

CHEM-A1410 Materiaalitieteen
Perusteet
Luento 2: Materiaaliryhmät ja
mikrorakenne

15.09.2020

Ville Jokinen

Oppimistavoitteet:

- Miten materiaaliryhmät voidaan määritellä sidostyyppien perusteella.
- Kiderakenteen perusteet kuutiollisille hiloille
- Mikrorakenteen peruselementit: Liukoisuus, koostumus, monikiteisyys, faasit
- Mikrorakenteen vaikutus materiaalin ominaisuuksiin

Shackelford kirjasta alue: Luvut 2, 3.1, 3.2

Osa 1: Sidostyypit ja materiaaliryhmät

Kemiallinen sidos

Atomit vuorovaikuttavat keskenään ja voivat muodostaa kemiallisen sidoksen vapaa-energian minimoimiseksi.

Tällä kurssilla ei paneuduta sidoksen kvanttimekaanisiin yksityiskohtiin vaan käytetään yksinkertaistettuja malleja.

Primäärisidokset ovat: **ionisidos**, **kovalenttinen sidos** ja **metallisidos**. Näissä energian minimointi tapahtuu ulkokuorten elektronien tilaa muuttamalla.

Primäärisidoksen tyyppi määräytyy elektronegatiivisuuden perusteella.

Sekundäärisidoksia ovat esim. **Van der Waals sidokset** ja **vetysidokset**. Energian minimointi tapahtuu sähkömagneettisilla dipolivuorovaikutuksilla.

Sidoksella on **sidosenergia** ja **sidospituus**.

IA												0					
1 H 2.1	IIA											III A	IVA	VA	VIA	VIIA	2 He -
3 Li 1.0	4 Be 1.5											5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2	III B	IV B	V B	VIB	VII B	VIII			IB	II B	13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7															

Elektronegatiivisuus jaksollisessa järjestelmässä.

Elektronegatiivisuus kuvaa atomin taipumusta *ottaa vastaan* elektroneja.

Iso elektronegatiivisuus: atomi ottaa vastaan herkästi elektroneja.

Pieni elektronegatiivisuus: atomi luovuttaa herkästi elektroneja.

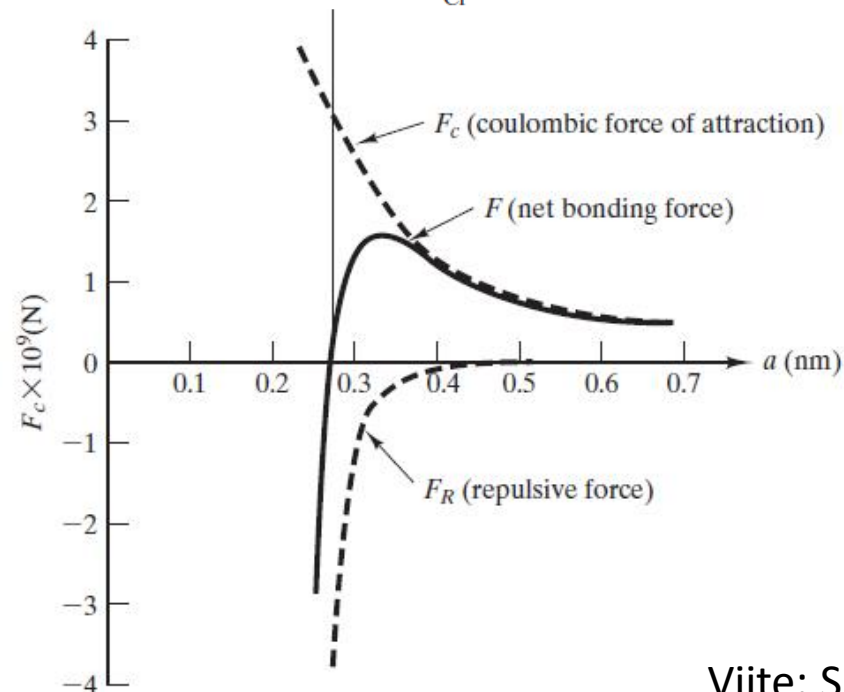
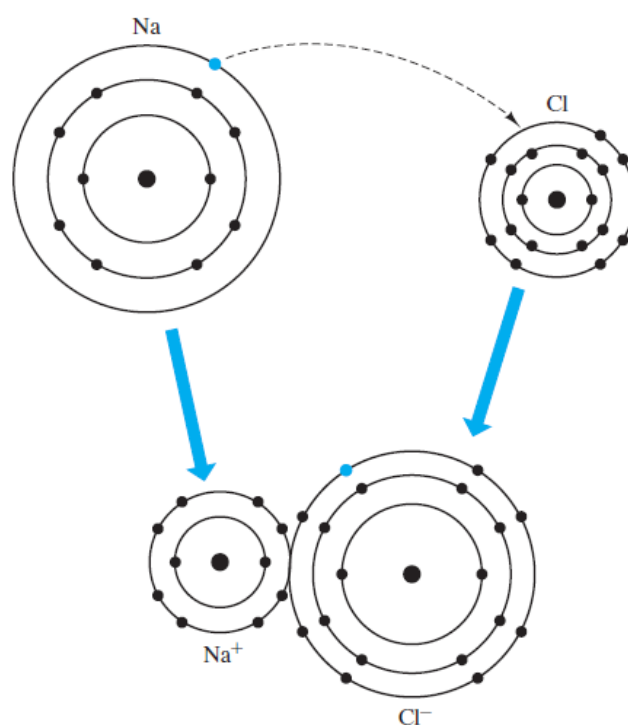
Ionisidos

Ionisidoksessa elektroni(t) siirtyy atomilta toisella ja syntyy positiivinen ioni (kationi) ja negatiivinen ioni (anioni).

Ionisidos on mahdollinen kun atomien välillä on suuri ero elektronegatiivisuudessa. Esim. ruokasuola NaCl, Na 0.9, Cl 3.0 \rightarrow Na⁺ ja Cl⁻

Muodostuneiden ionien välillä on Coulombinen (sähköstaattinen) vuorovaikutus.

Mutta: atomit eivät voi olla liian lähellä toisiaan koska elektronikuoret eivät voi mennä päällekkäin, tästä aiheutuu tietyltä etäisyydeltä alkaen hylkivä voima.



Sidosenergia ja sidospituus

Sidosenergia saadaan kokonaisvoimasta integroimalla:

$$E = \int_{\infty}^x F(x) dx$$

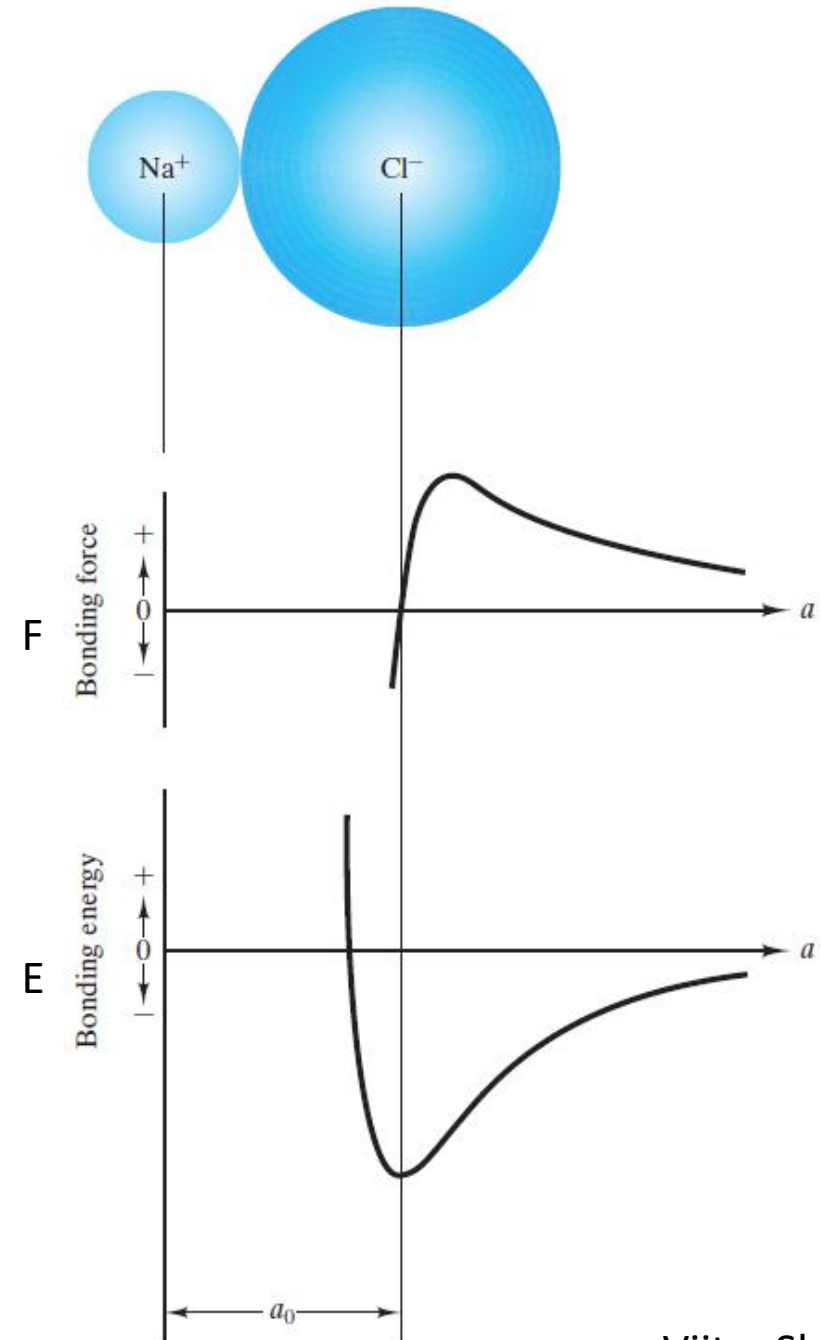
Sidosenergiassa on minimi tietyllä etäisyydellä a_0 ($dE/dx=0$).

Energia tässä pisteessä on sidosenergia ja a_0 on sidospituus (bond length).

Kovalenttiselle ja metallisidokselle sidosenergian muoto on kvalitatiivisesti samanlainen kuin ionisidokselle: voimakas repulsiio lyhyellä etäisyydellä, energiainimi tietyllä etäisyydellä, ja asymptoottinen lähestyminen nolaa pitkillä etäisyyksillä.

Ionisidoksen sidospituus on summa anionin ja kationin säteistä: $a_0 = r_{An+} + r_{Ct-}$

Huomaa että elektronin luovutuksen jälkeen anioni on pienempi ja kationi suurempi kuin vastaavat atomit.



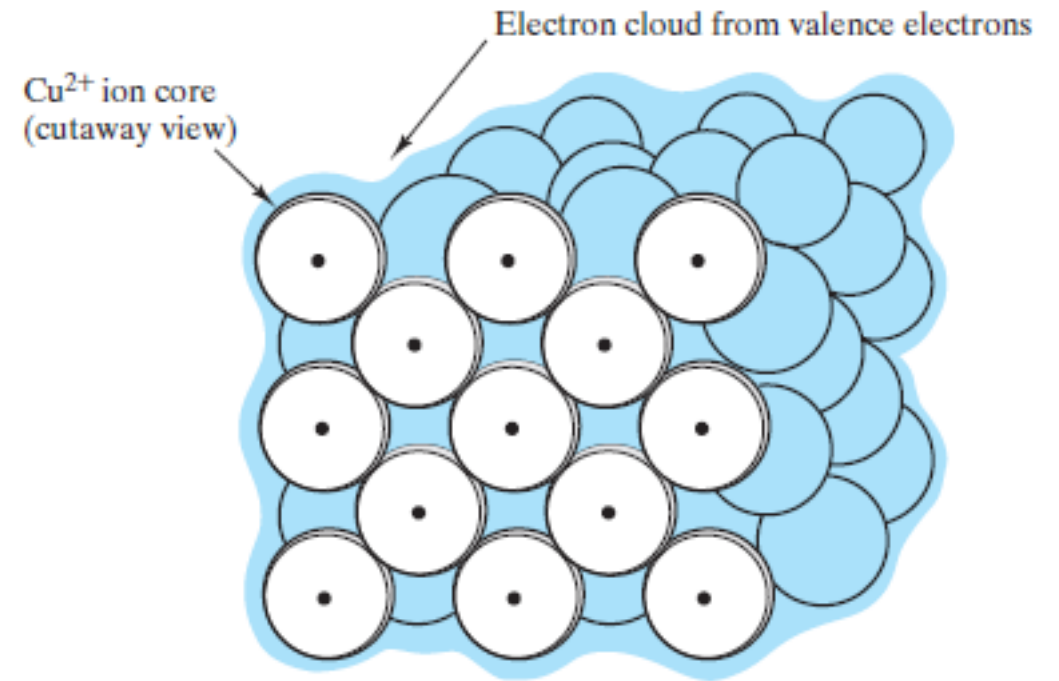
Metallisidos

Metallisidoksessa atomien valenssikuoren elektronit delokalisoituvat “elektronipilveksi” jonka kaikki ytimet jakavat.

Metallisidos syntyy elektropositiivisten atomien välille. Esim Cu-Cu, Au-Ag.

Kuten ionisidoksella, myös metallisidoksella (ja kovalenttisella sidoksella) on sidosenergia ja sidospituus.

Metallisidoksen ja kovalenttisen sidoksen pituus on ensimmäisenä approksimaationa atomisäteiden summa.



