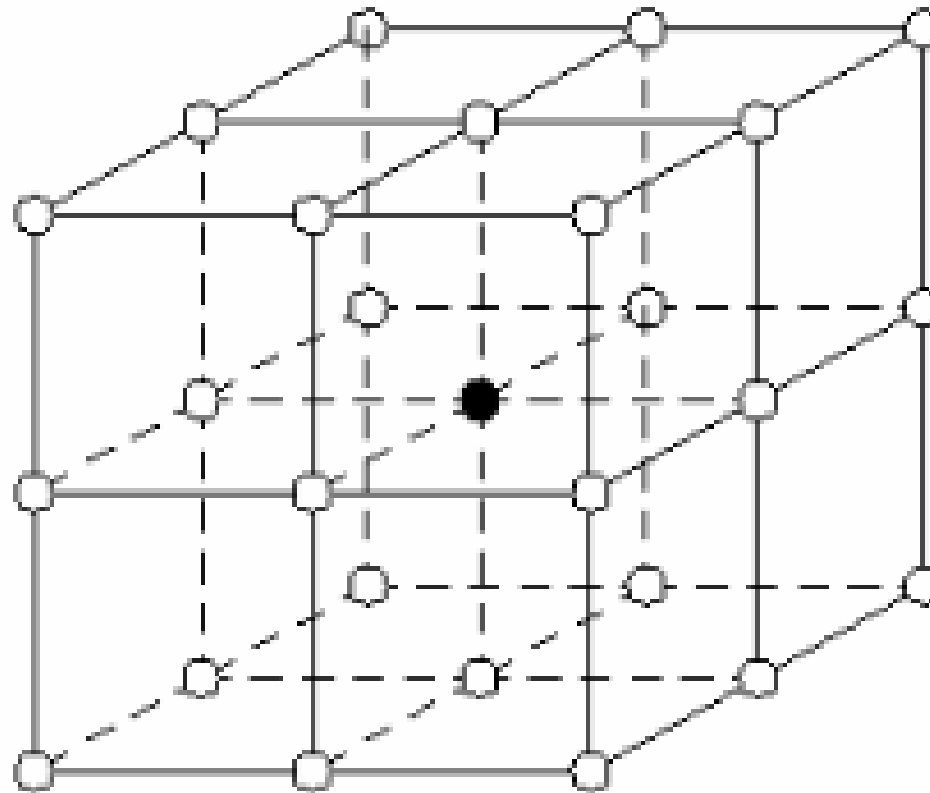


b)



c)

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:

$$a = 2r$$

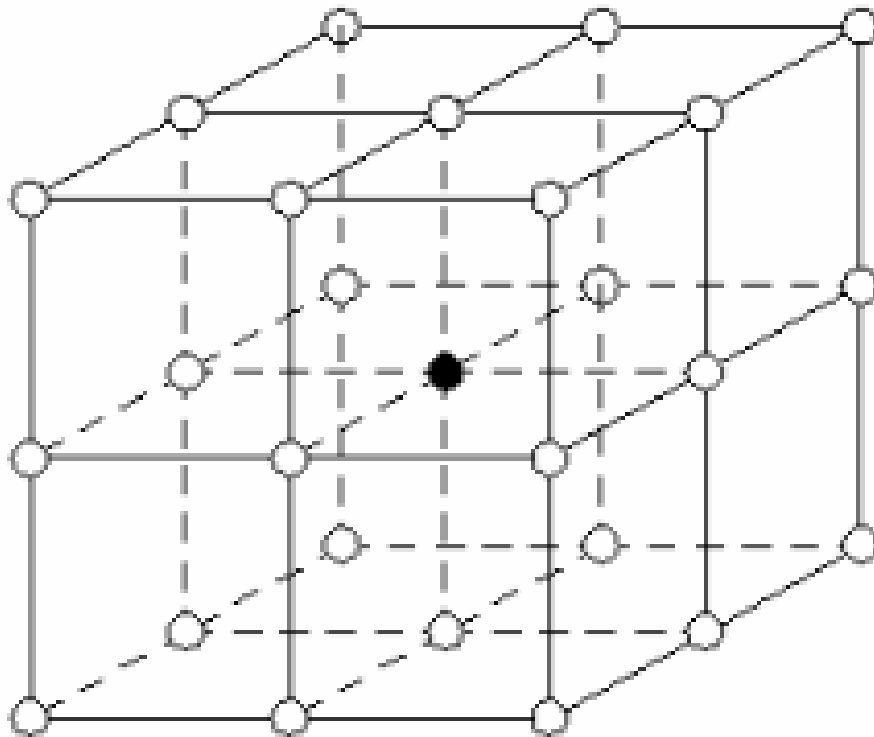
Kristálytani számítások alapösszefüggései

- A térkitöltési tényező:

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

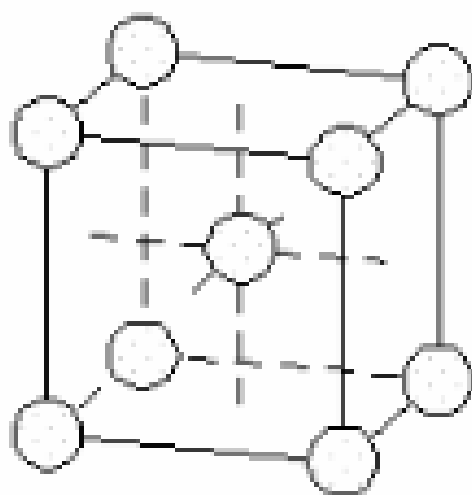
$$T = \frac{N \frac{4r^3\pi}{3}}{8r^3} = \frac{N\pi}{6} = 0,52 \Rightarrow 52 \%$$

Vázlat a koordinációs szám értelmezéséhez

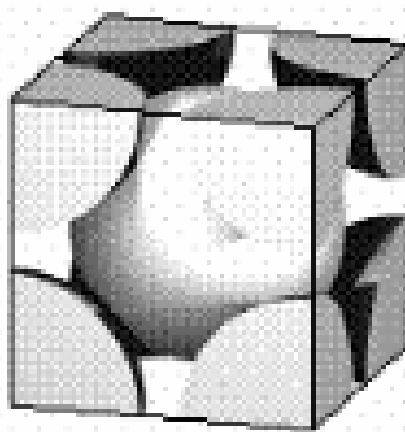


$$K = 6$$

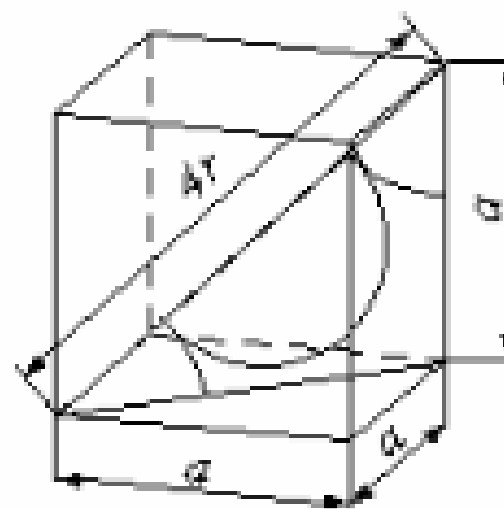
Vázlat a térközepes köbös kristályrendszer elemzéséhez



a)

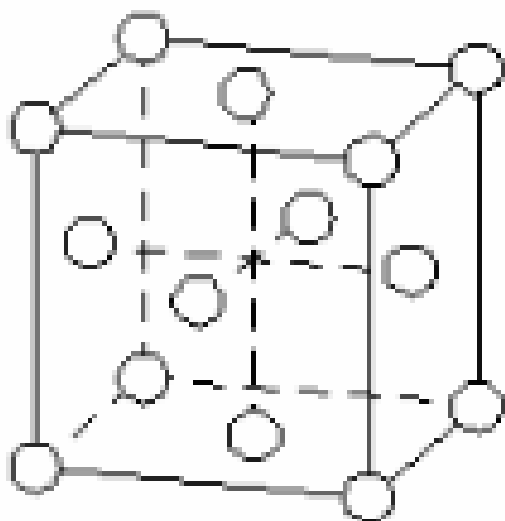


b)

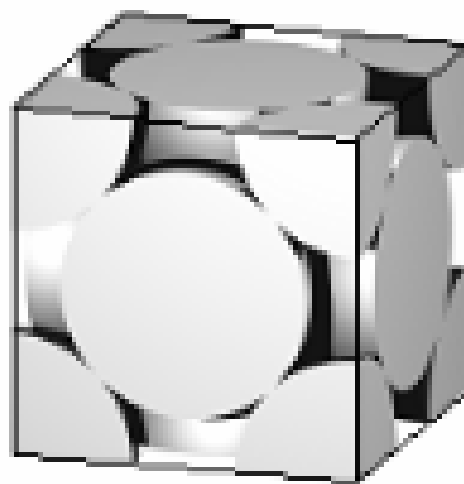


c)

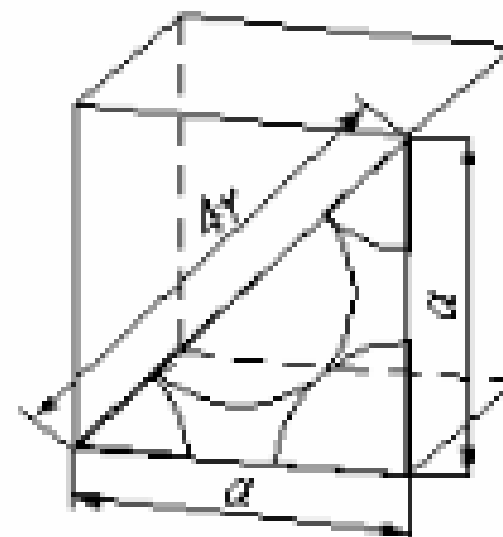
Vázlat a lapközepes köbös kristályrendszer elemzéséhez



a)



b)



c)

