

# **FYZIKÁLNÍ METALURGIE**

**[Návody na cvičení]**

**Jiří Machuta  
Iva Nová**

Liberec, 2015

Tato publikace byla vytvořena v rámci řešení projektu „Podpora tvorby excelentních výzkumných a vývojových týmů na Technické univerzitě v Liberci“ s reg. číslem CZ 1.07/2.300/30.0065, který je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

© Jiří Machuta, Iva Nová - 2015

**ISBN 978-80-7494-197-9**

---

## Obsah

|                                                                     |           |
|---------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1. ÚVOD .....</b>                                                | <b>6</b>  |
| <b>2. METALURGIE VYBRANÝCH TECHNICKÝCH KOVŮ .....</b>               | <b>7</b>  |
| 2.1 SUROVINY PRO VÝROBU KOVŮ.....                                   | 7         |
| 2.2 METODY VÝROBY KOVŮ .....                                        | 9         |
| 2.3 CHARAKTERISTIKY VÝROBY JEDNOTLIVÝCH KOVŮ .....                  | 10        |
| 2.4 ŘEŠENÍ UKÁZKOVÉHO PŘÍKLADU.....                                 | 18        |
| 2.5 ÚLOHY K PROCVIČENÍ .....                                        | 20        |
| <b>3. KOVY V PERIODICKÉ SOUSTAVĚ PRVKŮ .....</b>                    | <b>21</b> |
| 3.1 STRUKTURA ATOMŮ KOVŮ.....                                       | 27        |
| 3.1.1 JÁDRO ATOMU .....                                             | 28        |
| 3.1.2 ELEKTRONOVÝ OBAL ATOMU.....                                   | 29        |
| 3.2 ÚLOHY K PROCVIČENÍ.....                                         | 34        |
| <b>4. TAVENINY KOVŮ.....</b>                                        | <b>36</b> |
| 4.1 VLASTNOSTI TAVENIN KOVŮ .....                                   | 37        |
| 4.1.1 VLASTNOSTI KOVŮ PŘI PŘECHODU Z TAVENINY DO TUHÉHO STAVU ..... | 42        |
| 4.1.2 ŘEŠENÍ UKÁZKOVÝCH PŘÍKLADŮ .....                              | 44        |
| 4.2 ÚLOHY K PROCVIČENÍ.....                                         | 45        |
| <b>5. KRYSTALICKÁ STAVBA KOVŮ .....</b>                             | <b>47</b> |
| 5.1 CHARAKTERISTIKA KRYSTALOVÝCH MŘÍŽEK.....                        | 47        |
| 5.1.1 KRYSTALOVÉ MŘÍŽKY A BUŇKY TECHNICKY DŮLEŽITÝCH KOVŮ.....      | 48        |
| 5.1.2 GEOMETRICKÉ PODMÍNKY – LAVESOVA KRITERIA.....                 | 50        |
| 5.1.3 STANOVENÍ KOEFICIENTU ZAPLNĚNÍ .....                          | 53        |
| 5.2 ALOTROPIE - POLYMORFIE .....                                    | 54        |
| 5.3 VÝPOČET TEORETICKÉ HUSTOTY ČISTÝCH KOVŮ .....                   | 55        |
| 5.4 STANOVENÍ ROVIN A SMĚRŮ KRYSTALICKÝM MŘÍŽEK.....                | 56        |
| 5.5 ŘEŠENÍ UKÁZKOVÝCH PŘÍKLADŮ .....                                | 62        |
| 5.6 ÚLOHY K PROCVIČENÍ.....                                         | 70        |
| <b>6. VADY KRYSTALICKÝCH MŘÍŽEK.....</b>                            | <b>75</b> |
| 6.1 BODOVÉ PORUCHY .....                                            | 75        |
| 6.2 ČAROVÉ PORUCHY.....                                             | 76        |
| 6.2.1 POHYB DISLOKACÍ A HUSTOTA DISLOKACÍ .....                     | 79        |

|       |                                                                       |     |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.2.2 | MNOŽSTVÍ DISLOKACÍ V KOVECH.....                                      | 80  |
| 6.3   | ROVINNÉ PORUCHY KRYSTALOVÉ MŘÍŽKY .....                               | 81  |
| 6.4   | PORUCHY OBJEMU KRYSTALŮ.....                                          | 83  |
| 6.5   | ÚLOHY K PROCVIČENÍ.....                                               | 83  |
| 7.    | TERMODYNAMICKÉ VÝPOČTY KOVŮ.....                                      | 84  |
| 7.1   | FÁZOVÉ PRAVIDLO (GIBBSŮV ZÁKON FÁZÍ).....                             | 84  |
| 7.2   | TERMODYNAMICKÉ STAVOVÉ FUNKCE.....                                    | 85  |
| 7.2.1 | ENERGIE.....                                                          | 86  |
| 7.2.2 | ENTALPIE.....                                                         | 87  |
| 7.2.3 | ENTROPIE .....                                                        | 90  |
| 7.2.4 | GIBBSOVA ENERGIE .....                                                | 93  |
| 7.2.5 | HELMHOLTZOVA ENERGIE.....                                             | 94  |
| 7.3   | TERMODYNAMIKA FÁZOVÝCH PŘEMĚN .....                                   | 94  |
| 7.4   | DŮLEŽITÉ MATEMATICKÉ VZORCE POTŘEBNÉ PRO TERMODYNAMICKÉ VÝPOČTY ..... | 95  |
| 7.5   | UKÁZKA ŘEŠENÝCH PŘÍKLADŮ Z TERMODYNAMIKY KOVŮ.....                    | 96  |
| 7.6   | ÚLOHY K PROCVIČENÍ.....                                               | 97  |
| 8.    | DIFÚZE V KOVECH .....                                                 | 98  |
| 8.1   | ARRHENIOVA ROVNICE.....                                               | 100 |
| 8.2   | FICKOVY ZÁKONY.....                                                   | 101 |
| 8.3   | UKÁZKY ŘEŠENÍ PŘÍKLADŮ Z DIFÚZE KOVŮ .....                            | 105 |
| 8.4   | ÚLOHY K PROCVIČENÍ.....                                               | 109 |
| 9.    | LOMY KOVŮ.....                                                        | 111 |
| 9.1   | CHARAKTERISTIKA LOMŮ V KOVECH VZNIKLÝCH NA ZÁKLADĚ SÍLY .....         | 112 |
| 9.1.1 | KŘEHKÝ LOM .....                                                      | 112 |
| 9.1.2 | HOUŽEVNATÝ LOM.....                                                   | 114 |
| 9.1.3 | ADIABATICKÝ STŘIHOVÝ LOM .....                                        | 116 |
| 9.2   | ÚNAVOVÝ LOM.....                                                      | 116 |
| 9.3   | CREEPOVÉ PORUŠENÍ MATERIÁLU .....                                     | 118 |
| 9.4   | ÚLOHY K PROCVIČENÍ.....                                               | 121 |
| 10.   | VYBRANÉ VLASTNOSTI KOVŮ .....                                         | 124 |
| 10.1  | FYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI KOVŮ .....                                       | 124 |
| 10.2  | TEPELNÉ VLASTNOSTI KOVŮ .....                                         | 126 |
| 10.3  | ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI KOVŮ .....                                      | 129 |
| 10.4  | MAGNETICKÉ VLASTNOSTI KOVŮ.....                                       | 130 |
| 10.5  | PRUŽNOSTNÍ VLASTNOSTI KOVŮ.....                                       | 134 |
| 10.6  | ŘEŠENÍ UKÁZKOVÝCH PŘÍKLADŮ .....                                      | 139 |

---



|        |                                                                         |     |
|--------|-------------------------------------------------------------------------|-----|
| 10.7   | ÚLOHY K PROCVIČENÍ .....                                                | 141 |
| 11.    | KRYSTALICKÁ STAVBA FÁZÍ SOUSTAV KOVŮ .....                              | 143 |
| 11.1   | KLASIFIKACE KOVOVÝCH SOUSTAV .....                                      | 144 |
| 11.1.1 | TUHÉ ROZTOKY .....                                                      | 144 |
| 11.1.2 | INTERMEDIÁLNÍ FÁZE .....                                                | 147 |
| 11.2   | ÚLOHY K PROCVIČENÍ .....                                                | 153 |
| 12.    | FÁZOVÉ PŘEMĚNY V TUHÉM STAVU .....                                      | 154 |
| 12.1   | ALOTROPICKÉ PŘEMĚNY KOVŮ .....                                          | 154 |
| 12.2   | ROZPAD TUHÉHO ROZTOKU .....                                             | 155 |
| 12.2.1 | SEGREGACE .....                                                         | 155 |
| 12.2.2 | WIDMANSTÄTTENOVA STRUKTURA (WS) .....                                   | 156 |
| 12.2.3 | PRECIPITACE .....                                                       | 156 |
| 12.2.4 | EUTEKTOIDNÍ PŘEMĚNA .....                                               | 157 |
| 12.3   | PŘEMĚNY TUHÉHO ROZTOKU .....                                            | 157 |
| 12.4   | TECHNICKY DŮLEŽITÉ PŘEMĚNY .....                                        | 158 |
| 12.4.1 | PERLITICKÁ PŘEMĚNA .....                                                | 158 |
| 12.4.2 | BAINITICKÁ PŘEMĚNA .....                                                | 160 |
| 12.4.3 | MARTENZITICKÁ PŘEMĚNA .....                                             | 162 |
| 13.    | DEFORMAČNÍ CHOVÁNÍ KOVŮ .....                                           | 165 |
| 13.1   | PRUŽNÁ (ELASTICKÁ) DEFORMACE .....                                      | 166 |
| 13.2   | PLASTICKÁ DEFORMACE KOVŮ .....                                          | 168 |
| 13.2.1 | PLASTICKÁ DEFORMACE SKLUZEM – TRANSLACÍ .....                           | 170 |
| 13.2.2 | PLASTICKÁ DEFORMACE DVOJČATĚNÍM .....                                   | 173 |
| 13.3   | ÚLOHY K PROCVIČENÍ .....                                                | 174 |
| 14.    | METODY SLEDOVÁNÍ KOVŮ A JEJICH SLITIN .....                             | 175 |
| 14.1   | MIKROSKOPICKÁ POZOROVÁNÍ STRUKTURY KOVŮ .....                           | 175 |
| 14.1.1 | SVĚTELNÝ MIKROSKOP .....                                                | 176 |
| 14.1.2 | ELEKTRONOVÝ MIKROSKOP .....                                             | 180 |
| 14.2   | VYUŽITÍ SVĚTELNÉHO MIKROSKOPU PRO POZOROVÁNÍ KOVŮ .....                 | 184 |
| 14.2.1 | HODNOCENÍ VELIKOSTI ZRN PODLE ETALONOVÉ ŘADY (DLE ČSN.....) .....       | 184 |
| 14.2.2 | HODNOCENÍ STRUKTURY GRAFITICKÝCH LITIN .....                            | 186 |
| 14.3   | VYUŽITÍ ELEKTRONOVÝCH MIKROSKOPŮ PRO ANALÝZU KOVŮ A JEJICH SLITIN ..... | 191 |
| 14.4   | ÚLOHY K PROCVIČENÍ .....                                                | 191 |
|        | <b>PŘÍLOHA</b> .....                                                    | 198 |

## 1. Úvod

**Metalurgie** (*hutnictví*) – *zpracování surovin pro výrobu kovů a jejich slitin.*) Metalurgie je z řeckého *metallourgos*, *pracovník s kovem* < *metallon*, kov + *ergon*, práce). Je výrobní odvětví, které se zabývá zpracováním surovin pro výrobu kovů a jejich slitin. Metalurgie se týká výroby železa a ocelí, neželezných kovů. Pro charakteristiku a jejich pochopení dějů významnou úlohu sehrává *fyzikální metalurgie a fyzika kovů*.

Jak je známo, náš historický vývoj prošel dobou kamennou, dobou měděnou, dobou bronzovou a dobou železnou, vrcholící v 19. a 20. století. Nejstarší nálezy měděných figurek jsou známy z 6. tisíciletí před n. l. Měděné nástroje a zbraně se začaly objevovat 4500 let před n. l. V této době byla používána měď především v ryzím stavu. Těžko však upřesnit dobu, kdy začal člověk vyrábět kovy z rud redukcí. Lze předpokládat, že mýcením pralesů ohněm docházelo k zuhelnování dřeva a vysoké teploty způsobovaly redukci hornin skládajících se z lehké redukovatelných rud.

Značný rozvoj výroby kovů nastal s nástupem kapitalistického společenského řádu, resp. v důsledku „Průmyslové revoluce“ v Anglii. Objevy a výroba různých kovů je spojena i s rozvojem chemie na přelomu 18. a 19. století.

Sledujeme-li historický vývoj výrobních způsobů technicky významných kovů, nacházíme zásadní rozdíl podle toho, jak se kovy chovají k uhlíku, který je nejrozšířenějším redukčním činidlem (po dlouhá tisíciletí jako dřevěné uhlí, od poloviny 18. stol. jako kamenouhelný koks). Mnohé kovy z oxidických rud lze vyredukovat snadno, jako např. měď, olovo, tj. kovy jejichž výroba byla známa již v minulosti. Ve starověku k nim patřily stříbro, zinek, cín a rtuť. Naproti tomu některé kovy tvoří velmi stálé oxidy, které uhlíkem za běžných podmínek redukovat nelze. Jsou to např. oxid hlinitý ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), oxid křemičitý ( $\text{SiO}_2$ ) nebo oxid hořečnatý ( $\text{MgO}$ ), atd. Proto výroba těchto kovů zůstala neznámou až do doby rozvoje moderní chemie a elektrochemie. Jako např. hliník, jehož výroba je známa od roku 1825.

Úkolem těchto skript a praktických cvičení z předmětu Fyzikální metalurgie je postupně seznámit studenty se všemi fyzikálními procesy, které se při práci s kovy a jejich slitinami dějí a lze je využít v technické praxi.

*„Železo nám připadá jako obyčejný kov, ale v jeho podstatě se skrývají mnohá tajemství. Lidé, kteří se jím budou zabývat, dosáhnou velkého užitku nejen pro sebe, ale i pro celé lidstvo.“*  
(Joseph Glanvill 1636 – 1680)

## 2. METALURGIE VYBRANÝCH TECHNICKÝCH KOVŮ

**Metalurgie** (hutnictví) je průmyslovým odvětvím, zahrnuje zpracování surovin pro výrobu kovů a jejich slitin.

Výroba kovů se dělí do dvou skupin:

- a) výroba železa a jeho slitin (výroba technického železa, ocelí a litin);
- b) výroba neželezných kovů.

Výroba konkrétního kovu je úzce spojena s příslušnou výrobní technologií. Surovinami pro výrobu kovů jsou nejčastěji rudy (např. železné rudy pro výrobu železa). Pro výrobu hliníku se používá hornina nazývaná bauxit. Pro výrobu zinku se používá sfalerit ( $\text{ZnS}$ ).

### 2.1 Suroviny pro výrobu kovů

Pro výrobu kovů se používají minerály, horniny, které v metalurgii označujeme nejčastěji rudy.

**Železné rudy** – jak říká název, jsou to rudy pro výrobu surového železa. Železné rudy jsou nejčastěji oxidy železa:

Magnetovec (magnetit  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) - je nejcennější rudou, obsahuje průměrně 40 až 70 % železa. Je černý a velmi tvrdý, obtížně se redukuje. Nachází se ve Švédsku, Rusku a na Ukrajině.

Krevel (hematit  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) - obsahuje 40 až 65% železa. Je červený a velmi snadno se redukuje. Těží se v Rusku, v Čechách se nachází v povodí Berounky (obsahuje 40 % Fe).

Hnědel (limonit  $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ) - je nerozšířenější železnou rudou, obsahuje zpravidla 28 až 50 % železa a značné procento fosforu. Je žlutohnědé barvy. Po vypražení se nechá snadno redukovat.

Ocelek (siderit  $\text{FeCO}_3$ ) - po vypražení obsahuje 44 až 58% železa. Obsahuje značné množství manganu. Je světle žluté barvy.

V příloze č. 1 jsou uvedeny železné rudy (minerály) pro výrobu surového železa a současně obrázky vybraných typů železných rud.

**Suroviny pro výrobu hliníku** - nejčastěji se používá **bauxit** je směsí několika minerálů zahrnující hydroxidy hliníku, gibbsit, böhmít, diaspor, dihydrát oxidu hliníku ( $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) a oxidy železa. Dříve se bauxit, viz příloha č. 4, se klasifikoval jako minerál, současná literatura uvádí bauxit jako horninu. Svůj název dostal podle vsi Le Baud – Provence v jižní Francii.

**Suroviny pro výrobu zinku** – nejpoužívanější **sfalerit**, je to nejvýznamnější zinková ruda ( $\text{ZnS}$ ), viz příloha č. 4, zvaný též jako zinkové blejno, což je sulfid zinku. Sfalerit se pražením převádí na oxid zinečnatý ( $\text{ZnO}$ ).

Vedlejší produkt  $\text{SO}_2$  se zpracovává na kyselinu sírovou. Redukce oxidu zinečnatého na kovový zinek se provádí v retortových pecích ohřevem směsi koncentráту  $\text{ZnO}$  s drobným koksem při teplotě asi 1200 až 1300 °C. Zinek

zbavený kyslíku a převedený za těchto vysokých teplot do plynného stavu je odváděn do sběrných předloh, kde při teplotě 600 °C kondenzuje. Touto technologií se získává zinek s čistotou asi 98 %.

**Suroviny pro výrobu mědi** - čistá měď se v přírodě nachází vzácně, ve větším množství se vyskytuje převážně jen ve sloučeninách. Nejčastěji se nachází ve formě sulfidů, mezi něž patří například chalkozin neboli leštěnec měděný  $\text{Cu}_2\text{S}$ , covellin  $\text{CuS}$ , bornit  $\text{Cu}_3\text{FeS}_3$ , bournonit  $(\text{Cu}_2\text{Pb})_3[\text{SbS}_3]_2$  nebo chalkopyrit neboli kyz měděný  $\text{CuFeS}_2$ . Dalšími významnými minerály jsou kuprit  $\text{Cu}_2\text{O}$ , zelený malachit  $\text{CuCO}_3 \cdot \text{Cu}(\text{OH})_2$  a jemu chemicky podobný modrý azurit  $2 \text{CuCO}_3 \cdot \text{Cu}(\text{OH})_2$ . V příloze č. 4 jsou ukázky různých sloučenin mědi.