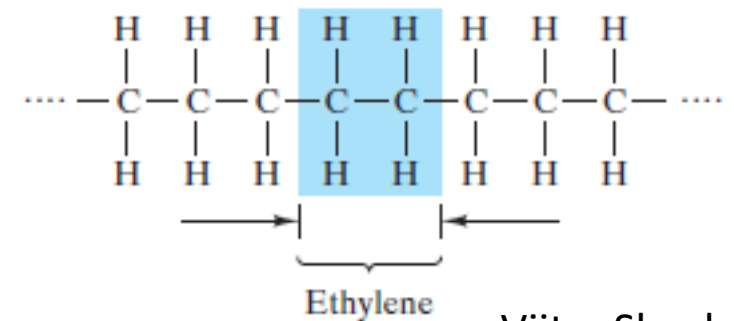
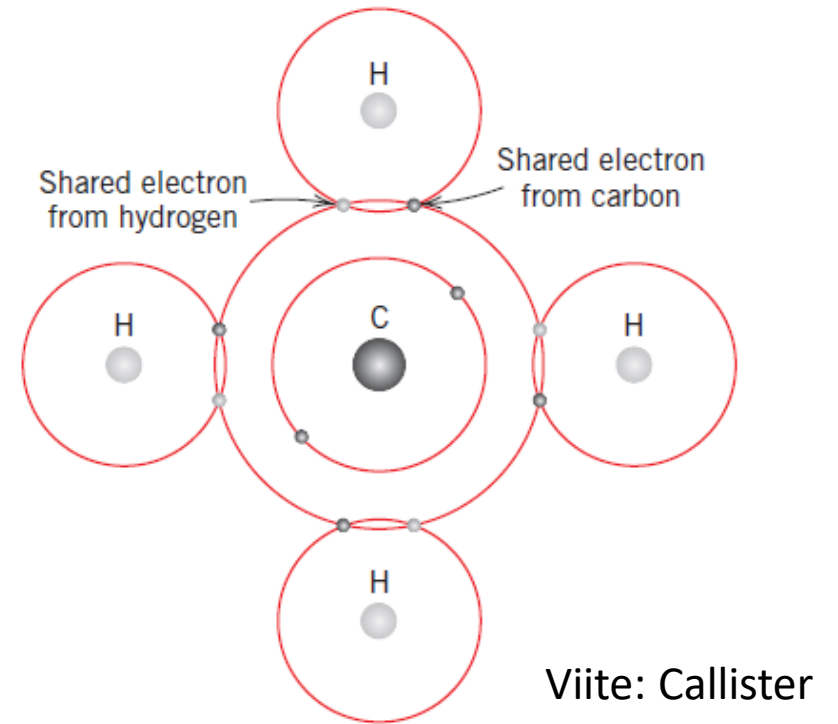
Kovalenttinen sidos

Kovalenttisessa sidoksessa atomit jakavat valenssi elektroneja täyden elektronikuoren saavuttamiseksi (oktetti).

Kovalenttinen sidos muodostuu kahden elektronegatiivisen atomin välille. Esim Cl-Cl, C-C, tai C-H.

Kovalenttisella sidoksella on myös **suunta** johtuen elektronikuorten kvanttimekaanisesta sijoittelusta.

Metallisidos ja ionisidos **ovat suuntaamattomia materiaaleissa**



Sekundaariset sidokset

Sekundaarisidoksissa valenssielektronien tila ei muutu.

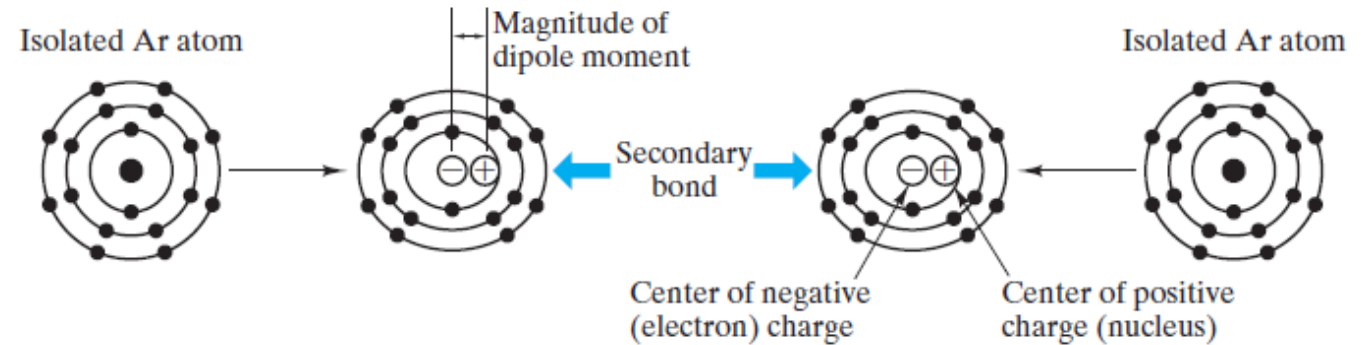
Sidokset ovat sähköstaattista vuorovaikutusta induoitujen dipolien ja dipolien välillä.

Sidokset pysyvien dipolien välillä vahvempia, induoitujen dipolien välillä heikompia.

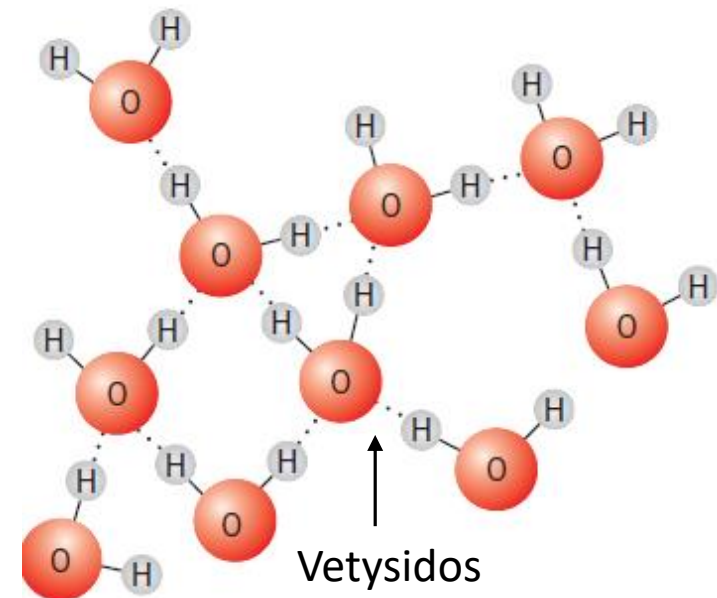
Erikoistapaus: vetysidos. Vedyn ja elektronegatiivisen atomin muodostaman pysyvän dipolin kautta muodostunut sidos.

Sekundaarisia sidoksia kutsutaan myös nimillä heikot sidokset tai fysikaaliset sidokset.

Indusoitu dipoli – induoitu dipoli



Viite: Shackelford



Viite: Callister

Sidokset ja materiaalityypit

Materiaalit voidaan lajitella materiaalityypiksi sidosten perusteella.

Metallisidos -> Metallit

Ionisidos -> Keraamit

Kovalenttinen sidos -> Puolijohteet + "kovalenttiset" + timantti etc.

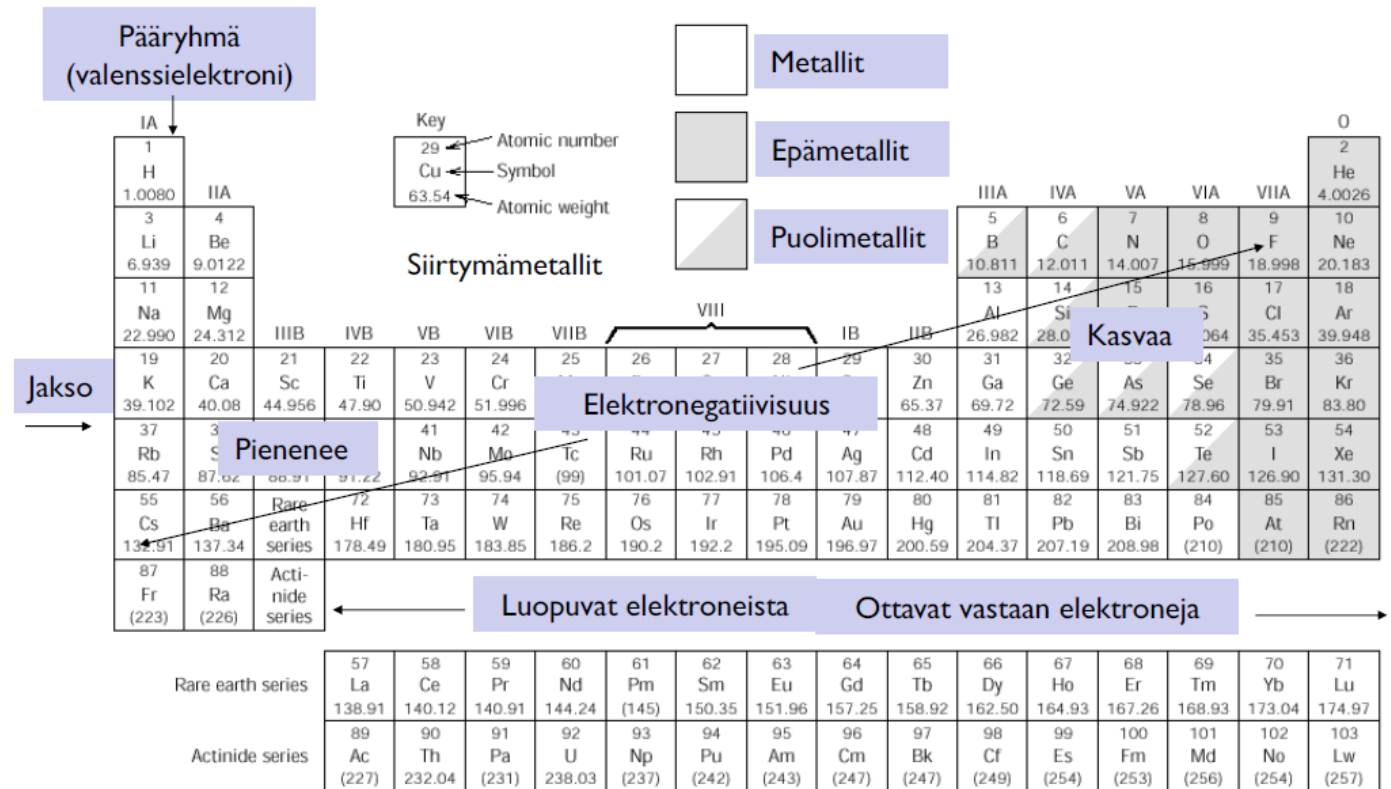
Kovalenttiset + heikot sidokset ->

Polymeerit ja luonnonmateriaalit

Mutta:

Sidoksilla voi olla myös esim. sekä ioni että kovalenttista luonnetta.

Moninaisista syistä tämä, tai mikään, jako materiaalityypisiin ei ole yksikäsitteinen



Sidosenergia ja sulamispiste

Primäärisidokset selkeästi voimakkaampia kuin sekundäärisidokset, useita satoja kJ/mol.

(Mutta: voimakasta vaihtelua myös materiaaliryhmien sisällä. Esim. Hg, nestemäinen metalli)

Sekundäärisidokset < 100 kJ/mol. Vetysidokset vahvimpia näistä.

Sulamislämpötila on ominaisuus josta iso osa selittyy suoraan sidosenergian kautta.

Tämän vuoksi metallit, keraamit ja puolijohteet tyypillisesti kestävät melko korkeita lämpötiloja mutta polymeerit eivät.

Viite: Callister

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640	3.3	801
	MgO	1000	5.2	2800
Covalent	Si	450	4.7	1410
	C (diamond)	713	7.4	>3550
Metallic	Hg	68	0.7	-39
	Al	324	3.4	660
	Fe	406	4.2	1538
	W	849	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7	0.08	-189
	Cl ₂	31	0.32	-101
Hydrogen	NH ₃	35	0.36	-78
	H ₂ O	51	0.52	0

Polyetyleni, kovalenttinen ja sekundäärisidos, sulamispiste 120°C

Materiaaliryhmien sidokset ja yleispiirteet

Metallit, *metallisidos*: sähkön- ja lämmönjohteita, korkea sulamispiste, lujia ja sitkeitä

Keraamit, *ionisidos*: sähkön- ja lämmöneristeitä, korkea sulamispiste, lujia ja hauraita

Puolijohteet/"kovalettiset", *kovalettinen sidos*: sähkönjohtavuus eristeiden ja johteiden välistä, korkea sulamispiste, lujia ja hauraita.

Polymeerit, *kovalettiset + heikot sidokset*: sähkön ja lämmöneristeitä, matala sulamispiste, helposti muokattavia

Luonnonmateriaalit, *kovalettiset + heikot sidokset*: sähkön ja lämmöneristeitä, matala sulamispiste, voivat olla joko pehmeitä tai lujia ja sitkeitä.

Kaikista näistä materiaaliryhmistä on erillinen luento tällä kurssilla!

Osa 2: Kiteinen materiaali

Kiteinen materiaali

Materiaalissa atomit useimmiten järjestäytyvät säännöllisiksi rakenteiksi, *kiteiksi*.

Syynä kiteiseen rakenteeseen on vapaa-energian minimointi, eli \approx se että atomit muodostavat maksimaalisen määrän sidoksia.

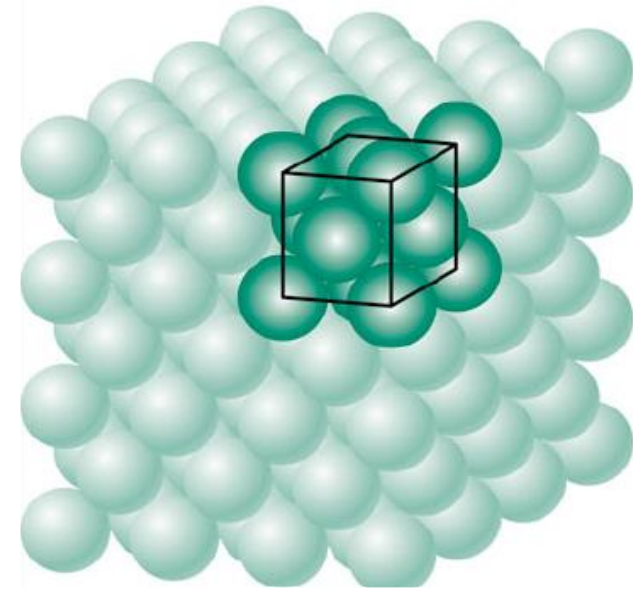
Eri sidokset tuovat rajoitteita mahdollisiin kiderakenteisiin:

Metallit: ei rajoitteita

Keraamit: stoikiometria (sähköinen neutraalius)

Puolijohteet: sidokset ovat suunnattuja.

