

Φυσική

ΜΕΤΑΛΛΟΥΡΓΙΑ

Ενότητα 2: Κρυσταλλική Δομή των Μετάλλων

Γρηγόρης Ν. Χαϊδεμενόπουλος
Πολυτεχνική Σχολή
Μηχανολόγων Μηχανικών



Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Σκοποί ενότητας

- Να περιγράφετε τις σημαντικότερες κρυσταλλικές δομές των μετάλλων
- Να προσδιορίζετε τους κρυσταλλογραφικούς δείκτες διευθύνσεων και επιπέδων στο πλέγμα
- Να υπολογίζετε την πυκνότητα των μετάλλων καθώς και την πυκνότητα επιπέδων και διευθύνσεων

Περιεχόμενα ενότητας

1. Εισαγωγή
2. 1. Χαρακτηριστικά των άμορφων και κρυσταλλικών στερεών
2. 2. Βασικά στοιχεία κρυσταλλογραφίας
3. Η κρυσταλλική δομή των μετάλλων
4. Αλλοτροπία
5. Επιδράσεις της κρυσταλλικής δομής των μετάλλων

Ενότητα 2: Κρυσταλλική Δομή των Μετάλλων

Εισαγωγή (1)

Χαρακτηριστικά των άμορφων και κρυσταλλικών στερεών 2.1(1)

Θεωρώντας τις τρεις βασικές καταστάσεις της ύλης στερεά, υγρά και αέρια παρατηρούμε ότι τα αέρια στερούνται εντελώς κρυσταλλικής δομής λόγω των τυχαίων κινήσεων των ατόμων και των μορίων, που τα αποτελούν.

Υγρά, γυαλί: έλλειψη κρυσταλλικότητας (τάση για σχηματισμό μικρών ομάδων από άτομα, χωρίς περιοδικότητα). Τα στερεά αυτά ονομάζονται άμορφα

Τα άμορφα στερεά είναι ισότροπα δηλαδή έχουν τις ίδιες φυσικές και χημικές ιδιότητες σε όλες τις κατευθύνσεις

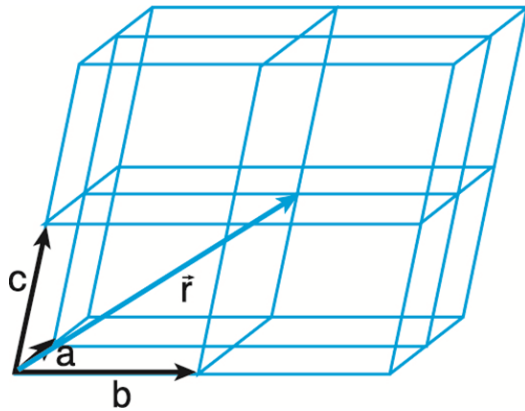
Χαρακτηριστικά των άμορφων και κρυσταλλικών στερεών 2.1(2)

Κρυσταλλικά στερεά: παρουσιάζουν *κατευθυντικότητα* ή *ανισοτροπία* σε ιδιότητες, όπως η θερμική και ηλεκτρική αγωγιμότητα, η θερμική διαστολή, οι ελαστικές και οπτικές σταθερές, κ.λ.π.

Όλα τα πραγματικά κρυσταλλικά στερεά έχουν *ατέλειες*, όπως κενές θέσεις ή οπές, ξένα άτομα σε θέσεις παρεμβολής μεταξύ των ατόμων του κρυστάλλου, ξένα άτομα, που αντικαθιστούν άτομα του κρυστάλλου στην κρυσταλλική δομή, καθώς και ολόκληρα στρώματα ή επίπεδα ατόμων εκτός θέσεως.