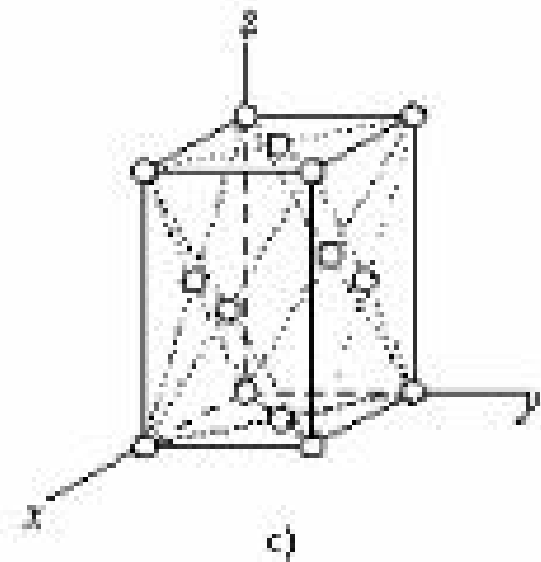
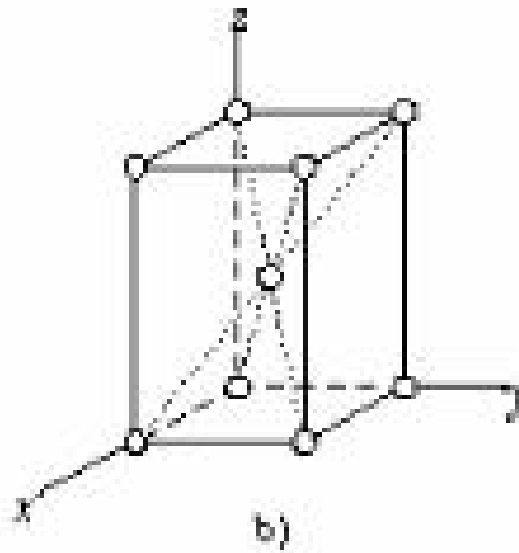
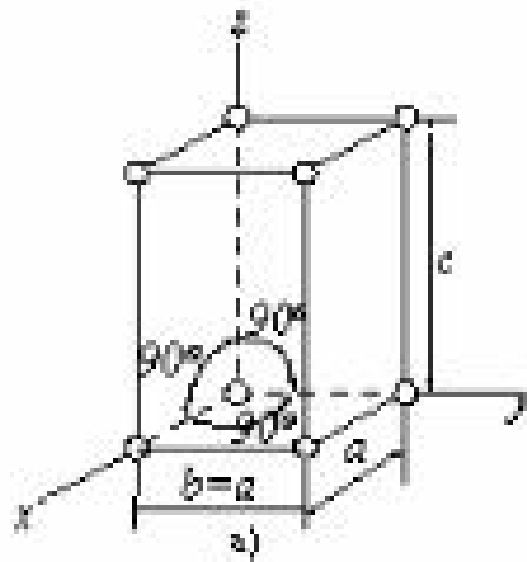
A köbös kristályrendszer elemzésének összefoglalása

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	α -Fe, Cr, W	γ -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)

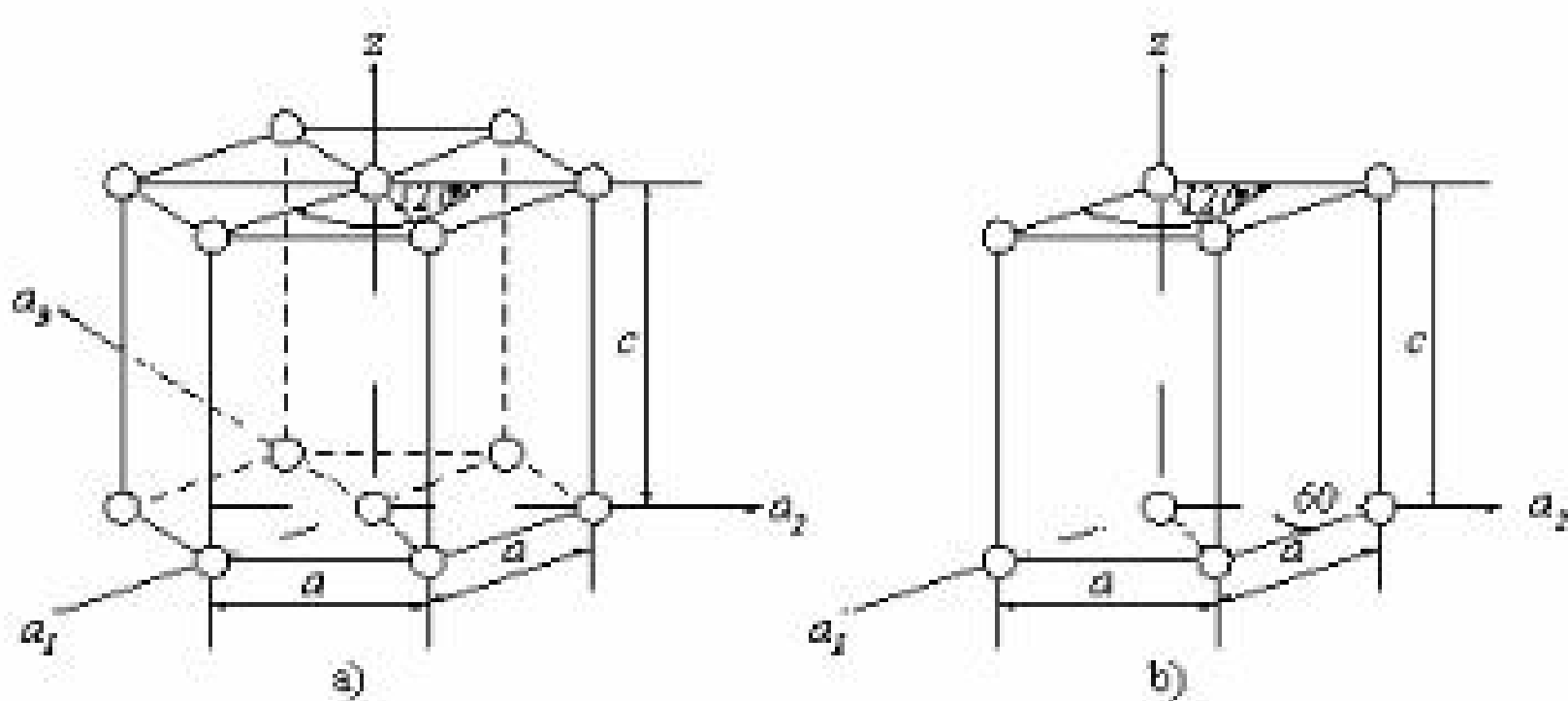
A tetragonális kristályrendszer módosulatai



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**

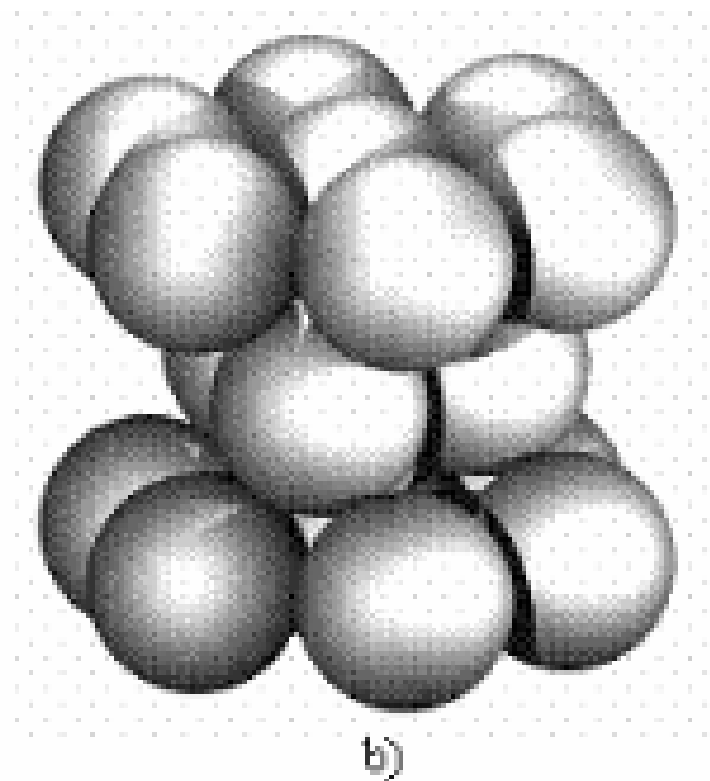
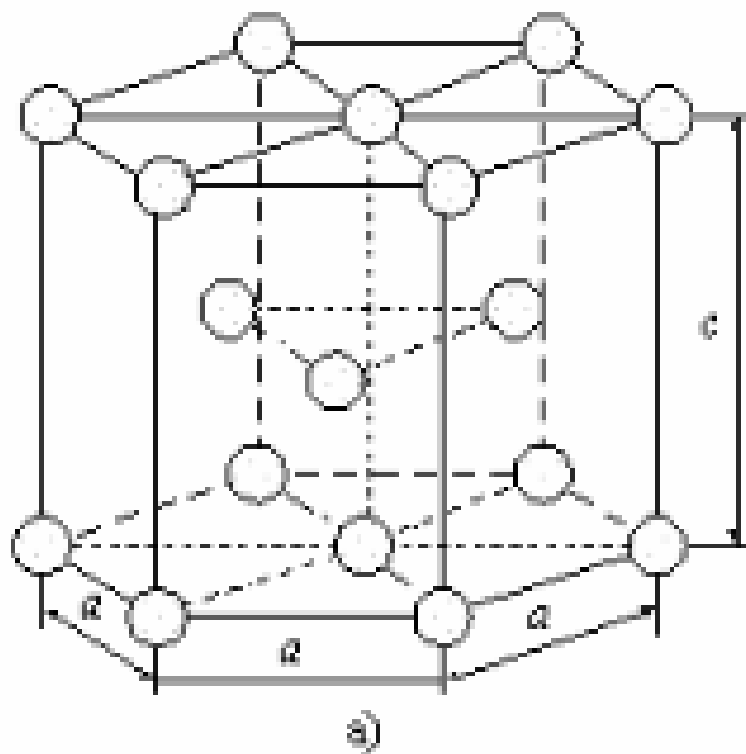
Az ortorombos és a hexagonális reprezentáció összehasonlítása