Tästä syystä metalleilla on tyypillisesti yksinkertaisempi ja tiiviimpi kiderakenne kuin keraameilla tai puolijohteilla.

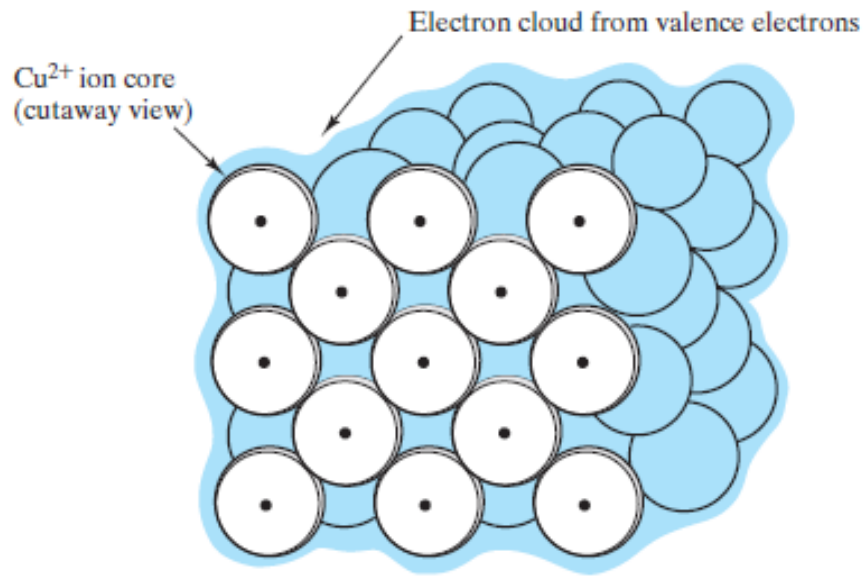


Säännöllinen kiderakenne



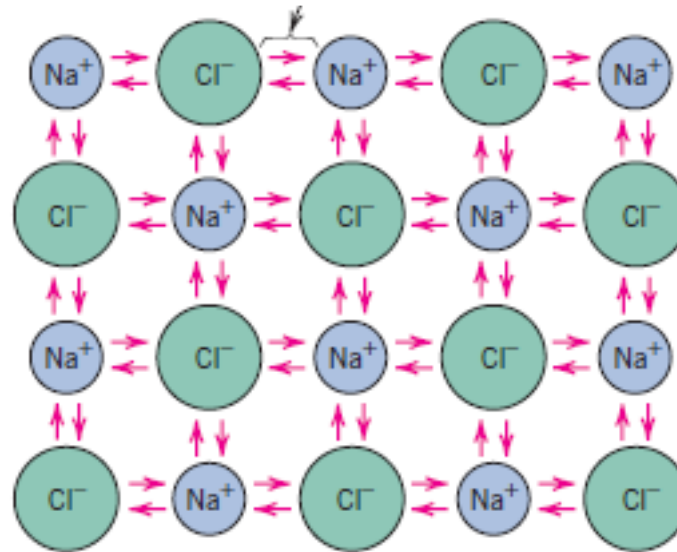
Yksikiteinen granaatti jalokivi

Metalli (kupari)



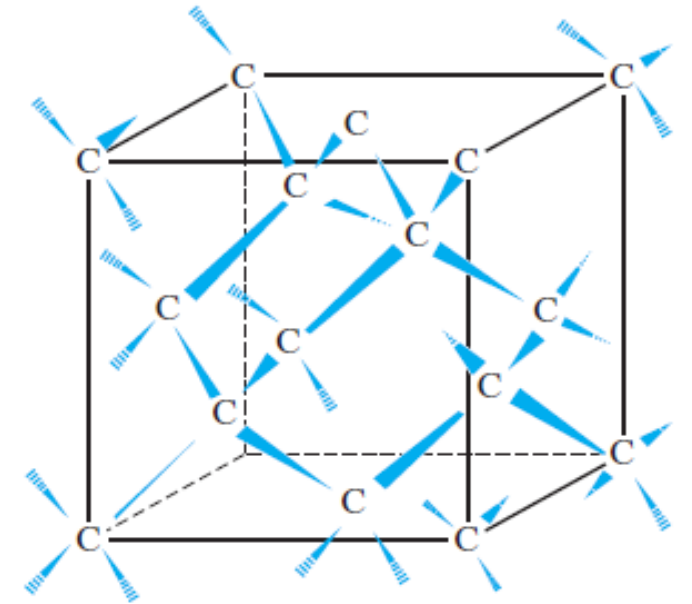
Metallisidos
Tiiviisti pakattu rakenne

Keraami (NaCl)



Ionisisidos,
sähköinen neutraalius
Yhtä monta Na^+ ja Cl^- ionia
Lähinaapurit aina vastakkaisesti varattuja

Kovalenttinen (timantti)



Kovalenttinen sidos
Kaikilla C atomeilla tasan 4
lähinaapuria samalla etäisyydellä

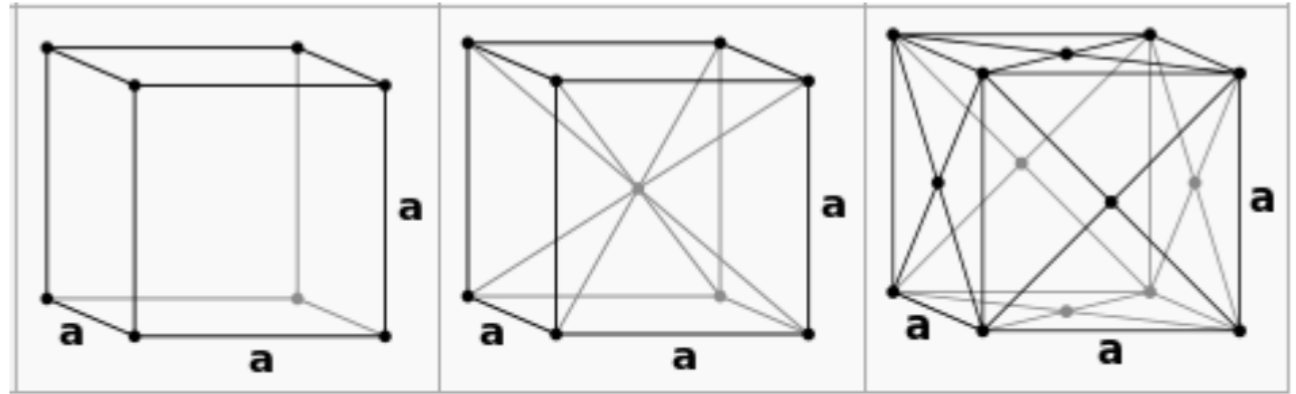
Kuutiollinen kiderakenne

Yleinen ja yksinkertainen. Kuutiollinen kiderakenne esiintyy esim: raudalla, timantilla ja piikarbidilla.

Kuutiollisen **kiderakenteen** määrittelee **hila**, jonka yksikkökoppi joka on kuution muotoinen.

Kuutiollisen hilan särmää (a) kutsutaan nimellä *hilavakio*.

Hilavakio määräytyy materiaalin muodostavien atomien *atomisäteiden* perusteella. (Keraameille: *ionisäde* atomisäteen sijaan.)



Primitiivinen kuutiollinen

sc (simple cubic)

Tilakeskinen kuutiollinen

tkk
bcc (body centered cubic)

Pintakeskinen kuutiollinen

pkk
fcc (face centered cubic)

Kide = fysikaalinen / materiaalitieteen konsepti

Hila = ideaalinen matemaattinen joukko pisteitä ja niiden koordinaatteja

Hila ja motiivi = kide

Kiderakenne joka muodostuu useammasta eri atomityypistä kuvataan täysin samalla formalismilla.

Kide = Hila + Motiivi

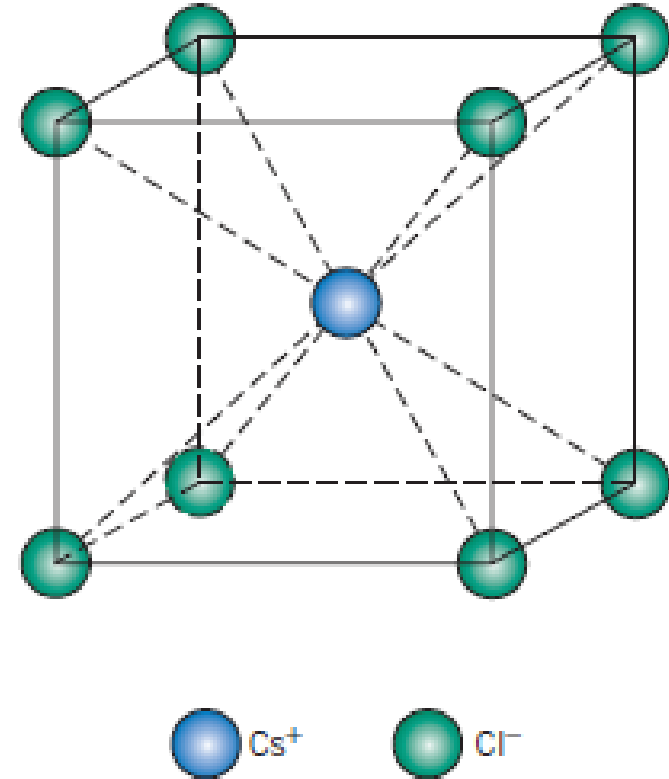
Hila = Toistuva rakenne hilapisteitä

Motiivi = Klusteri atomeita hilapisteessä. Motiivi voi olla joko yksi atomi tai useampia.

Esimerkkinä keraami cesiumkloridi. Tämä on yksinkertainen kuutiollinen hila, jossa motiivi on yksi Cs^+ ja yksi Cl^- ioni.

(CsCl rakenne EI siis ole tilakeskeinen kuutiollinen hila.)

Cesiumkloridi, keraami



Pakkaustiheys ja koordinaationumero

Pakkaustiheys (packing density): se määrä tilavuudesta joka pallomallissa on atomia suhteessa kokonaistilavuuteen.

Pallomallissa atomit (ionit) ajatellaan atomisäteen (ionisäteen) kokoisiksi palloiksi.

Pakkaustiheyden avulla voi laskea materiaalin tiheyden.

Koordinaationumero: jokaisen atomin lähinaapurien määrä. Eli pallomallissa se kuinka montaa vierekkäistä palloa kaikki atomit koskettavat.

Huomaa että sidos muodostuu yleensä ainoastaan lähinaapureiden välillä.

Käsitteitä avataan seuraavien kalvojen esimerkkien avulla

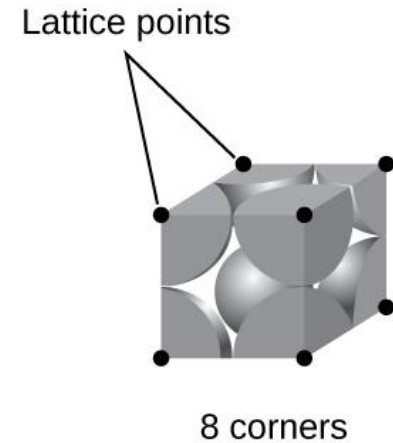
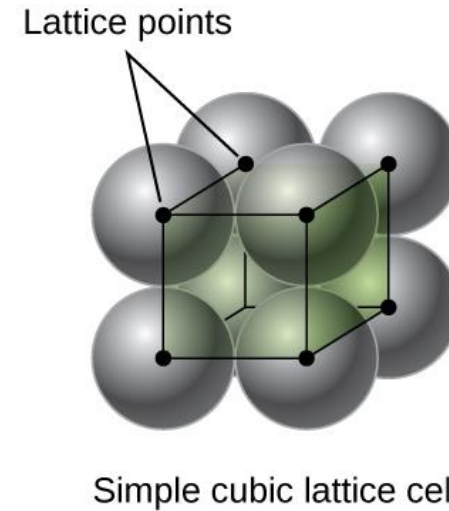
Laskuesimerkki 1: Poloniumin kiderakenne

Polonium on radioaktiivinen metalli.

Kysymys 1: Kuvan perusteella, mikä on Poloniumin kiderakenne?

Eli mikä on hila ja mikä on motiivi?

Vastailkaa rohkeasti chattiin, aikaa 2 min!

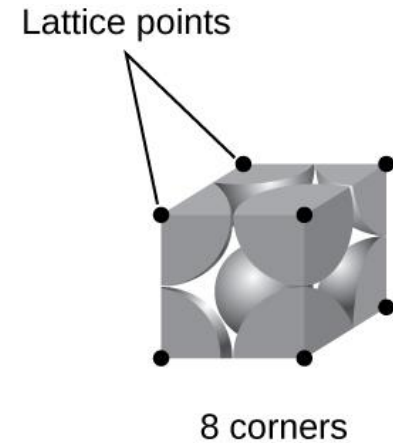
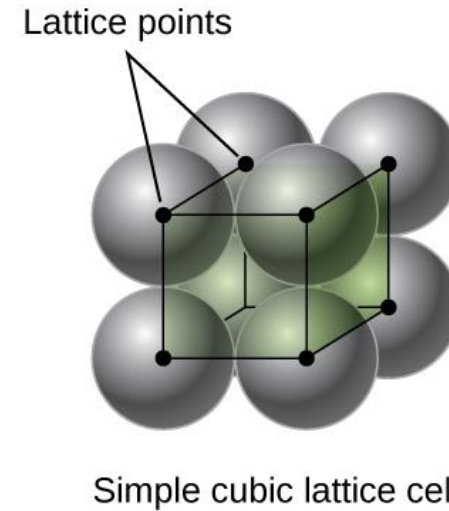


Laskuesimerkki 1: Poloniumin kiderakenne

Polonium on radioaktiivinen metalli.