**Suroviny pro výrobu hořčíku** - hořčík se v přírodě nachází jen ve formě různých chemických sloučenin a tvoří asi 2,35 % zemské kůry. Vyrábí se z hořčíkových rud, ale lze ho též získat dokonce i z mořské vody. Hořčíkové soli, které jsou rozpuštěné v mořské vodě tvoří nevyčerpatelné zásoby. Jak je známo 1 kg mořské vody obsahuje asi 3,8 g  $\text{MgCl}_2$ , 1,7 g  $\text{MgSO}_4$ , 0,1g  $\text{MgBr}_2$ . Pro průmyslovou výrobu hořčíku mají význam rudy jako je dolomit ( $\text{MgCO}_3 \cdot \text{CaCO}_3$ ), magnezit ( $\text{MgCO}_3$ ), karnalit ( $\text{MgCl}_2 \cdot \text{KCl} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), bischofit  $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  a dále mořská voda. Rudy pro výrobu mědi jsou uvedeny v příloze č. 5.

**Suroviny pro výrobu niklu** - čistým niklem se v přírodě setkáme pouze vzácně, jen ve slitině s železem v železných meteoritech, dopadajících na Zemi z kosmického prostoru.

Velká část niklu přítomného na Zemi je soustředěna v zemském jádře. Nikl se slučuje s kyslíkem (afinita ke kyslíku) i se sírou, resp. i s arzenem a vytváří se tedy dva typy ložisek. Primární, sulfidická, ve kterých se nachází v sirnicích a arzenidech - sulfid nikelnato-železitý-pentlamdit  $(\text{Ni,Fe})_9\text{S}_8$ , nikelin  $\text{NiAs}$ , millerit  $\text{NiS}$ , breithauptit  $\text{NiSb}$ , cloanit  $\text{NiAs}_2$ , gersdorfit  $\text{NiAsS}$ , smaltin  $(\text{Ni,Co,Fe})\text{As}_2$  a ullmanit  $\text{NiSbS}$ . Dále sekundární, kyslíkatá, lateritická, vznikající zvětřováním olivínu z ultrabazických hornin zemského pláště, které se dostaly na povrch. Vrstvy zvětřalin, obohacené železem, hliníkem a ochuzené o křemík a se nazývají laterity a vznikají lateritickým zvětřováním. Niklonosné laterity se typicky vyskytují ve zvětřalinách hadcových těles, což byly původně olivinické horniny ze zemského pláště, z hloubek okolo 50 km a více. Olivín je na povrchu nestálý, rychle zvětřává. Nikl v něm byl původně vázán jako příměs a zvětřováním přešel do hydrosilikátů niklu, zejména *garnieritu*  $(\text{Ni,Mg})_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})$ . Rudy pro výrobu niklu jsou uvedeny v příloze č. 5

**Suroviny pro výrobu titanu** – mezi nejvýznamnější rudy patří **ilmenit** ( $\text{FeTiO}_3$ ), oxid železnato-titaničitý) a **rutil** ( $\text{TiO}_2$  - oxid titaničitý). Přes své vysoké zastoupení v zemské kůře byl čistý kovový titan po dlouhou dobu velmi vzácným a drahým materiálem.

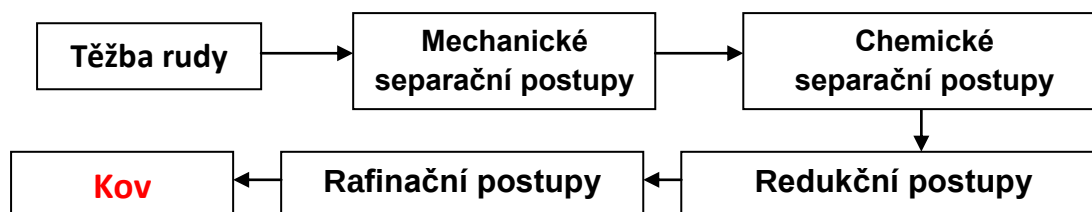
Důvodem je skutečnost, že běžné hutní metody, které se využívají k výrobě jiných kovů, jsou v případě titanu neúčinné díky možnosti titanu reagovat za

zvýšené teploty s kyslíkem, vodíkem, uhlíkem a dusíkem. V příloze č. 5 jsou rudy pro výrobu niklu.

## 2.2 Metody výroby kovů

Obecně výroba kovů začíná těžbou surovin – nejčastěji těžbou rud.

**Ruda** je obecný technický název pro nerost (směs nerostů), popř. minerál ze kterého se vyrábí kov. Rudy jsou horniny, které obsahují kovy v takovém množství a formě, která je vhodná pro ekonomickou výrobu. Na obr. 2-1 je schematicky naznačen obecný postup výroby kovů.



Obr. 2-1 Schéma obecného postupu výroby kovů

Jednotlivé postupy výroby kovů zahrnují nejrůznější možné operace, které závisí na vyráběném typu kovů. Před samotnou výrobou kovů z rud se nejčastěji provádí tyto operace:

- a) úprava kusovitosti rud a její obohacení, tj. zmenšování podílu hlušiny,
- b) tepelné způsoby úpravy (např. sušení, atd.),
- c) chemické způsoby úpravy.

Pro výrobu tavenin kovů je vedle přípravy rud nutno mít k dispozici paliva a další přísady, které jsou specifické pro jednotlivé typy výroby kovů.

Důležitým krokem hutních technologií je oddělení hlušiny, která neobsahuje požadovaný kov v příslušné rudě.

Dalším krokem při výrobě kovů jsou pochody, které probíhají buď za vysokých teplot - **pyrometalurgické pochody** nebo působením vhodných chemických činidel - **hydrometalurgické pochody**, popř. elektrochemické pochody, resp. **elektrometalurgické pochody** (elektrolýza taveniny nebo roztoku).

Pyrometalurgické pochody - výroba kovů pyrometalurgickým způsobem je založena na působení vysokých teplot v hutnických pecích, které jsou pro jednotlivé druhy výrob kovů specificky přizpůsobeny.

Metodu termického rozkladu lze využít pro výrobu kovu ze sloučeniny, která je dostatečně termicky nestabilní. Zpravidla se jedná o oxidy těchto kovů. Pyrometalurgicky se vyrábí např. surové železo, měď, zinek nebo cín.

Hydrometalurgické pochody - jsou založené na louhování připravených rud vhodnými rozpouštědly. Vlastnímu pochodu často předchází úprava rud

pražením. Kovy nebo jejich sloučeniny se tak převádějí do roztoku. Nejčastěji se používá zředěný roztok kyseliny sírové nebo roztoky různých solí. K tomuto účelu se používají louhovací nádrže, které jsou specificky konstruované pro jednotlivé druhy výroby kovů. Hydrometalurgické pochody jsou obecně ve srovnání s termickým rozkladem nákladnější, ale výroba je méně ztrátová. V technické praxi se často tato metoda kombinuje s pochody probíhajícími v hutnických pecích. Hydrometalurgické pochody jsou typické pro výrobu zlata a stříbra.

Elektrometalurgické pochody - základem elektrometalurgických pochodů výroby kovů je elektrolyza tavenin nebo roztoků jejich solí. Pro tuto metodu musí být použity velmi čisté sloučeniny kovů, aby nedocházelo k rušivým vlivům, a při elektrolyze se získá čistý kov. Kationty kovů, které jsou v roztoku nebo tavenině přítomné se redukují na katodě. Hlavními zařízeními elektrolytického způsobu výroby kovů jsou elektrolyzéry. To jsou vany z ocelového plechu vyzděné uhlíkovou vyzdívkou. Dno vany bývá katodou, anodou jsou obvykle uhlíkové elektrody. Elektrometalurgické pochody jsou typické pro výrobu alkalických kovů a kovů alkalických zemin, jako výchozí suroviny jsou použity jejich halogenidy, hydroxidy nebo oxidy. Výroba elektrolyzou je typická i pro výrobu hliníku.

## 2.3 Charakteristiky výroby jednotlivých kovů

**Výroba surového železa** – získávání surového železa z rud se provádí ve vysoké peci, viz obr. 2-2 Vysoká pec je šachtová pec ve které se topí koksem. K tavení se používá mimo železná ruda a koksu ještě vápenec a další přísady.

**Koks** plní ve vysoké peci nejen funkci topidla, ale také přispívá k redukci železné rudy, vytváří v některých místech vysoké pece CO, v některých místech pece CO<sub>2</sub>, viz obr. 2-3. Oba plyny napomáhají **k redukci železné rudy** – tj. vážou na sebe kyslík ze železné rudy, tím se ruda za vysokých teplot rozpadá a vytváří se **surové železo**.

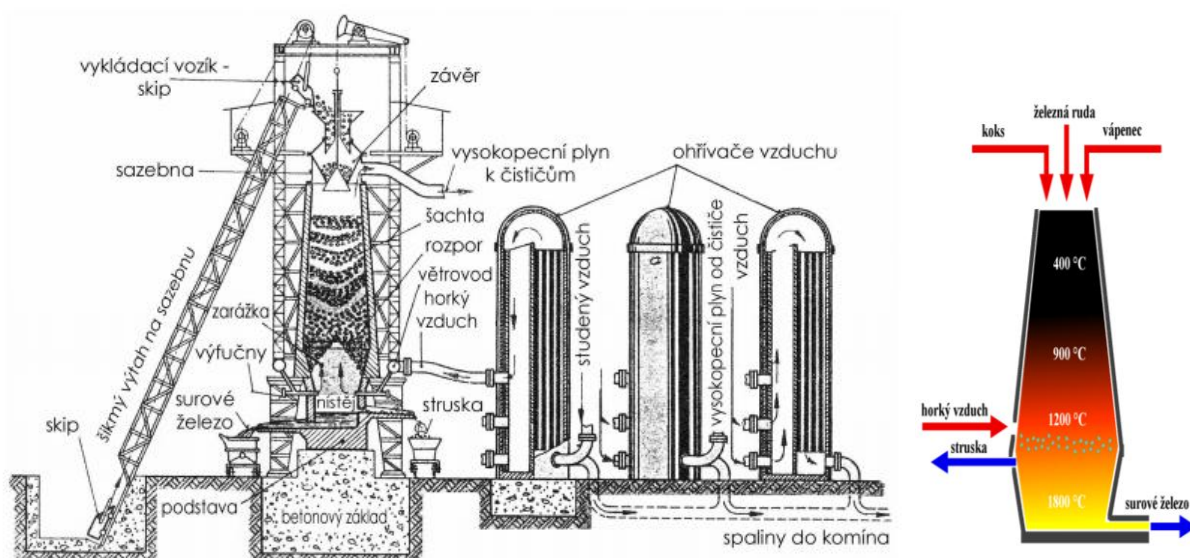
**Vápenec** (CaCO<sub>3</sub>) je struskotvorná látka a usnadňuje chemické procesy potřebné pro tavení železných rud.

Na obr. 2-4 je vysokopecní koks a vápenec. Tavení železné rudy je z hlediska chemie redukční proces, který probíhá při teplotách kolem 1500 °C.

Získaná tavenina surového železa má vysoký obsah uhlíku cca až 4,3 %. Další prvky, příměsi, se pohybují v různém rozmezí, např. 0,5 až 3,0 % Si, 0,5 až 3,0 % Mn, 0,05 až 2 % P a cca 0,1 % S.

Tato tavenina se vlévá do jednoduchých hutnických forem a po ztuhnutí získáváme housky.

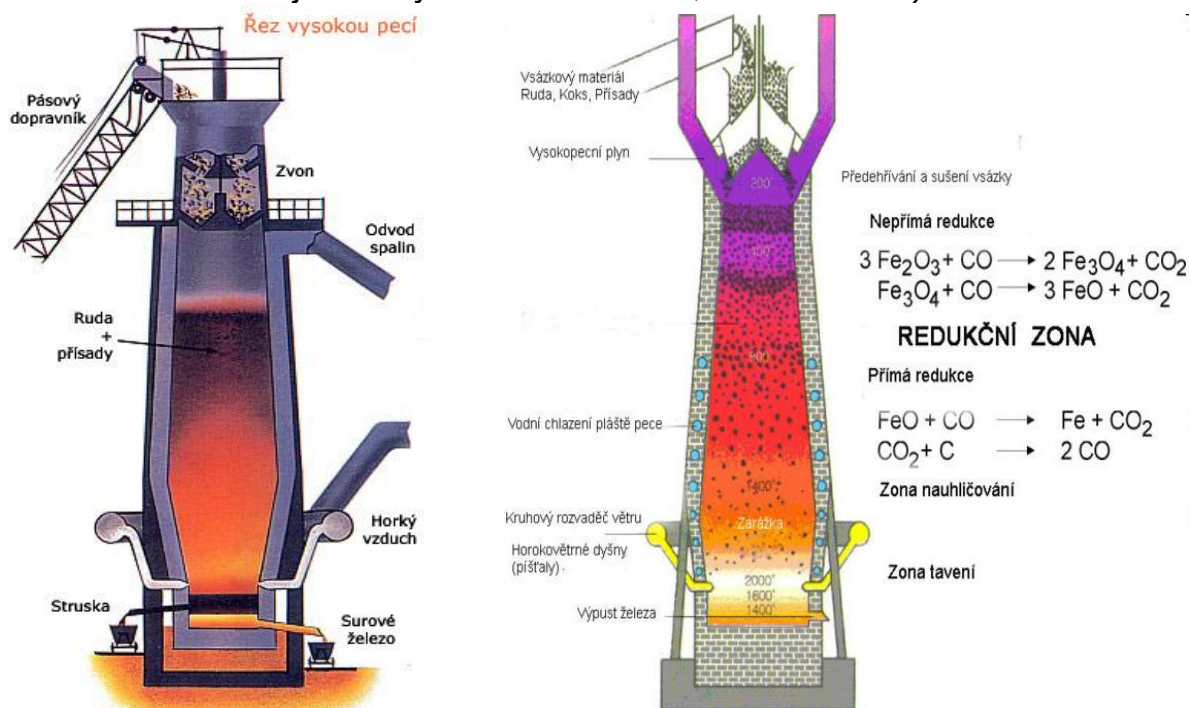
Vlivem vysokého obsahu uhlíku je tvrdé a křehké. Při ohřátí na teploty 1150°C až 1250°C se taví bez přechodu přes tvárný stav. Proto ho není možné tvářet za tepla ani za studena. Nazývá se také **nekužné železo** a jeho přímé použití je velmi omezené. Slouží především jako výchozí surovina pro výrobu technicky důležitých slitin železa – ocelí a litin.



Obr. 2-2 Schéma vysoké pece s příslušenstvím a základní schéma vysoké pece [1]

**Poznámka:** Výroba surového železa byla používána již ve Starověké Číně v období tzv. rané dynastie Čou, tj. v období 1122 až 256 př. N. letopočtem. Nebylo prokázáno, že v Evropě by se používala výroba surového železa dříve, než od 14. století.

Na obr. 2-5 je ukázka taveniny surového železa, které se vlévá do kokil a po ztuhnutí se získávají housky surového železa, viz obr. 2-6 a).



Obr. 2-3 Redukční pásma tavení ve vysoké peci [1]

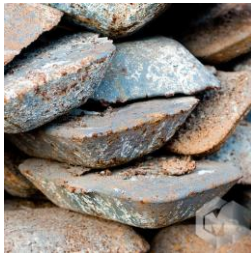




Obr. 2-4 Vysokopecní koks a vápenec



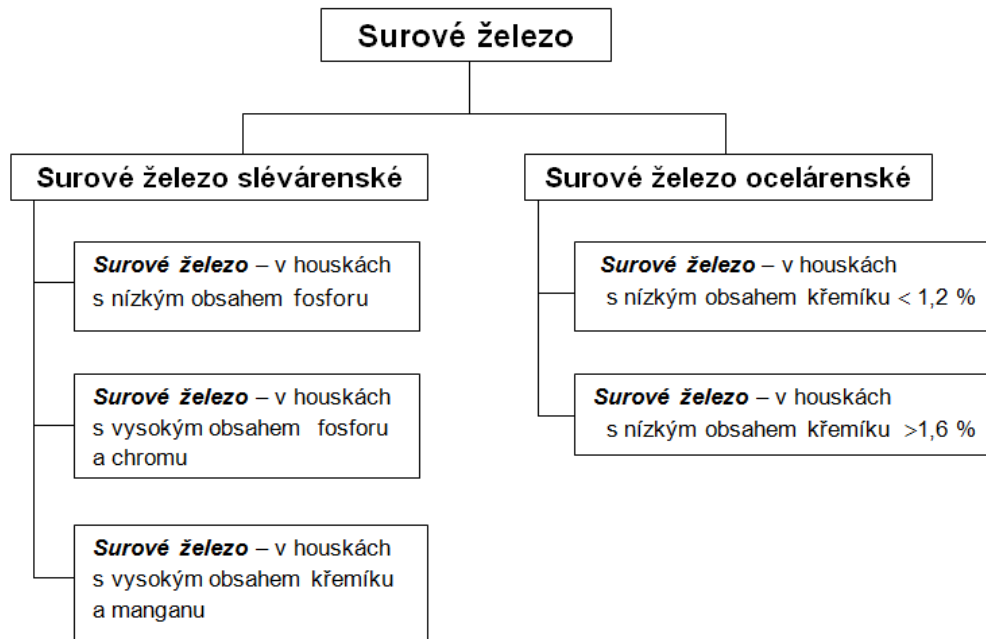
Obr. 2-5 Tavenina surového Fe a tavenina ve formě pro výrobu housek surového železa



Obr. 2-6 a) Housky surového železa [1]

Vyráběné surové železo se získává s různou kvalitou. Surové železo se dělí na dvě skupiny, viz schéma na obr. 2-6 b). Surová slévárenská železa se používají jako základní materiál k výrobě litiny (především litiny s lupínkovým grafitem). Surová ocelářská železa se používají pro výrobu litiny s kuličkovým a červíkovitým grafitem. Surová ocelářská železa slouží především pro výrobu ocelí.