Βασικά στοιχεία κρυσταλλογραφίας

2.1(1)



Σχήμα 1: Τρισδιάστατο πλέγμα που αντιπροσωπεύει περιοδική διάταξη ατόμων

Κρυσταλλική δομή χαρακτηρίζεται από:

- Περιοδικότητα της διάταξης των ατόμων στο χώρο
- Επανάληψη του μοτίβου στις 3 διευθύνσεις
- Μοτίβο \rightarrow Μοναδιαία κυψελίδα
- Ανισοτροπία στους μονοκρυστάλλους

Κάθε σημείο του τρισδιάστατου πλέγματος μπορεί να οριστεί από το διάνυσμα θέσεως \vec{r} σύμφωνα με τη σχέση 1 όπου u, v, w είναι ακέραιοι αριθμοί, που αντιστοιχούν στις συντεταγμένες του σημείου

$$\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad \text{Σχέση 1}$$

Βασικά στοιχεία κρυσταλλογραφίας

2.1(2)

Οι τρεις κρυσταλλικοί άξονες αποτελούν τις ακμές ενός παραλληλεπίπεδου , το οποίο ονομάζεται μοναδιαία κυψελίδα

Εάν η διάταξη της κυψελίδας επαναληφθεί στις 3 διευθύνσεις δημιουργείται η κρυσταλλική δομή

Θεωρώντας όλους τους δυνατούς συνδυασμούς αξόνων σε σχέση με το μήκος και της μεταξύ τους γωνίες προκύπτουν 14 πλέγματα (Bravais)

Βασικά στοιχεία κρυσταλλογραφίας

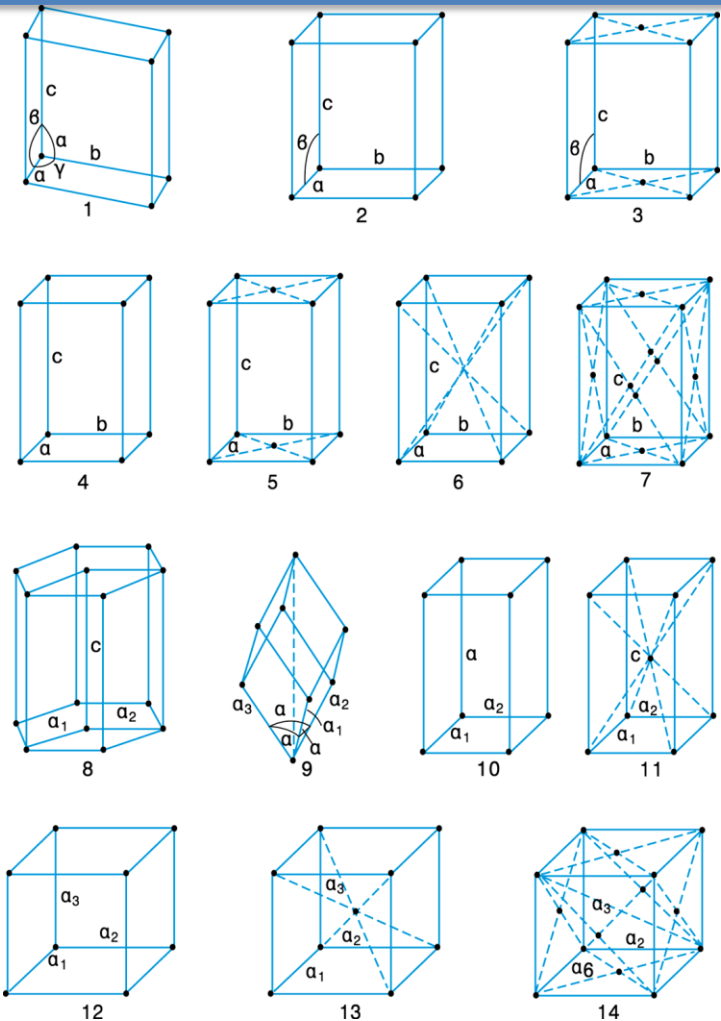
2.1(3)

Ένα σύστημα δεικτών χρησιμοποιείται για να περιγραφούν οι διαφορετικές κρυσταλλικές διευθύνσεις και κρυσταλλογραφικά επίπεδα στο χώρο.

