

Az anyagok atomos szerkezete, rendezettsége, kötése és a reális kristályok

Az anyagok atomos szerkezete

Az anyagok **atomok**ból épülnek fel, ezek az atomok pedig rendkívül kicsi részecskék. Az atom a legkisebb, kémiai módszerekkel tovább már nem bontható része az anyagoknak. Az atomok atommagból és elektronfelhőből épülnek fel. Jelölésük vegyjellel történik. Az atomokat felépítő protonokat, neutronokat, elektronokat elemi részecskéknek nevezzük. Nagyon fontos, hogy a protonok és az elektronok száma mindig egyenlő az atomokban, tehát kiegyenlítik egymást, így az atomok elektromosan semlegesek. Az atomnak azt a térrészét, ahol az elektronok 90%-os valószínűséggel mozognak, **atompályának** nevezzük. Az atomban lévő elektronok és atompályák tulajdonságait kvantumszámokkal jellemezzük. Az azonos főkvantumszámú pályák héjat alkotnak. Egy **elektronhéj**on belül, az azonos mellékkvantumszámú pályákon lévő elektronok alhéjat hoznak létre. A héjakra vonatkozik a Pauli-elv és a Hund-szabály, melyek szerint egy atomon belül nem lehet két olyan elektron, amelyeknek mind a négy kvantumszáma megegyezik (Pauli-elv) és egy alhéjon adott számú elektron úgy helyezkedik el, hogy közülük minél több legyen párosítatlan (Hund-szabály). Az **atommag** protonokból és neutronokból épül fel és az atom középpontjában helyezkedik el. Az atommag töltése pozitív, mert a protonok pozitív töltésűek, a neutronok pedig semleges töltéssel rendelkeznek. Az atommag tényleges tömege helyett, a relatív atomtömeget használjuk, ami azt jelenti, hogy az atom tömege hányszor nagyobb, mint a 12-es tömegszámú szénizotóp tömegének egy-tizenketted része. Az atommag felfedezéséhez egy fontos kísérlet fűződik: Rutherford alfa részecskékkal (melyek radioaktív anyagból származtak) bombázott egy vékony aranyfűst lemezt és azt tapasztalta, hogy az alfa részecskék többsége irányváltztatás nélkül továbbhaladt a lemezen csak néhány részecske verődött vissza a lemezről. Azok a részecskék melyek továbbhaladtak felvillantak a felfogó ernyőn, így fedezte fel az atommagot Rutherford. Az atommagot **elektronfelhő** veszi körül, melyben negatív töltésű elektronok nagy sebességgel mozognak. Az elektronoknak lehet mozgási és potenciális energiájuk is. A mozgási energia függ a hőmérséklettől, a helyzeti energia pedig függ az anyagi minőségtől. Az energia, ami ahhoz szükséges, hogy az elektronok a fém rácsszerkezetéből kilépjenek a vákuumba, a kilépési munka. A protonokat és a neutronokat összefoglaló néven **nukleonoknak** nevezzük és magerők tartják őket össze. A magerők szétbontásához nagyon nagy energiára van szükség, mert az atommagoknak nagy a stabilitása. A proton és a neutron egységnyi tömegűnek vehető, ezzel szemben az elektron

tömege elhanyagolható. A protonok száma egyenlő a **rendszámmal**, amit a vegyjel bal alsó sarkába szokás írni. A protonok és a neutronok számának az összege a **tömegszám**, amit a vegyjel bal felső sarkába írunk. Az azonos rendszámú, de eltérő tömegszámú atomok az **izotópok**. Az anyagmennyiség mértékegysége a **mol**, 1 mol annak a rendszernek az anyagmennyisége, amely annyi részecskét tartalmaz, mint ahány atom van 12 gramm 12-es tömegszámú szénben. Bármely elem relatív atomtömegnyi grammjában $6 \cdot 10^{23}$ darab atom van (ez az Avogadro-állandó). Az 1 mol anyagmennyiségű anyag tömege a **moláris tömeg**, melynek a jele M ($M = m/n$, mértékegysége: g/mol).