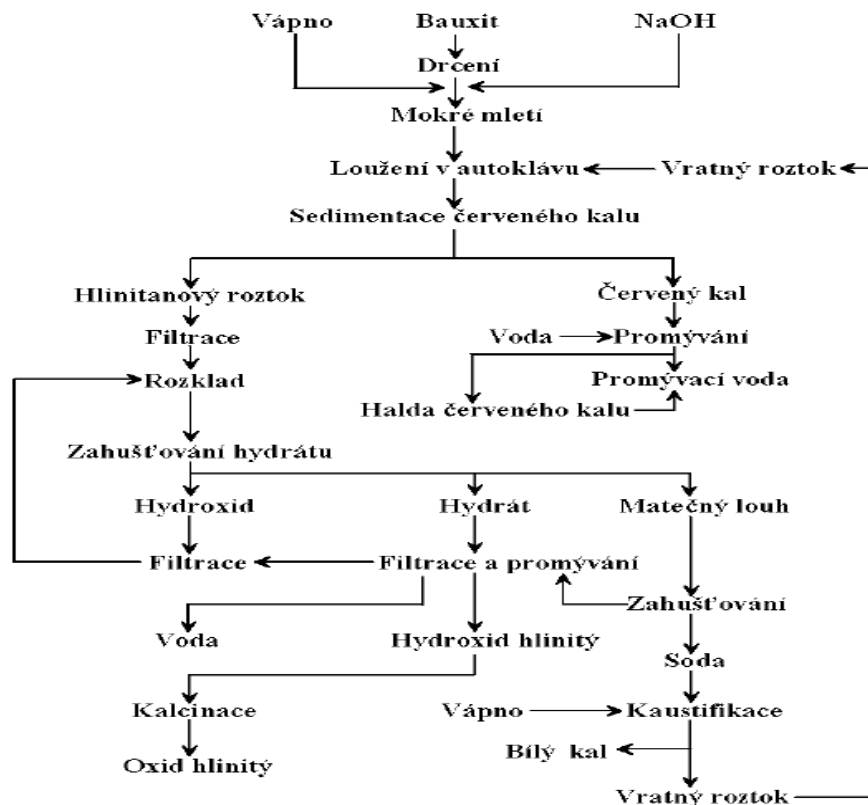


Obr. 2-6 b) Základní schéma rozdělení surových želez

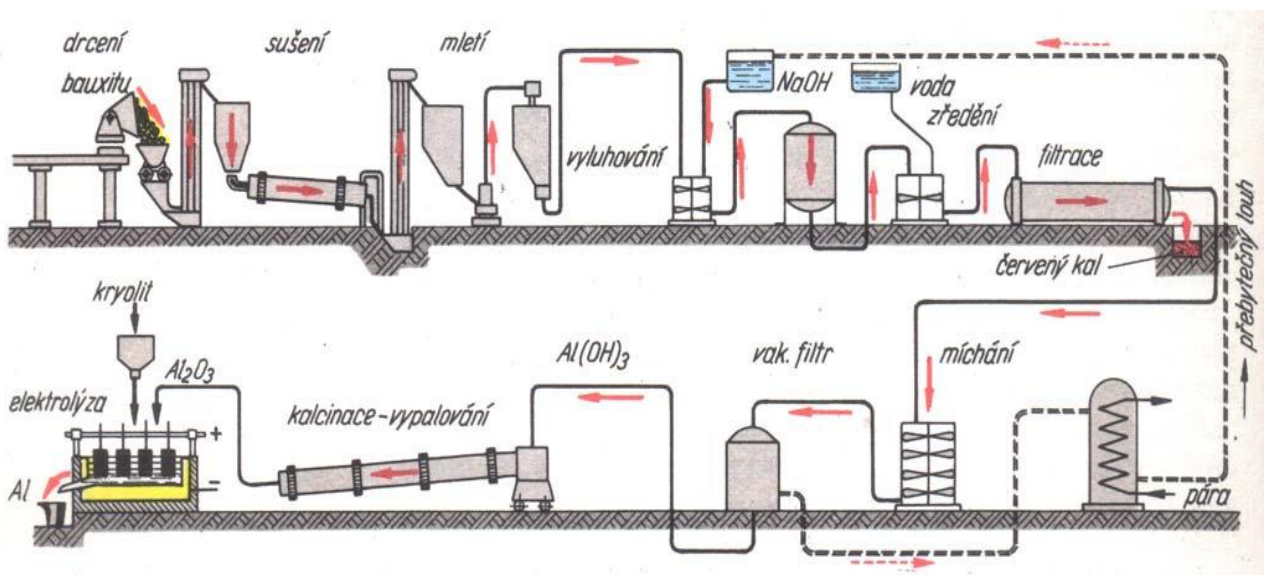
**Výroba hliníku** – hliník se vyrábí z horniny zvané bauxit. Výroba je rozdělena do dvou fází:

1. fáze: nejdříve se z horniny vyrobí *čistý oxid hlinitý*
2. fáze: z oxidu hlinitého se *elektrolýzou* vyrobí *hliník*.

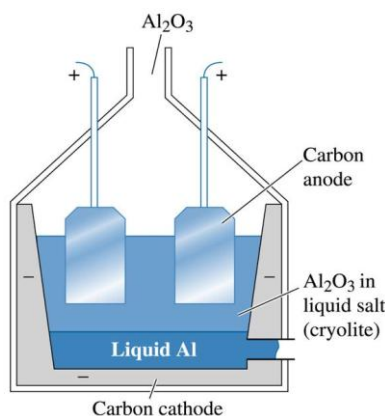
Výroba hliníku je schematicky znázorněna na obr. 2-7 a obr. 2-8.



Obr. 2-7 a) Schéma výroby Bayerovy metody výroby hliníku (1. fáze)



Obr. 2-7 b) Schéma výroby hliníku z bauxitu (1. i 2. fáze)



*Carbon anode – uhlíková elektroda, carbon cathode – uhlíková katoda,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  in liquid salt (cryoline) -  $\text{Al}_2\text{O}_3$  v tavenině soli (kryolinu)  
elektrické napětí je 5 V, elektrický proud je 200 kA*

Obr. 2-8 Schéma II. fáze výroby hliníku – elektrolýza  $\text{Al}_2\text{O}_3$  za vzniku taveniny hliníku

**Výroba hořčíku** - podstatou je rozklad roztaveného  $\text{MgCl}_2$  v tavenině s KCl, NaCl a  $\text{CaCl}_2$ . Proto první přípravnou operací je výroba bezvodého  $\text{MgCl}_2$ , a to z mořské vody, bischofitu, karnalitu nebo z magnezitu. V průmyslovém měřítku se používá hlavně dvou metod, které se od sebe liší stupněm dehydratace získaného chloridu.

Výroba  $\text{MgCl}_2$  z mořské vody - v průmyslovém měřítku se používá dvou metod, které se od sebe liší stupněm dehydratace získaného chloridu. Hořčík se z mořské vody sráží vápnem CaO. Vzniklý  $\text{Mg}(\text{OH})_2$  se odfiltruje a rozpustí v kyselině solné HCl. Roztok chloridu se pak odpařuje a neúplně dehydratuje, čímž vzniká  $\text{MgCl}_2 \cdot 1,5\text{H}_2\text{O}$ .

Při elektrolýze tohoto produktu vzniká také chlorovodík, jako následek hydrolýzy. Při druhém zpracování se  $\text{Mg}(\text{OH})_2$  kalcinuje na MgO, a ten se potom chloruje na bezvodý  $\text{MgCl}_2$ . Elektrolýzou vzniklý chlór, se vrací do výroby.

Výroba bezvodého  $\text{MgCl}_2$  z bischofitu  $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  – bischofit se taví při ohřevu na teplotu  $106^\circ\text{C}$  ve vlastní krystalové vodě. Zvyšováním teploty postupně vodu ztrácí, ale odstranění poslední části krystalové vody je doprovázeno hydrolýzou. Při vyšší teplotě je hydrolýza určena rovnováhou:



Je nutno konečnou dehydrataci provádět tak, aby rovnice probíhala doleva, tj. zvýšením tlaku par chlorovodíku. Konečná dehydratace probíhá v elektrické peci v proudu při teplotě HCl vyšší než  $T_m \text{ MgCl}_2$ .

Hořčík se vyrábí *elektrolýzou roztaveného bezvodého  $MgCl_2$*  ve směsi s KCl,  $NaCl_2$  a  $CaCl_2$ . Elektrolyt má toto složení: 10 až 12%  $MgCl_2$ , 75 až 78% KCl, 6 až 8% NaCl a 1,5 až 4,5  $CaCl_2$ .

Přímá elektrolýza čistého  $MgCl_2$  je možná, ovšem je výhodnější pracovat s vyšší elektrickou vodivostí elektrolytu, s menší těkavostí a s malou schopností rozpouštět kovový Mg.

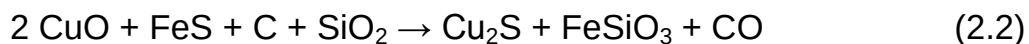
Pro zvýšení elektrické vodivosti a pro snížení hydrolýzy se přidává NaCl a KCl. Ke zvýšení měrné hmotnosti elektrolytu slouží přídavek  $CaCl_2$ . Pro lepší spojování kapek hořčíku lze přidat 1,8 až 2%  $CaF_2$ .

Složení elektrolytu umožňuje pracovat při teplotě 680 až 720°C, což značně snižuje těkavost  $MgCl_2$ . Roztavený elektrolyt má vyšší měrnou hmotnost a proto vyloučený hořčík vyplave na povrch lázně.

**Výroba mědi** - pro průmyslovou výrobu mědi jsou hlavním zdrojem sulfidické rudy, které jsou poměrně bohaté i na železo, obsah mědi se v nich pohybuje kolem 1 %. Vytěžená ruda se proto nejprve drtí a koncentruje, čímž obsah mědi stoupne na 15 až 20 %.

Výroba mědi ze sulfidických rud se provádí ve třech základních krocích (pražení, tavení, zpracování měďného lechu). Třetí krok, zpracování měďného lechu, doznal postupem času vývoj a dnes se již nepoužívá redukčních pražných pochodů.

Po odstranění velkého množství sulfidu železnatého z rudy následuje třetí krok.



Zpracování měďného lechu na surovou měď se dnes výhradně provádí dmýcháním v konvertoru, což je metoda, která se označuje jako pražení s dmýcháním nebo besemerace mědi. Besemerace proto, že ji zavedl *Henry Bessemer*. Tento způsob výroby spočívá v kombinaci pochodu pražně redukčního a pochodu pražně reakčního. Roztavený měďný lech se vlije do konvertoru, který obsahuje zásaditou nebo kyselou vyzdívku a to podle toho zda obsahuje ruda zásadité nebo kyselé přísady, a vhání se stlačený vzduch. Zbytky sulfidu železnatého přecházejí na oxid a vytváří tak strusku. Poté probíhá oxidace sulfidu měďného na oxid měďnatý, který energicky reaguje se sulfidem měďným na kovovou měď.



Oxidické měďnaté rudy lze zpracovávat na kov přímou redukcí koksem za vysoké teploty, ale častěji se přidávají k sulfidickým rudám mědi, kde tyto rudy působí oxidačně a urychlují tak redukcí sulfidu na oxid, popřípadě na kov při vhodně zvoleném poměru.

Surová měď, černá měď se čistí elektrolyticky. Anodou je surová měď, jako elektrolyt se užívá kyselý roztok síranu měďnatého  $\text{CuSO}_4$  a katodu tvoří čistá

měď. Nečistoty, které se hromadí v okolí anody jako anodické kaly jsou cenným zdrojem stříbra, zlata a dalších těžkých kovů.

**Výroba zinku** - zinek se z 90 % vyrábí ze svých **sulfidických rud**. Proces výroby začíná koncentrací rudy sedimentačními nebo flotačními technikami a následným pražením rudy za přístupu kyslíku.

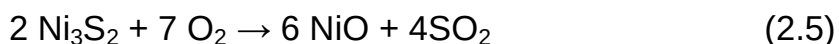


Vznikající oxid siřičitý se přitom obvykle zachycuje a používá následně pro výrobu kyseliny sírové. Oxid zinečnatý se dále zpracovává elektrolyticky nebo tavením s koksem.

Při elektrolytickém způsobu se oxid zinečnatý rozpouští v kyselině sírové a z výluhu se cementací zinkovým prachem získává kadmium. Roztok síranu zinečnatého se dále zpracovává elektrolýzou a zinek o čistotě 99,95 % se vylučuje na hliníkové katodě.

Redukce oxidu zinečnatého koksem se dříve prováděla v soustavě horizontálních retort s vnějším ohřevem a pracovaly vsádkovým způsobem. Časem byly nahrazeny kontinuálně pracujícími vertikálními retortami, které měly někdy elektrické vyhřívání. Ani jeden z těchto dvou procesů nemá takovou termickou účinnost jako má vysoká pec, ve které spalování paliva pro zahřívání probíhá ve stejném prostoru jako redukce oxidu. Problém při výrobě zinku tímto způsobem je v tom, že redukce oxidu zinečnatého uhlíkem neprobíhá pod teplotou varu zinku.

**Výroba niklu** - nejdůležitější rudy niklu jsou novokaledonský *garnierit* ( $\text{Ni, Mg}_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})$ ) a kanadský *pyrrhotin* s příměsí pentlanditu, který obsahuje průměrně 3 % niklu. Při obou způsobech výroby niklu probíhá získávání niklu přes tyto dva kroky:



Při výrobě niklu z *garnieritu* se využívá mimořádná slučivost (afinita) niklu k síře. Ruda se taví se sloučeninami snadno odštěpujícími síru a tím vzniká  $\text{Ni}_3\text{S}_2$  a nečistoty ve stavu křemičitanů přechází do strusky.

V konvertoru se částečným vypražením, opakovaným tavením s přísadou křemene ( $\text{SiO}_2$ ) se odstraní železo a zůstane  $\text{Ni}_3\text{S}_2$ .

Následným pražením se z sulfidu niklu ( $\text{Ni}_3\text{S}_2$ ) získá oxid nikelnatý  $\text{NiO}$ . Žíháním  $\text{NiO}$  (oxidu nikelnatého) s dřevěným uhlím se získá práškový nikl nebo se k oxidu nikelnatému a dřevěnému uhlí přidá ještě voda a mouka (jako pojidla), ve formě se vytvarují krychle a při žíhání vzniká nikl v podobě krychlí.

**Výroba titanu** - v současné době se při průmyslové výrobě titanu používá především tzv. *Krollův proces*.

Přitom se nejprve pyrolýzou *ilmenitu* nebo *rutilu* s uhlíkem a chlorem získává chlorid titaničitý  $\text{TiCl}_4$ .



Po přečištění se jeho páry redukuje hořčíkem v inertní argonové atmosféře při teplotě kolem 800 °C.

## 2.4 Řešení ukázkového příkladu

### Příklad č. 1

Vypočtete složení vsázky pro výrobu litiny s lupínkovým grafitem, její chemické složení je uvedeno v tabulce 2.1 Pro výrobu litin jsou důležité suroviny ze kterých se tavenina litiny připravuje v tavící peci, viz tabulka 2.2.

Tabulka 2.1 Chemické složení vyráběné litiny

| <b>Obsah prvků v litině [ hmot. %]</b> |           |           |          |           |            |
|----------------------------------------|-----------|-----------|----------|-----------|------------|
| <b>C</b>                               | <b>Si</b> | <b>Mn</b> | <b>P</b> | <b>S</b>  | <b>Sc</b>  |
| 3,1 - 3,3                              | 1,7 - 1,9 | 0,8-1,0   | max. 0,5 | max. 0,15 | 0,87- 0,93 |

**Poznámka:** Stupeň eutektičnosti,  $S_c = \%C / (4,23 - 0,27\% P - 0,297 \% Si)$ , hodnotí kvalitu litiny.

Tabulka 2.2 Přehled surovin pro výrobu litiny s lupínkovým grafitem

| <b>Složení surovin pro vsázku při výrobě litiny s lupínkovým grafitem</b> |                            |                               |                          |                          |                          |                       |
|---------------------------------------------------------------------------|----------------------------|-------------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-----------------------|
| <b>Materiál pro vsázku</b>                                                | <b>Obsah ve vsázce [%]</b> | <b>Obsah uhlíku [%]</b>       | <b>Obsah křemíku [%]</b> | <b>Obsah manganu [%]</b> | <b>Obsah fosforu [%]</b> | <b>Obsah síry [%]</b> |
| Ocelový odpad                                                             | 10                         | 0.2                           | 0.5                      | 0.4                      | -                        | -                     |
| Surové železo M1                                                          | 25                         | 4.2                           | 1.2                      | 0.8                      | 0.08                     | 0.15                  |
| Vratný materiál                                                           | 28.8                       | 3.2                           | 1.65                     | 0.6                      | 0.10                     | 0.08                  |
| Litinový odpad                                                            | 35                         | 3.19                          | 1.70                     | 0.6                      | 0.02                     | 0,09                  |
| FeSi 75                                                                   | 0.5                        | -                             | 75                       | -                        | -                        | -                     |
| FeMn 80                                                                   | 0.2                        |                               |                          | 80                       |                          |                       |
| Cu (100%)                                                                 | 0.3                        | pro zvýšení korozní odolnosti |                          |                          |                          |                       |

**Poznámka:** pro výpočet jsou uvedeny jen nejdůležitější prvky. U litiny s lupínkovým grafitem je důležitý poměr prvků C/Si = 1.8.

**Stanovení obsahu uhlíku v roztavené litině**

Předpokládaný obsah uhlíku v litině je 3,3 %, výpočet obsahu uhlíku ve vsázce:

$$C_{vs} = \frac{10 \cdot 0,2 + 25 \cdot 4,2 + 28,8 \cdot 3,2 + 35 \cdot 3,19}{10 + 25 + 35 + 28,8 + (0,5 + 0,2 + 0,5)} = 3,11\%$$

Protože obsah uhlíku stanovený ze surovin vsázky je nízký, je třeba dodat, uhlík do vyráběné litiny :  $\Delta C = 3,3 - 3,11 = 0,19$ . Budou poskytováno přidáním speciálního koksu :

$$m_{SK} = \Delta C \cdot \frac{100}{\eta_c} = 0,9 \cdot \frac{100}{75} = 0,26 kg$$

Návrh obsahu jednotlivých prvků s ohledem na předpokládaný obsah litiny 10 % ocelový odpad; 35 % litinový odpad; 29 % vratný material; 25 % surové železo; 0,5 % FeSi75; 0,2% FeMn80 a 0,3 % mědi. Výpočet se provádí na 100 kg vsázky.