A hexagonális kristályrendszer módosulatai

- A primitív hexagonális kristály (Cd, Be)
 - A kristálytani leírásból származó redundancia következménye: a primitív hexagonális rendszer a lapközepen 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

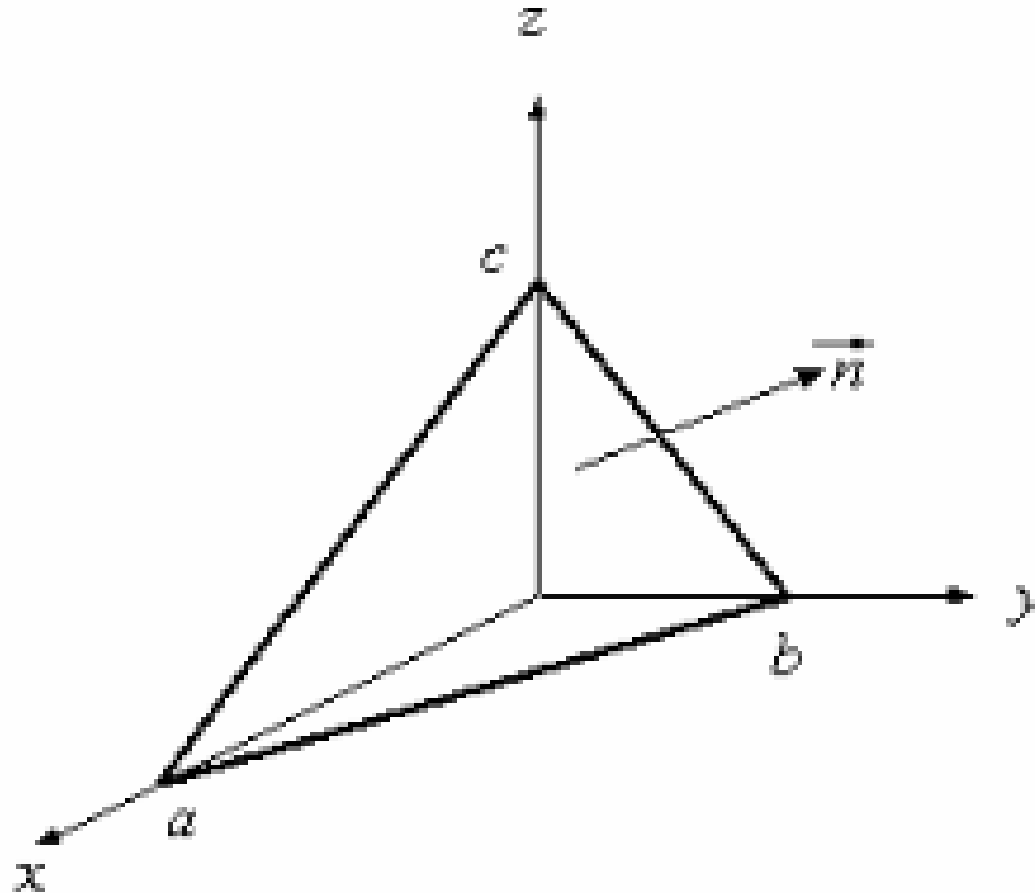
- Egy általános helyzetű sík vektorikus egyenlete

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

- 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

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

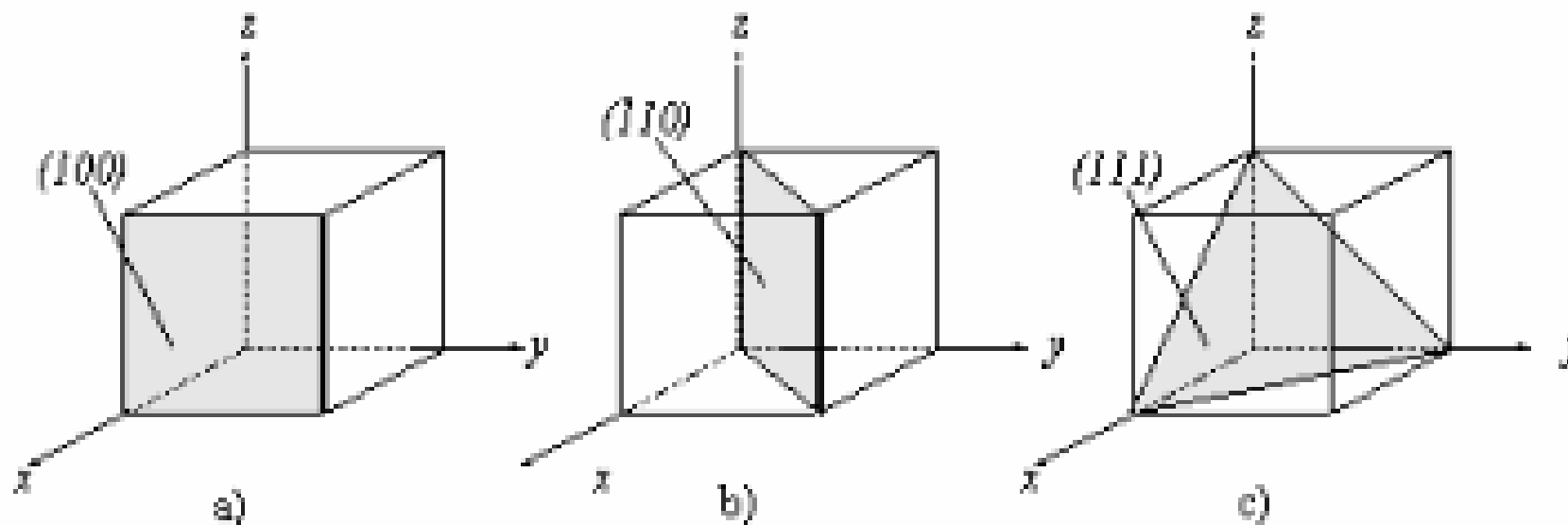
4. A sík Miller-indexének kifejezése matematikai átalakítással a legkisebb egész számokkal
($h\ k\ l$)

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



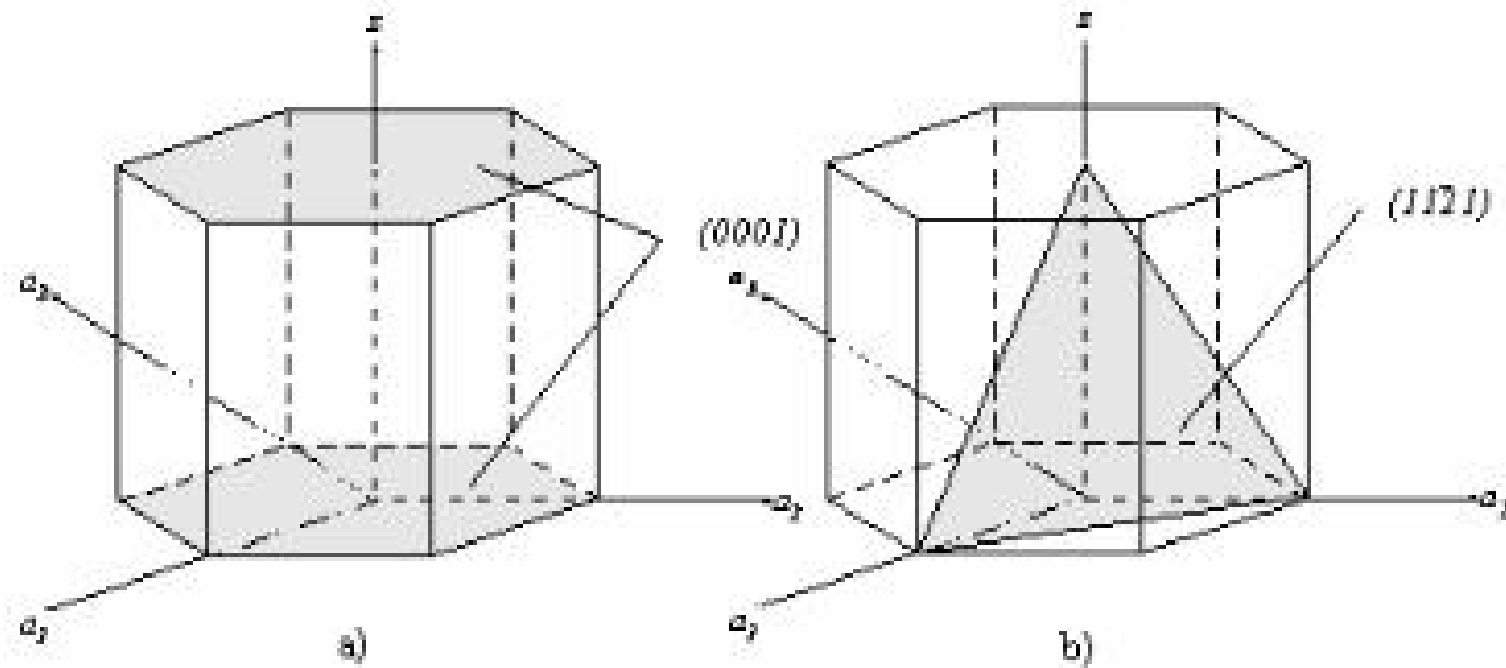
Kristálytani síkok jelölése a hexagonális rendszerben