Az anyagok atomos rendezettsége

Az atomos rendezettség lehet: gáz, folyékony, szilárd halmazállapot, illetve amorf szilárd és kristályos szilárd anyagok. A **gázok** jellegzetessége az, hogy teljesen kitöltik a rendelkezésükre álló teret, ezért nincsen állandó alakjuk és térfogatuk. Minél nagyobb teret töltenek be, annál távolabb helyezkednek el egymástól a gázmolekulák, tehát a gázmolekulák között nincs számottevő kölcsönhatás. Jellemző rájuk a statisztikus rendezetlenség, mely azt jelenti, hogy a részecskék állandó, rendezetlen mozgásban vannak (ezt nevezzük kaotikus mozgásnak), és gyakran ütköznek egymással illetve az edény falával. Ütközéskor a molekulák mindig visszapattannak, és hőmérséklet emelésével a molekulák sebessége nő, hűtéskor pedig a molekulák mozgása lelassul és el lehet érni egy olyan hőmérsékleti értéket, amikor a gáz cseppfolyósodni fog. A molekulák között gyenge, másodlagos kötőerők vannak, ezért a gázok összenyomhatók. Ilyenkor szintén csökken a molekulák mozgástere, és a gáz cseppfolyóssá válhat. A gázok összenyomhatósága az általános gáztörvényből számítható: $pV = RT$ (p a nyomás, V a fajtérfogat, R a gázállandó, T az abszolút hőmérséklet). A gázok összenyomhatósága sok esetben elhanyagolható, ha a sűrűségváltozás viszonylag kicsi. A gázok sűrűsége az izotermikus állapotváltozás esetén pedig a nyomással arányos. Továbbá a gázokra jellemző még Avogadro törvénye, miszerint az azonos nyomású és hőmérsékletű gázok egyenlő térfogatában azonos számú molekula van, az anyagi minőségtől függetlenül. Tehát az azonos állapotú gázok térfogatának és anyagmennyiségének a hányadosa állandó, ezt nevezzük moláris térfogatnak. A moláris térfogat pedig megadja 1 mol gáz térfogatát (pl. szobahőmérsékletű gáz moláris térfogata $24,0 \text{ dm}^3/\text{mol}$, $0,1 \text{ MPa}$ nyomáson).

A **folyadékok**ban a részecskék sokkal közelebb helyezkednek el egymáshoz, mint a gázokban, tehát már beszélhetünk rövidtávú atomos rendezettségről. Fontos a részecskék potenciális energiája és a kinetikus energia is jelentős, ezért a részecskék könnyedén

mozognak, de rendezettség hosszútávon nem tud kialakulni. Az alakjuk nem állandó (nem alaktartóak), de a térfogatuk meghatározott, és emiatt gyakorlatilag összenyomhatatlanok. A folyadék molekulák is állandóan mozgásban vannak, akárcsak a gázok molekulái, azonban a folyadékok molekuláira a forgó- és rezgőmozgások jellemzőek, de haladó mozgásra is képesek. A molekulák egymáson gördülve mozognak és egy részük a folyadék felületéről kilép, és gáz állapotúvá válik, ezt nevezzük párolgásnak. Jellemző rájuk a diffúzió folyamata (keveredés), a mozgásuk pedig a súrlódás miatt korlátozottabb, mint a gáz molekulák mozgása. Jellemző a folyadékokra a folyadéksúrlódás, ami azt jelenti, hogy nyugvó súrlódás nincsen bennük, de egyenesen áramló folyadék bizonyos rétegei között sebességkülönbség alakul ki, és ekkor lép fel súrlódás. A folyadéksúrlódást Newton fedezte fel, szerinte olyan áramlásban, melyben az áramvonalak párhuzamos egyenesek, és a sebesség más és más az áramvonalakra merőleges sík pontjaiban, az áramvonalakkal párhuzamos síkokban csúsztató feszültség keletkezik (tau). Ez arányos a sebességnek az áramvonalra, és a vizsgált síkra merőlegesen vett differenciálhányadosával. Jellemzi a folyadékokat még a viszkozitási tényező, amely értékét nyomásméréssel lehet meghatározni és függ a hőmérséklettől. A technikai gyakorlatban előfordul még a turbulens áramlás, melynél a viszkozitáson kívül egy további súrlódó feszültséggel is kell számolni. Ezt a feszültséget ilyen áramlásban a molekulákhoz képest nagy folyadéktömegek impulzuscseréje okozza. Beszélhetünk még a folyadékok esetében felületi feszültségről is, ami azt jelenti, hogy a folyadékok felszíne úgy viselkedik, mint egy rugalmas hártya. Ennek oka, hogy a felszínen lévő molekulákat a többi molekula lefelé vonzza, így a felszín minél kisebb területre akar összehúzódní. Görbült felszín két oldalán a felületi feszültség nyomáskülönbséget eredményez. A folyadékokra jellemző még a kapilláris felemelkedés és lesüllyedés. A vékony csövekben fedezhető fel ez a jelenség, mert a felületi feszültség a folyadékfelszínt megemeli. Beszélhetünk még folyadékkristályos anyagokról is, ezek átmenetet képeznek a folyadékok és a kristályos anyagok között. Rendezett csoportjai a kristályos testekhez hasonlóak, de ezek a csoportok könnyen elmozdulnak egymáshoz képest, ezért a halmaz folyékony. Jellemző rájuk, hogy elektromos vagy mágneses mező hatására a csoportjai rendeződnek és ez megváltoztatja az anyag fénytani tulajdonságait. Az erőtér kikapcsolása után a csoportok rendezetlensége visszaáll. Ilyen anyagot használnak pl. elektromos órákban, számológépekben, kijelzőként műszereken.