**Kontrola obsahu jednotlivých prvků v tavenině litiny**

*Obsah křemíku:*

$$Si = \frac{10 \cdot 0,5 + 25 \cdot 1,2 + 28,8 \cdot 2,0 + 35 \cdot 2,2 + 0,5 \cdot 75}{10 + 25 + 35 + 28,8 + (0,5 + 0,2 + 0,5)} = 1,66\%$$

*Obsah manganu:*

$$Mn = \frac{10 \cdot 0, + 25 \cdot 0,8 + 28,8 \cdot 0,8 + 35 \cdot 0,60 + 0,2 \cdot 80}{10 + 25 + 35 + 28,8 + (0,5 + 0,2 + 0,5)} = 0,78\%$$

*Obsah fosforu:*

$$P = \frac{25 \cdot 0,08 + 28,8 \cdot 0,1 + 35 \cdot 0,02}{10 + 25 + 35 + 28,8 + (0,5 + 0,2 + 0,5)} = 0,06\%$$

*Obsah síry:*

$$S = \frac{25 \cdot 0,15 + 28,8 \cdot 0,08 + 35 \cdot 0,09}{10 + 25 + 35 + 28,8 + (0,5 + 0,2 + 0,5)} = 0,09\%$$

Při tavních se dle potřeby provádí úprava kovové vsázky. K očkování taveniny byla použita předslitina FeSi75 v množství 0.4 hmot. % taveniny.

## 2.5 Úlohy k procvičení

*Uplatňování znalostí z předchozí výuky (nauka o materiálu I a II, technologie I a II) ve fyzikální metalurgii.*

### Úloha č. 1

Nakreslete křivku chladnutí čistého železa, vyznačte teploty a načrtněte krystalické buňky železa, označte hodnoty mřížkového parametru.

### Úloha č. 2

Nakreslete binární rovnovážný diagram Fe – C (metastabilní), označte složky v tomto diagramu. Označte fáze v tomto diagramu.

### Úloha č. 3

Nakreslete rovnovážný diagram Al–Si, vyznačte oblast koncentrací křemíku, slitin, které jsou vhodné pro odlévání a tváření. Definujte ferit a austenit. Jaké technické uplatnění má ferit a austenit?

### Úloha č. 4

Na základě diagramu Zn – Al, resp. Al-Zn odhadněte, jaké složení by měla mít slitina Zn – Al, aby byla dobře slévatelná.

### Úloha č. 5

Vyznačte oblast v rovnovážném diagramu Fe – C (metastabilním), která diagramu je vhodná pro svařování ocelí. Vyznačte oblast v diagramu Fe–C (metastabilním), která oblast diagramu je vhodná pro tváření ocelí.

### Úloha č. 6

Definujte mosazi a bronzы, jaké mají uplatnění v technické praxi?



### 3. KOVY V PERIODICKÉ SOUSTAVĚ PRVKŮ

Vlastnosti kovů, tak jako všech prvků, závisí v uspořádání elektronových obalů atomů z nichž jsou tvořeny. Tento názor byl potvrzen ruským chemikem Mendělejevem (1834-1907), který roku 1869 vyslovil periodický zákon prvků: „Vlastnosti prvků seřazených podle vzrůstajících hodnot proměnných atomových hmotností se periodicky opakují“. V roce 1913 zjistil Mosejev, že pořadové číslo prvku má hlubší význam a nazval pořadové číslo atomovým číslem. Dánský fyzik Bohr (1885 - 1962) prokázal, že atomové číslo udává počet elektronů obíhajících kolem jádra atomu daného prvku. Bohr také upravil postavení kovů v Mendělejevově tabulce, které v současné době není standardně používáno (viz tabulka 3.2). Tabulka 3.3 je tzv. krátká Mendělejevova tabulka periodického systému prvků. Kovy jsou v současné době v periodické soustavě prvků rozděleny dle tabulky 3.4. Bližší informace o skupinách prvků uvádí tabulky v příloze č. 14 až příloze č. 17.

**Atomová hmotnost prvků (hmotnost atomu)  $m_a$**  je velmi malá. Hmotnost atomu uhlíku (formálního atomu chemického prvku) je  $(m_a)_C = 1,9944 \cdot 10^{-26}$  kg. Malé hodnoty atomových prvků jsou nepraktické. Proto se v praxi používá pojem relativní atomová hmotnost ( $A_r$ ). Ta je počítána k zvolenému základu. Základem relativních atomových hmotností je  $1/12$  hmotnosti atomu nuklidu  $^{12}\text{C}$ . Tato veličina se **nazývá atomová hmotnostní konstanta ( $m_u$ )**, její hodnota je  $1,66053 \cdot 10^{-27}$  kg. Vypočítá se, jako  $1/12 m_a (^{12}\text{C})$ . Je to  $1/12$  hmotnosti atomu nuklidu  $^{12}\text{C}$ .

$$m_u = \frac{m_a(^{12}\text{C})}{12} = \frac{1,9944 \cdot 10^{-26}}{12} = 1,66053 \cdot 10^{-27} [\text{kg}] \quad (3.1)$$

Relativní atomová hmotnost  $A_r$  obecného prvku X, v našem případě kovu, se vypočítá:

$$A_{r(X)} = \frac{m_{a(X)}}{m_u} = \frac{m_{a(X)}}{1,66053 \cdot 10^{-27}} \quad (3.2)$$

kde značí:  $m_{a(X)}$  – hmotnost atomu prvku X [kg];  $m_u$  – hmotností atomovou konstantu ( $1,66053 \cdot 10^{-27}$  kg).

Relativní atomová hmotnost  $A_r$  je bezrozměrné číslo. Po atomovém čísle je to druhá významná charakteristika prvku resp. kovu. Hodnoty relativních atomových hmotností prvků ( $A_r$ ) jsou běžně uvedeny v chemických tabulkách. V tabulce 3.1 jsou uvedeny relativní atomové hmotnosti prvků, včetně kovů.

Pro některé výpočty (jako je např. určení hustoty kovů výpočtem z jejich krystalické buňky), je nutné naopak počítat s hodnotou hmotnosti příslušného kovu  $m_a(X)$ .



**Dmitrij Ivanovič Mendělejev**  
(8.2.1834 – 2.2.1907)



**Amendeo Avogadro**  
(9.8. 1776 – 9.7.1856)

Hypotézou počtu částic v jednotce objemu formuloval v roce 1811 Avogadro, ale až v roce 1865 hodnotu Avogadrovy konstanty vypočítal Losmit. Dnes je tato konstanta definována jako celkový počet atomů v 0,012 kg izotopu uhlíku  $^{12}_6\text{C}$ . To je izotop uhlíku, který obsahuje v jádře 6 protonů a 6 neutronů. Hodnota Avogadrovy konstanty ( $N_A = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ).

Na základě Avogadrovy konstanty lze také stanovit hmotnost atomu prvku:

$$m_{a(X)} = \frac{M_{m(X)}}{N_A} = \frac{A_r(X) \cdot M_u}{N_A} = \frac{A_r(X) \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}}, \quad (3.3)$$

kde značí:  $m_a(X)$  - hmotnost atomu prvku X (v našem případě kovu) [kg];  $M_m(X)$  - molární hmotnost prvku X [ $\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ ];  $N_A$  - Avogadrovu konstantu ( $N_A = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ );  $A_r(X)$  - relativní atomová hmotnost prvku X [1];  $M_u$  - molární hmotnostní konstantu  $10^{-3} [\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}]$ .

Tabulka 3.1 Přehled relativních atomových hmotností prvků a technicky důležitých kovů

| Prvek     | Chemická<br>Značka | Atomové<br>číslo | Relativní atomová<br>hmotnost<br>( $A_r$ ) [1] |
|-----------|--------------------|------------------|------------------------------------------------|
| Antimon   | Sb                 | 51               | 121,75                                         |
| Aktinium  | Ac                 | 89               | 227,03                                         |
| Americium | Am                 | 95               | 243,00                                         |
| Argon     | Ar                 | 18               | 39,95                                          |
| Arsen     | As                 | 33               | 74,92                                          |
| Astat     | At                 | 85               | 210,00                                         |
| Baryum    | Ba                 | 56               | 137,34                                         |
| Berkelium | Bk                 | 97               | 247,00                                         |
| Beryllium | Be                 | 4                | 9,01                                           |
| Bismut    | Bi                 | 83               | 208,98                                         |

|               |           |           |               |
|---------------|-----------|-----------|---------------|
| Bor           | B         | 5         | 10,81         |
| Brom          | Br        | 35        | 79,90         |
| Cer           | Ce        | 58        | 140,12        |
| Cesium        | Cs        | 55        | 132,90        |
| <b>Cín</b>    | <b>Sn</b> | <b>50</b> | <b>118,69</b> |
| Curiím        | Cm        | 96        | 247,00        |
| Draslík       | K         | 19        | 39,10         |
| Dysprosium    | Dy        | 66        | 162,50        |
| Einsteinium   | Es        | 99        | 254,00        |
| Erbium        | Er        | 68        | 167,26        |
| Europium      | Eu        | 63        | 151,96        |
| Fermium       | Fm        | 100       | 253,00        |
| Fluor         | F         | 9         | 18,99         |
| Fosfor        | P         | 15        | 30,97         |
| Francium      | Fr        | 87        | 223,00        |
| Gadolinium    | Gd        | 64        | 157,25        |
| Galium        | Ga        | 31        | 69,72         |
| Germanium     | Ge        | 32        | 72,59         |
| Hafnium       | Hf        | 72        | 178,49        |
| Helium        | He        | 2         | 4,003         |
| <b>Hliník</b> | <b>Al</b> | <b>13</b> | <b>26,98</b>  |
| Holmium       | Ho        | 67        | 164,93        |
| <b>Hořčík</b> | <b>Mg</b> | <b>12</b> | <b>24,31</b>  |
| Chlor         | Cl        | 17        | 35,45         |
| <b>Chróm</b>  | <b>Cr</b> | <b>24</b> | <b>51,996</b> |
| Indium        | In        | 49        | 114,82        |
| Iridium       | Ir        | 77        | 192,22        |
| Jod           | I         | 53        | 126,90        |
| Kadmium       | Cd        | 48        | 12,40         |
| Kalifornium   | Cf        | 98        | 251,00        |
| Kobalt        | Co        | 27        | 58,93         |
| Krypton       | Kr        | 36        | 83,80         |
| <b>Křemík</b> | <b>Si</b> | <b>14</b> | <b>29,09</b>  |
| Kyslík        | O         | 8         | 15,999        |
| Lanthan       | La        | 57        | 138,90        |
| Lithium       | Li        | 3         | 6,94          |
| Lutecium      | Lu        | 71        | 174,97        |
| <b>Mangan</b> | <b>Mn</b> | <b>25</b> | <b>54,94</b>  |
| <b>Měď</b>    | <b>Cu</b> | <b>29</b> | <b>63,55</b>  |
| Mendělevium   | Mv        | 101       | 256,00        |
| Molybden      | Mo        | 42        | 95,94         |
| Neodyum       | Nd        | 60        | 144,42        |
| Neon          | Ne        | 10        | 20,18         |
| Neptunium     | Np        | 93        | 237,05        |
| <b>Nikl</b>   | <b>Ni</b> | <b>28</b> | <b>58,70</b>  |
| Niob          | Nb        | 41        | 92,91         |

|                |           |           |               |
|----------------|-----------|-----------|---------------|
| Nobelium       | No        | 102       | 254,00        |
| <b>Olovo</b>   | <b>Pb</b> | <b>82</b> | <b>207,20</b> |
| Osmium         | Os        | 76        | 190,20        |
| Paladium       | Pd        | 46        | 106,40        |
| Platina        | Pt        | 78        | 195,09        |
| Plutonium      | Pu        | 94        | 242,00        |
| Praseodym      | Pr        | 59        | 140,91        |
| Promethium     | Pm        | 61        | 145,00        |
| Protaktinium   | Pa        | 91        | 231,04        |
| Radium         | Ra        | 88        | 226,03        |
| Radon          | Rn        | 86        | 222,00        |
| Rhenium        | Re        | 75        | 186,21        |
| Rhodium        | Rh        | 45        | 102,90        |
| Rtuť           | Hg        | 80        | 200,59        |
| Rubidium       | Rb        | 37        | 85,47         |
| Ruthenium      | Ru        | 44        | 101,07        |
| Samarium       | Sm        | 62        | 150,40        |
| Selen          | Se        | 34        | 78,96         |
| Síra           | S         | 16        | 32,064        |
| Skandium       | Sc        | 21        | 44,96         |
| Sodík          | Na        | 11        | 22,99         |
| Stroncium      | Sr        | 38        | 87,62         |
| <b>Stříbro</b> | <b>Ag</b> | <b>47</b> | <b>107,87</b> |
| Tantal         | Ta        | 73        | 180,87        |
| Technicium     | Tc        | 43        | 98,91         |
| Telur          | Te        | 52        | 127,60        |
| Terbium        | Tb        | 65        | 157,92        |
| Thalium        | Tl        | 81        | 204,37        |
| Thorium        | Th        | 90        | 232,04        |
| Thulium        | Tm        | 69        | 168,93        |
| <b>Titan</b>   | <b>Ti</b> | <b>22</b> | <b>47,90</b>  |
| Uhlík          | C         | 6         | 12,011        |
| Uran           | U         | 92        | 238,03        |
| Vanad          | V         | 23        | 50,94         |
| Vápník         | Ca        | 20        | 40,08         |
| Vodík          | H         | 1         | 1,008         |
| <b>Wolfram</b> | <b>W</b>  | <b>74</b> | <b>183,85</b> |
| Xenon          | Xe        | 54        | 131,30        |
| Yterbium       | Yb        | 70        | 173,04        |
| Ytrium         | Y         | 39        | 88,91         |
| <b>Zinek</b>   | <b>Zn</b> | <b>30</b> | <b>65,38</b>  |
| Zirkonium      | Zr        | 40        | 91,22         |
| Zlato          | Au        | 79        | 196,97        |
| <b>Železo</b>  | <b>Fe</b> | <b>26</b> | <b>55,845</b> |

Periodická soustava prvků je sestavena v různých tabulkách. Nejznámější je tzv. Mendělejevova tabulka dlouhá nebo krátká.

Tabulka 3.2a) Dlouhá Mendělejevova tabulka periodického systému prvků, podle Bohra

| Perioda      | Skupina        |            |                |            |          |           |            |            |            |          |                |          |            |            |                                      |            |              | Vzácné plyny               |  |              |
|--------------|----------------|------------|----------------|------------|----------|-----------|------------|------------|------------|----------|----------------|----------|------------|------------|--------------------------------------|------------|--------------|----------------------------|--|--------------|
|              | Kovy           |            |                |            |          |           |            |            |            |          | Polokovy       |          | Nekovy     |            |                                      |            |              |                            |  |              |
|              | I              | II         | III            | IV         | V        | VI        | VII        | VIII       |            | I        | II             | III      | IV         | V          | VI                                   | VII        |              |                            |  |              |
| 1            | 1<br>H         |            |                |            |          |           |            |            |            |          |                |          |            |            |                                      |            | 0<br>2<br>He |                            |  |              |
| 2            | 3<br>Li *      |            |                |            |          |           |            |            |            |          | 4<br>Be *      | 5<br>B * | 6<br>C     | 7<br>N     | 8<br>O                               | 9<br>F     | 10<br>Ne     |                            |  |              |
| 3            | 11<br>Na *     |            |                |            |          |           |            |            |            |          | 12<br>Mg       | 13<br>Al | 14<br>Si   | 15<br>P *  | 16<br>S *                            | 17<br>Cl   | 18<br>Ar     |                            |  |              |
| 4            | 19<br>K        | 20<br>Ca * | 21<br>Sc *     | 22<br>Ti * | 23<br>V  | 24<br>Cr  | 25<br>Mn * | 26<br>Fe * | 27<br>Co * | 28<br>Ni | 29<br>Cu       | 30<br>Zn | 31<br>Ga * | 32<br>Ge   | 33<br>As *                           | 34<br>Se * | 35<br>Br     | 36<br>Kr                   |  |              |
| 5            | 37<br>Rb       | 38<br>Sr * | 39<br>Y        | 40<br>Zr * | 41<br>Nb | 42<br>Mo  | 43<br>Tc   | 44<br>Ru * | 45<br>Rh * | 46<br>Pd | 47<br>Ag       | 48<br>Cd | 49<br>In   | 50<br>Sn * | 51<br>Sb *                           | 52<br>Te   | 53<br>J      | 54<br>Xe                   |  |              |
| 6            | 55<br>Cs       | 56<br>Ba   | 57<br>La *     | 72<br>Hf * | 73<br>Ta | 74<br>W * | 75<br>Re   | 76<br>Os   | 77<br>Ir   | 78<br>Pt | 79<br>Au       | 80<br>Hg | 81<br>Tl * | 82<br>Pb   | 83<br>Bi *                           | 84<br>Po * | 85<br>At     | 86<br>Rn                   |  |              |
| 7            | 87<br>Fr       | 88<br>Ra   | 89<br>Ac       |            |          |           |            |            |            |          |                |          |            |            |                                      |            |              |                            |  |              |
| Skupina kovu | Kovy skupiny A |            | Kovy skupiny T |            |          |           |            |            |            |          | Kovy skupiny B |          |            |            | P<br>O<br>L<br>O<br>K<br>O<br>V<br>Y |            |              | N<br>E<br>K<br>O<br>V<br>Y |  | Vzácné plyny |

**Poznámka:** \*) prvky s alotropickou přeměnou. Pro technickou praxi největší význam mají tyto kovy s alotropickou přeměnou: Fe, Co, Mn, Ti a Sn.