- 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

$$h + k = -i$$

" - - - f" - - -

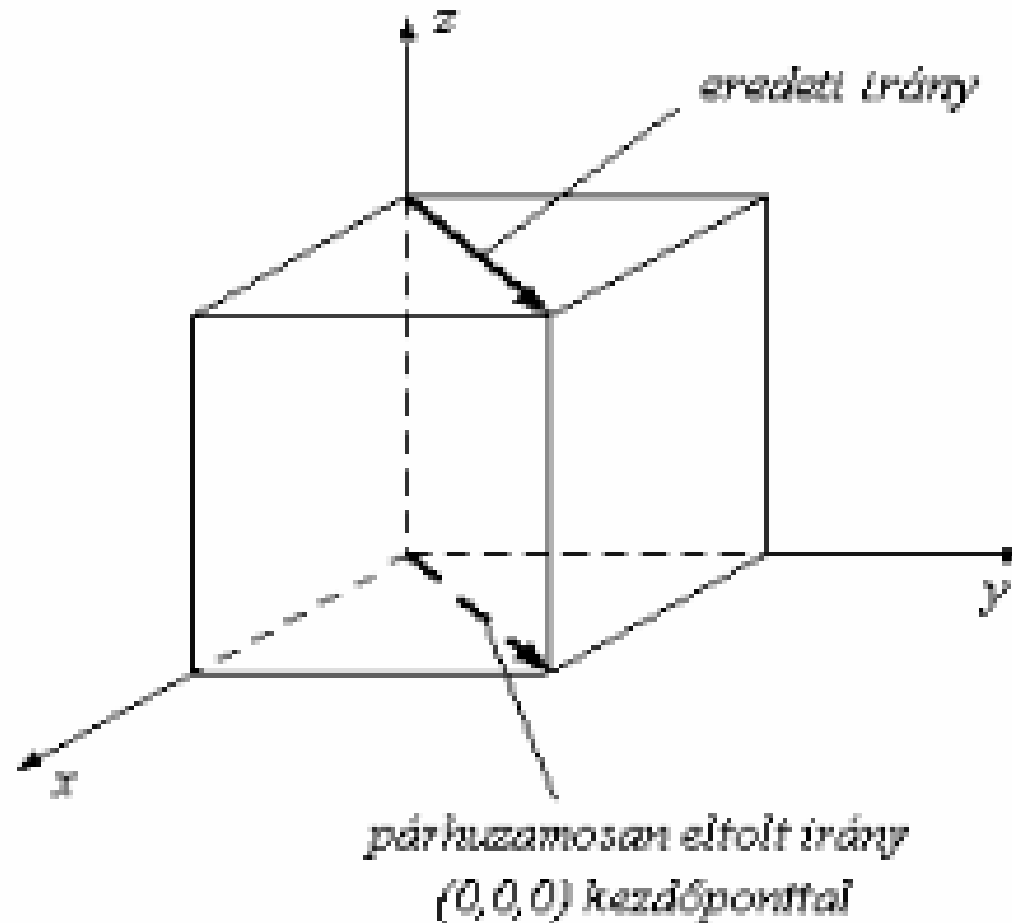
Vázlat kristálytani síkok jelöléséhez a hexagonális rendszerben



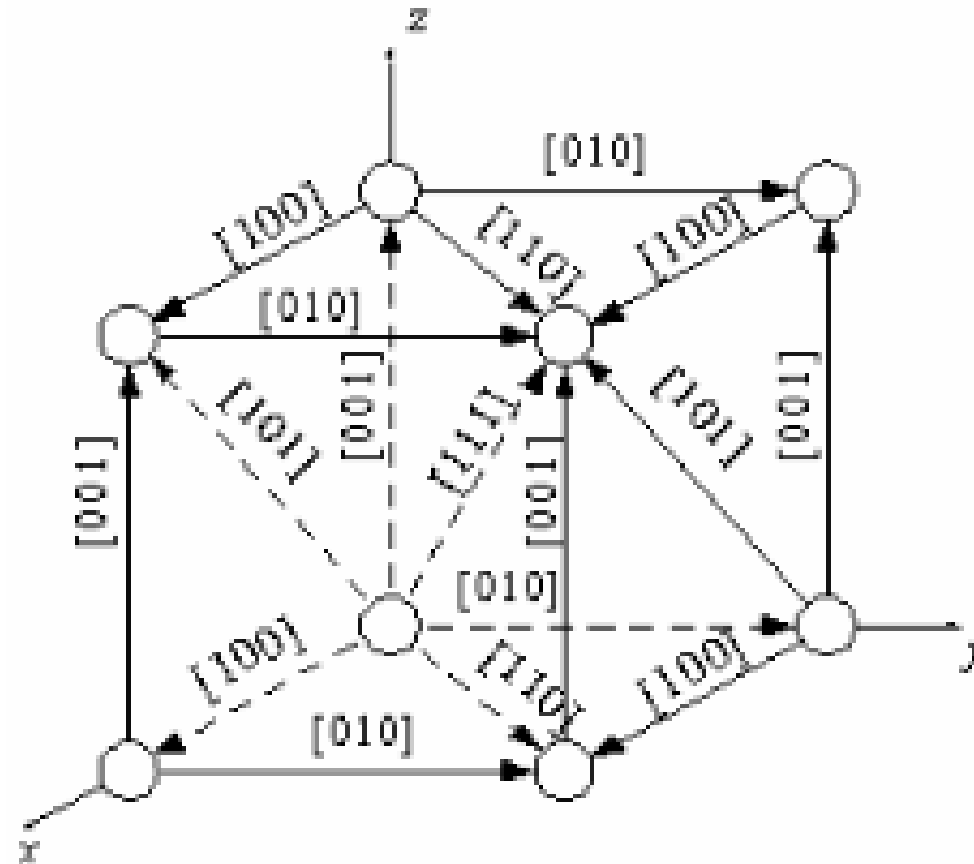
Kristálytani irányok jelölése a kübös rendszerben

- Az irányok indexelnek (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

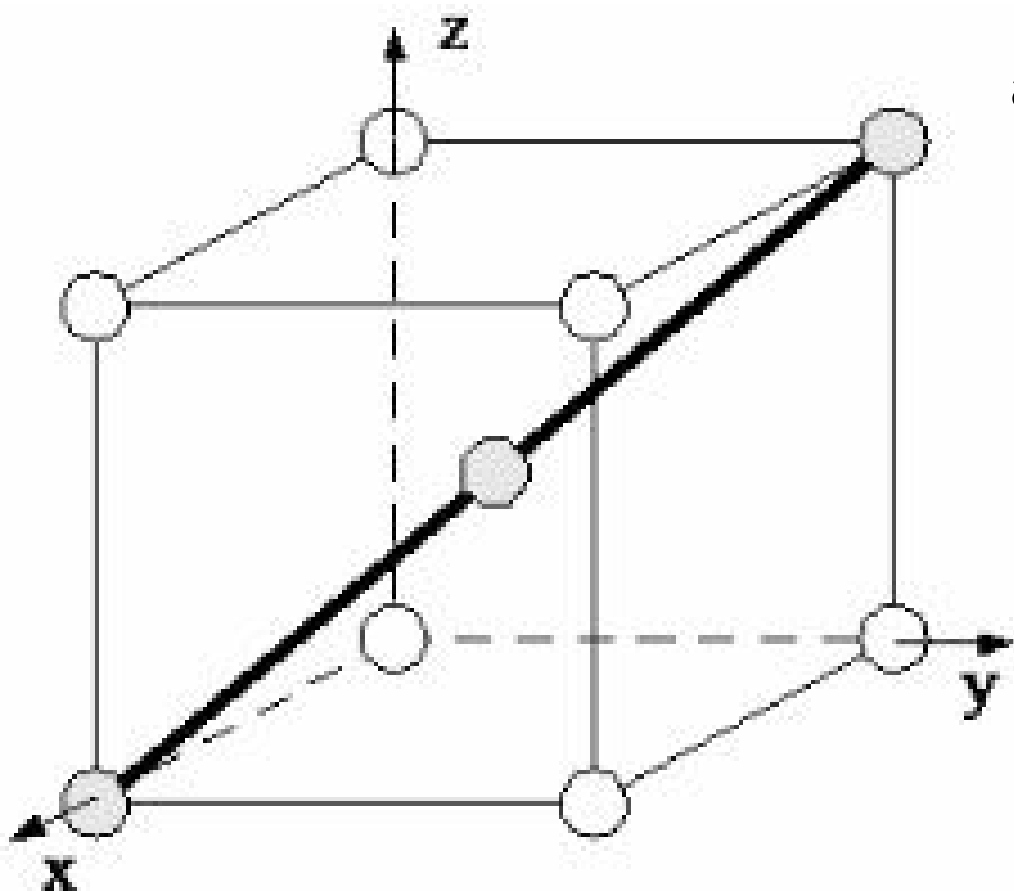
- Az azonos számhármassal jellemezhető kristálytani sík merőleges az ugyanazon számhármassal jellemezhető kristálytani irányra, azaz
ha $h = u$, $k = v$, és $l = w$ teljesül
az irány a sík normálisa.