A szilárd halmazállapotú anyagokban a legjelentősebb a potenciális energia, mert az őket felépítő atomok, ionok, molekulák között lévő vonzerők sokkal nagyobbak, mint a folyékony állapotú részecskék közötti vonzerők. Az alakjuk és térfogatuk is állandó. A molekulák

rezgési középpontok körüli rezgőmozgást végeznek, ezért itt jelenik meg a kinetikus energia. Ha a részecskék elhelyezkedése hosszútávon rendezett, akkor kristályos szilárd anyagról beszélünk, ha rendezetlen vagy rövidtávon rendezett, akkor amorf szilárd anyagról. A kristályos szilárd anyagokban a részecskék a tér minden irányában szabályos rendben helyezkednek el, tehát térrácsot alkotnak. A kristályokat síklapok határolják és a részecskék egyensúlyi helyzetük körüli rezgőmozgást végeznek. Ha a rácspontokban lévő rezgések kitérése olyan nagy lesz, hogy a részecskék kiszakadnak a rácsból, akkor a szilárd anyag megolvad. A kristályos anyagok az olvadáspontjukon olvadnak meg. Az amorf szilárd anyagokra jellemző, hogy nincs meghatározott olvadáspontjuk. Ha a hőmérséklet emelkedik, először meglágyulnak, majd fokozatosan mennek át folyékony halmazállapotba.

Az anyagok atomos kötése

A kötések lehetnek elsőrendű, erős (kovalens, ionos, fémek) kötések és másodrendű, gyenge (Van der Waals) kötések. A **kovalens kötés** a legerősebb elsőrendű kötés, térben lokalizált elektronpárok hozták létre és elektronmegosztással alakul ki (elektron két atomhoz kötődik), ezért a molekulák képződése energia-felszabadulással jár. Kovalens kötés kialakításakor a vegyértékelektronok az atompályákról molekulapályákra lépnek. A molekulapálya az a térrész, ahol az elektronok megtalálási valószínűsége 90%, és egy molekulapályán legfeljebb 2 elektron lehet. Az elektronok az atomok között ugyanakkora távolságban helyezkednek el, és kevert pályán mozognak. A kovalens kötésen belül megkülönböztetünk σ (szigma) illetve π (pi) kötések. Azt a kötést, amelyben a kötő elektronpár elektronsűrűsége a kötés tengelye mentén a legnagyobb, szigma-kötésnek nevezzük. Ez a kötés tengelyszimmetrikus. Az olyan kötést, amelyben a kötő elektronpár elektronsűrűsége merőlegesen a legnagyobb a kötés tengelyére, pi-kötésnek nevezzük. Ez a kötés pedig síkszimmetrikus. Az egyszeres kötés mindig szigma-kötés. Nincs szabad elektron a kovalens kötésben, ezért elektromos szigetelőanyagokat készítenek ilyen kötésű anyagokból. Főbb jellemzői a kovalens kötésnek a kötési energia, kötéshossz és kötéstávolság. A kötési energia egy mol molekulában, két atom közötti kötés felszakításához szükséges. A kötést kialakító atomok magjai közötti távolság a kötéshossz. A kapcsolódó atomok kötése által bezárt szög a kötésszög. A kovalens kötésnek van polaritása is, lehet poláris vagy apoláris. A molekula polaritását a kötés polaritása és a molekula alakja együttesen határozza meg. Az azonos elektronegativitású atomok apoláris, az eltérő elektronegativitásúak poláris kovalens kötést alkotnak. Tehát ha a kötő és nem kötő elektronpárok térbeli elhelyezkedése szimmetrikus, a kötés és a molekula is apoláris (pl. Cl_2 , O_2 , H_2). Ha pedig a kötő és nem kötő elektronpárok térbeli elhelyezkedése nem szimmetrikus,

akkor a kötés és a molekula is poláris (pl. HCl). A datív kötés a kovalens kötésnek az az esete, amikor egy atom adja a kötő elektront.