Tabulka 3.2b) Dlouhá Mendělejevova tabulka periodického systému prvků, používaná v současné době

| Perioda                                                                                                                                              | Sloupce             |                     |                        |                      |                      |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     | 0                   | n | Sféra           |   |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|---------------------|------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---|-----------------|---|
|                                                                                                                                                      | a)                  |                     |                        |                      |                      |                     |                     |                     | b)                  |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |   |                 |   |
|                                                                                                                                                      | I                   | II                  | III                    | IV                   | V                    | VI                  | VII                 | VIII                |                     | I                   | II                  | III                 | IV                  | V                   | VI                  | VII                 |                     |                     |   |                 |   |
| 1                                                                                                                                                    | <sup>1</sup><br>H   |                     |                        |                      |                      |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     | <sup>2</sup><br>He  | 1                   | K |                 |   |
| 2                                                                                                                                                    | <sup>3</sup><br>Li  | <sup>4</sup><br>Be  |                        |                      |                      |                     |                     |                     |                     |                     |                     | <sup>5</sup><br>B   | <sup>6</sup><br>C   | <sup>7</sup><br>N   | <sup>8</sup><br>O   | <sup>9</sup><br>F   | <sup>10</sup><br>Ne | 2                   | L |                 |   |
| 3                                                                                                                                                    | <sup>11</sup><br>Na | <sup>12</sup><br>Mg |                        |                      |                      |                     |                     |                     |                     |                     |                     | <sup>13</sup><br>Al | <sup>14</sup><br>Si | <sup>15</sup><br>P  | <sup>16</sup><br>S  | <sup>17</sup><br>Cl | <sup>18</sup><br>Ar | 3                   | M |                 |   |
| 4                                                                                                                                                    | <sup>19</sup><br>K  | <sup>20</sup><br>Ca | <sup>21</sup><br>Sc    | <sup>22</sup><br>Ti  | <sup>23</sup><br>V   | <sup>24</sup><br>Cr | <sup>25</sup><br>Mn | <sup>26</sup><br>Fe | <sup>27</sup><br>Co | <sup>28</sup><br>Ni | <sup>29</sup><br>Cu | <sup>30</sup><br>Zn | <sup>31</sup><br>Ga | <sup>32</sup><br>Ge | <sup>33</sup><br>As | <sup>34</sup><br>Se | <sup>35</sup><br>Br | <sup>36</sup><br>Kr | 4 | N               |   |
| 5                                                                                                                                                    | <sup>37</sup><br>Rb | <sup>38</sup><br>Sr | <sup>39</sup><br>Y     | <sup>40</sup><br>Zr  | <sup>41</sup><br>Nb  | <sup>42</sup><br>Mo | <sup>43</sup><br>Tc | <sup>44</sup><br>Ru | <sup>45</sup><br>Rh | <sup>46</sup><br>Pd | <sup>47</sup><br>Ag | <sup>48</sup><br>Cd | <sup>49</sup><br>In | <sup>50</sup><br>Sn | <sup>51</sup><br>Sb | <sup>52</sup><br>Te | <sup>53</sup><br>I  | <sup>54</sup><br>Xe | 5 | O               |   |
| 6                                                                                                                                                    | <sup>55</sup><br>Cs | <sup>56</sup><br>Ba | <sup>57</sup><br>La *) | <sup>72</sup><br>Hf  | <sup>73</sup><br>Ta  | <sup>74</sup><br>W  | <sup>75</sup><br>Re | <sup>76</sup><br>Os | <sup>77</sup><br>Ir | <sup>78</sup><br>Pt | <sup>79</sup><br>Au | <sup>80</sup><br>Hg | <sup>81</sup><br>Tl | <sup>82</sup><br>Pb | <sup>83</sup><br>Bi | <sup>84</sup><br>Po | <sup>85</sup><br>At | <sup>86</sup><br>Rn | 6 | P               |   |
| 7                                                                                                                                                    | <sup>87</sup><br>Fr | <sup>88</sup><br>Ra | <sup>89</sup><br>Ac**) | <sup>104</sup><br>Rf | <sup>105</sup><br>Db |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |   | 7               | Q |
|                                                                                                                                                      | KOVY                |                     |                        |                      |                      |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     | P                   | N                   | V.P.                |   |                 |   |
|                                                                                                                                                      | A                   |                     | T                      |                      |                      |                     |                     |                     |                     |                     | B                   |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |   |                 |   |
|                                                                                                                                                      | 1                   | 2                   | 1                      | 2                    | 3                    | 4                   | 5                   | 6                   | 7                   | 8                   | 10                  | 10                  | 1                   | 2                   | 3                   | 4                   | 5                   | 6                   |   | Počet elektronů |   |
|                                                                                                                                                      | s                   |                     | d                      |                      |                      |                     |                     |                     |                     |                     | p                   |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |   |                 |   |
| Poznámka: P – polokovy, N – nekovy, V.P. – vzácné plyny, *) prvky 57 až 71 – jsou lanthanoidy (kovy vzácných zemín);<br>**) prvky 89 až 103 aktinidy |                     |                     |                        |                      |                      |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |                     |   |                 |   |

**Poznámka:** P – polokovy, N – nekovy, V.P. – vzácné plyny, \*) prvky 57 až 71 – jsou lanthanoidy (kovy vzácných zemin); \*\*) prvky 89 až 103 aktinidy

Tabulka 3.3 Zkrácená Mendělejevova tabulka periodického systému prvků

| Perioda | Skupiny prvků |          |          |           |           |          |          |          |          |          |        |  |          |  |  |
|---------|---------------|----------|----------|-----------|-----------|----------|----------|----------|----------|----------|--------|--|----------|--|--|
|         | A I B         | A II B   | B III A  | B IV A    | B V A     | B VI A   | B VII A  | VIII B   |          |          | VIII A |  |          |  |  |
| 1       | 1<br>H        |          |          |           |           |          |          |          |          |          |        |  | 2<br>He  |  |  |
| 2       | 3<br>Li       | 4<br>Be  | 5<br>B   | 6<br>C    | 7<br>N    | 8<br>O   | 9<br>F   |          |          |          |        |  | 10<br>Ne |  |  |
| 3       | 11<br>Na      | 12<br>Mg | 13<br>Al | 14<br>Si  | 15<br>P   | 16<br>S  | 17<br>Cl |          |          |          |        |  | 18<br>Ar |  |  |
| 4       | 19<br>K       | 20<br>Ca | 21<br>Sc | 22<br>Ti  | 23<br>V   | 24<br>Cr | 25<br>Mn | 26<br>Fe | 27<br>Co | 28<br>Ni |        |  |          |  |  |
|         | 29<br>Cu      | 30<br>Zn | 31<br>Ga | 32<br>Ge  | 33<br>As  | 34<br>Sc | 35<br>Br |          |          |          |        |  | 36<br>Kr |  |  |
| 5       | 37<br>Rb      | 38<br>Sr | 39<br>Y  | 40<br>Zr  | 41<br>Nb  | 42<br>Mo | 43<br>Tc | 44<br>Ru | 45<br>Rh | 46<br>Pd |        |  |          |  |  |
|         | 47<br>Ag      | 48<br>Cd | 49<br>In | 50<br>Sn  | 51<br>Sb  | 52<br>Te | 53<br>I  |          |          |          |        |  | 54<br>Xe |  |  |
| 6       | 55<br>Ca      | 56<br>Ba | 57<br>La | 72<br>Hf  | 73<br>Ta  | 74<br>W  | 75<br>Re | 76<br>Os | 77<br>Ir | 78<br>Pt |        |  |          |  |  |
|         | 79<br>Au      | 80<br>Hg | 81<br>Tl | 82<br>Pb  | 83<br>Bi  | 84<br>Po | 85<br>At |          |          |          |        |  | 86<br>Ra |  |  |
| 7       | 87<br>Fr      | 88<br>Ra | 89<br>Ac | 104<br>Ku | 105<br>Ns |          |          |          |          |          |        |  |          |  |  |

|            |          |          |          |          |          |          |          |          |          |          |           |           |           |           |
|------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| Lantanoidy | 58<br>Ce | 59<br>Pr | 60<br>Nd | 61<br>Pm | 62<br>Sm | 63<br>Eu | 64<br>Gd | 65<br>Tb | 66<br>Dy | 67<br>Ho | 68<br>Er  | 69<br>Tm  | 70<br>Yb  | 71<br>Lu  |
| Aktinoidy  | 90<br>Th | 91<br>Pa | 92<br>U  | 93<br>Np | 94<br>Pu | 95<br>Am | 96<br>Cm | 97<br>Bk | 98<br>Cf | 99<br>Es | 100<br>Fm | 101<br>Md | 102<br>No | 103<br>Lr |

Pro charakteristiku kovů je lepší dlouhá tabulka. Skládá se ze 7 period (řad) a 8 sloupců vždy s hlavní a vedlejší podskupinou (a,b). Do stejných sloupců patří prvky se stejným mocenstvím, přičemž v těchto podskupinách se řadí pod sebe prvky s podobnými vlastnostmi. Tak např. vedlejší podskupina prvního sloupce obsahuje měď, stříbro a zlato. Tyto kovy se vyznačují vysokou elektrickou a tepelnou vodivostí i odolností proti korozi. Vlastnosti kovů jsou také ovlivňovány i vzájemným působením atomů v krystalu.

Asi 3/4 prvků z celkového počtu cca 107 prvků v Mendělejevově tabulce (resp. v periodickém systému prvků) tvoří kovy. Ostatní jsou polokovy, nekovy a vzácné (netečné) plyny. Z chemického hlediska, ale i obecně, se za kovy považují prvky, které jsou schopny tvořit tzv. **kationy**.

Kovy se nejčastěji rozdělují do tří hlavních skupin. Kovy skupiny A, kovy skupiny B a kovy tranzitivní T (přechodové).

U kovů skupiny A přebývá atomům malý počet elektronů (než mají vzácné plyny), a proto mnoho elektronů chybí do počtu elektronů nejbližšího vzácného plynu. Naopak u kovů skupiny B, je tomu naopak, atomům přebývá mnoho elektronů (než mají vzácné plyny) a málo jich chybí do elektronové konfigurace nejbližšího následného vzácného plynu. Tranzitivní kovy mají neúplně obsazenou předposlední sféru elektronového obalu a již mají částečně obsazenou další vyšší sféru elektrony. Z technicky důležitých kovů mezi přechodové se řadí: Fe, Mn, Cr, Ni, Co, V, Ti, Zr, Mo, W, Nb atd.

Kovy v Mendělejevově tabulce lze rozdělit ještě do těchto dílčích skupin a podskupin.

**Alkalické kovy:** Li, Na, K, Rb, Cs, Fr.

**Kovy alkalických zemin:** Ca, Sr, Ba, Ra.

**Přechodné kovy:** Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn; Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd; La, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg.

**Ušlechtilé kovy:** Cu, Ag, Au, Hg, Ru, Rh, Pd, Re, Os, Ir, Pt.

**Kovy skupiny železa:** Fe, Co, Ni.

**Platinové kovy: lehké:** Ru, Rh, Pd; **těžké:** Os, Ir, Pt.

**Lanthanoidy:** (La), Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu.

*Aktinoidy:* (Ac), Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr.

### **Elektronová konfigurace kovů v periodické soustavě prvků**

- 1) Zaplňování slupek **s** charakterizuje alkalické kovy a žíraviny;
- 2) Slupka **d** se obsazuje u přechodových kovů;
- 3) Zaplňování slupky **f** je charakteristické pro lanthanoidy (vzácné zeminy), atd.;
- 4) Slupka **p** se začíná zaplňovat u jednotlivých kovů a zaplňuje se u nekovů;
- 5) Zaplněná slupka **p** je charakteristická pro vzácné plyny.

Technické dělení kovů je uvedeno v tabulce 3.4.

Tabulka 3.4 Technické rozdělení kovů

| Skupina  | Charakteristika kovů                                                                                                                                                           |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>1</b> | <b>Železo a slitiny železa</b>                                                                                                                                                 |
| <b>2</b> | <b>Neželezné kovy s vysokou hustotou</b><br>a) se střední hodnotou teploty tání: Cu, Ni, Co, Mn.<br>b) s nízkou hodnotou teploty tání: Zn, Cd, Hg, Pb, Bi, Sn, Sb, Ga, In, Tl. |
| <b>3</b> | <b>Neželezné kovy s vysokou hustotou</b><br>a) se střední hodnotou teploty tání: Al, Mg, Be, Ca, Sr, Ba.<br>b) s nízkou hodnotou teploty tání: Li, Na, K, Pb, Cs.              |
| <b>4</b> | <b>Ušlechtilé (drahé) neželezné kovy</b><br>a) se střední hodnotou teploty tání: Au, Ag.<br>b) S vysokou teplotou tání: Pt, Ir, Os, Pd, Rh, Ru.                                |
| <b>5</b> | <b>Těžkovitělné neželezné kovy</b><br>a) s mřížkou kubickou mřížkou prostorově středěnou: W, Ta, Mo, Nb, V, Cr.<br>b) s mřížkou hexagonální: Ti, Zr, Hf, Tc, Re.               |
| <b>6</b> | <b>Rozptýlené kovy a lanthanoidy</b><br>a) rozptýlené (stopové) kovy: Sc, Y, La.<br>b) lanthanoidy: Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Th, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu.                    |
| <b>7</b> | <b>Radioaktivní kovy a transurany</b><br>a) radioaktivní kovy: U, Th, Pa, Ac, Fr, Po.<br>b) transurany: Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lw, Kw.                        |

## **3.1 Struktura atomů kovů**

Základy o stavbě atomu prvků, resp. kovů položili fyzikové *RUTHEFORD* a *BOHR* v letech 1911-1913. Podle *RUTHEFORDA* se model atomu skládá z **kladně nabitého jádra**, kolem něhož obíhají **záporně nabitě elektrony**.

Dnes je model podle *RUTHEFORDA* všeobecně známý pod pojmem **planetární model**. V roce 1913 *BOHR* na základě tehdy vznikající **kvantové**

**mechaniky** vytvořil model (**Bohrův tzv. kvantový model**) doplnil původní planetární model atomu o tři důležité postuláty:

- 1) Elektron nemůže kolem jádra obíhat po libovolných drahách, ale pouze po pevně daných (kvantovaných) drahách s přesně určenými diskrétními hodnotami poloměru. Takové dráhy (elektronové orbity) jsou stacionární a elektron při oběhu na nich **nevyzařuje** elektromagnetické vlny.
- 2) Pouze při **přechodu** z vyšší dráhy na nižší se **vyzáří kvantum elektromagnetického vlnění (foton)**, což je rozdíl energií mezi oběma drahami.
- 3) Planetární model, doplněný těmito třemi postuláty, představuje proslulý **Bohrův model atomu**, který úspěšně vysvětluje nejdůležitější kvantové vlastnosti stavby atomu, mimo jiné diskrétní (nespojité) čárová spektra záření vysílaného atomu. Bohrův model si svou platnost zachoval dodnes.

Současná charakteristika modelu atomu je, že se skládá:

- a) z kladně nabitého jádra, v němž je soustředěna skoro všechna hmota atomu;
- b) z obalu, který tvoří záporně nabité elektrony s velmi nepatrnou hmotou, kroužící kolem jádra atomu po pevně daných (kvantovaných) drahách s přesně určenými diskrétními hodnotami poloměru, které se nazývají elektronové orbity.



**Ernest Rutherford (1871-1937)**



**Niels Bohr (1885 -1962)**

Rozměry atomů kovů, resp. jejich „průměry“, jsou řádově  $10^{-7}$  mm (to je hluboko pod rozlišovací schopností světelného mikroskopu, atom je mnohem menší než vlnová délka světla a tím ani elektronovým mikroskopem nejsou atomy přímo pozorovatelné). Jádro atomu je však ještě 100 000 krát menší, jeho "průměr" činí jen  $\approx 10^{-12}$  mm. Přitom je v jádře soustředěna téměř veškerá hmotnost (více než 99,9%) atomu.

### 3.1.1 Jádro atomu

Jádro atomu se skládá z nukleonů tvořených, jednak kladně nabitými protony a neutrony. Neutrony jsou bez elektrického náboje. Počet elektronů je a jejich elektrický náboj je stálý jako u protonů. Kladný elektrický náboj atomového jádra je tedy v rovnováze s celkovým záporným nábojem elektronů, které tvoří obal atomu. Počet kladných elementárních nábojů atomového jádra, teda počet protonů se nazývá **atomové číslo** a určuje pořadí prvku v periodické soustavě prvků (resp. Mendělejevově periodické



soustavě prvků). U elektronegativních atomů prvků také atomové číslo udává celkový počet elektronů prvku.

Atomové jádro určitého prvku (nuklidu, tj prvek který má stejné atomové číslo hmotnostní) charakterizují tři veličiny:

- a) atomové číslo  $Z$ ;
- b) hmotnostní číslo  $A$ ;
- c) relativní atomová hmotnost prvku (nuklidu)  $A_r$ .

**Atomové (protonové) číslo  $Z$**  - je charakteristikou vlastností atomů a odpovídá počtu protonů v jádře atomu.

**Hmotnostní (nukleonové) číslo  $A$**  - charakterizuje celkový počet nukleonů (protonů a neutronů) v jádře.

**Relativní atomová hmotnost  $A_r$**  - je to atomová hmotnost daného prvku ( $m_a$ ) dělená jednotkovou atomovou hmotností ( $1,66053 \cdot 10^{-27}$  kg).

**Poznámka:** Atomová hmotnost prvků je obecně velmi malá, tudíž nepraktická. Proto v praxi byl zaveden pojem relativní atomová hmotnost.

Tak např. Fe má atomové číslo 26, jeho relativní atomová hmotnost je 55,845. Za předpokladu, že jde o prvek elektronegativní (stejný počet protonů v jádře jako elektronů v obalu), pak z toho je zřejmé, že Fe má v obalu 26 elektronů. Atomy se často pro názornost zobrazují jako koule. Je třeba si však uvědomit, že je to téměř prázdný prostor. Kdybychom si atom, jehož průměr je řádově asi  $10^{-10}$  m (resp. 1Å, tj.  $10^{-7}$  mm), představili jako kouli o Ø 10 m, pak by atomové jádro bylo velké asi jako zrnko máku a elektrony by byly tak malé, že by vůbec nebyly vidět.

### 3.1.2 Elektronový obal atomu

Kolem atomového jádra existuje celý systém elektronů, tzv. elektronový obal. Hmotnost elektronů je 1/1838 hmotnosti atomu vodíku. Podle kvantové teorie se mohou elektrony pohybovat kolem atomového jádra jen v určitých kvantových drahách, pro které platí:

$$m \cdot v \cdot a = n \cdot h, \quad (3.4)$$

kde značí:  $m$  - hmotnost elektronu;  $v$  - postupnou rychlost elektronu;  $a$  - poloměr kruhové dráhy elektronu;  $n$  - první neboli hlavní kvantové číslo (je vždy číslo celé);  $h$  - Planckovu konstantu ( $6,626 \cdot 10^{-34}$  J.s).

Popis chování elektronů a jejich orbitů v elektronovém (atomovém) obalu popisují 4 kvantová čísla (hlavní, vedlejší, magnetické a spinové).

**Hlavní kvantové číslo  $n$**  ( $n = 1$  až 7, jsou celá kladná čísla) – udává energii elektronu, tj. energii stojatého vlnění, které doprovází daný elektron.