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

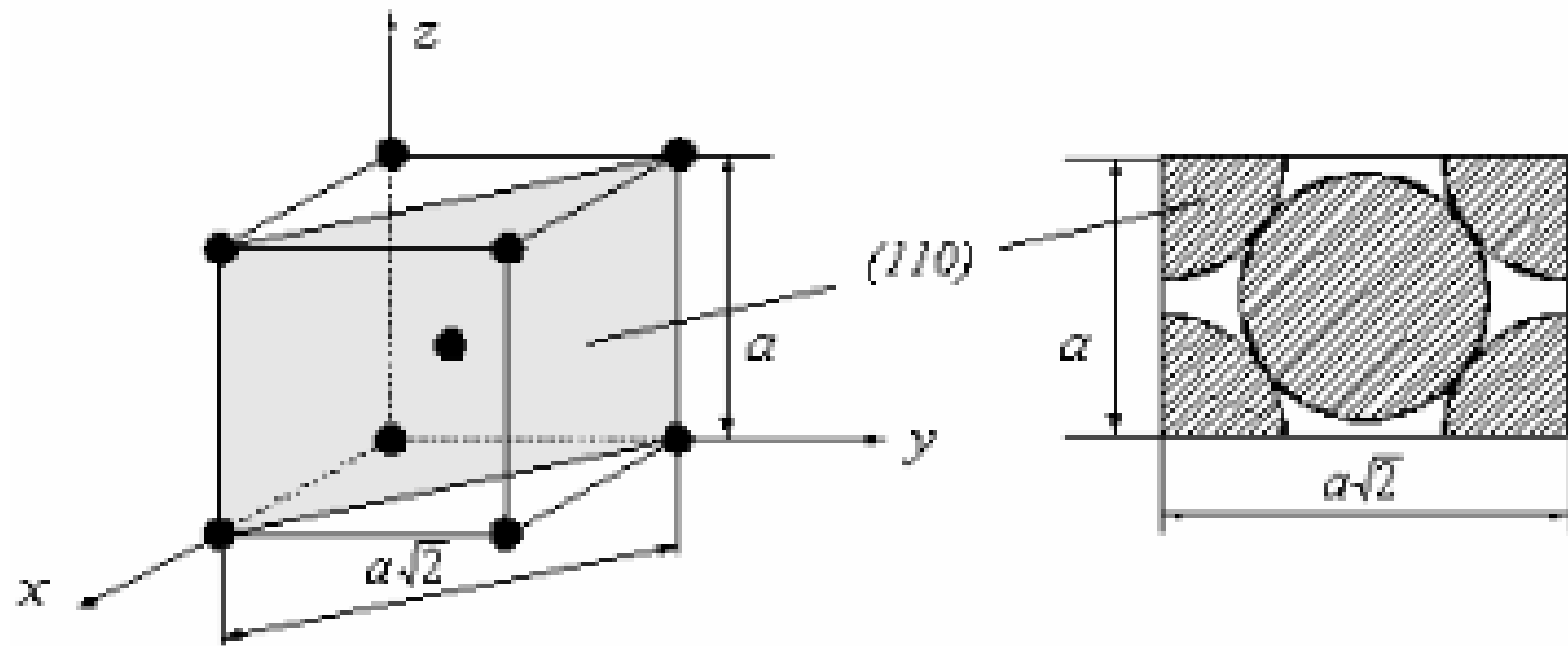
$$\rho_{\text{vonal}} = \frac{N_{\text{vonal}}}{l}$$

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

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

Kristálytani síkok távolsága

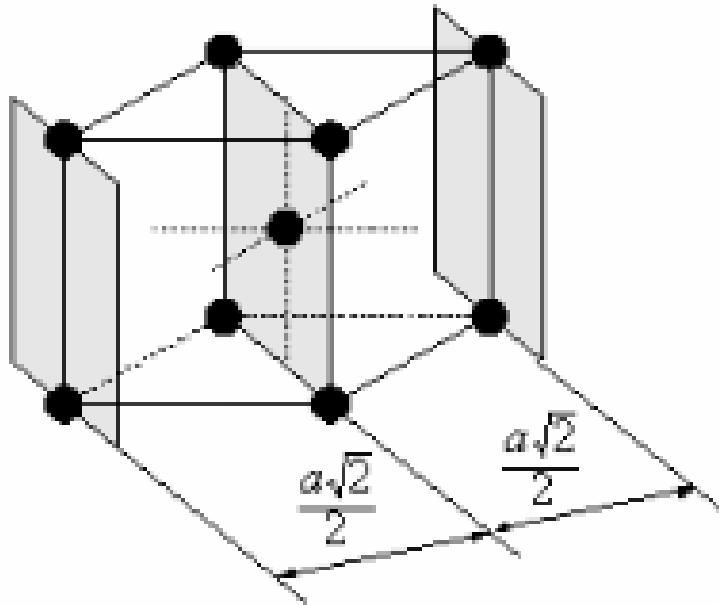
Köbös rendszerre érvényes összefüggés

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

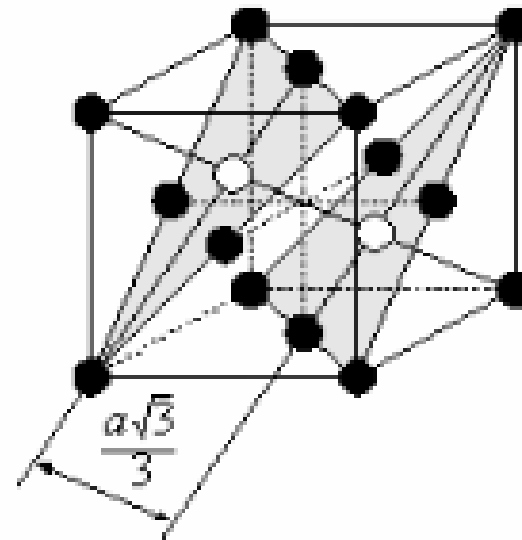
Az $(\bar{1}10)$ síkok távolsága

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

Vázlat kristálytani síkok távolságához



a)



b)

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.

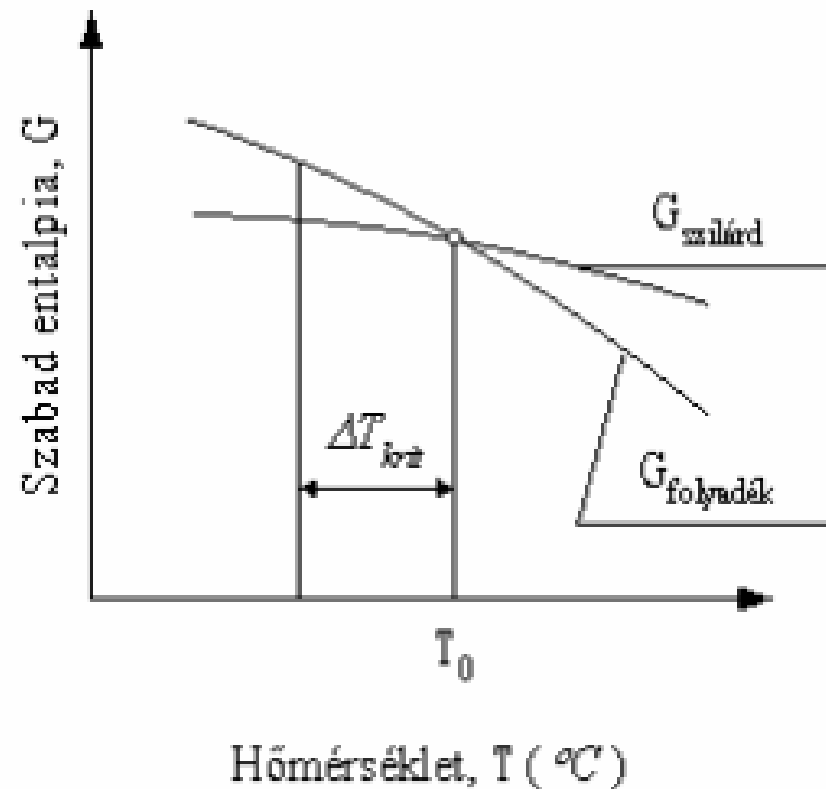
- Az állapottényezők fogalma, csoportjai
 - hőmérséklet (T),
 - nyomás (p),
 - fajtérfogat (V)
 - koncentráció (c)
- A szabadságfok (SZ) fogalma
- A Gibbs-féle fázisszabály
$$F + SZ = K + 2$$
(bármely termodinamikai rendszerre)
$$F + SZ = K + 1$$
(metallográfiai rendszerre, mivel $p=\text{állandó}$)