Az ionos kötés gyengébb, mint a kovalens kötés és elektronátadással jön létre, tehát az ellentétes töltésű ionok közötti elektrosztatikus vonzás az ionkötés. Az egyik atom vegyértékelektronja a másik atom elektronjaihoz lép át, és így az elektront leadó atom pozitív töltésű ionná, az elektront felvevő atom pedig negatív töltésű ionná alakul át. A pozitív töltésű ion a kation, a negatív töltésű ion pedig az anion. Az ionokban a külső héjakon nemesgáz-konfiguráció jön létre (kivéve a hidrogénnél). Az ionokat pedig a Coulomb erők tartják össze. A kötés energiája az atomok elektronegativitásával és pozitivitásával arányos. Az ionok kialakulására jellemző az ionizációs energia, azt az energiát nevezzük így, amely 1 mol szabad alapállapotú atom legkönnyebben leszakítható elektronjának eltávolításához szükséges. Azt az energiát pedig, amely akkor szabadul fel vagy nyelődik el, ha 1 mol alapállapotú szabad atomból egyszeresen negatív töltésű ion képződik, elektronaffinitásnak nevezzük. Az ionos kötés erősségét az ion-rácsenergiával jellemezhetjük. A rácsenergia 1 mol kristályos anyag gázhalmazállapotú ionokra bontásához szükséges energia. Megkülönböztetünk ionvegyületeket és ionkristályokat. Az ionvegyületek szilárd állapotban ionrácsot alkotnak, oldatuk és olvadékuk az áramot jól vezeti. Az ionkristályokban a rácspontokat ionok foglalják el, és hőmérséklet emelésével a vezetőképesség növekszik. A kialakuló vegyület típusa az anion és a kation töltésétől és vegyértékétől függ.

A fémes kötés a kovalens kötéshez hasonlóan erős, elsőrendű kötés. A fémionok rácspontokban helyezkednek el, és a vegyértékelektronok az elektronfelhőben szabadon mozognak, ezért jól vezetik a hőt és az áramot. A fématomok kevés vegyértékelektronja az atommagtól viszonylag távol van, és lazán kötött. Ha sok fématom kerül egymáshoz közel, akkor a kis elektronegativitású fématomok leadják a vegyértékelektronjaikat. Így pozitív töltésű fém-atomtörzsek és delokalizált elektronok jönnek létre. A pozitív töltésű fém-atomtörzsek és a delokalizált elektronok közötti vonzást nevezzük fémes kötésnek. A fémes kötéssel összekapcsolódott fém-atomtörzsek halmaza a fémrács. A fémek jól vezetnek az elektromos áramot illetve nagy szilárdság és jó alakíthatóság jellemzi a legtöbbjüket. A fémek elektromos vezetése a hőmérséklet emelésével csökken. Ennek az oka, hogy magasabb hőmérsékleten a fémrács rácspontjaiban lévő részecskék rezgőmozgásának tágassága megnő, ami zavarja az elektronok szabad mozgását. A delokalizált elektronok elmozdulásával magyarázható a jó hővezető képessége a fémeknek. Többségük a fémes kötés és a rácspontokban lévő azonos méretű fém-atomtörzsek miatt jól megmunkálható, mert az egyes