Kysymys 1: Kuvan perusteella, mikä on Poloniumin kiderakenne? Eli mikä on hila ja mikä on motiivi?

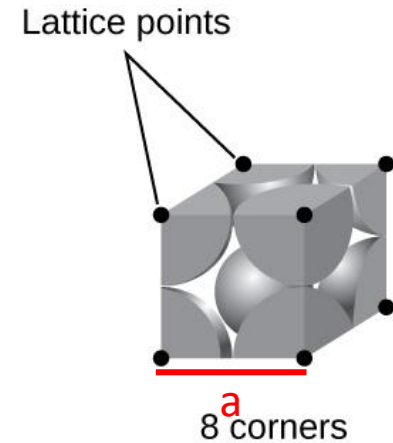
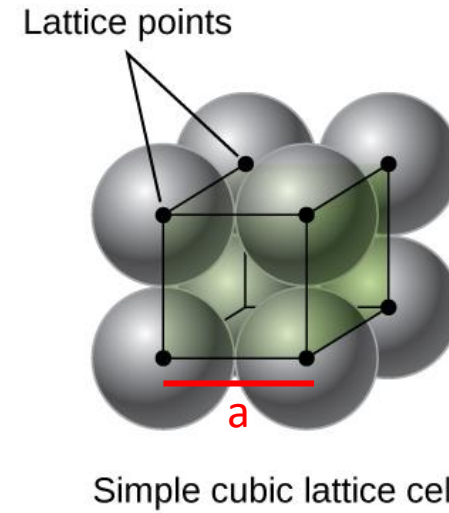
Vastaus 1: Poloniumilla kiderakenne koostuu yksinkertaisesta kuutiollisesta hilasta ja **motiivina on yksi polonium atomi.**



Laskuesimerkki 2: Poloniumin hilavakio

Kysymys 2: Poloniumin atomisäde on 0.167 nm. Mikä on kuutiollisen hilan hilavakio a ?

Vastailkaa rohkeasti chattiin, aikaa 2 min!



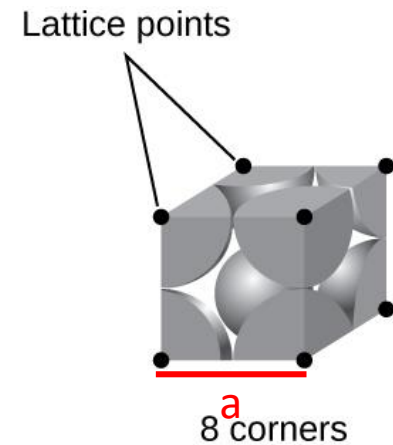
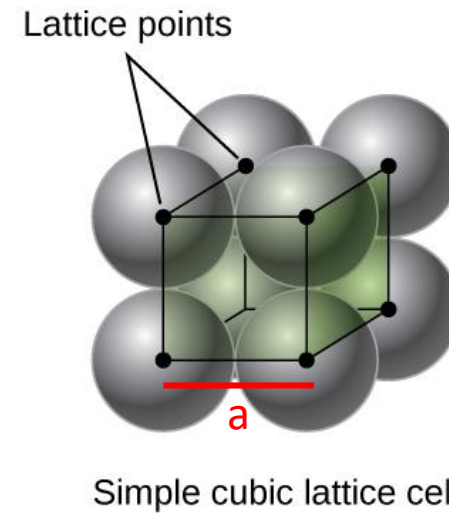
Laskuesimerkki 2: Poloniumin hilavakio

Kysymys 2: Poloniumin atomisäde on 0.167 nm. Mikä on kuutiollisen hilan hilavakio a ?

Vastaus 2: Pallomallissa atomisäteen kokoiset pallot koskevat toisiaan. Eli jos katsotaan mitä tahansa särmää nähdään että se on $2 \times$ atomisäde, eli $a = 0.334$ nm.

Hilavakio määräytyy atomisäteen ja hilarakenteen perusteella.

Avainasemassa on *tiivispakkauksellinen suunta*. Eli se suunta missä atomit ovat atomisäteen etäisyydellä toisistaan ilman väliin jäävää tyhjää tilaa.



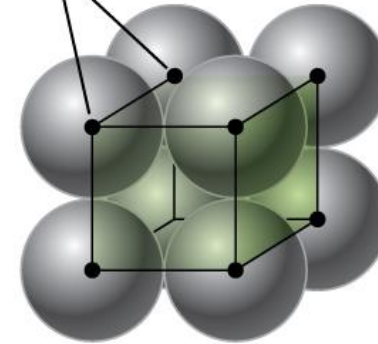
Laskuesimerkki 3: Poloniumin koordinaationumero

Kysymys 3: Mikä on poloniumin koordinaationumero?

Eli montaako atomia jokainen polonium atomi koskettaa?

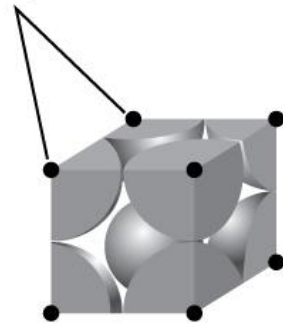
Vastailkaa rohkeasti chattiin, aikaa 2 min!

Lattice points



Simple cubic lattice cell

Lattice points



8 corners

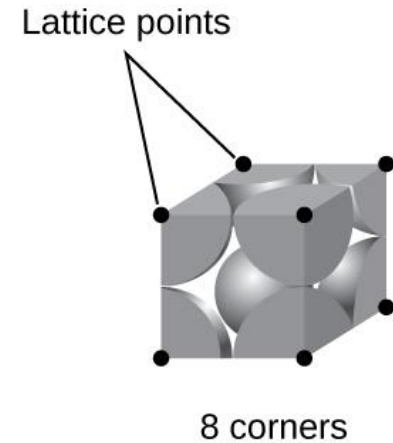
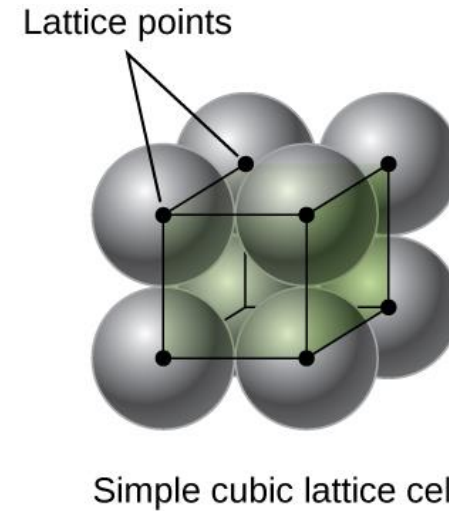
Laskuesimerkki 3: Poloniumin koordinaationumero

Kysymys 3: Mikä on poloniumin koordinaationumero?

Vastaus 3: Tarkastellaan kuinka montaa naapuria pallomallissa jokainen pallo koskettaa. Kaikki pallot ovat identtisiä keskenään, eli kaikilla on yhtä monta naapuria.

Jokaisella pallolla on 2 naapuria x akselilla, 2 naapuria y akselilla ja 2 naapuria z akselilla, eli koordinaationumero = 6

Koordinaationumero määräytyy pelkästään hilarakenteen perusteella

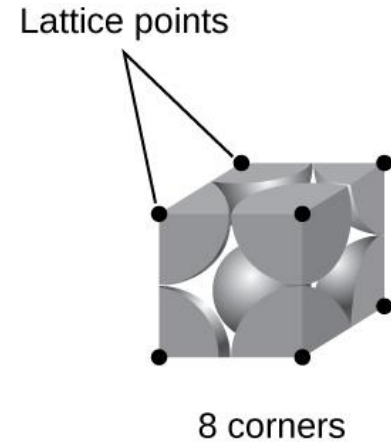
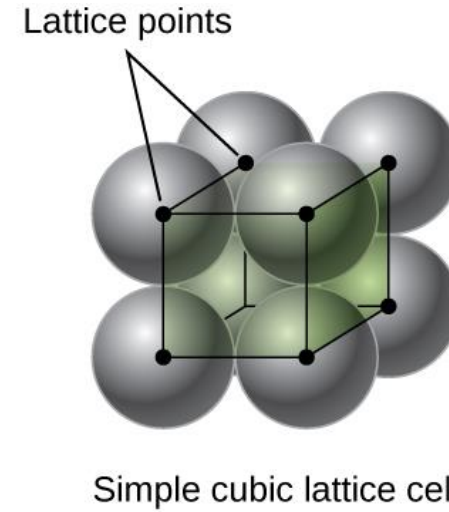


Laskuesimerkki 4: Poloniumin pakkaustiheys

Kysymys 4: Mikä on poloniumin pakkaustiheys.

Eli paljonko yhden kopin tilavuudesta on "palloa" ja paljonko tyhjää.

Vastailkaa rohkeasti chattiin, aikaa 3 min!



Laskuesimerkki 4: Poloniumin pakkaustiheys

Kysymys 4: Mikä on poloniumin pakkaustiheys.

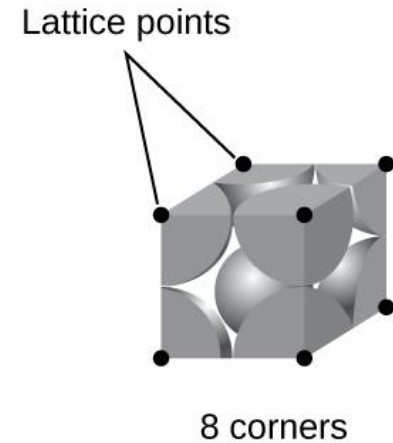
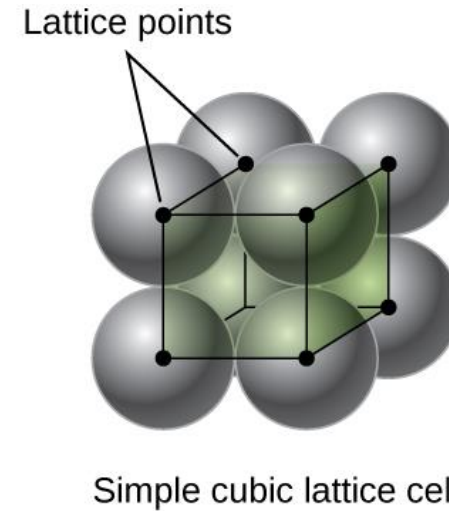
Vastaus 4: Yksinkertaisessa kuutiollisessa hilassa alkeiskopin tilavuus $a^3 = (2r)^3 = 8r^3$.

Yksinkertaisessa kuutiollisessa hilassa yhdessä alkeiskopissa on yksi atomi! (jonka tilavuus $(4/3)\pi r^3$

(kuvassa on 8 atomia mutta jokaisesta ainoastaan 1/8 on tarkasteltavassa kopissa).

Pakkaustiheus on siis $(4/3)\pi r^3 / 8r^3 = \pi/6 \approx 0.5236 \approx 52\%$

Pakkaustiheys määräytyy pelkästään hilarakenteen perusteella (ei siis tarvita tietoa atomipainoista)



Laskuesimerkki 5: Poloniumin tiheys

Kysymys 5: Polonium atomisäde on 0.167 nm ja atomipaino 209 u.
Mikä on poloniumin tiheys?

Vastaus 5: $\rho = m/V$

Tiheys on materiaaliparametri joka ei riipu tarkasteltavasta tilavuudesta. Lasketaan siis yhden alkeiskopin tiheys.

Alkeiskopin tilavuus $a^3 = (0.334 \text{ nm})^3 = (0.334 \cdot 10^{-9} \text{ m})^3$
 $\approx 3.73 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$

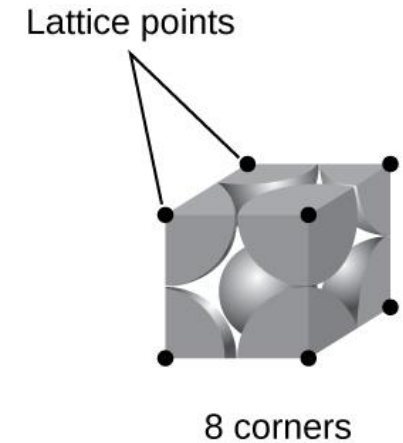
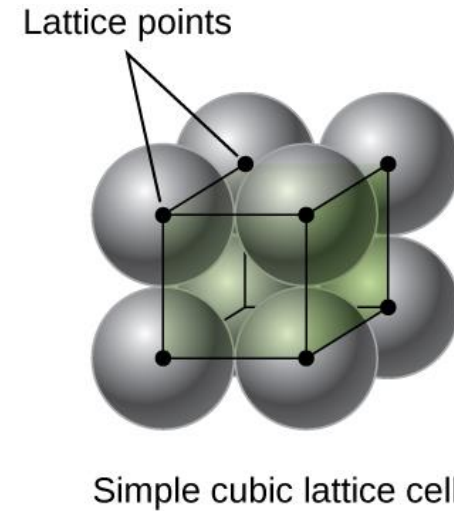
Alkeiskopissa oli 1 polonium atomi, jonka massa on
 $209 \text{ u} = 209 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \approx 3.47 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$

Tiheys on siis $(3.47 \cdot 10^{-25} \text{ kg}) / (3.73 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3) \approx 9300 \text{ kg/m}^3$

Tiheys määräytyy atomisäteen, atomipainon ja kiderakenteen perusteella. Laskareissa tullaan laskemaan vastaava pkk ja tkk kiderakenteille.