Termodinamikai alaptörvények

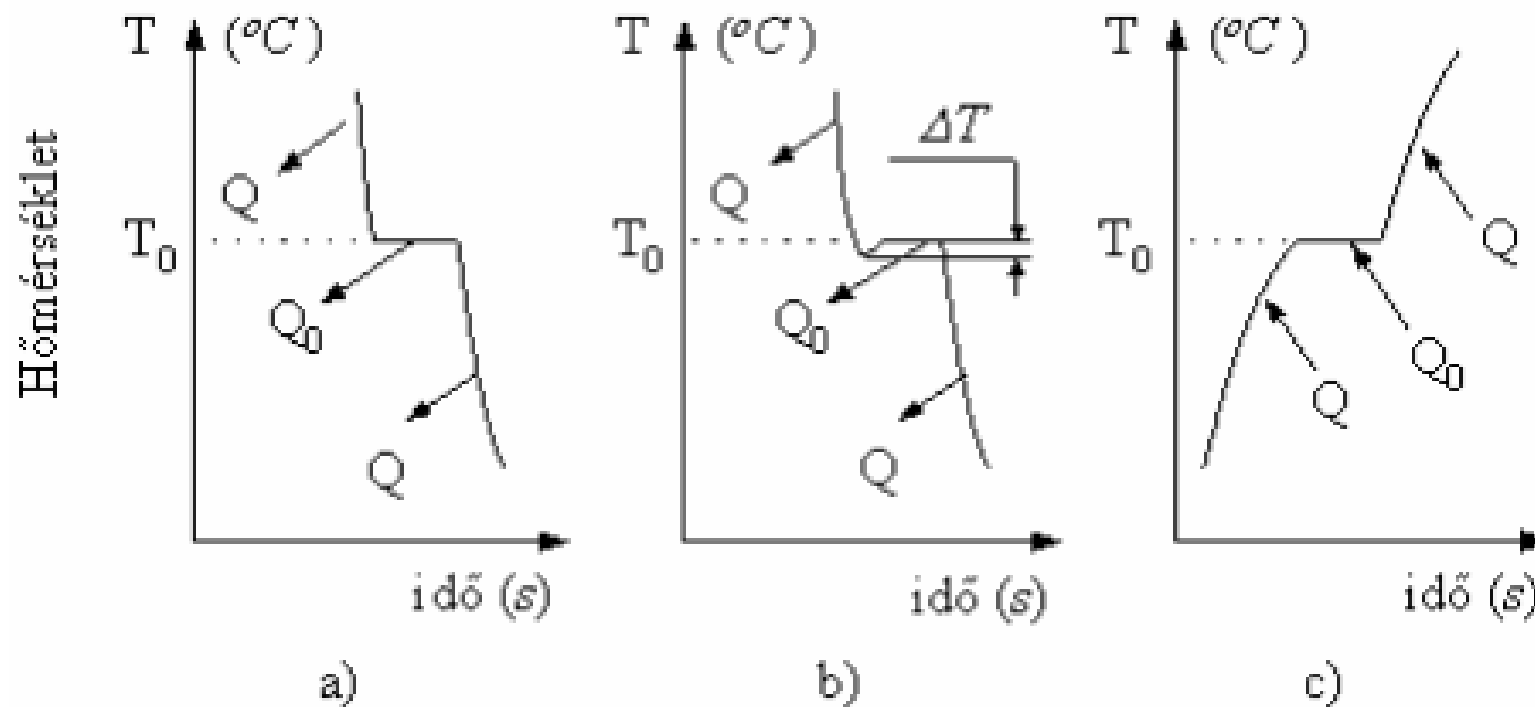
- A termodinamika I. főtétele
- A termodinamika II. főtétele (az entalpiára kifejezve)
 $H = G + TS$, amiből $G = H - TS$
- A termodinamikai folyamatok spontán lejátszódásának feltétele
 $\Delta G = \Delta H - T \Delta S - S \Delta T < 0$
- állandó hőmérsékleten lejátszódó folyamatokra
 $\Delta G = \Delta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

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

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

A kritikus csíraméret függvény elemzése

- 1 A szabad-entalpia összegezett változása

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

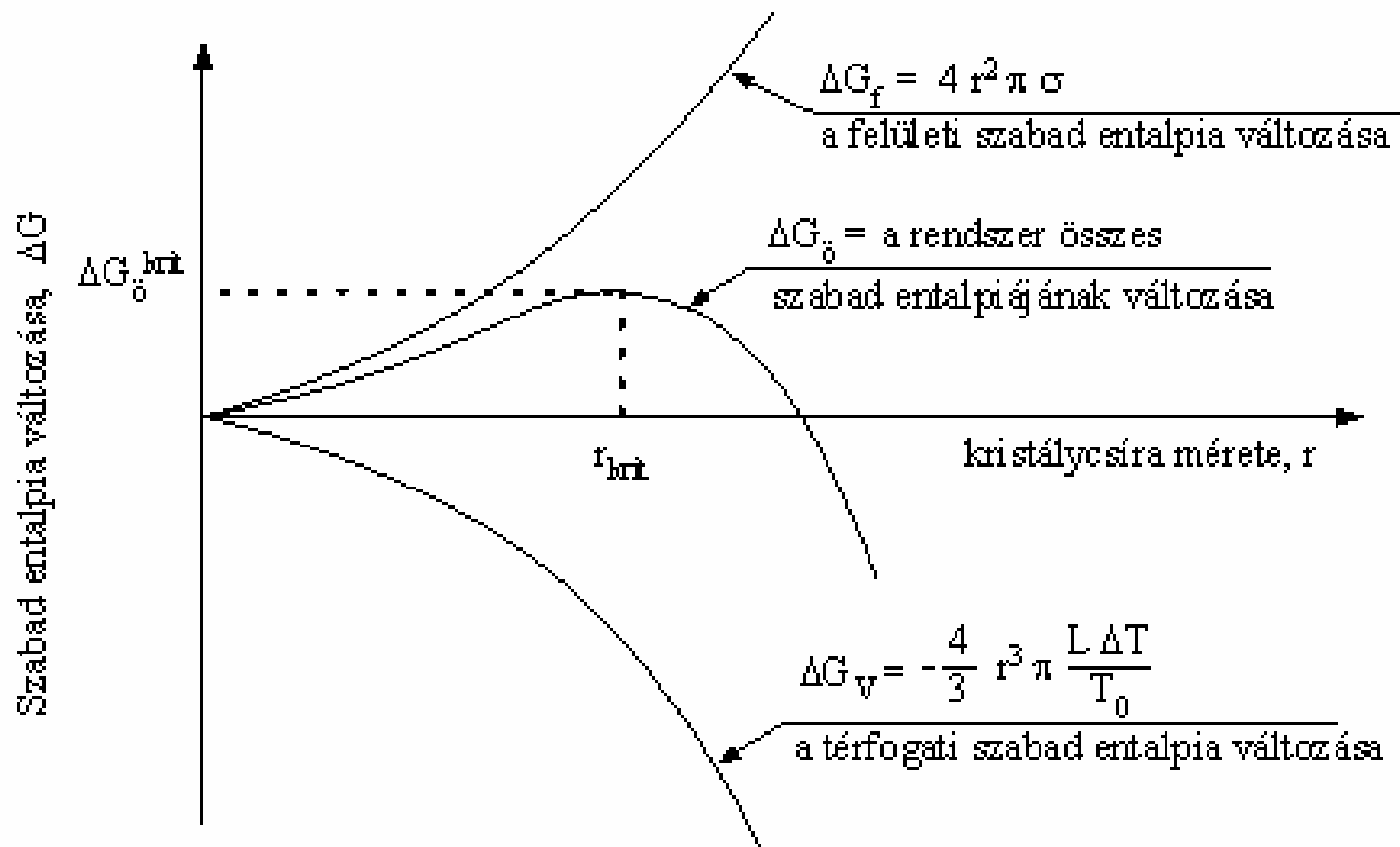
- 1 a függvény szélsőértékének (minimumának)
meghatározása (r-szerinti deriválással)