tömegpontok erő hatására elcsúsztathatók. A fém-atomtörzsek az átrendeződés után ugyanolyan környezetbe kerülnek, mint amilyenben eredetileg voltak. A **fémrács** rácspontjaiban pozitív töltésű fém-atomtörzsek vannak, amelyeket a hozzájuk tartozó delokalizált elektronok kötnek össze. Ezek az elektronok a rácspontok között pedig szabadon mozognak. Mivel a fémes kötés erős, ezért szobahőmérsékleten általában szilárdak (kivéve a higany). A fémrácsokat 3 fő típusba lehet sorolni: 1) lapon középpontos kockarács, ezeknél a részecskék a kocka csúcaiban és a lapok középpontjában van (pl. arany, ezüst, réz). 2) térben középpontos kockarács, ezeknél a részecskék a kocka csúcaiban és a középpontjában helyezkednek el (pl. vas, króm, kálium). 3) hatszöges rács, ezek olyan szabályos hatszögalapú hasábokból épülnek fel, amelyeknek az alap- és fedőlapján 7-7, a hasáb közepén pedig 3 részecske van (pl. cink, magnézium, nikkel). A fémek megmunkálhatóságának az oka is a fémes rács. A legjobban megmunkálható a lapon középpontos kockarácsot alkotó fémek (pl. alumínium). A térben középpontos kockarácsú fémek egy része lágy (pl. nátrium), másik része pedig nagyon kemény (pl. króm). A hatszöges rácsszerkezetű fémeket pedig nehéz megmunkálni. A fémek sűrűsége nagyon változó, általában annak nagyobb a sűrűsége, amelynek nagyobb az atomtömege. Sűrűség alapján beszélhetünk könnyűfémekről (sűrűség $< 5 \text{ g/cm}^3$, pl. alumínium) és nehézfémekről (sűrűség $> 5 \text{ g/cm}^3$, pl. vas). A fémek olvadáspontja és keménysége a fémes kötés erősségétől függ. Minél erősebb a fémes kötés, annál keményebb a fém és annál magasabb az olvadáspont.

A **másodrendű kötések (Van der Waals kölcsönhatások)** gyenge kölcsönhatásokat jelentenek a molekulák között. Két fő típusa lehet: az időleges gyenge és az állandósult gyenge kölcsönhatások. Az időleges gyenge kölcsönhatáshoz tartozik a diszperziós kölcsönhatás, ez a leggyengébb a másodrendű kötések közül. Létrejöttének oka, hogy az apoláris (szimmetrikus) molekulák elektronjainak az atommag körüli rezgése, gyenge dipólusságot eredményez, így gyenge elektrosztatikus vonzás (aszimmetria) jön létre az apoláris molekulák között. A nemesgázok atomjai (pl. hélium, neon, argon) és a nemfémes elemek molekulái (pl. oxigén, jód, kén) között jön létre diszperziós kölcsönhatás. A kötés erőssége függ a molekulamérettől is, minél több az elektron, annál nagyobb a polarizálható elektronfelhő, így annál erősebb lesz a kölcsönhatás. Az állandósult gyenge kölcsönhatások közé tartozik az indukciós, orientációs kölcsönhatás és a hidrogénhíd kötés. Az indukciós kölcsönhatás poláris és apoláris molekulák között jön létre, az orientációs kölcsönhatás a poláris molekulák között alakulhat ki, az egyik molekula pozitív pólusa vonzza a másik molekula negatív pólusát. Ezután láncokká majd halmazokká rendeződnek, de energiaközlés

hatására ezek a láncok felbomlanak. A hidrogénhid kötés olyan molekulák között jön létre, melyekben a hidrogénatom egy nagy elektronegativitású, nem kötő elektronpárt is tartalmazó atomhoz (oxigén, fluor, nitrogén) kapcsolódik. Ez a kölcsönhatás a datív kötéshez hasonlít. A másodrendű kötések között ez a kötés a legerősebb. Annak ellenére, hogy másodrendű kötésekről van szó, a gyakorlati jelentőségük ugyanolyan fontos, mint az elsőrendű kötéseknek, ugyanis az élet számos területén megfigyelhetők, pl. vízmolekulákat tartja össze és a fehérjék térszerkezetének stabilizálásában vesz részt a hidrogénhid kötés, továbbá a másodlagos kötések felelnek az abszorpcióért, felületen fellépő nedvesítésért és egyes ragasztókban is megtalálhatóak ezek a kötések.