Viite:

<https://opentextbc.ca/chemistry/chapter/10-6-lattice-structures-in-crystalline-solids/>



Muista: Atomipaino = yhden atomin keskimääräinen massa, ilmoitetaan usein atomimassayksiköissä (u, tai D). $1 \text{ u} \approx 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Moolimassa = Avogadron luvun määrämän määrän atomeita yhteismassa. Ilmoitetaan grammoissa(/mol).

Pintakeskeinen kuutiollinen hila

Pkk yksikkökopissa on 4 atomia. **Atomit lasketaan kaavalla:**

$$n = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8}$$

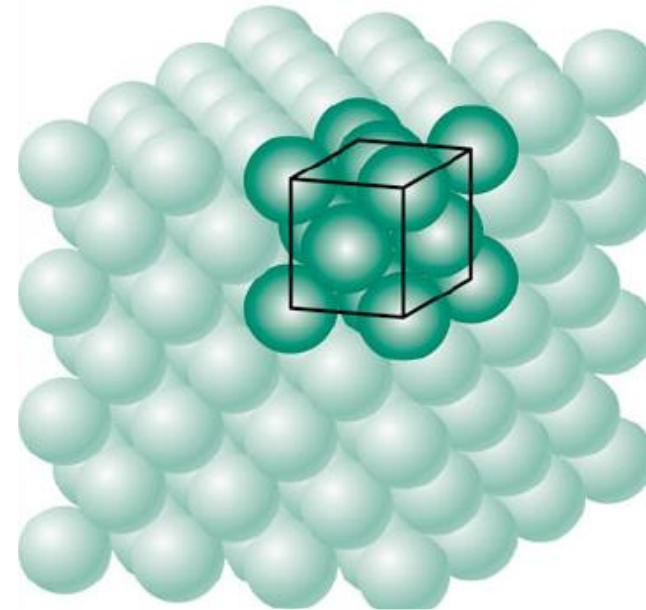
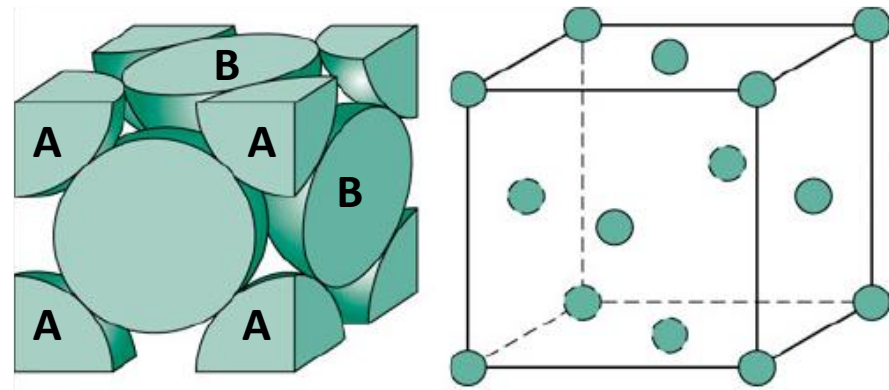
N_i sisällä
 N_f tahkoissa
 N_c nurkissa

$$N_f=6, N_c=8$$

Koordinaatioluku: 12. 4 lähinaapurua merkattu kuvaan A, 4 lähinaapurua B joista vain 2 näkyy kuvassa, ja 4 B:n kaltaista lähinaapurua atomin "etupuolella" jotka eivät mahdu kuvaan.

Tiivispakkauksellinen, pakkaustiheys 74%

Esim: γ -Fe, Al, Ni, Cu, Ag, Pt, Au



Tilakeskeinen kuutiollinen hila

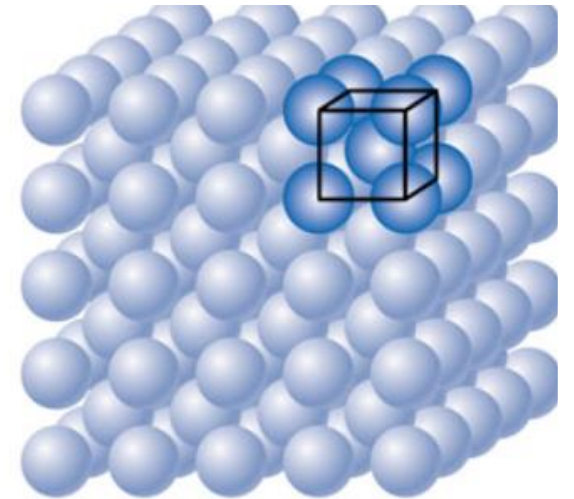
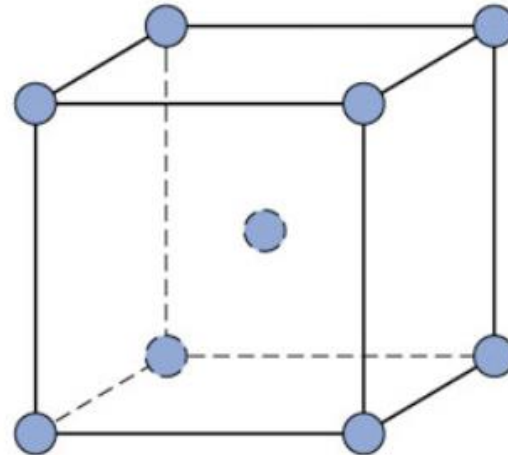
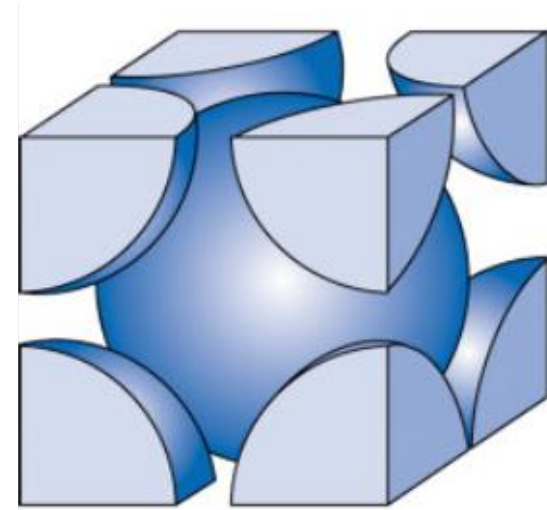
Tkk kopissa 2 atomia ($N_i = 1$, $N_c = 8$)

Sekä tkk että pkk hilassa kaikki atomit ovat identtisessä asemassa. Eli esim. pkk keskellä oleva atomi ei ole eri asemassa kuin kuution kulmissa olevat.

Koordinaatioluku: 8

Pakkaustiheys 68%, eli väljempi rakenne kuin pkk

Esim: α -Fe, V, Cr, Mo, W



Monimutkaisempia kiderakenteita.

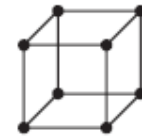
Kuutiolliset kiderakenteet ovat yleisiä metalleilla ja niitä esiintyy myös keraameilla, puolijohteilla ja kovalenttisilla materiaaleilla.

Monilla materiaaleilla voi olla hyvinkin monimutkaisia kiderakenteita. Mutta näilläkin rakenne on jaksollisesti toistuva (mikä on kiteellisen aineen määritelmä).

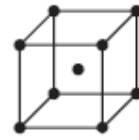
Esimerkiksi kiteytyvillä proteiineilla motiivi koostuu tuhansista atomeista.

Nyrkkisääntö: mitä yksinkertaisempi hila ja motiivi, sitä helpommin materiaali kiteytyy.

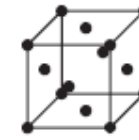
Metallit melkein aina kiteisiä ja amorfinen metalli vaikea saavuttaa. Toisessa ääripäässä proteiinien kiteytys erittäin vaikeaa.



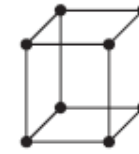
Simple cubic



Body-centered cubic



Face-centered cubic



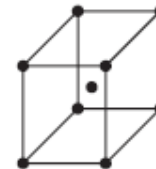
Simple tetragonal



Body-centered tetragonal



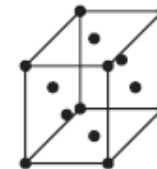
Simple orthorhombic



Body-centered orthorhombic



Base-centered orthorhombic



Face-centered orthorhombic



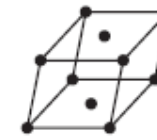
Rhombohedral



Hexagonal



Simple monoclinic



Base-centered monoclinic



Triclinic

Amorfinen materiaali = ei kiteinen

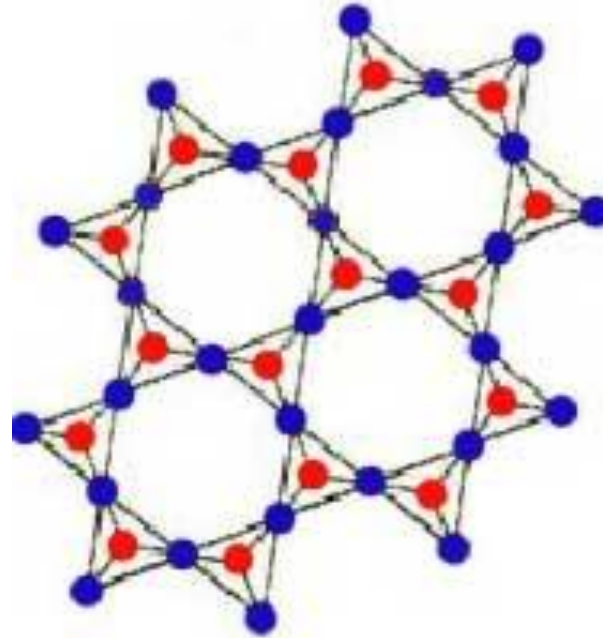
Jos materiaalilla ei ole säännöllistä *pitkän kantaman* toistuvaa rakennetta (eli kiderakennetta) niin materiaali on amorfinen.

Amorfisellakin materiaalilla on lokaalia järjestäytymistä energian minimoimiseksi.

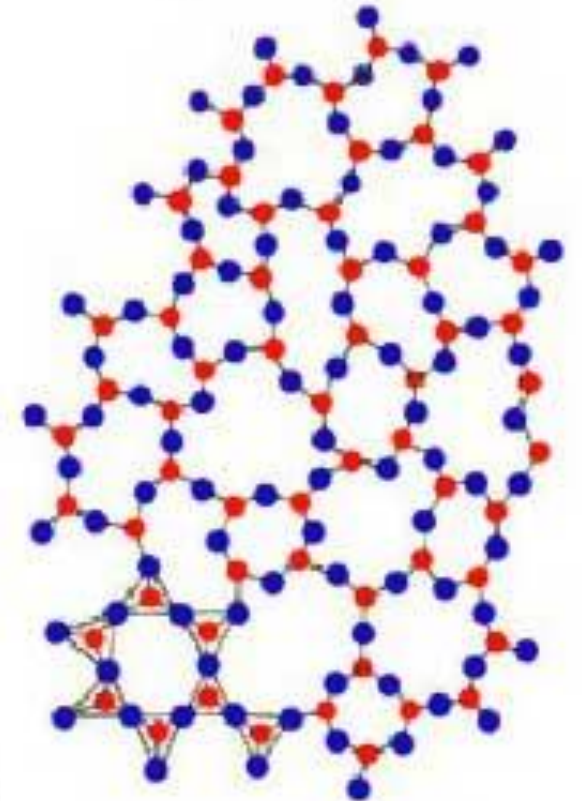
Lasi on tyypillinen amorfinen materiaali.

Lasit muodostuvat ionisidoksista/kovalenttisista sidoksista ja ne lasketaan joskus keraamien joukkoon.

Crystalline SiO₂
(Quartz)



Amorphous SiO₂
(Glass)



● Si ● O

Osa 3: Materiaalin mikrorakenne.

Mitä on materiaalin mikrorakenne?

Mikrorakenne \approx faasien ja kidevirheiden jakauma materiaalissa.

Eli toisin sanoen, kaikki mikä poikkeaa matemaattisesta ideaalisesta kiderakenteesta on mikrorakennetta.