Για την περιγραφή της διευθύνσεων μιας γραμμής που συνδέει την αρχή των αξόνων με το σημείο, που έχει συντεταγμένες u, v, w χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό $[uvw]$

Βασικά στοιχεία κρυσταλλογραφίας

2.1(4)



- (1) απλό τρικλινές
- (2) απλό μονοκλινές
- (3) κεντροβασικό μονοκλινές
- (4) απλό ορθορομβικό
- (5) κεντροβασικό ορθορομβικό
- (6) χωροκεντρομένο ορθορομβικό
- (7) εδροκεντρομένο ορθορομβικό
- (8) εξαγωνικό
- (9) ρομβοεδρικό
- (10) απλό τετραγωνικό
- (11) χωροκεντρομένο τετραγωνικό
- (12) απλό κυβικό
- (13) χωροκεντρομένο κυβικό
- (14) εδροκεντρομένο κυβικό

Σχήμα 2 Οι κυψελίδες των 14 πλεγμάτων Bravais

Βασικά στοιχεία κρυσταλλογραφίας

2.1(6)

Για να προσδιορίσουμε τους δείκτες Miller ενός επιπέδου χρησιμοποιούμε την εξής διαδικασία:

- Βρίσκουμε τις τομές του επιπέδου με τους 3 άξονες
- Παίρνουμε τους αντίστροφους των αριθμών αυτών
- Τους ανάγουμε στους 3 μικρότερους ακέραιους με τον ίδιο λόγο, h, k, l
- Κλείνουμε τους 3 ακέραιους αριθμούς με παρένθεση (hkl)

Βασικά στοιχεία κρυσταλλογραφίας

2.1(7)

Στο Σχήμα 4 έχουμε τους δείκτες μερικών σημαντικών επιπέδων.

Το επίπεδο που τέμνει τους άξονες στα $\frac{1}{2}$ και ∞ Έχει δείκτες Miller (210)

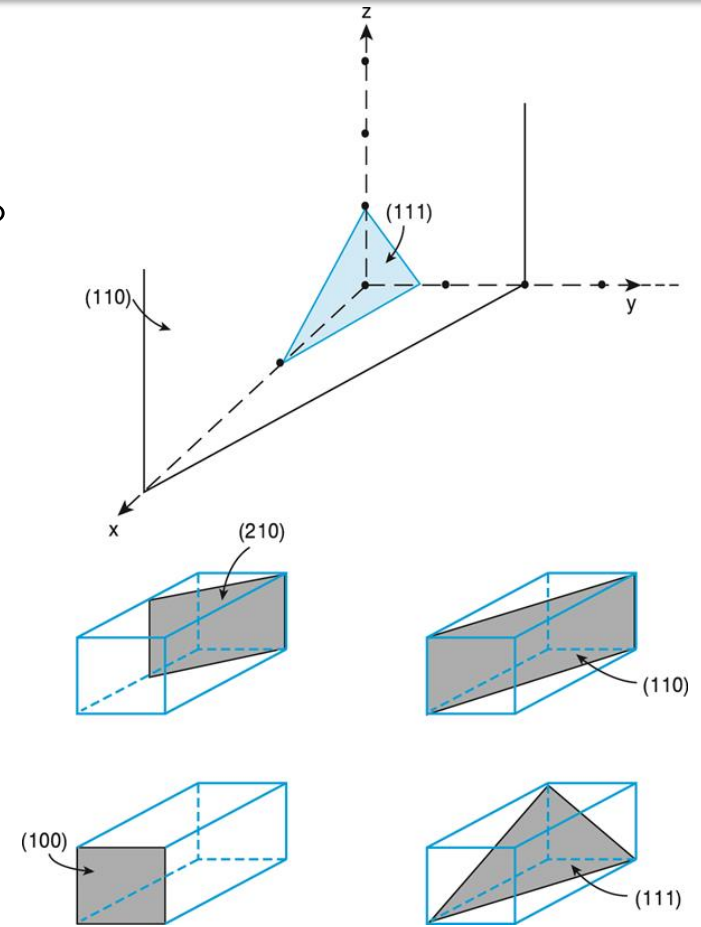
όλα τα παράλληλα επίπεδα έχουν τους ίδιους δείκτες Miller.