Reális kristályok

A valóságban a reális kristályok kisebb-nagyobb rácshibákat tartalmaznak. A rácshibákat méretük, kiterjedésük, jellegük és termodinamikai stabilitásuk szerint osztályozhatjuk. A rácshiba jellege, kiterjedése befolyásolja a kristály tulajdonságait, termodinamikai jellege pedig meghatározza a rácshiba viselkedését, ha a fém energiatartalmát változtatjuk. A fémre T hőmérsékleten jellemző, a szabadentalpiának $G=H-TS$ kifejezéssel jellemezhető értéke, ahol H a rendszer entalpiája, S pedig entrópiája. A hiba megjelenése, $\Delta G=\Delta H-T\Delta S$ változást hoz létre a szabadentalpiában. A változás a szabadentalpia növekedése vagy csökkenése lehet. Nagyon fontos, hogy nem az entalpia (energia), hanem a szabadentalpia az, amelynek minimális értéke az egyensúlyt meghatározza. A rácshibák lehetnek: pontszerűek, vonalszerűek illetve sík- és térbeli kiterjedésűek.

Pontszerű rácshibák: Az atomok a valóságban nem nyugalmi helyzetben vannak, hanem egyensúlyi helyzetük körül, rezgő mozgást végeznek. Az atomok rezgő mozgása azzal az eredménnyel járhat, hogy a rácsot alkotó atomok némelyike kiszakad a helyéről és ott hiány, vakancia (Schottky-féle hiba) jön létre. A helyéről elszakadt atom a rácsban olyan helyre ékelődik be, ahol eredetileg nem volt atom, az ilyen fajta beékelődést intersztíciónak (Fraenkel-féle hiba) nevezzük. Az interszticiós helyzetű atomoknak a beékelődés helyén nincs elég nagy szabad terük, ezért a szomszédos atomokat a helyükről kisebb mértékben eltávolítják, majd a kristály határán rácspontba kerülnek, növelve ezzel a kristály fajtérfogatóát. A vakanciák és az interszticiós helyzetű atomok száma tehát nem egyenlő. Pontszerű rácshiba keletkezése növeli a fém entalpiáját és entrópiáját is. A rácshibák ezen két típusának, főleg a vakanciának, a diffúziós folyamatokban van nagy jelentőségük. Szilárd állapotban, a fémes rácsban az atomok mozgását a vakanciák jelenléte teszi lehetővé. Bármilyen módon energiát

közlünk a fémme (melegítjük, alakítjuk), benne a vakanciák és intersticiós atomok száma nő. Fontos, hogy az alakított állapotú fém fajterfogata nagyobb, mint a lágyított állapotúé. Ezen kéttípusú hiba és a hőmérséklet kapcsolatából következik, hogy nagyobb hőmérsékleten a stabilis pontszerű hibák száma hűtés során fokozatosan csökken. Gyors hűtéssel azonban a hibák egy része befagyasztható, mert az atomok mozgásához idő kell.

Vonalszerű rácshibák: Ezek a hibák a fémek alakváltozó képességéhez köthetőek. Kristályos szerkezetben az atomok között ható erők miatt nem lehetséges a fémek nagymértékű alakváltozása, mert a kristályos szerkezetet fenntartó erőket az alakítás nem szüntetheti meg, azok az alakváltozás után is fenntartják a kristályos szerkezetet. A fémek rácsaiban azonos töltésű részecskék követik egymást, ezért a fémek legjellegzetesebb alakváltozása a transzláció, melynek lényege, hogy a kristály egy része a másikkhoz képest csúsztatófeszültség hatására elmozdul. A transzlációs sík az atomokkal legerősebben terhelt sík, és a transzláció iránya mindig az az irány, amelyben az atomok legsűrűbben helyezkednek el. Kismértékű elmozdulásnál az alakváltozás és a feszültség közötti kapcsolat lineáris [$\tau = G \cdot (u/d)$, ahol τ a működő feszültség, G a csúsztató rugalmassági modulus, d a két sík távolsága egymástól, u a felső sornak az elmozdulása az egyensúlyi helyzettől]. A csúsztatófeszültségnek a minimális értéke, amely a csúszást megindítja, a kritikus csúsztatófeszültség, és ez körülbelül a G csúsztató rugalmassági modulus hatoda. A valóságban egyes fémek kristályain mért kritikus csúsztatófeszültség a G -nek tízezred része körül mozog, pl. alumínium esetében $G = 2700 \text{ kp/mm}^2$, $\tau_{\text{kritikus}} = 0,1 \text{ kp/mm}^2$. A kritikus csúsztatófeszültségnek számításal meghatározott és kísérletileg mért értéke között 3-5 nagyságrendbeli különbség adódhat, ami csak úgy magyarázható, ha feltételezzük, hogy a csúszás nem ment egyidejűleg végbe a sík minden atomjánál, hanem az alakváltozás a síknak csak egy részére terjedt ki, és fokozatosan ment végbe az egész síkon. Ez pedig azt is jelenti, hogy a transzlációs sík egyik részén az alakváltozás már bekövetkezett, a másik részre azonban a deformáció még nem terjedt ki. Mind azon a részen, ahol a csúszás még nem történt meg, mind ott, ahol már megtörtént, a rács ép, csak a választó vonal mentén léphet fel a rácsban zavar. A csúszás síkjá mentén, a kristály alsó részéhez képest a felső része egy atomtávolságnyi mértékben fog elmozdulni. A vonalnak, a működő erő és a csúszás irányára merőleges érintője mentén végbemenő mozgást éldiszlokációnak, míg a párhuzamon érintője mentén végbemenő mozgást csavardiszlokációnak nevezzük. A diszlokációt a Burgers-kör és vektor jellemzi. Burgers-kör jön létre, ha a rács valamelyik pontjából kiindulva, rácspontokon haladva, körüljárjuk a rács egy viszonylag kis részét. Ha az egymással párhuzamos irányokban egyforma számú