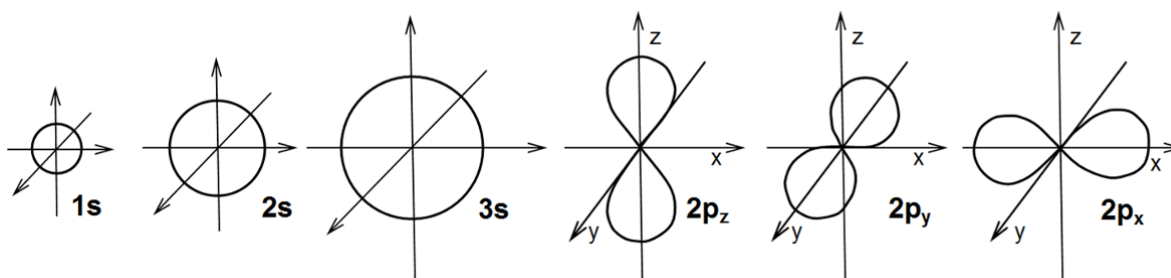
Elektrony se stejnou hodnotou čísla  $n$  patří do stejné sféry (slupky, vrstvy). Rozlišujeme sféry jednokvantové, dvoukvantové až sedmikvantové. Místo číselné hodnoty  $n$ , se často sféry označují písmeny K, L, M, N, O, P, Q. Např. sféra N odpovídá hodnotě  $n = 4$ . To současně znamená, že je to čtvrtá sféra v pořadí od jádra atomu. Maximální počet elektronů ve sféře může dosáhnout hodnoty  $2n^2$ . Každá sféra je tvořena určitým počtem orbitů (orbitalů). Orbitem se rozumí část prostoru kolem jádra, v níž se elektrony vyskytují s největší pravděpodobností. Orbity se odlišují tvarem a prostorovou orientací, některé typy orbitalů jsou uvedeny na obr. 3-1.

Při pohybu elektronu na kvantové dráze se jeho energie nemění, avšak přejde-li elektron z vyšší kvantové dráhy na nižší, vyzáří elektron určité kvantum elektromagnetické energie, a to 1 foton. Naopak při přechodu elektronu z nižší kvantové dráhy na vyšší, je třeba dodat elektronu určité množství energie.

**Vedlejší kvantové číslo  $l$**  ( $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ ), charakterizuje tvar orbitu (orbitalu), proto se také často označuje jako orbitální kvantové číslo. Je rovněž celé kvantové číslo. Udává „tvar“ stojatého vlnění elektronu to znamená tvar orbitalu (podslupky). Místo číselných hodnot 0, 1, 2, 3, 4, 5 vedlejšího kvantového čísla, se často užívá konvenčních symbolů s, p, d, f, g, h (značení je podle spektroskopických anglických pojmů *sharp*, *principal*, *diffuse*, *fundamentals*). Pro vyšší hodnoty vedlejšího kvantového čísla (4; 5) se značí orbitaly písmeny g, h (dle abecedy).

Nedílnou součástí typu orbitalu je hlavní kvantové číslo  $n$  příslušné energetické slupky atomového obalu (píše se před písmennou značkou typu), viz dále. V každé sféře se nachází tolik typů orbitalů, kolik činí hlavní kvantové číslo. Např. ve druhé sféře L ( $n = 2$ ) se nachází dva typy orbitalu, označené 2s, 2p. Naproti tomu ve čtvrté sféře N ( $n = 4$ ) jsou celkem 4 typy orbitalů s označením 4s, 4p, 4d, 4f.

Základní tvar orbitalu lze považovat v různých sférách za stejný, rozdíl je však ve velikosti. Např. orbitaly typu s ( $l = 0$ ) jsou ve všech sférách kulovitého tvaru, jejich poloměr roste s hlavním kvantovým číslem. Ostatní orbitaly vykazují složitější prostorové tvary, s rostoucí hodnotou hlavního kvantového čísla se zvyšuje i složitost tvarů orbitalů. Tvary orbitalů vyplývají ze složitých výpočtů kvantové mechaniky.



Obr. 3-1 Tvary některých orbitalů (s,p)

**Magnetické kvantové číslo  $m$**  - udává počet prostorových variací orbitalu (tj. kolikrát je orbital degenerován), resp. charakterizuje polohu drah elektronů v prostoru. Magnetické kvantové číslo má hodnotu celých čísel v rozmezí od  $-l$  do  $+l$  (včetně nuly), v počtu  $(2l + 1)$ . Spolu s hlavním a vedlejším kvantovým číslem určuje magnetické kvantové číslo atomový orbital. To znamená, že orbitály téhož tvaru (se stejným vedlejším kvantovým číslem) mohou zaujímat určitý počet orientací (prostorových uspořádání) vzhledem ke zvolenému směru. Určitý typ orbitalu je tolikrát degradovatelný, kolik různých prostorových orientací zaujímá. Orbitály  $s$ , které mají jediné prostorové uspořádání, jsou však nedegenerovatelné. Počet prostorových variací, resp. násobnost degradace jednotlivých orbitalů, je uvedena v tabulce 3.5. Orbitály  $p$  se třemi prostorovými orientacemi jsou třikrát degenerovatelné, orbitály  $d$  s pěti prostorovými orientacemi jsou pětkrát degenerovatelné a orbitály  $f$  se sedmi prostorovými orientacemi jsou sedmkrát degenerovatelné.

Tabulka 3.5 Počet prostorových variací orbitalů příslušných podslupek

| Vedlejší kvantové číslo $l$ | Značení orbitalů (podslupek) | Magnetické kvantové číslo $2l + 1$ | Hodnoty magnetického kvantového čísla | Počet prostorových variací |
|-----------------------------|------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|----------------------------|
| 0                           | S                            | 2.0 + 1                            | 0                                     | 1                          |
| 1                           | P                            | 2.1 + 1                            | -1; 0; 1                              | 3                          |
| 2                           | D                            | 2.2 + 1                            | -2; -1; 0; 1; 2                       | 5                          |
| 3                           | F                            | 2.3 + 1                            | -3; -2; -1; 0; 1; 2; 3                | 7                          |

**Spinové kvantové číslo  $s$**  - vyjadřuje rotační pohyb elektronu okolo své osy. Rotace elektronu může být jen ve dvou smyslech. Proto magnetické kvantové číslo dosahuje hodnoty  $-\frac{1}{2}$  a  $+\frac{1}{2}$  (odpovídá kladnému nebo zápornému směru rotačního pohybu).

V jedné sféře by tedy mohl být velký počet kvantových drah, jejichž velikost, tvar a poloha jsou určeny hlavním, vedlejším a magnetickým kvantovým číslem. Rotaci elektronu určuje spin. Počet elektronů v obalu atomu je však omezen tím, že v něm nemohou současně existovat dva elektrony, u nichž by byla všechna čtyři kvantová čísla stejná.

Počet elektronů, které mohou obíhat po jedné dráze je omezen, tzv. Pauliho vylučovacím principem. To znamená, že v téže dráze současně nemohou obíhat dva elektrony (která mají tři kvantová čísla stejná), avšak mají opačný spin. Propočtem zjistíme, že podle Pauliho vylučovacího principu se počet kvantových drah v určité sféře rovná  $2n^2$ . U jedno kvantové sféry (je to  $2.1^2 = 2$ ) jsou 2 kvantové dráhy, u sféry dvou kvantové je 8 kvantových drah, atd., viz tabulka 3.6.

Elektrony které obíhají v plně obsazených slupkách se označují jako vnitřní. Ve vnějších neúplně zaplněných slupkách obíhají elektrony vnější (valenční).

Tabulka 3.6 Přehled kvantových sfér (slupek) a kvantových drah

| Sféra    | Slupka | Kvantové číslo |              | Počet drah | Úplné obsazení |            |
|----------|--------|----------------|--------------|------------|----------------|------------|
|          |        | hlavní $n$     | vedlejší $l$ |            | Slupky         | Sféry      |
| <b>K</b> | 1s     | 1              | 0            | 1          | <b>2</b>       | $2=2.1^2$  |
| <b>L</b> | 2s     | 2              | 0            | 1          | 2              | $8=2.2^2$  |
|          | 2p     | 2              | 1            | 3          | <b>6</b>       |            |
| <b>M</b> | 3s     | 3              | 0            | 1          | 2              | $18=2.3^2$ |
|          | 3p     | 3              | 1            | 3          | 6              |            |
|          | 3d     | 3              | 2            | 5          | <b>10</b>      |            |
| <b>N</b> | 4s     | 4              | 0            | 1          | 2              | $32=2.4^2$ |
|          | 4p     | 4              | 1            | 3          | 6              |            |
|          | 4d     | 4              | 2            | 5          | 10             |            |
|          | 4f     | 4              | 3            | 7          | <b>14</b>      |            |

**Pravidla pro výstavbu elektronového obalu**

- 1) Elektrony obsazují orbitály v pořadí rostoucí energie orbitalů.
- 2) V atomu nemohou existovat dva elektrony shodné ve všech 4 kvantových číslech (dle tzv. Pauliho principu).
- 3) Pro stabilní atomy na orbitály se stejným vedlejším kvantovým číslem vstupují elektrony tak, aby co největší počet elektronů měl stejný spin (Hundovo pravidlo).

Podle Paulova principu mohou tedy být v každé sféře na orbitalu **s** maximálně 2 elektrony, na orbitalu **p** maximálně 6 elektronů, na orbitalu **d** maximálně 10 elektronů, na orbitalu **f** maximálně 14 elektronů. Obsazování energetických hladin elektrony je v tomto pořadí:

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \approx 5d < 6p < 7s < 5f \approx 6d < 7p$ .

V tabulce 3.7 je uvedeno vyznačením orbitalů elektronového obalu prvků. Prvky ve stejných sloupcích mají stejnou elektronovou konfiguraci.

Tabulka 3.7 Označení orbitalů při zaplňování elektrony prvků v periodickém systému

|    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 1s |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | 1s |    |
| 2s | 2s |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | 2p | 2p | 2p | 2p | 2p | 2p |
| 3s | 3s |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | 3p | 3p | 3p | 3p | 3p | 3p |
| 4s | 4s | 3d | 3d | 3d | 3d | 3d | 3d | 3d | 3d | 3d | 3d | 4p | 4p | 4p | 4p | 4p |    |
| 5s | 5s | 4d | 4d | 4d | 4d | 4d | 4d | 4d | 4d | 4d | 4d | 5p | 5p | 5p | 5p | 5p |    |
| 6s | 6s | 5d | 5d | 5d | 5d | 5d | 5d | 5d | 5d | 5d | 5d | 6p | 6p | 6p | 6p | 6p |    |
| 7s | 7s | 6d | 6d | 6d | 6d | 6d | 6d | 6d | 6d | 6d | 6d |    |    |    |    |    |    |

|               |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|---------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| Lanthanidy *) | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f | 4f |
| Actinoidy **) | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f | 5f |

Z tabulky 3.7 je zřejmé, že zaplňování orbitalů (slupek) **s** je typické pro *alkalické kovy a kovů alkalických zemin (kovy skupiny A)*. Orbitaly **p** se zaplňovat u jednoduchých kovů (kovy skupiny B), dále u polokovů, nekovů a halogenů. Orbitaly **d** se zaplňují u přechodových prvků, což jsou v podstatě přechodové neboli tranzitivní kovy (kovy skupiny T). Zaplňování orbitalu **f** je typické pro lanthanidy (kovy vzácných zemin) a aktinoidy.

### Elektronová konfigurace atomů prvků v jejich základním stavu

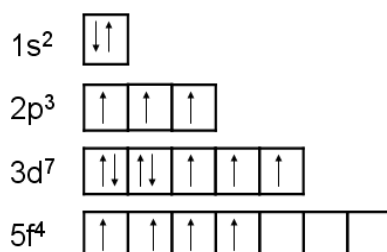
Elektronová konfigurace prvků představuje schématický zápis elektronů prvku, dle zaplnění příslušných orbitalů.

**1s<sup>2</sup>**

**1 - číslo vrstvy (sféry)**, sféra: K, L, M, N, O, P, Q.

**s - orbital (slupka)**, orbital: s, p, d, f, g, h.

**2 - počet elektronů na orbitalu s.**



Obr. 3-2 Grafické schéma zaplnění orbitalů

**Sféra 1** = K – obsahuje orbital **1s**, který může mít max. 2 elektrony;

**Sféra 2** = L – obsahuje orbital **2s** a **2p**. Orbital **2s** může mít max. 2 elektrony, orbital **3p** může mít maximálně 6 elektronů;

**Sféra 3** = M – obsahuje orbital **3s**, **3p** a **3d**. Orbital **s** může mít max. 2 elektrony, orbital **3p** může mít maximálně 6 elektronů, orbital **3d** může mít maximálně 10 elektronů;

**Sféra 4** = N – obsahuje orbital **4s**, **4p**, **4d** a **4f**. Orbital **4s** může mít max. 2 elektrony, orbital **4p** může mít max. 6 elektronů, orbital **4d** může mít max. 10 elektronů, orbital **4f** může mít max. maximálně 14 elektronů;

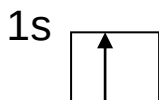
**Sféra 5** = O – obsahuje orbital **5s**, **5p**, **5d**, **5f**. Orbital **5s** může mít max. 2 elektrony, orbital **5p** může mít max. 6 elektronů, orbital **5d** může mít max. 10 elektronů, orbital **5f** může mít max. maximálně 14 elektronů.

**Výstavbový princip** (princip minimální energie) - elektrony obsazují hladiny postupně tak, aby výsledný systém měl co nejnižší energii:

**1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d, 7p.**

Elektronová konfigurace se provádí s použitím speciálních políček, viz obr. 3-2 nebo zkráceným zápisem.

Např. vodík jeho obal obsahuje 1 elektron - také zaujímá *první místo* v periodickém systému prvků. Jeden elektron se nachází na orbitu 1s ( $1s^1$ ).



Např. hliník – protonové číslo 13, nachází se na 13 místě v Mendělejevově tabulce (v základním stavu má 13 elektronů), zkrácený zápis elektronové konfigurace hliníku:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

### 3.2 Úlohy k procvičení

#### Úvod - zopakování důležitých vztahů a veličin

*Stanovení hmotnosti atomu prvků, resp. kovů*

Výpočet hmotnosti prvků, v našem případě stanovení atomové hmotnosti kovu X, lze provést s použitím vzorce (3.2) a (3.3). Provádí se s využitím relativní atomové hmotnosti příslušného prvku, resp. kovu. Relativní atomové hmotnosti prvků, resp. kovů jsou uvedeny v tabulce 3.1 nebo jsou k dispozici v chemických tabulkách.

Z relativní atomové hmotnosti, viz rovnice (3.2):

$$Ar_{(X)} = \frac{m_{a(X)}}{m_u} = \frac{m_{a(X)}}{1,66053 \cdot 10^{-27}}$$

kde značí:  $m_{a(X)}$  – hmotnost atomu prvku X [kg];  $m_u$  – hmotností atomovou konstantu ( $1,66053 \cdot 10^{-27}$  kg).

Na základě Avogadrovy konstanty, viz rovnice (3.3):

$$m_{a(X)} = \frac{M_{m(X)}}{N_A} = \frac{Ar_{(X)} \cdot M_u}{N_A} = \frac{Ar_{(X)} \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}},$$

kde značí:  $m_{a(X)}$  - hmotnost atomu prvku X (v našem případě kovu);  $M_{m(X)}$  – molární hmotnost prvku X [ $\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ ];  $N_A$  - Avogadrova konstanta ( $N_A = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ );  $Ar_{(X)}$  – relativní atomová hmotnost prvku X [1];  $M_u$  – molární hmotnostní konstantu  $10^{-3}$  [ $\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ ].

#### Úloha č. 1

Určete hmotnost atomu železa, zlata, hliníku, hořčíku, zinku a vodíku. Vodík je škodlivým prvkem v taveninách kovů (např. v hliníku a mědi).

*Řešení:*

1) najdeme v chemických tabulkách příslušné hodnoty:

$Ar_{(Fe)}$ : 55,847;  $Ar_{(Al)}$ : 26,96;  $Ar_{(Mg)}$ : 24,31;  $Ar_{(Zn)}$ : 65,38;  $Ar_{(H)}$ : 1,008;

2) dosadíme do vztahu (3.2):

$$\begin{aligned}
m_{a(\text{Fe})} &= A_{r(\text{Fe})} \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 55,847 \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 9,2736 \cdot 10^{-26} [\text{kg}]; \\
m_{a(\text{Al})} &= A_{r(\text{Al})} \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 26,96 \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 4,4768 \cdot 10^{-26} [\text{kg}]; \\
m_{a(\text{Mg})} &= A_{r(\text{Mg})} \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 24,31 \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 4,0367 \cdot 10^{-26} [\text{kg}]; \\
m_{a(\text{Zn})} &= A_{r(\text{Zn})} \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 65,38 \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 10,8565 \cdot 10^{-26} [\text{kg}]; \\
m_{a(\text{H})} &= A_{r(\text{H})} \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 1,008 \cdot 1,66053 \cdot 10^{-27} = 1,673 \cdot 10^{-27} [\text{kg}];
\end{aligned}$$

3) dosazením do vztahu (3.3):

$$m_{a(\text{Fe})} = \frac{A_{r(\text{X})} \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = \frac{55,847 \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = 9,272 \cdot 10^{-26} [\text{kg}]$$

$$m_{a(\text{Al})} = \frac{A_{r(\text{X})} \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = \frac{26,93 \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = 4,471 \cdot 10^{-26} [\text{kg}]$$

$$m_{a(\text{Mg})} = \frac{A_{r(\text{X})} \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = \frac{24,31 \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = 4,036 \cdot 10^{-26} [\text{kg}]$$

$$m_{a(\text{Zn})} = \frac{A_{r(\text{X})} \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = \frac{65,38 \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = 10,855 \cdot 10^{-26} [\text{kg}]$$

$$m_{a(\text{H})} = \frac{A_{r(\text{X})} \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = \frac{1,008 \cdot 10^{-3}}{6,023 \cdot 10^{23}} = 1,674 \cdot 10^{-27} [\text{kg}]$$

## Úloha č. 2

Vypočítejte relativní atomovou hmotnost těchto prvků: cínu, chromu, kobaltu, niklu, olova, vanadu, mědi, železa a zlata. Hodnoty porovnejte s hodnotami v tabulce 3.1.