Για να συμβολίσουμε τα ισοδύναμα κρυσταλλογραφικά επίπεδα χρησιμοποιούμε το συμβολισμό $\{hkl\}$

Παράδειγμα: Οι έξι έδρες τις κυψελίδας ενός κυβικού κρυστάλλου έχουν δείκτες Miller

Και συμβολίζεται $\{100\}$

(100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$



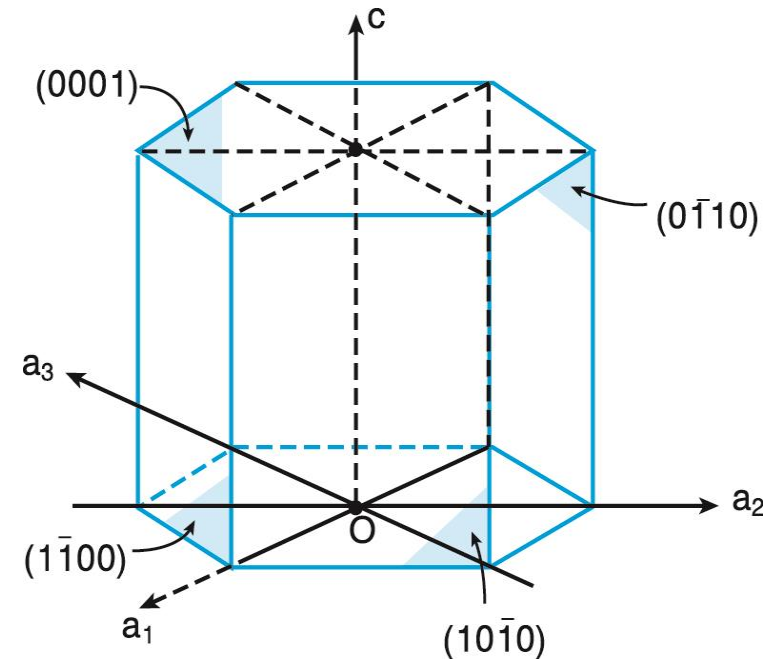
Σχήμα 4: Δείκτες Miller κρυσταλλογραφικών επιπέδων

Βασικά στοιχεία κρυσταλλογραφίας

2.1(8)

Στο εξαγωνικό σύστημα χρησιμοποιούμε 4 δείκτες $(hkil)$, που βασίζονται στους 4 άξονες a_1, a_2, a_3 και c .