rácsparamétert teszünk meg, és a kiinduló helyzetbe érkezünk, akkor a körüljárt rész kristálytanilag ép. Ha a kiinduló és a végső pont nem esik egybe, akkor a körüljárt részben diszlokáció helyezkedik el. Ebben az esetben a kör zárttá tételéhez, egy rácsparaméter abszolút értékű vektorra van szükség. Ez a Burgers-vektor, jele: b . Ha a Burgers-kör síkban helyezkedik el, akkor a vektor is ebben a síkban fekszik, és a körülzárt részben éldiszlokáció van, amely merőleges a Burgers-vektorra. Csavardiszlokáció esetén a Burgers-kör csavarvonalszerűen emelkedik, a Burgers-vektor pedig párhuzamos a diszlokációval. Egy diszlokációs vonal mentén a Burgers-vektor azonos. Az alábbi **5 következtetés** vonható le az elmondottakból: **1)** A diszlokáció a kristály elcsúszott és el nem csúszott részének a határa, a diszlokáció vonalának mindkét oldalán a rácsot tökéletesnek tekintjük. Az elcsúszott rész a kristályban helyezkedik el, vagy kiér a kristály határáig. Ezért a diszlokáció vonala vagy a kristályban záródó görbe, vagy a kristály felületén kezdődik és végződik. **2)** A diszlokációt a Burgers-vektor jellemzi. A Burgers-vektor irányát pedig Miller-indexekkel adjuk meg. **3)** A Burgers-vektor az éldiszlokáció vonalára merőleges, csavardiszlokációnál annak tengelyével párhuzamos. **4)** Az éldiszlokáció egy félsík beékelődését vagy hiányát jelenti. Ebből következik, hogy ellentétes jellegű éldiszlokációk ellenkező irányú mozgása ugyanolyan alakváltozást eredményez. Csavardiszlokációkat jobb- és balsodrásúként lehet forgásirányuk szerint megkülönböztetni. Ezekre is érvényes, hogy ellentétes jellegűek, ellenkező irányú mozgása ugyanolyan alakváltozást eredményez. **5)** Ugyanabban a síkban mozgó ellentétes előjelű éldiszlokációk, ellentétes sodrású csavardiszlokációk megsemmisítik egymást, ha találkoznak. A diszlokációk létét, egy lassú növekedési folyamat során keletkezett tűszerű kristályok (sörtekristályok) nagy csúsztatófeszültsége bizonyítja. A sörtekristályok a kristály tengelyeként is szereplő csavardiszlokáció növekedésével fejlődnek. Kondenzátorok fegyverzetei között hónapok alatt jönnek létre ilyen kristályok. Manapság már gyártani is lehet ilyen kristályokat.