Kokoskaaloja:

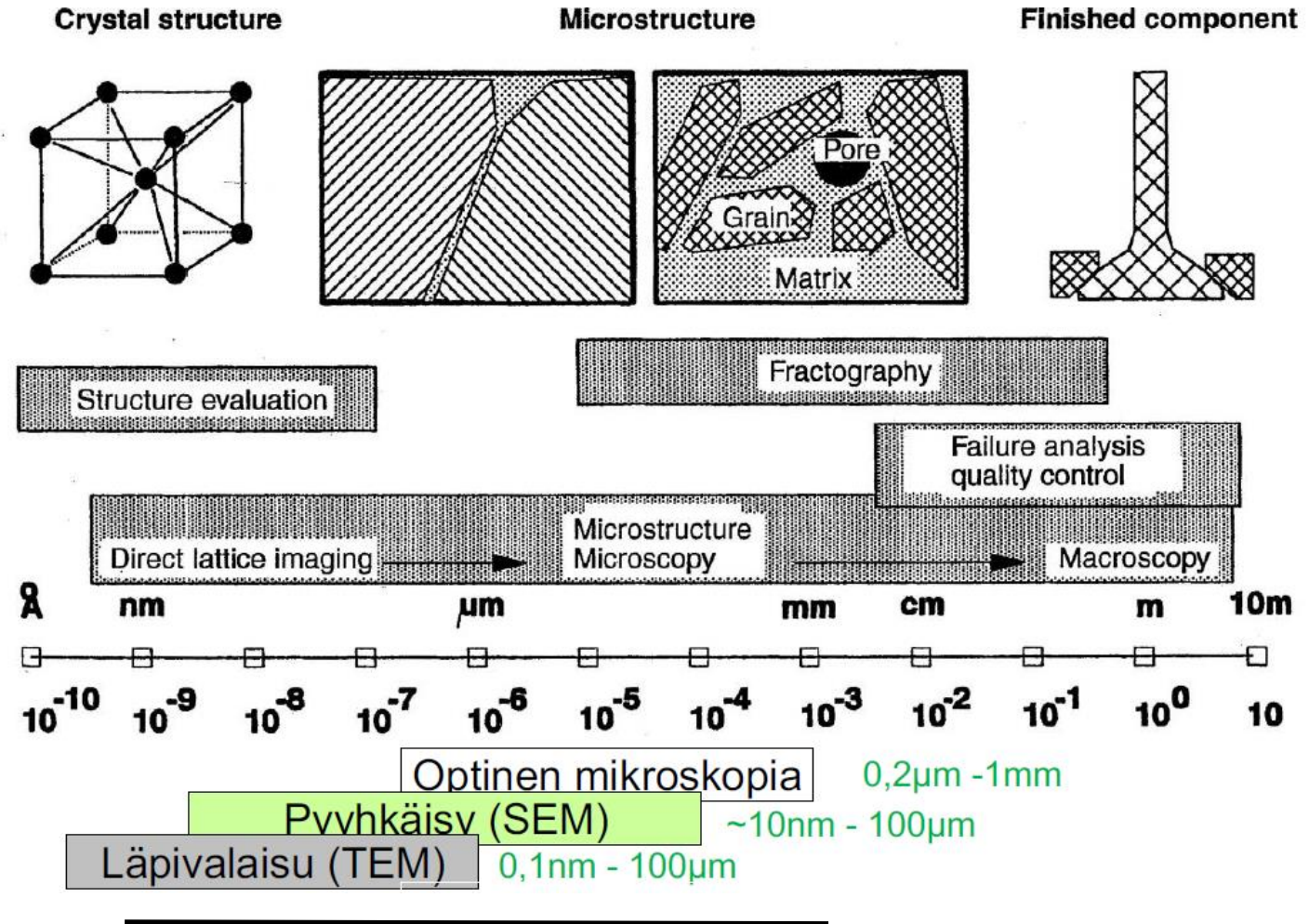
Kemiallinen sidos: 0.1 nm (1Å)

Atomin koko: 0.1 nm – 0.2 nm

Kiteen yksikkökoppi: 0.3 nm - 1 nm

Mikrorakenne: 1 nm – 1000 μ m

“Objektit”: 1mm+



Materiaalitieteen mielenkiintoiset ilmiöt välillä 1nm – 1mm

Mikrorakenne perusteet

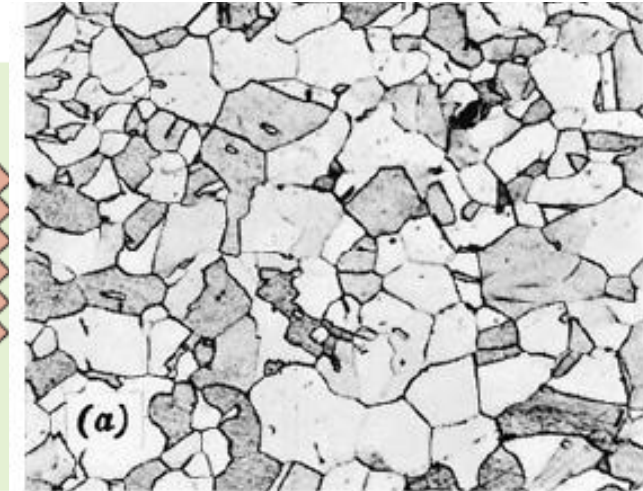
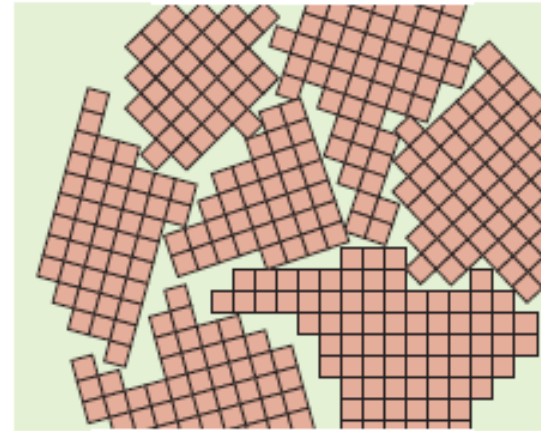
Joitakin mikrorakenteen elementtejä:

Koostumus: Materiaalin kiderakenteeseen on usein liuenneena/sekoittuneena pieniä tai suuria määriä muita aineita

Faasit: Tietty koostumus ja tietty kiderakenne muodostaa faasin. Kiinteä materiaali voi koostua usean kiinteän faasin tasapainosta.

Monikiteisyys: Useimmat kiteiset materiaalit ovat monikiteisiä. Yksikiteiset materiaalit ovat poikkeustapaus. Rakeet voivat olla samaa faasia tai eri faaseja

Muut kidevirheet: Dislokaatiot, vakanssit, säröt jne. jne.



Monikiteinen materiaali

Liukoisuus

Kiinteän aineen sekoittumista toiseen kiinteään aineeseen kutsutaan liukoisuudeksi, aivan kuten nesteiden tapauksessakin.

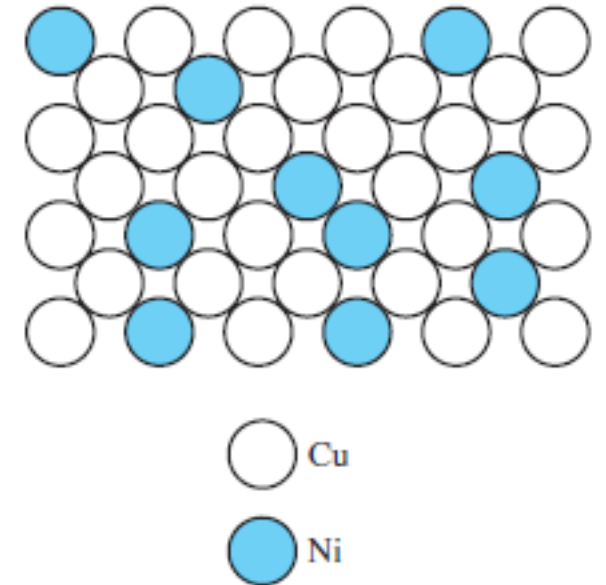
Kiinteä liuos (solid solution).

Kiinteä liuoksen muodostuminen, eli atomit sekoittuminen, vaatii yleensä korotettua lämpötilaa, mutta ei välttämättä sulaa. Liuos säilyy jäähdyttämisen jälkeenkin.

Kaikki ei liukene kaikkeen (ihan kuten nesteidenkin tapauksessa.)

Yksi nyrkkisääntö: useimmat metallit liukenevat muihin metalleihin ainakin jotenkin, esim. kupari ja nikkeli liukenevat toisiinsa missä tahansa suhteissa.

(Huomaa: liukoisuus on termodynaaminen konsepti eli kuvaa energiaminimiä joka saavutetaan äärettömän ajan kuluessa. Syy minkä takia *huoneenlämmössä* esim. kupari ja nikkeli eivät fuusoidu keskenään on kineettinen, eli diffuusio on liian hidasta huoneenlämmössä)



Cu-Ni seos, eli kiinteä liuos

Koostumus

Koostumus = mitä atomeja/yhdisteitä materiaalissa on ja miten paljon.

Mikrorakenteessa eri atomit ja yhdisteet voivat olla joko liuenneina toisiinsa (eli osana samaa faasia) tai erillisinä faaseina.

Esimerkkejä koostumuksista:

Metalli:

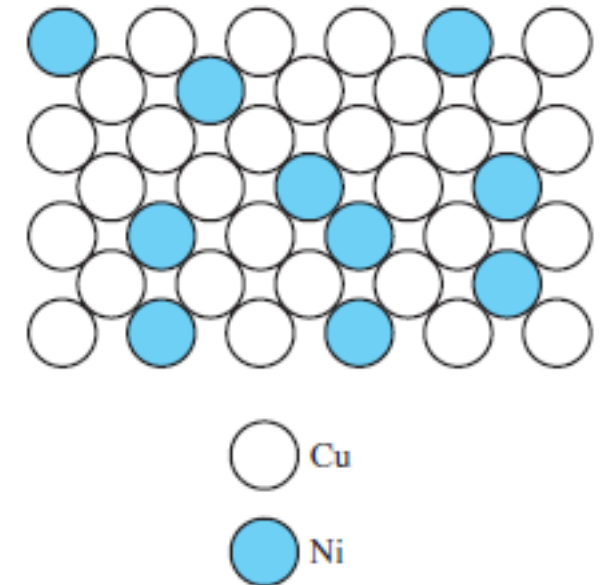
5160 Teräs: Fe, Mn: 0.75-1%, Cr: 0.7-0.9%, C: 0.56-0.64% ,P: .035%, Si ≤ 0.15-0.3%, S ≤ 0.04%

Keraami:

40% MgO, 60% Al₂O₃

Polymeeri:

90% polyetyleni, 10% polyvinyyliasetaatti



Cu-Ni seos, eli kiinteä liuos

Koostumus ja ominaisuudet

“Saman” materiaalin eri koostumuksilla on eri ominaisuudet.

Jotkut ominaisuudet (kuten tiheys) vaativat ison % seostamista muuttuakseen merkittävästi. 5%Cu 95%Ni on tiheydeltään hyvin lähellä 7%Cu 93%Ni.

Monet ominaisuudet voivat muuttua dramaattisesti pienilläkin määrillä liuennutta ainetta. **Esimerkiksi:**

Metallin lujittaminen (*liuoslujitus, tulee metalliliuennossa*)

Puolijohteen sähkönjohtavuuden muokkaus douppaamalla (*tulee sähköliuennossa*)

Keraamin väri (*tulee keraamiluennossa*)



littalan punainen lasi:
SeO₂ tai Au seos aineena SiO₂
pohjaisessa lasissa

Mikrorakenteen/monikiteisyyden muodostuminen

Mikrorakenne muodostuu aineen valmistusvaiheessa.

Esimerkki:

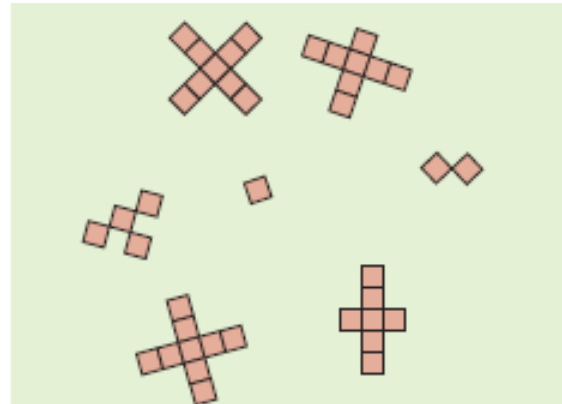
A: Jäähdytettäessä sulaa metallia tietyssä lämpötilassa muodostuu pieniä kiteitä (ytimiä).

B: Ajan kuluessa ja jäähdytyksen jatkuessa ytimet kasvavat.

C: Ytimet täyttävät tilavuuden, muodostaen monikiteistä materiaalia.

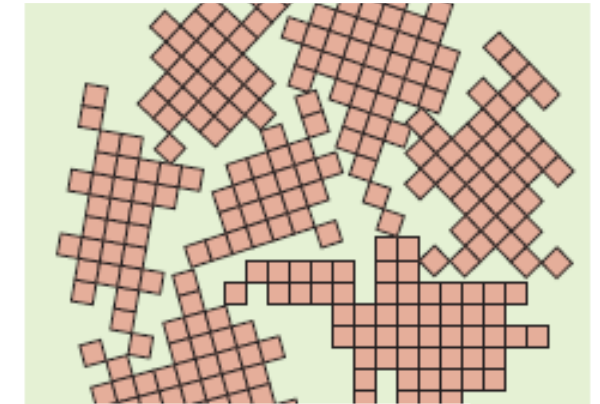
Mikrorakennetta muokataan usein myös jähmettymisen jälkeenkin esim. lämpökäsittelyillä.

A



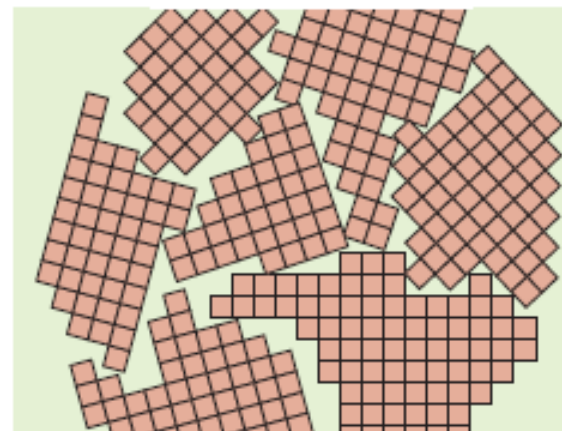
(a)

B



(b)

C



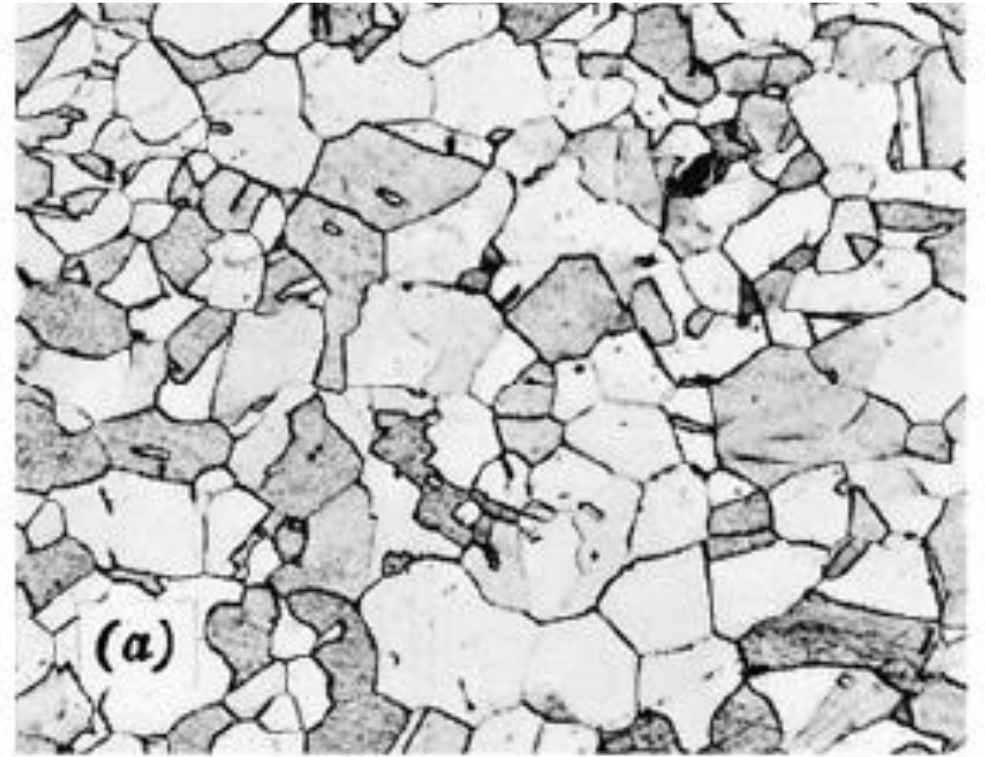
Monikiteisyys

Avainkonsepti: kidekoko/raekoko: tyypillinen 1D mitta (\approx halkaisija) rakeen koolle.