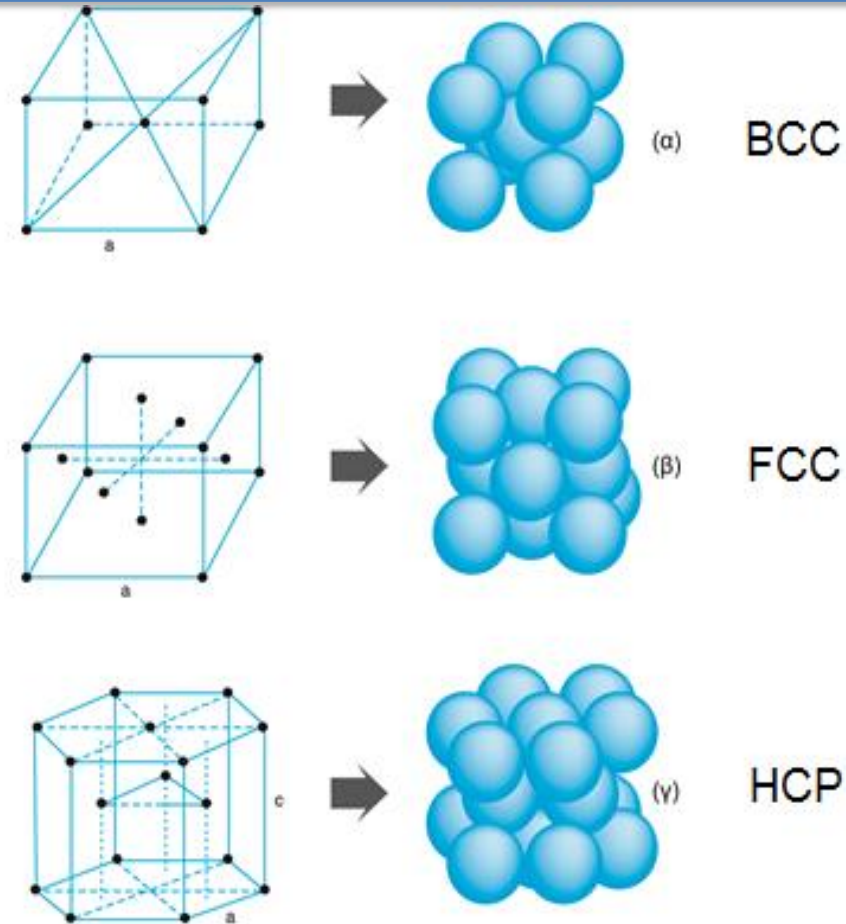
Μεταξύ των τριών πρώτων δεικτών h, k και i ισχύει η σχέση $i=-(h+k)$.



Σχήμα 5: Δείκτες ορισμένων επιπέδων του εξαγωνικού συστήματος

Η κρυσταλλική δομή των μετάλλων 3 (1)

Τα περισσότερα μέταλλα
κρυσταλλώνονται σε μια από τις
3 απλές κυβικές δομές,
(α) κυβικό χωροκεντρομένο
(β) κυβικό εδροκεντρομένο
(γ) πυκνό εξαγωνικό



Σχήμα 6: Κυψελίδες των 3 βασικών
κρυσταλ.δομών των μετάλλων

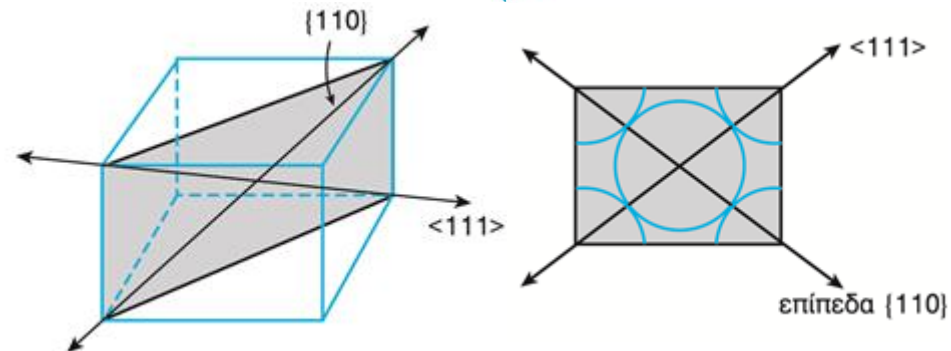
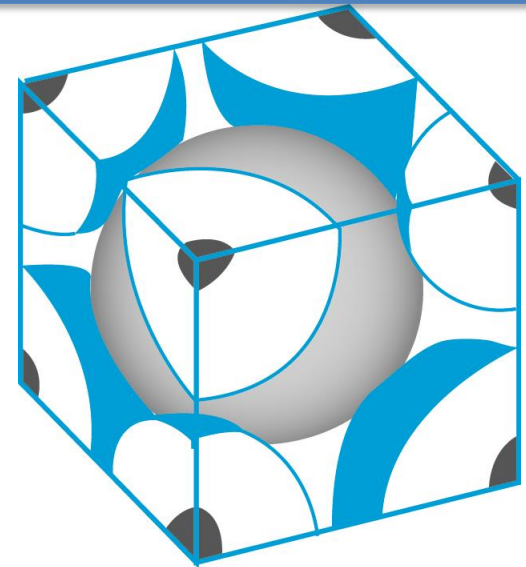
Η κρυσταλλική δομή των μετάλλων 3 (2)