Felületszerű rácshibák: Ezek a rácshibák kialakulhatnak kristályfelületen (makro-felület), szemcsehatáron, fázishatáron (inkoherens, koherens, szemi-koherens), ikersíkon és rétegződési hibaként is előfordulhatnak. A kristályfelületen kialakuló rácshiba lényege, hogy a kristályfelületen lévő atomok nagyobb energiájú helyzetben vannak, mint a kristály belsejében lévők, mert nem alakul ki minden irányban atomi kötés. A felület energiaszintje csökken, ha a felülethez új atomok kapcsolódnak, így oxidréteg alakul ki, majd kémiai reakciók fognak lejátszódni. Rétegződési hibáról (ikerhibáról) akkor beszélünk, ha a síkok sorrendjében, bármilyen hatásra, az ideálistól eltérés mutatkozik, és ez a rács entalpiáját

megnöveli. Így magában a rácsban rétegződési hiba (ikerhiba) keletkezik. A kristály egy részének ikerhelyezete pedig azt jelenti, hogy ez a rész tükörszimmetrikus elrendeződést vesz fel a másik részhez képest, ezt nevezzük ikerkristálynak. Felületen középpontos kockarácsban az ikerkristály ABCABCBAACBA sémával jellemezhető. Az ikersík (a sémában C) a kristály mindkét részéhez egyaránt tartozik, koherens határt képez közöttük. Hiba keletkezik a felületen középpontos kockarácsban, ha az (111) síkok között egy többlet félsík vagy annak hiánya mutatkozik. A hiányzó félsík egyrétegű ikerhiba is egyben, míg a többlet félsík kétrétegű ikerhiba. Jellemzője ennek a két hibának, hogy nem csúszás hozza létre, és a csúszás nem tudja a rács szimmetriáját helyreállítani. Ezeket a hibákat csak hő hatására az atomok diffúziós mozgása szüntetheti meg. Ezeket a hibákat Frank-féle hibáknak nevezik, a többlet-félsíkkal rendelkezőt pozitív (külső) Frank-féle hibának, a hiányt negatív (belső) Frank-féle hibának hívják. Frank-féle hibának tekinthető, ha a felületen középpontos kockarácsú anyagban a vakanciák torlódása miatt az (111) síkok közül egynek vagy többnek a részlete hiányzik. Ekkor a szomszédos síkok összeesnek, és egy diszlokáció-gyűrű jön létre, amely e síkok menti csúszást akadályozza. A kristályoknak egy-egy kisszögű határral bezárt része a mozaikblokk. Ha az a szög, amelyet a mozaikblokkok kristálytani tengelyei egymással bezárnak 6° -nál kisebb, és azon határt alkotó atomok között vannak, amelyek mindkét kristályrészhez tartoznak, akkor a határ szemi-koherens. Ha a határon lévő atomok annak mindkét oldalán lévő kristályrészek rácsába beleillenek, akkor a határ koherens.

A fémek legjellemzőbb kémiai tulajdonsága, a korrózió

A korrózió a fémeknek és ötvözeteknek elektrokémiai folyamatok révén bekövetkező pusztulása, amely közönséges hőmérsékleten megy végbe, a fémnek nem fémes elemmel alkotott vegyületének képződésével jár és nem szándékos folyamat. Megjelenési alakjai a következők lehetnek: a) egyenletes korrózió: a fémtárgy egész felületét egyenletesen támadja meg. A fémtárgy így hosszú idő alatt (több év) elvékonyodik, majd használhatatlanná válik. b) helyi korrózió: a fém felületének gödrös kimaródásaként akkor következik be, ha a korrózió folyamata valami okból, a fémtárgy felületének egyes pontjaira koncentrálódik. Ez a fajta korrózió néhány tized mm vastag fémlemezt pár óra alatt képes átlukasztani. c) kristályhatár menti korrózió: a helyi korrózióhoz hasonlóan ez is gyorsan megy végbe. Akkor alakul ki, ha a kristályok határán lévő anyag más szerkezetű, több rácshibát tartalmaz, mint a kristályok belsejében. Egyik fajtája a réteges korrózió, amikor a lemezekben a lemez felületével párhuzamos síkokban halad előre a korrózió, és ilyenkor a lemez rétestésztához hasonlóan lapokra válik szét. A másik fajtája az interkristallin feszültségi korrózió, amely

nagyon veszélyes folyamat, és a gyakorlatban gyakran előfordul, mivel a használatban lévő fémtárgyakat legtöbbször feszültség is terheli. d) általános és válogató korrózió: ez csak ötvözeteken fordul elő. Valamely ötvözet korróziója akkor nevezhető általánosnak, ha annak minden alkotórésze oldatba megy, mégpedig ugyanabban az arányban, amilyenben azokat az ötvözet is tartalmazza. Válogató korrózióról akkor beszélünk, ha az ötvözetnek csak az egyik alkotórésze megy oldatba, vagy ha ez az alkotórész nagyobb arányban oldódik, mint amilyenben az ötvözet tartalmazza.