Raekoko voi vaihdella nanometri tasolta millimetritasolle.

Yksittäisessä kiteessä ominaisuudet ovat **anisotrooppiset**, eli riippuvat kidesuunnasta.

Monikiteisyyden seuraus: makroskooppisten ominaisuuksien **isotrooppisuus** johtuen **keskiarvoistumisesta**.



Monikiteinen metalli

Faasit

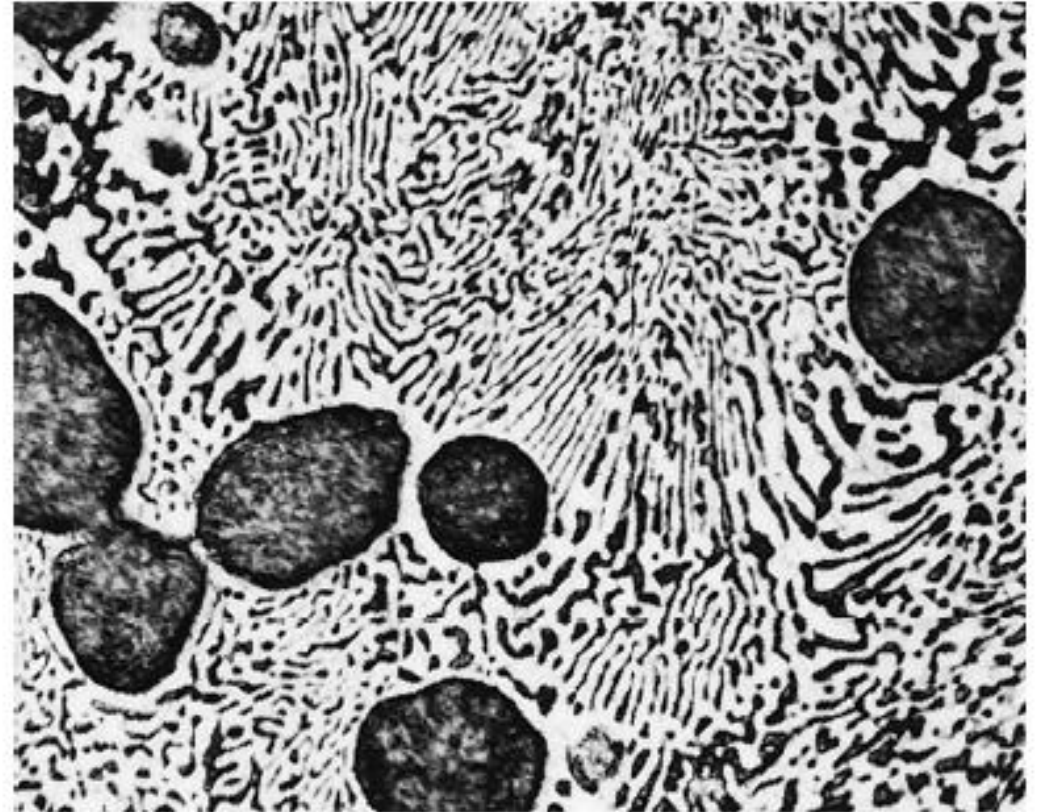
Faasi = koostumukseltaan ja ominaisuuksiltaan homogeeninen alue.

Monikiteisessä materiaalissa rakeet voivat olla kaikki samaa faasia tai koostua eri faaseista.

Vapaa-energian minimoimiseksi aineen komponentit (eri alkuaineet) eivät välttämättä jakaudu tasaisesti mikrorakenteen tasolla. -> tasapainofaasit

On myös olemassa faaseja jotka eivät ole energiaminimejä. Näitä syntyy tyypillisesti nopealla jäähdytyksellä.

Faasit voivat olla kiteisiä tai amorfisia. Esim. polymeereissä usein mikrorakenne koostuu kiteisistä ja amorfisista faaseista.



Koostumus: 50% Sn, 50% Pb

Tummat alueet lyijy rikasta faasia

Vaaleat alueet tina rikasta faasia

Mikrorakenne esimerkki

Materiaalin *koostumus*: 50% Sn, 50% Pb

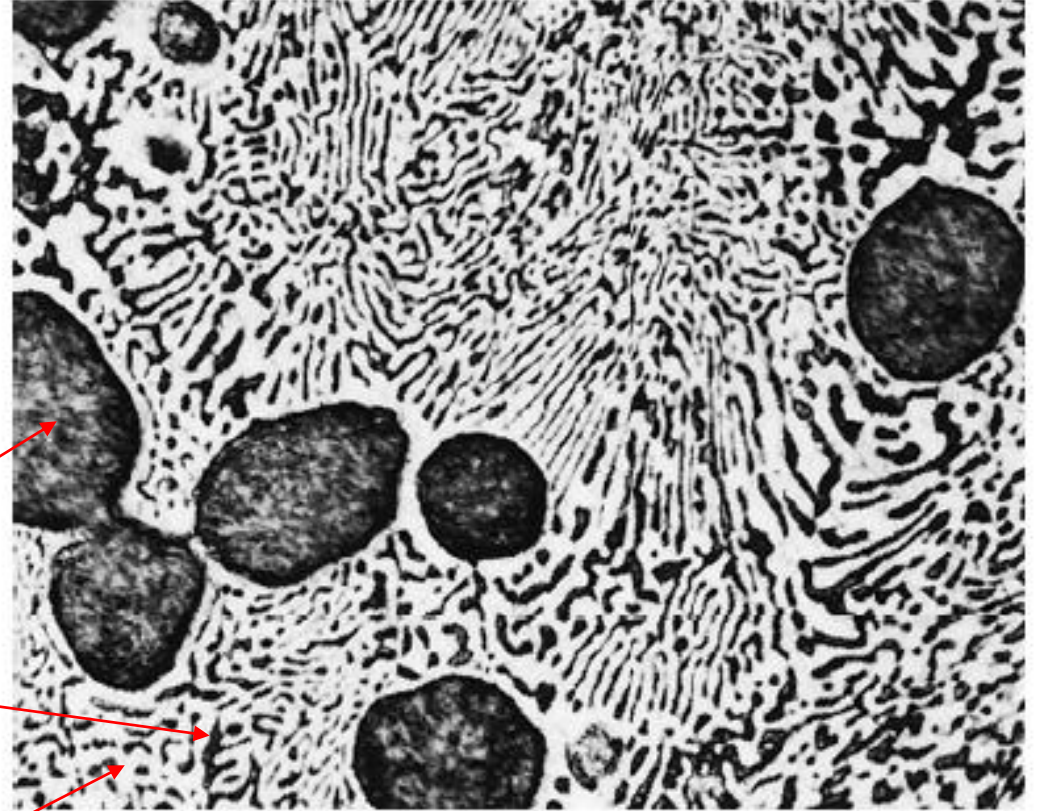
Faasit:

Tummat alueet: lyijy rikasta faasia (19% Sn, 81%Pb),
kiderakenne pintakeskeinen kuutiollinen

Vaaleat alueet tina rikasta faasia (97% Sn, 3%Pb),
kiderakenne tilakeskeinen tetragonaalinen

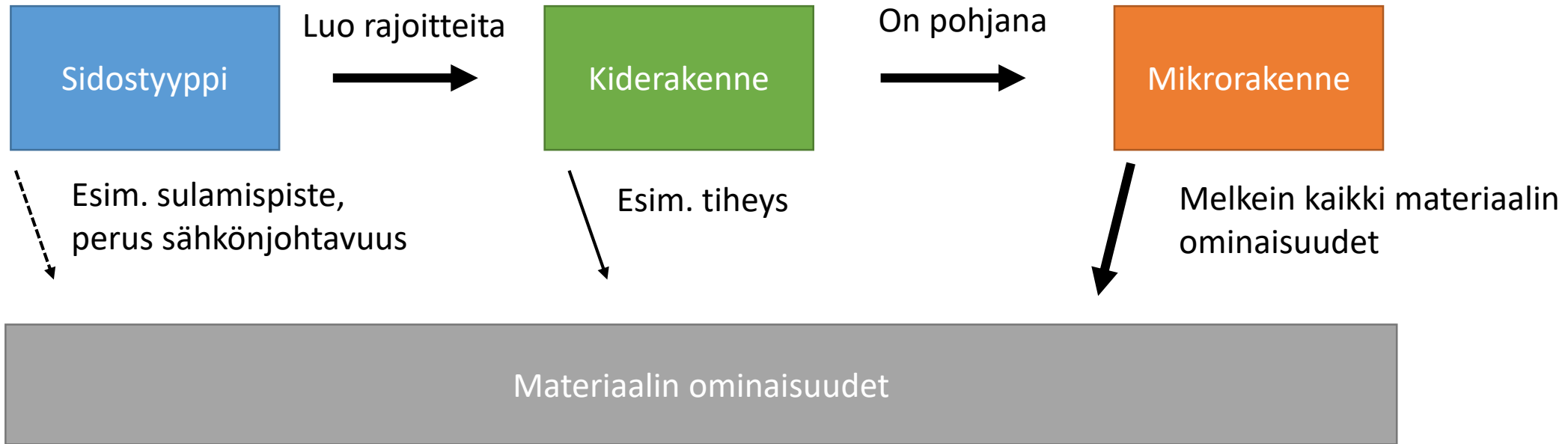
Lyijyrikasta faasia on isoina pallomaisina rakeina joiden
raekoko on $\approx 20\mu\text{m}$, ja pieninä tasomaisina rakeina (=lamelli)
joiden koko on $\approx 1\mu\text{m}$

Tinarikasta faasia on ainoastaan tasomaisina lamelleina
joiden koko on myös $\approx 1\mu\text{m}$



50 μm

Mikä määrittää materiaalin ominaisuudet?



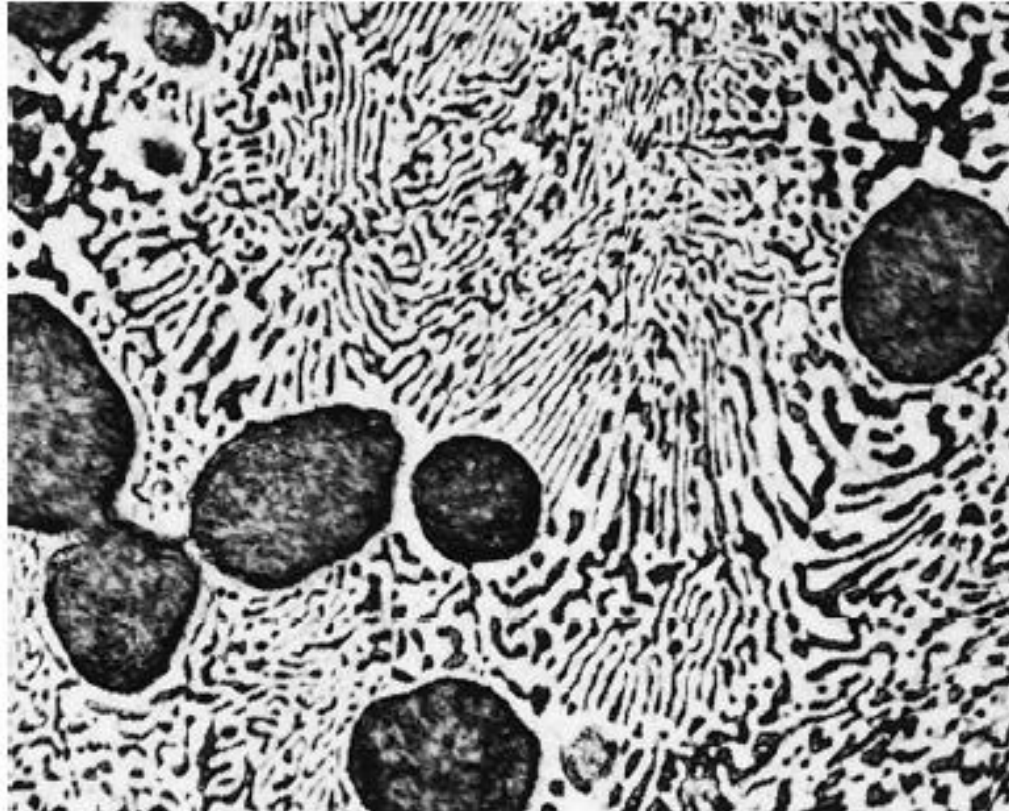
Mikrorakenne on monimuotoinen ilmiö joka vaikuttaa materiaalin ominaisuuksiin ratkaisevalla tavalla. Materiaalitiedettä voi hyvin kutsua mikrorakenteen tieteeksi.

Esimerkki: metallin sähkönjohtavuus perusilmiönä selittyy metallisidoksen avulla, mutta siihen vaikuttaa myös epäpuhtaudet ja rakeiden koko.