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

- 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

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

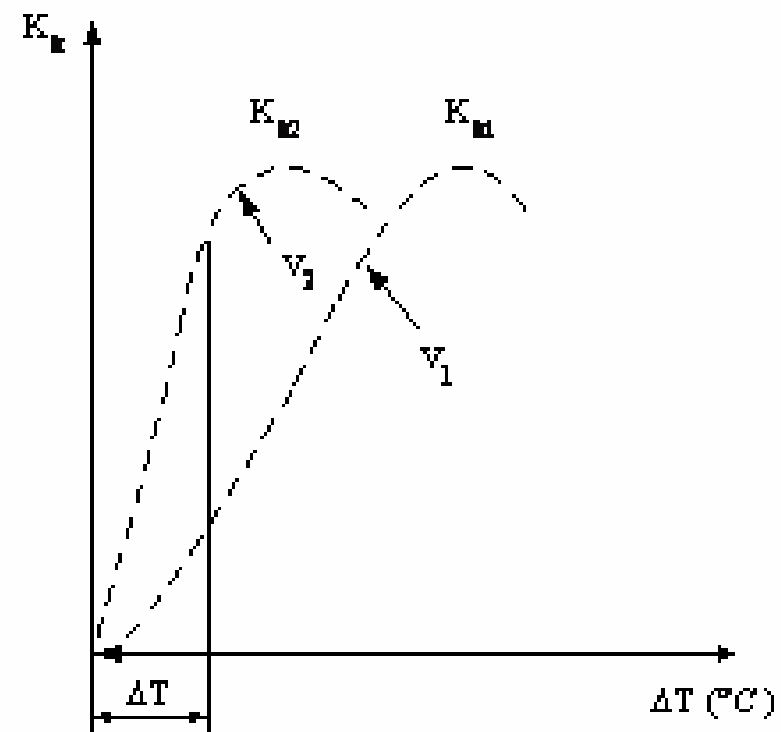
1 befolyásoló paraméterek

a túlhűtés mértéke

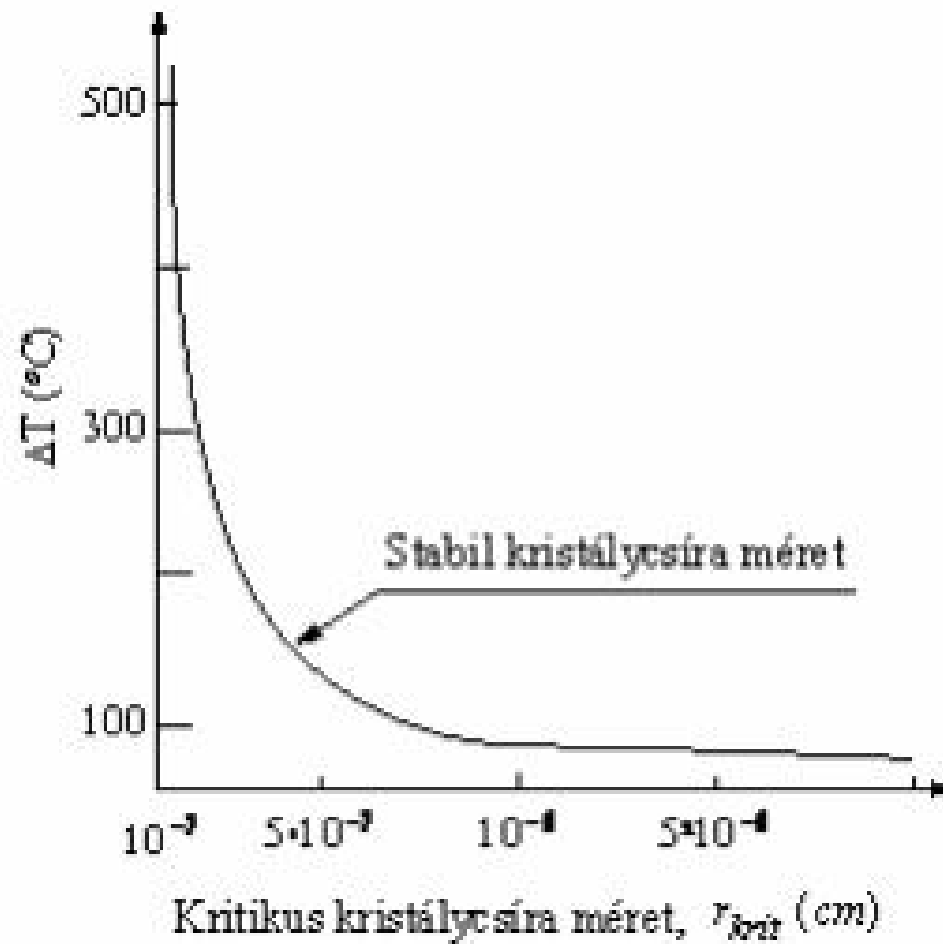
$$\Delta T [^\circ\text{C}]$$

a hűtési sebesség

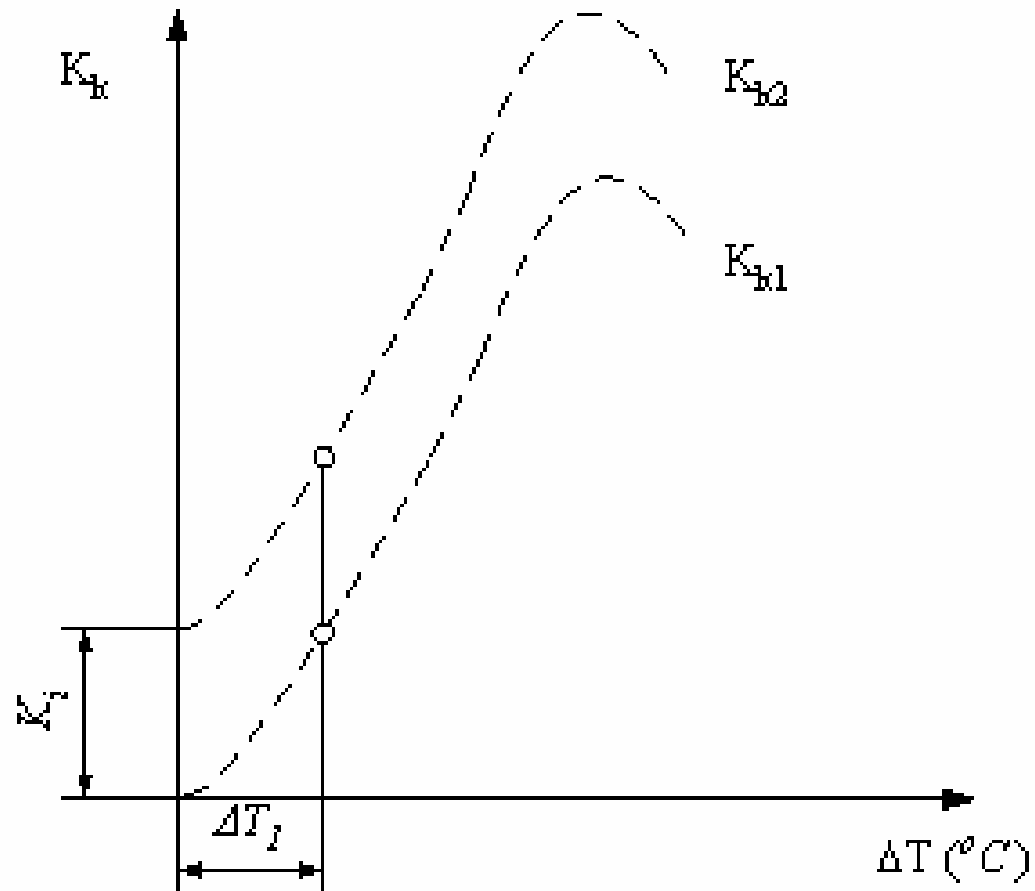
$$v [^\circ\text{C}/\text{s}]$$



A kritikus kristálycsíra méret változása a túlhűtéssel



Heterogén kristály csíra képződési mechanizmus



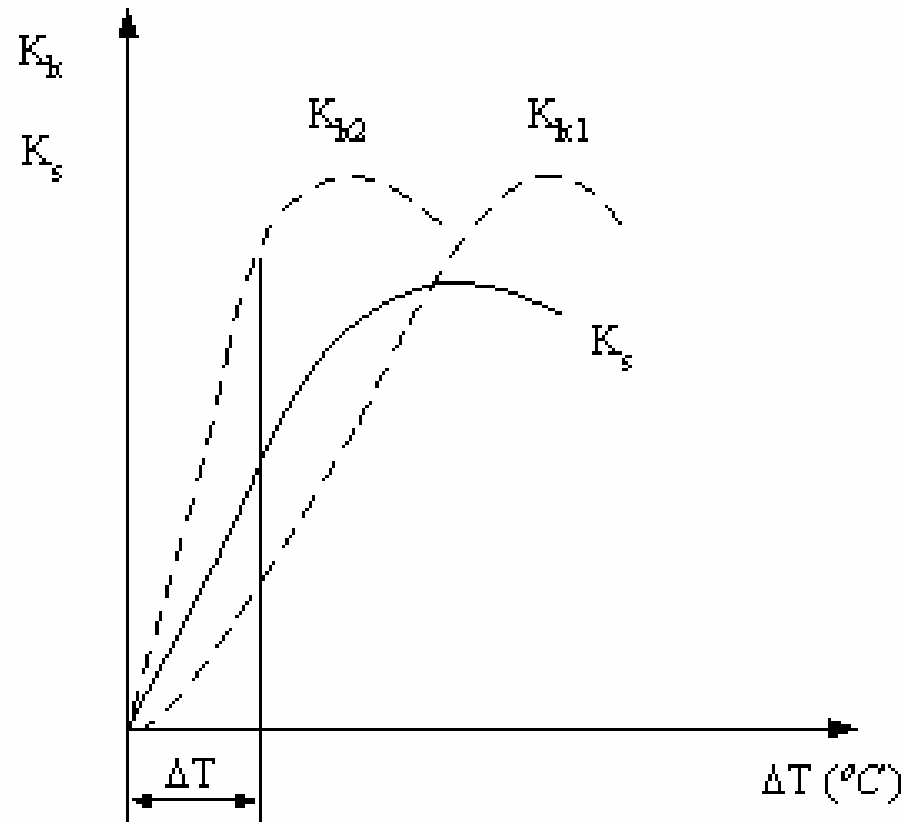
A kristálycsírák növekedése, kristályosodási mechanizmusok

- 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

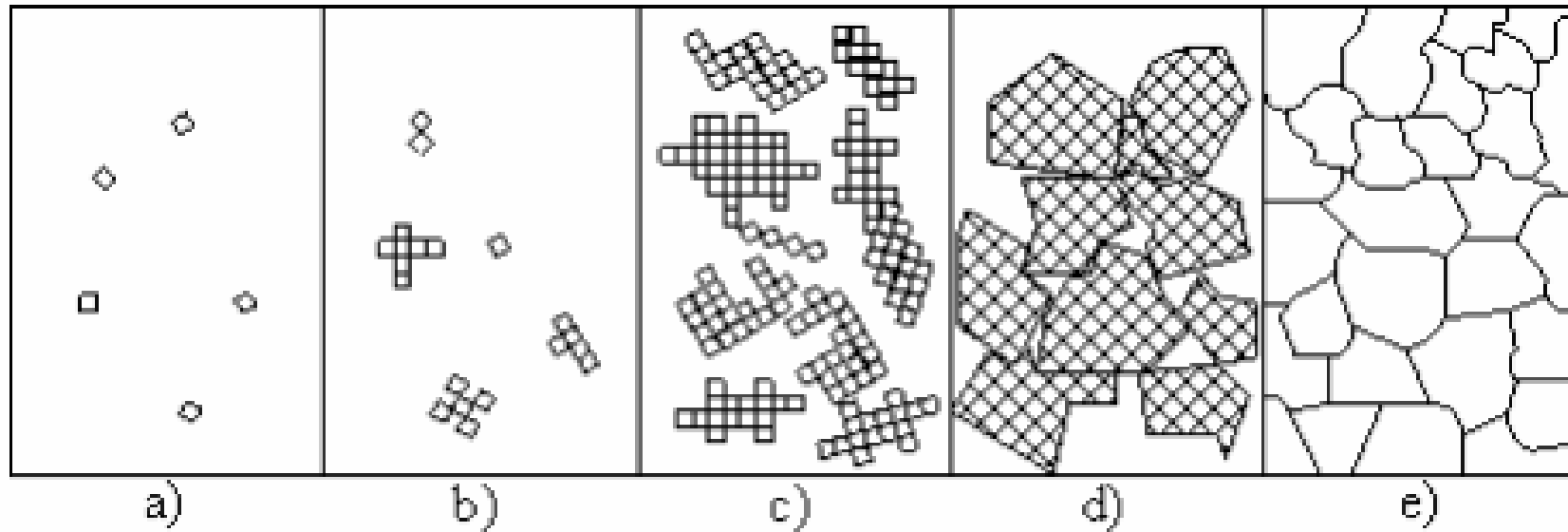
- 1 Mértéke
 K_s [mm/s]