Hodnoty hmotností atomů těchto prvků  $m_{a(\text{X})}$  jsou:

$$m_{a(\text{Sn})}: 1,971 \cdot 10^{-25} [\text{kg}];$$

$$m_{a(\text{Cr})}: 8,63 \cdot 10^{-26} [\text{kg}];$$

$$m_{a(\text{Co})}: 9,786 \cdot 10^{-25} [\text{kg}];$$

$$m_{a(\text{Ni})}: 9,746 \cdot 10^{-26} [\text{kg}];$$

$$m_{a(\text{Pb})}: 3,44 \cdot 10^{-25} [\text{kg}];$$

$$m_{a(\text{V})}: 8,314 \cdot 10^{-26} [\text{kg}];$$

$$m_{a(\text{Cu})}: 1,055 \cdot 10^{-25} [\text{kg}];$$

$$m_{a(\text{Fe})}: 9,274 \cdot 10^{-26} [\text{kg}];$$

$$m_{a(\text{Au})}: 3,27 \cdot 10^{-25} [\text{kg}].$$

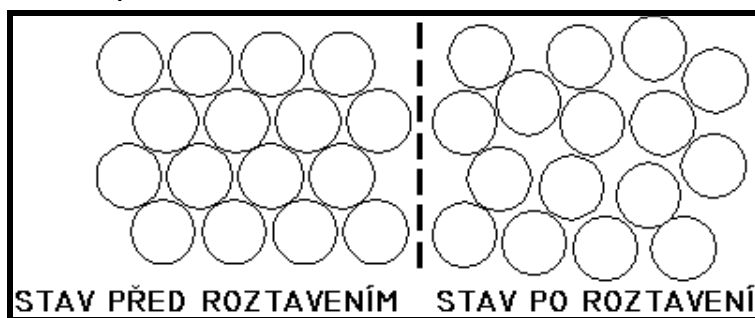
## Úloha č. 3

Napište elektronovou konfiguraci těchto kovů: Na, Mg, Al, Ti, Cr, Mn a Fe. Za základ vezměte tabulku 3.3 a 3.4.

## 4. TAVENINY KOVŮ

Kapalná fáze kovů není tak pro předmět fyziku kovů zajímavá, ale pro oblast fyzikální metalurgie si zasluhuje značnou pozornost.

Tuhý stav kovů je charakterizován pravidelnými polohami atomů, resp. iontů, které kmitají kolem rovnovážných poloh v krystalické mřížce. Ohřevem kovů dochází ke snižování vazebných (kohezních) sil mezi atomy kovů. Postupně dochází ke zvětšování vzdáleností mezi atomy kovů, které vede k tomu, že původní pravidelné uspořádání se porušuje, to významně nastává při určité teplotě, kterou nazýváme **teplotou tání materiálu**. Tím vzniká kapalná fáze - tavenina kovu. Představa je taková, že i taveniny kovů mají relativně pravidelné uspořádání atomů. Představujeme si, že každý atom je obklopen určitým počtem atomů. Vlivem intenzivního tepelného pohybu atomů je však, i při stálé teplotě taveniny, sousedství atomů proměnné. Jednotlivé atomy přitom mění polohy, avšak jejich vzájemná vzdálenost se podstatně nemění. Takovému stavu, při kterém je stále pouze nejbližší sousedství atomů, říkáme uspořádání na blízkou vzdálenost (na rozdíl od uspořádání na dlouhé vzdálenosti v tuhých kovech, které je dáno pravidelným uložením atomů v krystalové mřížce). Na obr. 4-1 je schéma rozmístění atomů v krystalové mřížce a po roztavení.



Obr. 4-1 Schéma rozmístění atomů v krystalové mřížce před a po roztavení

Teoretické představy o struktuře kapalin, resp. tavenin, vychází v podstatě ze dvou navzájem rozdílných hledisek. Jedno hledisko považuje taveniny za roztavené krystalické látky, jejichž prostorové uspořádání se částečně zachovává v určité formě po roztavení.

Podle druhého hlediska jsou kapaliny považovány za plynulé pokračování plynného stavu v oblasti nízkých teplot a velmi vysokých tlaků, kdy se již velmi výrazně uplatňují vlastní objemy a mezimolekulární přitažlivé síly molekul plynů. Tuto teorii podpořily výsledky výzkumu při zkapalňování plynů a určování kritických teplot, které ukázaly na možnost plynulého přechodu ze skupenství plynného do kapalného. Rovněž z použitelnosti Van der Waalsovy rovnice, jak pro plyny, tak pro kapaliny, vyplývá podobnost mezi strukturou obou skupenství.

Výstižnost obou hledisek závisí především na podmínkách, ve kterých se kapalina nebo tavenina nachází. Při teplotách blízkých bodu varu se struktura



kapalin a tavenin bude blížit značně nedokonalým plynům. Naproti tomu v oblasti teplot nad bodem tání bude mít kapalina nebo tavenina v souladu s druhým názorovým hlediskem řadu vlastností podobných tuhým látkám.

Protože většina metalurgických procesů probíhá při teplotách jen málo převyšujících teploty tání zúčastněných látek, vychází teorie metalurgických tavenin z představy, že struktura metalurgických tavenin je více podobná struktuře tuhých krystalických látek než struktuře plynů.

Při roztavení se průměrná meziatomová vzdálenost téměř u všech kovů zvětšuje. Tento jev je výraznější u kovů, které mají v tuhém stavu těsnější uspořádání atomů v krystalické mřížce (šesterečná a krychlová plošně středěná). Zvětšení objemu kovů při tavení se vysvětluje tím, že ve struktuře vzniká oslabením vazebných sil velké množství vakancí (prázdných míst). Množství vakancí v taveninách kovů je o několik řádů vyšší než u kovů v tuhém stavu. Proto změna polohy atomů v taveninách vlivem vakancí je velmi snadná. V tabulce 4.1 je uvedena změna mřížkového parametru a při teplotě přechodu z tuhého do kapalného stavu.

Tabulka 4.1 Hodnoty změny mřížkového parametru a při teplotě přechodu z tuhého do kapalného stavu [11]

| Kov    | Rozměr mřížkového parametru v tuhém stavu [m] | Kov v kapalném stavu  |                       |
|--------|-----------------------------------------------|-----------------------|-----------------------|
|        |                                               | Teplota taveniny [°C] | Vzdálenost atomů [m]  |
| Hliník | $2,86 \cdot 10^{-10}$                         | 700                   | $2,96 \cdot 10^{-10}$ |
| Zinek  | $2,65 \cdot 10^{-10}$                         | 460                   | $2,94 \cdot 10^{-10}$ |
| Cín    | $3,05 \cdot 10^{-10}$                         | 280                   | $3,20 \cdot 10^{-10}$ |

Některé prvky, které tvoří kovalentní vazbu, nemají dostatečně těsné uspořádání atomů v tuhém stavu. Jsou to např. křemík, vizmut, galium a germanium. Tyto prvky při tavení naopak smršťují a v kapalném stavu mají větší hustotu.

Struktura reálných tavenin s určitým podílem rozpuštěných nebo nerozpuštěných příměsí bude poněkud odlišná, neboť změna ve složení taveniny se výrazně projevuje již při nízkých koncentracích příměsí v její struktuře a tím i na jejích vlastnostech jako jsou viskozita, povrchové napětí apod.

#### 4.1 Vlastnosti tavenin kovů

Taveniny kovů mají vlastní objem, ale jejich tvar je dán tvarem nádoby ve které se nacházejí. Z toho vyplývá, že mezi atomy nebo molekulami tavenin působí silné meziatomové nebo mezimolekulární síly, podmiňující jejich soudržnost. Existence kapalného stavu tedy závisí na určité rovnováze mezi přitažlivými meziatomovými nebo mezimolekulárními silami a silamivvolanými

tepelným pohybem, které sice znesnadňují rozmístění atomů v uzlových bodech krystalických mřížek, nejsou však natolik energické, aby převýšily působení těchto přitažlivých sil.

Jak je obecně známo, veškeré kovy s výjimkou rtuti, jsou za normální teploty krystalické. Změna skupenství při přechodu ze stavu kapalného do tuhého je vedle objemových změn doprovázena i změnami pohyblivosti a uspořádání částic, resp. atomů, koordinační síly řadí tyto atomy ve zcela přesném pořadí. Pohyblivost atomů se omezuje a hmota ztrácí vlastnosti taveniny, tj. izotropii volnost pohybu atomů. Postupně vzniká útvar, ve kterém se atomy uspořádávají prostorově periodicky, pravidelně podle určitých zákonitostí, mluvíme o krystalech. Stavební částice krystalu však nejsou úplně nehybné, ale kmitají podle svých středních poloh, jež jim přísluší v krystalické struktuře. Čisté kovy tuhnou při konstantní teplotě při níž se atomy kovů uspořádávají do krystalické mřížky. Protože tavenina má nižší uspořádání atomů a tím vyšší entropii než tuhá fáze, je Gibbsova energie tuhé fáze do teploty tuhnutí menší než fáze kapalné. Proto dochází ke krystalizaci, při které se uvolňuje určitá energie ve formě tzv. skupenského krystalizačního tepla. Z termodynamického hlediska je teplota tuhnutí teplotou teoretickou při níž Gibbsova energie tuhé fáze a kapalné fáze mají stejnou hodnotu.

I když tuhnutí kovů probíhá teoreticky při konstantní teplotě, je nutno v praktických podmínkách vyvolat určité podchlazení kapalné fáze, resp. taveniny. To je vytvoření ještě nižší teploty v tavenině, než je teplota tuhnutí. Pak krystalizace začne probíhat při „skutečné“ teplotě. To vyplývá z termodynamiky krystalizace, jejíž podstatou je záporná hodnota změny Gibbsovy energie.

Na základě výše uvedených poznatků je zřejmé, že taveniny různých kovů zaujímají jiný objem než kovy ve stavu tuhém, to způsobuje přítomnost vakancí tavenin kovů. V tabulce 4.2 jsou uvedeny změny objemu vybraných kovů při teplotě tání.

Tabulka 4.2 Změny specifického objemu kovů při jejich teplotě tání [8]

| Kov       | Relativní atomová hmotnost [1] | Teplota tání [°C] | Změna objemu při teplotě tavení [%] |
|-----------|--------------------------------|-------------------|-------------------------------------|
| Hliník    | 26,981                         | 660               | 7,1                                 |
| Zinek     | 65,380                         | 420               | 4,1                                 |
| Měď       | 63,546                         | 1083              | 5,3                                 |
| Hořčík    | 24,305                         | 650               | 4,2                                 |
| Cín       | 118,69                         | 232               | 3,5                                 |
| Nikl      | 58,70                          | 1455              | 3,1                                 |
| Železo    | 565,845                        | 1539              | 3,2                                 |
| Křemík    | 28,086                         | 1430              | -5,0                                |
| Galium    | 70                             | 29                | -3,2                                |
| Vismut    | 208,98                         | 271               | -3,3                                |
| Antimon   | 121,75                         | 630               | -1,0                                |
| Germanium | 73                             | 936               | -5,0                                |

Chování tavenin kovů charakterizují různé fyzikální veličiny, jako je teplota, vlastnosti při přechodu do tuhého stavu, atd.

**Teplota tání kovů** - čisté kovy tají při jedné teplotě. Slitiny kovů se taví v intervalu teplot, s výjimkou slitin kovů o eutektickém složení (tají při jedné teplotě). K roztavení kovů je potřeba určité množství tepla, které lze stanovit na základě rovnice:

$$Q = m \left[ \int_{T_{20}}^{T_S} c_S \cdot dT + l_{Tá} + \int_{T_S}^{T_L} c_L \cdot dT \right] \quad (4.1)$$

kde značí:  $m$  - hmotnost taveniny [kg];  $c_S$  - měrnou tepelnou kapacitu kovu v tuhém stavu [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ];  $T_L$  - teplotu tání kovu [ $^{\circ}\text{C}$ ];  $T_{20}$  - počáteční teplotu kovu před tavením [ $^{\circ}\text{C}$ ];  $l_{Tá}$  - měrné skupenské teplo tání [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ];  $c_L$  - měrnou tepelnou kapacitu kovu v kapalném stavu [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ];  $T_L$  - teplotu kovu po roztavení [ $^{\circ}\text{C}$ ].

**Měrná tepelná kapacita kovů v kapalném stavu** - představuje množství tepla, které je potřeba k ohřátí 1 kg taveniny kovu, aby se zvýšila její teplota o  $1^{\circ}\text{C}$ .

**Měrné skupenské teplo tání (krystalizace)** bylo také označováno jako latentní teplo - je to teplo, které musí přijmout 1 kg kovu, aby přešel do kapalného stavu (aby došlo k jeho roztavení). Pro krystalizaci je jeho význam opačný - je teplo, které musíme odejmout 1 kg kovu, aby přešel do tuhého stavu.

V tabulce 4.3 jsou uvedeny hodnoty měrné tepelné kapacity a měrného skupenského tepla vybraných technicky důležitých kovů.

Tabulka 4.3 Tepelné hodnoty slévárenských materiálů [12]

| Materiál               | Měrné skupenské teplo tání [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ] | Měrná tepelná kapacita [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ] |        |
|------------------------|----------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|--------|
|                        |                                                                | $c_L$                                                                          | $c_S$  |
| Čistý hliník (99,98 %) | 397 163                                                        | 1289,5                                                                         | 896,0  |
| Slitina AlSi10         | 472 121                                                        | 1070,0                                                                         | 968,0  |
| Slitina AlSi9Cu3       | 463 100                                                        | 1090,0                                                                         | 985,0  |
| Slitina AlSi12         | 513 335                                                        | 1131,0                                                                         | 1080,0 |
| Čisté olovo            | 23 865                                                         | 142,0                                                                          | 129,0  |
| Čistá měď              | 209 340                                                        | 480,0                                                                          | 383,0  |
| Mosaz (40%Zn)          | 180 032                                                        | 447,0                                                                          | 381,0  |
| Ocel (měkká)           | 272 142                                                        | 670,0                                                                          | 405,0  |
| Ocel (1,2%C)           | 251 200                                                        | 710,0                                                                          | 473,0  |
| Litina (LLG)           | 259 200                                                        | 837,2                                                                          | 540,0  |
|                        | 299 200                                                        | 729,0                                                                          | 544,2  |

|             |         |       |       |
|-------------|---------|-------|-------|
| Čistý cín   | 56 615  | 227,0 | 243,0 |
| Čistý zinek | 112 206 | 502,0 | 385,0 |

Tabulka 4.4 Hodnoty hustoty tavenin vybraných kovů při teplotě likvidu a solidu, podle CAMPBELLA [13]

| Kov     | Typ krystalické buňky | Teplota tavení [°C] | Hustota při $T_L$ [kg.m <sup>-3</sup> ] | Hustota při $T_s$ [kg.m <sup>-3</sup> ] | Objemové smrštění [%] |
|---------|-----------------------|---------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------|
| Hliník  | FCC                   | 660                 | 2368                                    | 2550                                    | 7,14                  |
| Kobalt  | FCC                   | 1495                | 7750                                    | 8180                                    | 5,26                  |
| Měď     | FCC                   | 1083                | 7938                                    | 8382                                    | 5,30                  |
| Nikl    | FCC                   | 1453                | 7790                                    | 8210                                    | 5,11                  |
| Olovo   | FCC                   | 327                 | 10665                                   | 11020                                   | 3,22                  |
| Železo  | BCC                   | 1539                | 7035                                    | 7260                                    | 3,15                  |
| Hořčík  | HCP                   | 650                 | 1590                                    | 1655                                    | 4,10                  |
| Zinek   | HCP                   | 420                 | 6577                                    | 6840                                    | 4,08                  |
| Cín     | Tetragonal.           | 232                 | 6986                                    | 7166                                    | 2,51                  |
| Antimon | Rhomb.                | 631                 | 6493                                    | 6535                                    | 0,64                  |
| Vismut  | Rhomb.                | 271                 | 10034                                   | 9701                                    | -3,32                 |
| Cer     | HCP                   | 787                 | 6668                                    | 6646                                    | -0,33                 |
| Křemík  | Diam.                 | 1412                | 2525                                    | 2450                                    | -2,90                 |

Vlastnosti tavenin kovů jsou důležité pro metalurgickou výrobu a jejich zpracování. Vlastnosti tavenin kovů charakterizují dvě důležité fyzikální veličiny, viskozita a povrchové napětí.

**Viskozita** – je vnitřní tření taveniny, závisí na charakteru taveniny a na přitažlivých silách v tavenině. Taveniny s velkou hodnotou viskozity jsou málo tekuté, naopak taveniny s malou hodnotou viskozity jsou tekuté. Hodnoty viskozit vybraných kovů jsou uvedeny v tabulce 4.5.

Rozlišují se dva typy viskozity: *dynamická viskozita* ( $\eta$ ) a *kinematická viskozita* ( $\nu$ ).

Dynamická viskozita ( $\eta$ ) [Pa.s] - je součinitelem úměrnosti mezi tečným napětím (působí mezi vrstvami proudícího prostředí) a velikostí rychlostního spádu kolmého k pohybujícímu se proudu taveniny.

Kinematická viskozita ( $\nu$ ) [m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup>] – dynamická viskozita podělená hustotou daného kovu. V technické praxi lépe charakterizuje taveninu kovu.

**Povrchové napětí** ( $\sigma$ ) - je normálové napětí působící v rovině povrchu kapaliny kolmo na kterýkoliv řez povrchu. Přitom se rozumí kolmým napětím podíl síly dF a délky dl k této síle kolmého řezu povrchem kapaliny. Povrchové napětí tavenin kovů lze orientačně vypočítat dle vztahu:

$$\sigma = \alpha \cdot \frac{\rho}{M_{m(x)}} = 7,87 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{\rho}{A_{r(x)} \cdot M_u} [N.m^{-1}] \quad (4.2)$$

kde značí:  $\alpha$  – součinitel  $7,87 \cdot 10^{-6}$  [J.m.mol<sup>-1</sup>];  $\rho$  - hustota [kg.m<sup>-3</sup>];  $M_{m(X)}$  – molární hmotnost prvku X [kg.mol<sup>-1</sup>];  $A_{r(X)}$  – relativní atomová hmotnost prvku X [1];  $M_u$  – molární hmotnostní konstantu  $10^{-3}$  [kg.mol<sup>-1</sup>].

Hodnoty povrchového napětí tavenin kovů jsou v tabulce 4.6. Taveniny kovů s velkým povrchovým napětím nejsou např. vhodné pro výrobu odlitků. S rostoucí teplotou taveniny, jak povrchové napětí, tak i viskozita, klesají.