Βασικά χαρακτηριστικά BCC κυψελίδας

Άτομα ανα κυψελίδα: 2

Πυκνή διεύθυνση στο BCC $\rightarrow \langle 111 \rangle$,

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



Σχήμα 7: Η κυψελίδα BCC

Η κρυσταλλική δομή των μετάλλων 3 (3)

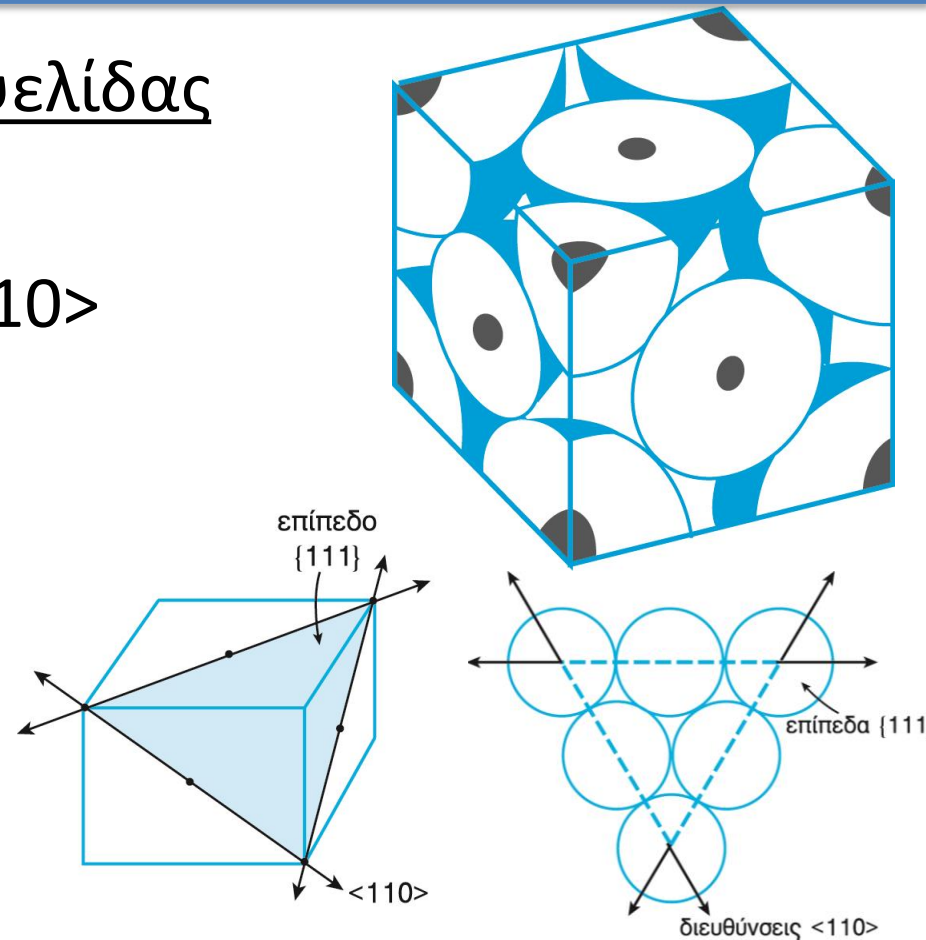
Βασικά χαρακτηριστικά FCC κυψελίδας

Άτομα ανα κυψελίδα: 4

Πυκνή διεύθυνση στο FCC $\rightarrow \langle 110 \rangle$

Πυκνό επίπεδο $\{111\}$

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



Σχήμα 8: Η κυψελίδα FCC

Η κρυσταλλική δομή των μετάλλων 3 (4)