A polikrisztallin kristályosodás módjai

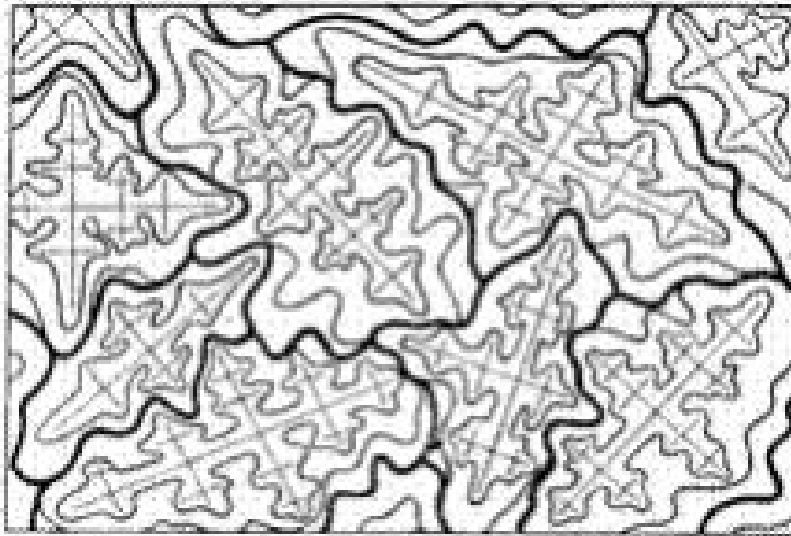
- poliéderez, szemcsés
- dendrites
 - rendezetlen dendrites
 - oszlopos, sugaras dendrites
- szferolitos
 - a gömbgrafitos öntöttvas, mint
gyakorlati példa

A poliédres, szemcsés kristályosodás

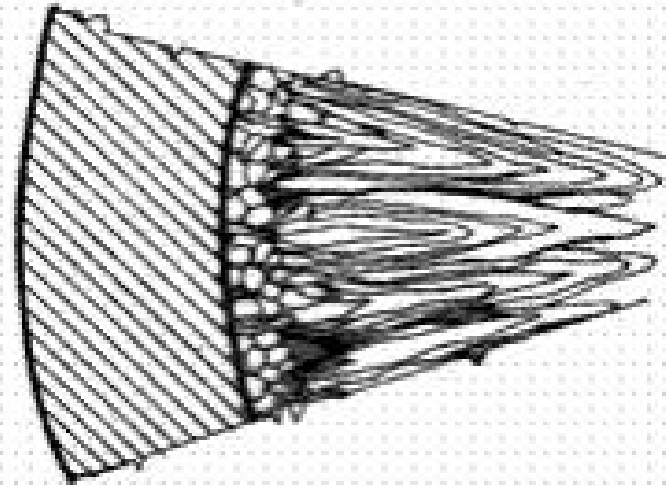


A dendrites kristályosodás

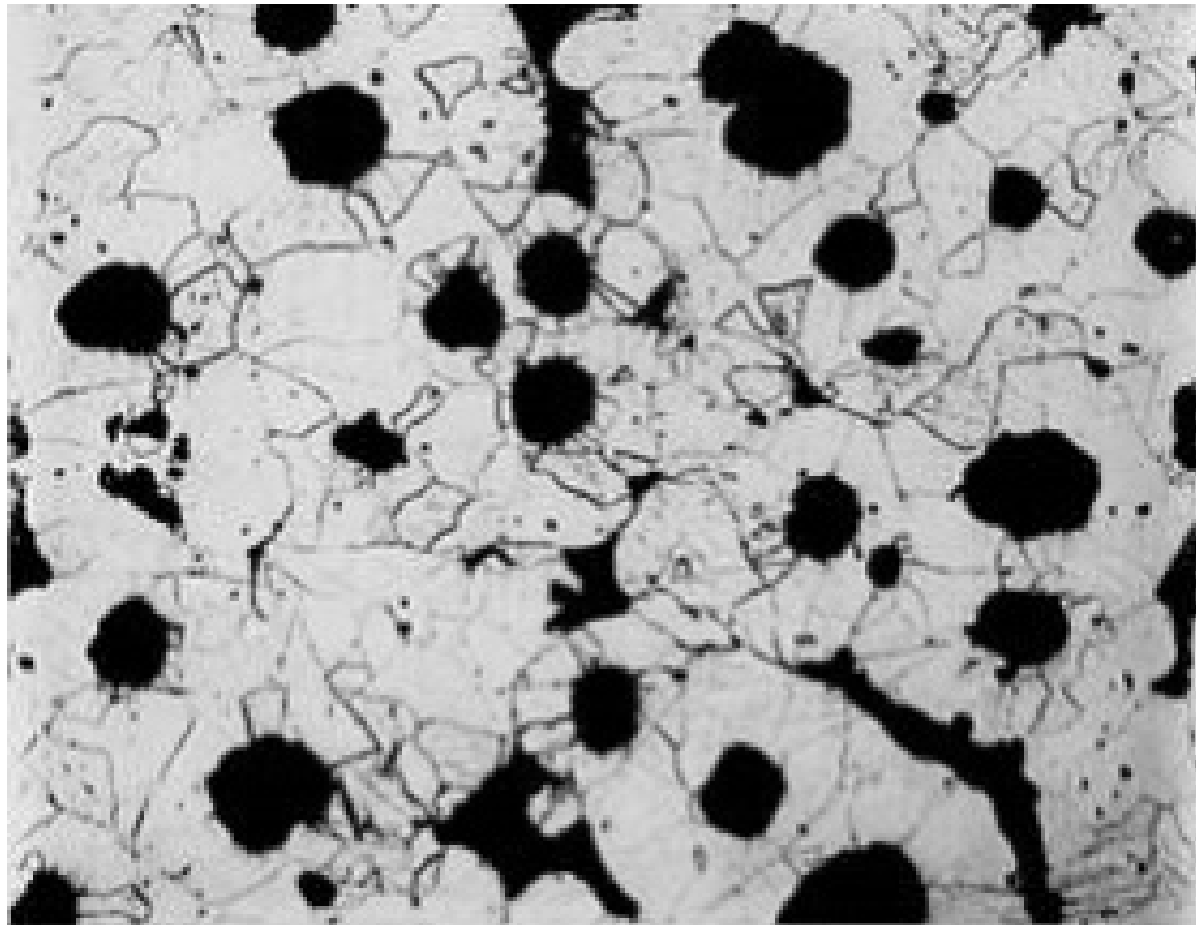
rendezetlen dendrites



oszlopos dendrites



A szferolitos kristályosodás a gömbgrafitos öntöttvas kristályosodása



A kristályos szerkezet módosítása

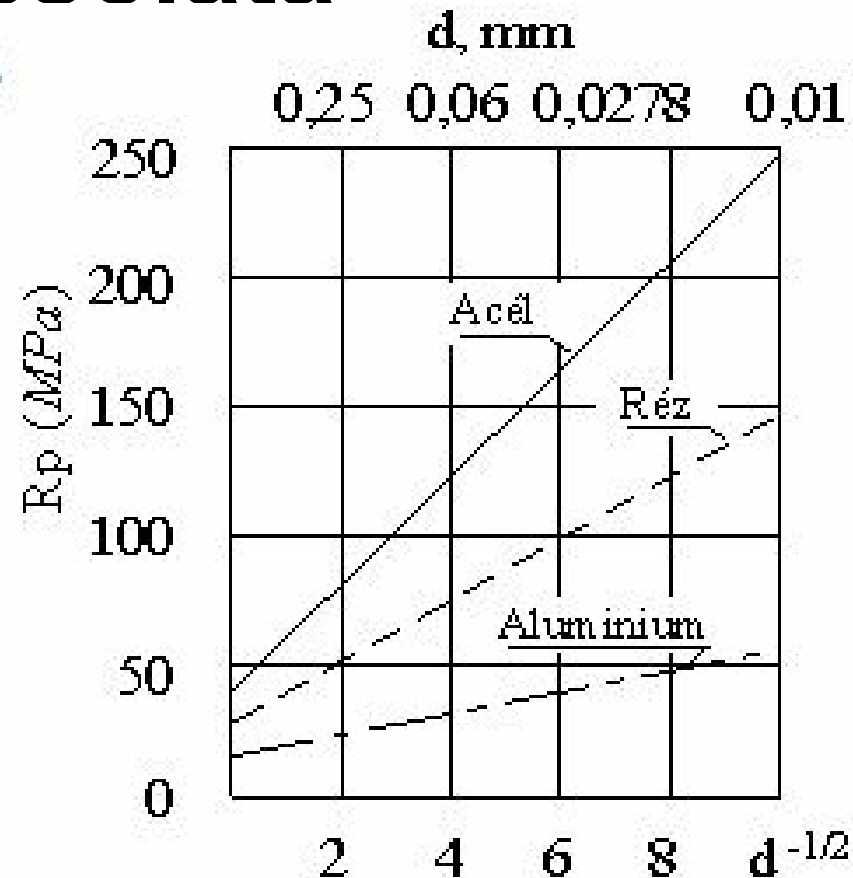
alapvető a kristályosodási képesség és a kristályosodási sebesség viszonya

- 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