Ajattele että täältä ylhäältä tulee fotoni, fononi tai elektroni joka matkaa alaspäin.

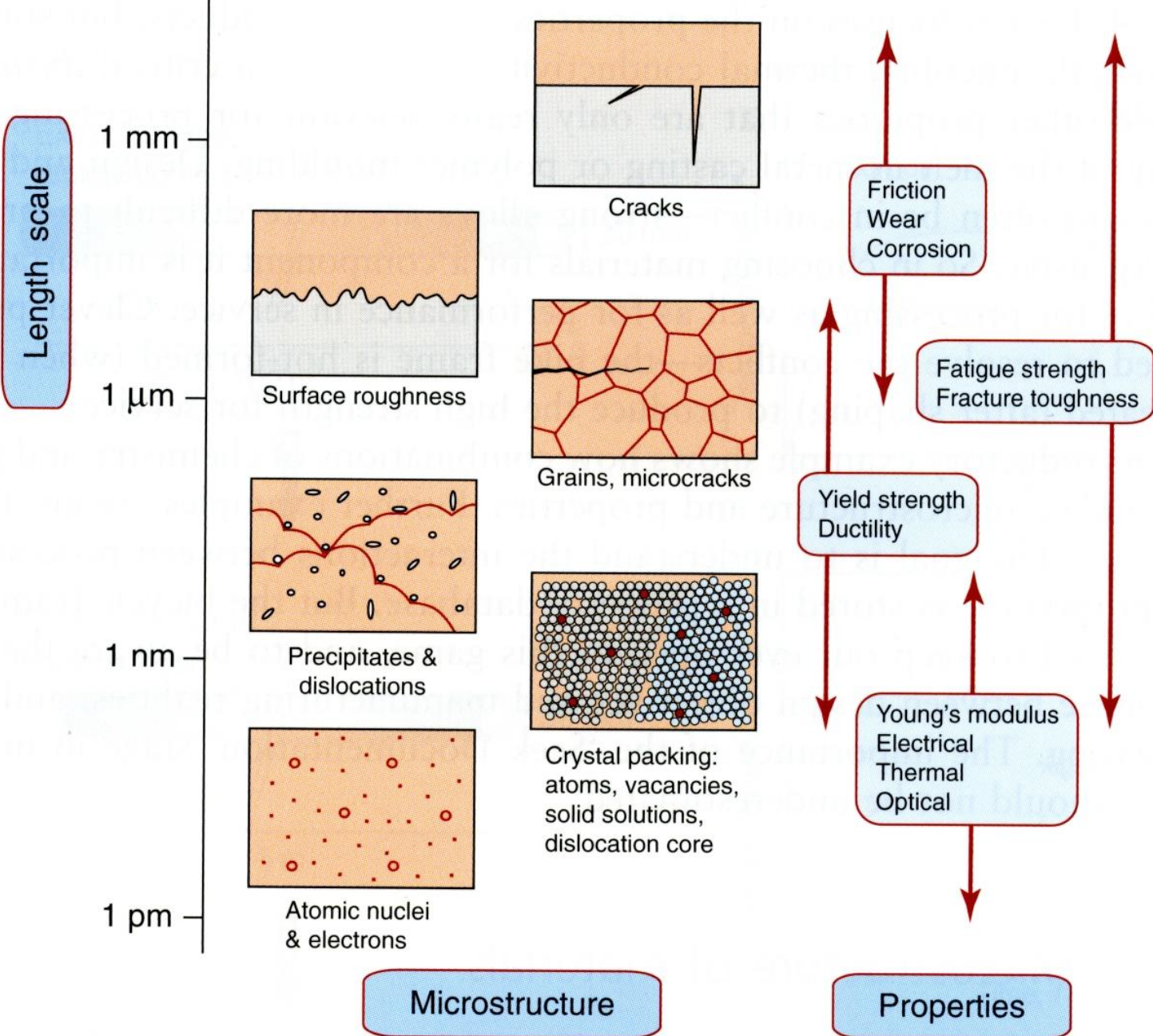
Eri hetkinä se matkustaa erilaisissa faaseissa tai törmää faasien välillä oleviin epäjatkuvuuskohtiin, eli raerajoihin

λ, ω, e

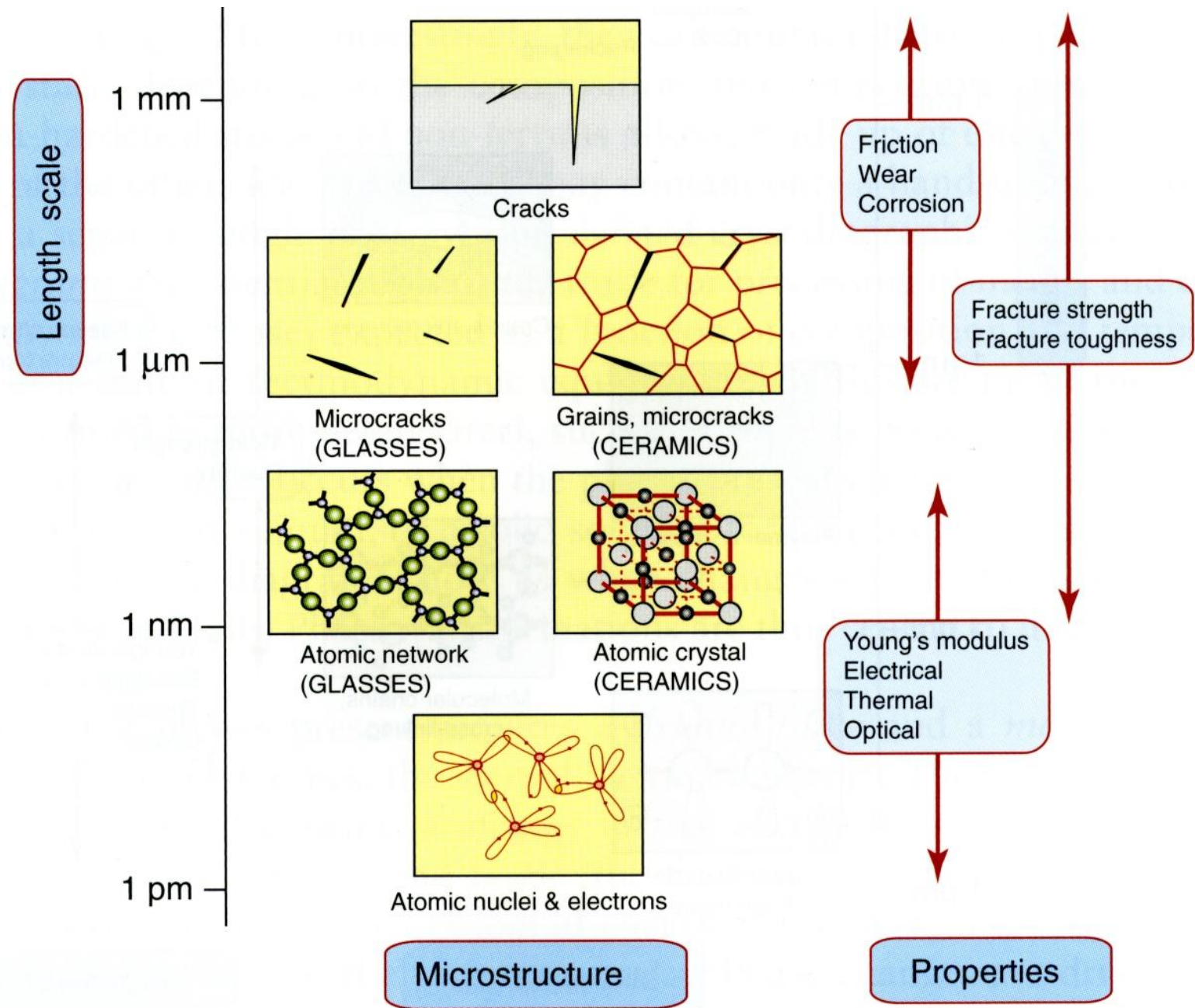


Ajatusleikin perusteella on toivottavasti ilmeistä minkä takia mikrorakenne vaikuttaa materiaalin optisiin, termisiin ja sähköisiin ominaisuuksiin.

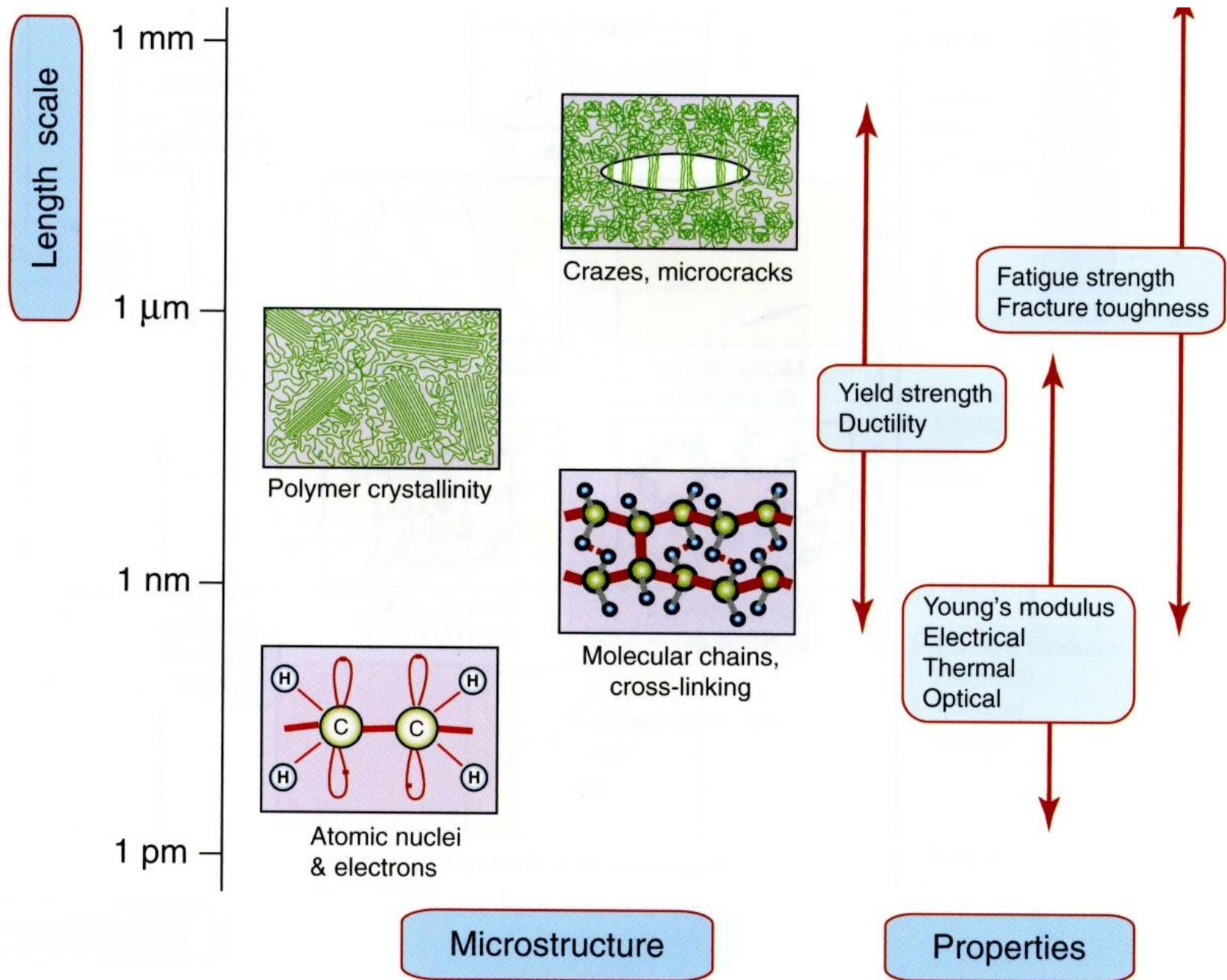
Metallit



Keraamit



Polymeerit



Pohdittavaksi: Mikä on materiaali? Mikä määrittää materiaalin ominaisuudet?

Minkä ominaisuuden perusteella voi sanoa että kaksi kappaletta on samaa materiaalia?

1. Sama materiaaliryhmä?
(esim. metalli)

Äänestäkää chattiin, 1, 2 vai 3

2. Sama koostumus?
(esim 99%Fe, 1%C)

3. Sama mikrorakenne?

Pohdittavaksi: Mikä on materiaali? Mikä määrittää materiaalin ominaisuudet?

Minkä ominaisuuden perusteella voi sanoa että kaksi kappaletta on samaa materiaalia?

1. Sama materiaaliryhmä?
(esim. metalli)

Ei sentään

2. Sama koostumus?
(esim 99%Fe, 1%C)

Usein ajatellaan näin

3. Sama mikrorakenne?

Mutta myös mikrorakenne vaikuttaa ominaisuuteen, joten jos koostumus määrittää materiaalit samaksi niin sitten samoilla materiaalilla voi olla eri ominaisuudet.

Yhteenveto

- 1. Sidostaso:** Kemiallisen (ja fysikaalisten) sidosten tyyppi jakaa aineet eri materiaaliryhmiin: metallit, keraamit, puolijohteet, polymeerit, biomateriaalit.
- 2. “Kidetaso”:** Nanotasolla aine on usein kiteistä, eli säännöllisesti järjestäytyntä.
- 3. Mikrorakenne:** Aineen mikrorakenne on erittäin laaja aihe. Eri materiaaliryhmillä on omat tyypilliset mikrorakenteensa. Kaikilla materiaaliryhmillä mikrorakenteen ymmärtäminen on avainasemassa ominaisuuksien ymmärtämiseen ja muokkaukseen.

Alue Shackelfordin kirjasta: luvut 2, 3.1, 3.2

Lähteet:

Shackelford, Introduction to Materials Science for Engineers

Callister, Materials Science and Engineering an Introduction