Βασικά χαρακτηριστικά HCP κυψελίδας

Πυκνό επίπεδο {0001}

Ιδανικός λόγος $c/a=1.63$

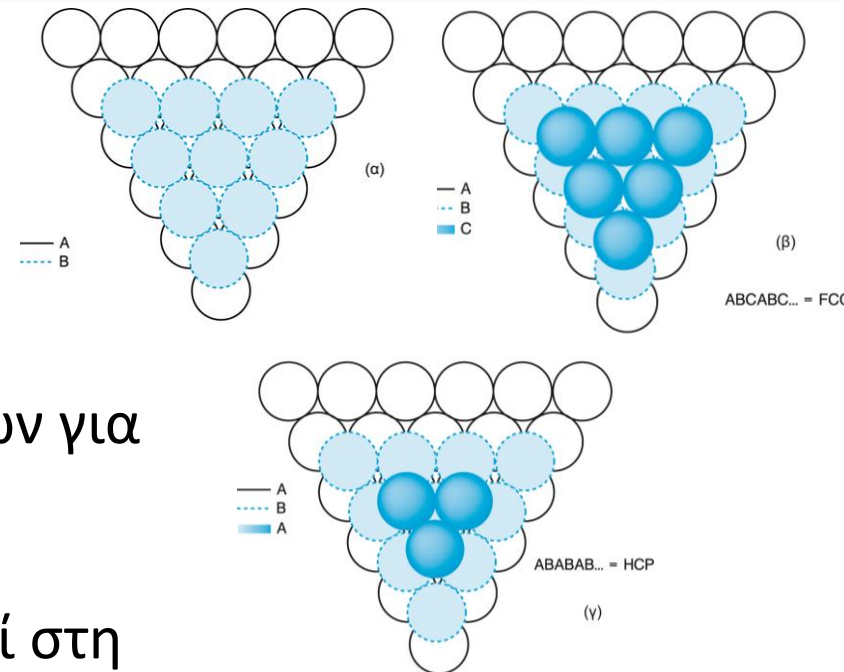
Ισοδύναμία FCC/HCP

Στο Σχήμα 9 έχουμε τους διαφορετικούς τρόπους στοιβάσματος σκληρών σφαιρών για τη δημιουργία των δομών FCC και BCC

(α) στοιβάσμα επιπέδων A και B

(β) στοίβασμα ABCABC .. Που αντιστοιχεί στη δομή FCC

(γ) στοίβασμα ABABAB... που αντιστοιχεί στη δομή HCP



Σχήμα 9: Τρόποι στοιβάσματος σκληρών σφαιρών για τη δημιουργία δομών FCC και BCC

Η κρυσταλλική δομή των μετάλλων 3 (5)

Συντελεστής ατομικής πλήρωσης (Atomic Packing Factor (APF)): Ο λόγος του όγκου των ατόμων, που αντιστοιχούν στην κυψελίδα της κρυσταλλικής δομής προς τον όγκο V_c της κυψελίδας.

z : ο αριθμός των ατόμων ανα κυψελίδα

R : η ακτίνα του ατόμου

V_c : ο όγκος της κυψελίδας.

$$APF = \frac{z \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right)}{V_c}$$

Ο APF εκφράζει το ποσοστό του χώρου της κυψελίδας, που είναι κατειλημμένος από τα άτομα του μετάλλου.

Συντελεστής συνδυάταξης CN: ο αριθμός των πλησιεστερων γειτονικών ατόμων σε ίσες αποστάσεις από το άτομο

Η κρυσταλλική δομή των μετάλλων 3 (6)

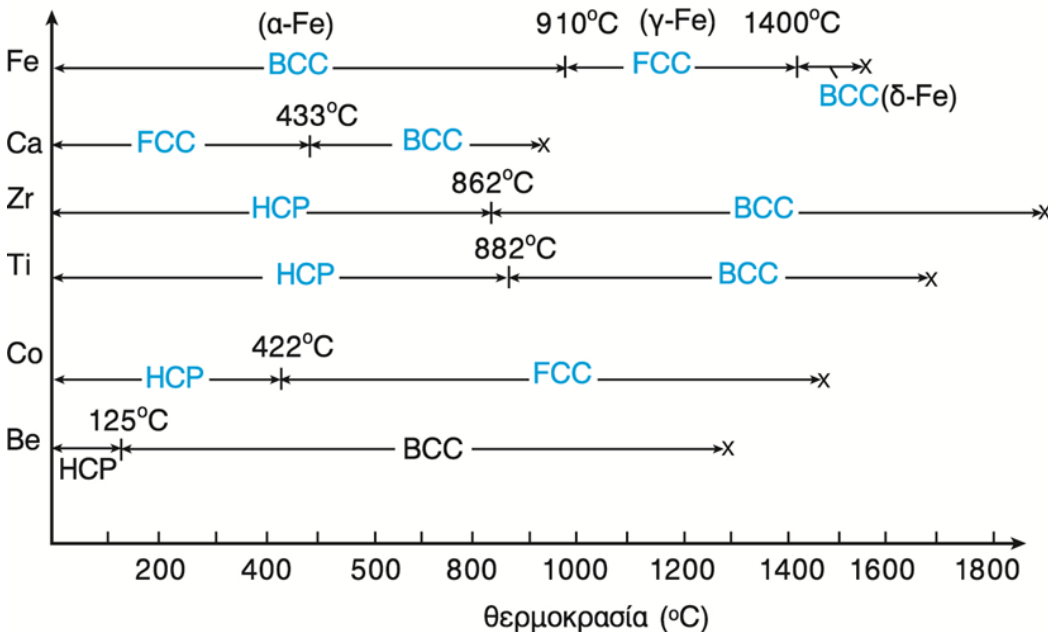
Δομή	FCC	HCP	BCC	Απλό Κυβικό
Αριθμός συνδιατάξεως, CN	12	12	8	6
Ατομική ακτίνα, R	$\frac{1}{4}a\sqrt{2}$	$\frac{1}{2}a$	$\frac{1}{4}a\sqrt{3}$	$\frac{1}{2}a$
Αριθμός ατόμων ανά κυψελίδα	4	6	2	1
Συντελεστής ατομικής πληρώσεως, APF	0.74	0.74	0.68	0.52
Παραδείγματα	Cu, Ag, Au, Ni, Al <u>Pb</u> , Pt <u>γ</u> -Fe	Mg (1.62) <u>Ti</u> (1.59) <u>Zr</u> (1.59) Be (1.56) Zn (1.86)	W, Mo, V Ba, Na <u>Zr</u> , <u>α</u> - Fe	<u>α</u> -Po

Πίνακας με τα χαρακτηριστικά βασικών μεταλλικών κρυσταλλικών δομών

Αλλοτροπία 4 (1)

Αλλοτροπία: Η ιδιότητα των μετάλλων να αλλάζουν κρυσταλλική δομή με τη μεταβολή της θερμοκρασίας ή της πίεσης ή ακόμα και όταν υπόκεινται σε θερμικές ή μηχανικές κατεργασίες.

I : αλλοτροπικός μετασχηματισμός
X : τήξη



Σχήμα 10: Οι αλλοτροπικές μορφές και θερμοκρασίες μετασχηματισμού ορισμένων μετάλλων