Tabulka 4.5 Hodnoty viskozity tavenin kovů [15]

| Hodnoty viskozity vybraných tavenin kovů |              |                                        |                                   |                                                                |
|------------------------------------------|--------------|----------------------------------------|-----------------------------------|----------------------------------------------------------------|
| Kov                                      | Teplota [°C] | Hustota taveniny [kg.m <sup>-3</sup> ] | Dynamická viskozita $\eta$ [Pa.s] | Kinematická viskozita $\nu$ [m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ] |
| Hliník                                   | 700          | 2410                                   | $3,0 \cdot 10^{-3}$               | $1,25 \cdot 10^{-6}$                                           |
| Měď                                      | 1083         | 8450                                   | $3,58 \cdot 10^{-3}$              | $0,43 \cdot 10^{-6}$                                           |
| Zinek                                    | 420          | 6700                                   | $3,32 \cdot 10^{-3}$              | $0,30 \cdot 10^{-6}$                                           |
| Cín                                      | 327          | 10645                                  | $2,50 \cdot 10^{-3}$              | $0,240 \cdot 10^{-6}$                                          |
| Litina s lupínkovým grafitem             | 1250         | 6900                                   | $2,10 \cdot 10^{-3}$              | $0,305 \cdot 10^{-6}$                                          |
|                                          | 1425         | 6880                                   | $1,50 \cdot 10^{-3}$              |                                                                |
| Bílá litina                              | 1310         | 6980                                   | $2,65 \cdot 10^{-3}$              | $0,380 \cdot 10^{-6}$                                          |
|                                          | 1405         |                                        | $1,90 \cdot 10^{-3}$              |                                                                |
| Ocel                                     | 1535         | 7300                                   | $2,80 \cdot 10^{-3}$              | $0,335 \cdot 10^{-6}$                                          |
|                                          | 1555         | 7280                                   | $2,60 \cdot 10^{-3}$              |                                                                |
|                                          | 1610         | 7260                                   | $2,30 \cdot 10^{-3}$              | $0,325 \cdot 10^{-6}$                                          |
| Roztavená struska                        | 1650         | 2600                                   | $0,50 \cdot 10^{-3}$              | $0,192 \cdot 10^{-6}$                                          |
| Rtuť                                     | 0            | 13500                                  | $1,685 \cdot 10^{-3}$             | $0,210 \cdot 10^{-6}$                                          |
|                                          | 20           |                                        | $1,554 \cdot 10^{-3}$             |                                                                |
|                                          | 100          |                                        | $1,240 \cdot 10^{-3}$             |                                                                |
|                                          | 300          |                                        | $0,950 \cdot 10^{-3}$             |                                                                |
| Voda                                     | 20           | 1000                                   | $1,005 \cdot 10^{-3}$             | $1,005 \cdot 10^{-6}$                                          |
|                                          | 100          | 950                                    | $0,282 \cdot 10^{-3}$             | $0,297 \cdot 10^{-6}$                                          |

Tabulka 4.6 Hodnoty povrchového napětí některých tavenin a kapalin [15]

| Hodnoty povrchového napětí vybraných tavenin kovů a kapalin |              |                                                |
|-------------------------------------------------------------|--------------|------------------------------------------------|
| Látka                                                       | Teplota [°C] | Povrchové napětí $\sigma$ [N.m <sup>-1</sup> ] |
| Hliník                                                      | 750          | $489 \cdot 10^{-3}$                            |
| Hořčík                                                      | 680          | $547 \cdot 10^{-3}$                            |
| Měď                                                         | 1120         | $1270 \cdot 10^{-3}$                           |
| Olovo                                                       | 350          | $442 \cdot 10^{-3}$                            |
| Cín                                                         | 700          | $538 \cdot 10^{-3}$                            |
| Nikl                                                        | 1550         | $1925 \cdot 10^{-3}$                           |
| Litina s lupínkovým grafitem (očkovaná)                     | 1300         | $1070 \cdot 10^{-3}$                           |
| Litina s lupínkovým grafitem (3,9 %C)                       | 1300         | $1150 \cdot 10^{-3}$                           |
| Bílá litina                                                 | 1420         | $1500 \cdot 10^{-3}$                           |

|                                  |      |                      |
|----------------------------------|------|----------------------|
| <b>Železo</b>                    | 1570 | $1835 \cdot 10^{-3}$ |
| <b>FeO</b>                       | 1420 | $585 \cdot 10^{-3}$  |
| <b>Rtut' v atmosféře vzduchu</b> | 1420 | $334 \cdot 10^{-3}$  |
| <b>Rtut' v atmosféře dusíku</b>  | 25   | $565 \cdot 10^{-3}$  |
| <b>Voda</b>                      | 25   | $72,7 \cdot 10^{-3}$ |

Z komplexního fyzikálně metalurgického pohledu je třeba uvažovat důležité vlastnosti, ke kterým dochází u kovů při přechodu z kapalně fáze do tuhé fáze.

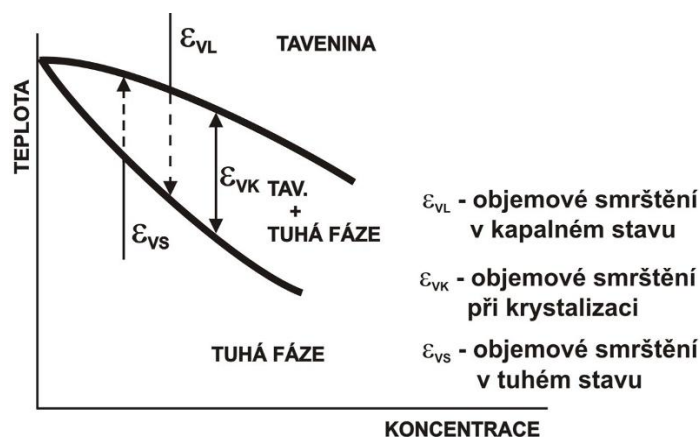
#### 4.1.1 Vlastnosti kovů při přechodu z taveniny do tuhého stavu

Při přechodu taveniny kovů do tuhého stavu (tuhnutí a popř. chladnutí kovů) probíhá změna objemu tuhnoucího kovu, hodnoty, viz tabulka 4.2 a 4.4, které přispívají ke změnám rozměrů ztuhlého kovu. Mezi tyto jevy se řadí smršťování, které mění výsledné rozměry ztuhlého kovu a vyvolává podmínky pro vznik vnitřních dutin ztuhlého kovu. Smršťování je obrazem objemových změn tekuté a tuhé fáze odlévaného kovu (slitiny kovů) s klesající teplotou i objemovými změnami při fázových přeměnách, tj. při tuhnutí ( $T_L$  a  $T_S$ ). Projevem jsou charakteristické změny objemu a rozměrů ztuhlého kovu, podle druhu kovu dochází nejčastěji ke zmenšování celkových rozměrů, popř. ke vzniku staženiny.

**Poznámka:** Smršťování, které se vztahuje k délkovým změnám rozměrů ztuhlého kovu, se nazývá lineární smršťování. K lineárnímu smršťování dochází při chladnutí ztuhlého kovu a je příčinou zmenšení jeho lineárních rozměrů.

Smršťování, které probíhá v celém procesu tuhnutí a chladnutí kovů lze rozdělit do tří etap:

- 1)  $\varepsilon_{V(L)}$  - smršťování v tekutém stavu ( $T_{lití} - T_S$ );
- 2)  $\varepsilon_{V(K)}$  - smršťování při krystalizaci (v intervalu teplot tuhnutí), ( $T_L - T_S$ );
- 3)  $\varepsilon_{V(S)}$  - smršťování v tuhém (pevném) stavu ( $T_L - T_{ok}$ ), viz obr. 4-3.



Obr. 4-3 Část rovnovážného diagramu s vyznačením oblastí smrštění

**Smršťování v tekutém stavu** - bezprostředně po odlití taveniny do slévárenské formy dochází k odvodu tepla přehřátí kovu do formy. Současně však vzniká smrštění taveniny, které končí až jejím tuhnutím. Objemové smrštění v tekutém stavu lze stanovit:

$$\varepsilon_{V(L)} = \alpha_{V(L)} \cdot (T_{\text{lití}} - T_S), \quad (4.3)$$

kde značí:  $\alpha_{V(L)}$  - součinitel objemového smrštění v tekutém stavu;  $T_{\text{lití}}$  - teplotu lití;  $T_S$  - teplotu solidu.

Smršťování v tekutém stavu je spojeno s poklesem hladiny taveniny. Míra smrštění je tím větší, čím více je tavenina přehřátá, tj. čím je vyšší lití teplota.

**Smršťování při krystalizaci (stahování)** - nastává mezi teplotou likvidu a solidu. S poklesem teploty přibývá tuhá fáze na úkor taveniny. Objemové smrštění při krystalizaci lze stanovit:

$$\varepsilon_{V(K)} = \alpha_{V(K)} \cdot (T_S - T_{\text{lití}}), \quad (4.4)$$

kde značí:  $\varepsilon_{V(K)}$  - součinitel objemového smrštění v intervalu teplot;  $T_L$  - teplotu likvidu.

**Smršťování v tuhém stavu** - projevuje se hlavně lineárním (délkovým) smrštěním  $\varepsilon_{\text{lin}}$  - dochází ke zmenšení lineárních rozměrů tuhnoucího materiálu. To má v technické praxi význam např. při výrobě odlitků, kdy model pro výrobu daného odlitku musí být vždy větší o tzv. míru smrštění. Lineární smrštění kovů lze vypočítat:

$$\varepsilon_{\text{lin}} = \left[ \frac{(l_1 - l_2)}{l_1} \right] \cdot 100, \quad (4.5)$$

kde značí:  $l_1$  - rozměr odlitku při teplotě solidu;  $l_2$  - rozměr ochlazovaného odlitku.

Objemové smrštění v tuhém stavu lze stanovit orientačně stanovit:

$$\varepsilon_{V(S)} = 3 \cdot \varepsilon_{\text{lin}}. \quad (4.6)$$

Objemové smrštění v pevném stavu nemá prakticky vliv na velikost staženiny v materiálu, je nepatrné a lze ho vypočítat dle vztahu:

$$\varepsilon_{V(S)} = \alpha_{V(S)} (T_L - T_0), \quad (4.7)$$

kde značí:  $\varepsilon_{V(S)}$  - součinitel objemového smrštění v tuhém stavu;  $T_0$  - teplotu okolí.

Smršťování kovů při přechodu z kapalně do tuhé fáze a smršťování kovů v tuhém stavu je nutno věnovat značnou pozornost především v praktické metalurgii a ve slévárenské výrobě.

### Stanovení změny objemu při tuhnutí kovů

Výpočet změny objemu kovu při tuhnutí kovů vychází ze skutečnosti, že při tuhnutí běžných kovů dochází v porovnání s objemem taveniny ke zmenšení objemu, vzniká tzv. staženina.

Platí rovnice:

$$V_S = V_T - V_Z, \quad (4.8)$$

kde značí:  $V_S$  - objem staženiny [ $\text{m}^3$ ];  $V_T$  - objem taveniny [ $\text{m}^3$ ];  $V_Z$  - objem ztuhlého kovu [ $\text{m}^3$ ].

Na základě rovnosti hmotností, lze vyjádřit vztah objemu ztuhlého kovu v souvislosti s objemem taveniny:

$$m_Z = m_T, \quad (4.9)$$

kde značí:  $m_Z$  - hmotnost ztuhlého kovu [ $\text{kg}$ ];  $m_T$  - hmotnost taveniny kovu [ $\text{kg}$ ].

Dosazením součinu příslušného objemu a hustoty do rovnice (4.9), lze psát:

$$V_Z \cdot \rho_Z = V_T \cdot \rho_T, \quad (4.10)$$

kde značí:  $\rho_Z$  – hustotu kovu při teplotě solidu [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ];  $\rho_T$  – hustotu kovu při teplotě likvidu [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ].

Z rovnice (4.9) lze vyjádřit stanovení objemu taveniny:

$$V_T = V_Z \cdot \frac{\rho_Z}{\rho_T}, \quad (4.11)$$

### 4.1.2 Řešení ukázkových příkladů

#### Příklad č. 1

Na základě rovnice (4.2) vypočítejte přibližnou hodnotu povrchového napětí mědi. Molární hmotnost 1 molu je  $M_{\text{m(X)}} = A_{\text{r(X)}} \cdot M_{\text{u}}$  (relativní atomová hmotnost prvku  $\cdot 10^{-3}$ ). Molární hmotnost 1 molu mědi je  $63,55 \cdot 10^{-3}$ .  $\rho = 8450 [\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$ ,  $\alpha = 7,87 \cdot 10^{-6} [\text{J} \cdot \text{m} \cdot \text{mol}^{-1}]$ . Dosazením potřebných hodnot do vztahu (3.2) lze získat hodnotu  $1,10 [\text{N} \cdot \text{m}^{-1}]$ .



**Řešení:**

$$\sigma = \alpha \cdot \frac{\rho}{M_{m(x)}} = 7,87 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{\rho}{A_r \cdot M_u} = 7,87 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{8450}{63,55 \cdot 10^{-3}} = 1,05 [N.m^{-1}]$$

### **Příklad č. 2**

Výpočet změny objemu kovu po ztuhnutí lze ukázat např. na železe. Hustota železa  $\rho_Z$  při teplotě solidu je 7225 [kg.m<sup>-3</sup>], hustota železa  $\rho_T$  při teplotě likvidu je 7014 [kg.m<sup>-3</sup>]. Dosazení do rovnice (4.10).

**Řešení:**

$$V_T = V_Z \cdot \frac{7225}{7014} = V_Z \cdot 1,03$$

Dosazení vyjádřeného vztahu (4.11) do rovnice (4.7) se získá:

$$V_S = V_Z \cdot 0,03 - V_Z = V_Z \cdot (1,03 - 1) = V_Z \cdot 0,03$$

Zřešení, dosazením do příslušných rovnic je zřejmé, že objem staženiny činí 0,03, tj. 3 %. Pokud tuto hodnotu porovnáme s hodnotou uvedenou v tabulce 4.2 (3,2 %) nebo s hodnotou v tabulce 4.4 (3,15 %).

## **4.2 Úlohy k procvičení**

*Výpočet tepla pro tavení kovů*

### **Úloha č. 1**

Stanovte množství tepla, které je potřeba k roztavení 1000 kg čistého hliníku. Teplota tavení čistého hliníku je 660 °C. K řešení použijte hodnoty z tabulky 4.3 a integrál (4.1).

### **Úloha č. 2**

Porovnejte, zda-li pro tavení 1 kg litiny s lupínkový grafitem je nutno dodat více tepla než pro tavení čistého hliníku. Teplota tání litiny je 1147 °C a teplota tavení čistého hliníku je 660 °C.

### **Úloha č. 3**

Stanovte množství tepla pro roztavení 1000 kg mědi. Teplota tání mědi je 1083 °C. Srovnajte vypočítanou hodnotu tepla s teplem potřebného pro tavení 1000 kg čistého hliníku.

*Výpočet povrchového napětí tavenin kovů*

**Úloha č. 4**

Na základě rovnice (4.2) vypočítejte přibližnou hodnotu povrchového napětí hliníku, hořčíku, zinku, olova. Potřebné hodnoty pro výpočet jsou k dispozici v tabulce 3.1, hustoty tavenin v tabulkách 4.5, popř. 4.4, pro  $T_L$ . Vypočítané hodnoty porovnejte s hodnotami v tabulce 4.6.

*Stanovení hodnoty změny objemu kovu při tuhnutí*

**Úloha č. 5**

Vypočítejte hodnotu objemového smrštění (objem staženiny) při tuhnutí čistého zinku. Hustota zinku při teplotě solidu je  $6840 \text{ [kg.m}^{-3}\text{]}$  a při teplotě likvidu je  $6577 \text{ [kg.m}^{-3}\text{]}$ .

**Úloha č. 6**

Vypočítejte hodnotu objemového smrštění (objem staženiny) při tuhnutí čisté mědi. Hustota mědi při teplotě solidu je  $8382 \text{ [kg.m}^{-3}\text{]}$  a při teplotě likvidu je  $7938 \text{ [kg.m}^{-3}\text{]}$ .

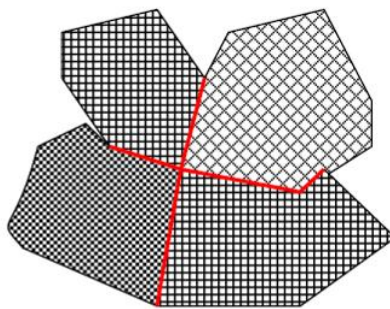
**Úloha č. 7**

Vypočítejte hodnotu objemového smrštění (objem staženiny) při tuhnutí čistého vizmutu. Hustota vizmutu při teplotě solidu je  $9701 \text{ [kg.m}^{-3}\text{]}$  a při teplotě likvidu je  $10034 \text{ [kg.m}^{-3}\text{]}$ .

## 5. KRYSTALICKÁ STAVBA KOVŮ

Všechny kovy, s výjimkou rtuť, jsou za normální teploty (cca 20 °C) krystalické. Krystalické látky se vyznačují uspořádáním částic (atomů, iontů, molekul) na dlouhou i krátkou vzdálenost. To znamená, že jednotlivé atomy jsou pravidelně uspořádány v tzv. krystalové struktuře a tou pravidelností je vytvářen tzv. určitý „jednoduchý motiv“. To znamená, že částice se pravidelně opakuje ve všech směrech.

Změna skupenství ze stavu kapalného do tuhého je mimo jiné doprovázena i výraznými změnami v pohyblivosti atomů a v jejich uspořádání. Pohyblivost atomů se omezuje a hmota ztrácí vlastnosti kapaliny, tj. izotropii. Koordinační síly řadí atomy do pravidelných poloh. Vzniká útvar, v němž jsou atomy (obecně částice) uspořádány v prostoru pravidelně podle určitých zákonitostí, mluvíme o *krystalu*. Na obr. 5-1 je plošné schéma krystalů.

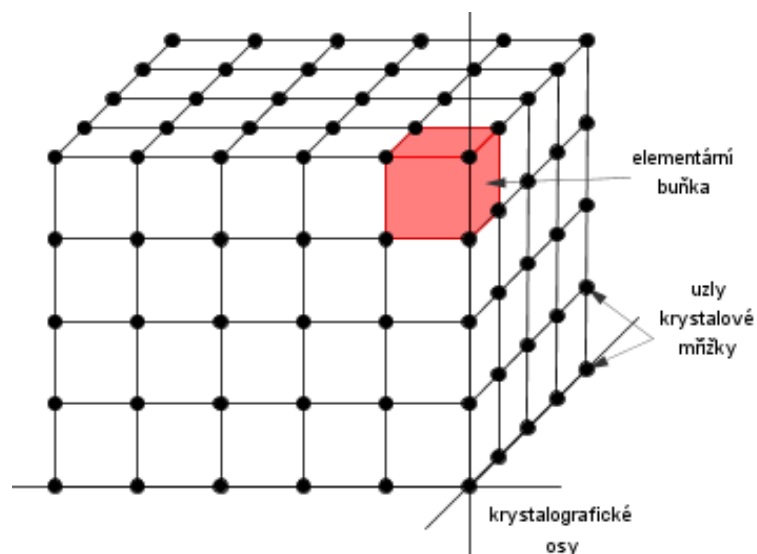


Obr. 5-1 Plošné schéma krystalů [26]

Ve skutečnosti je však struktura kovů je polykrystalická – skládá se z většího počtu krystalů. Při krystalizaci však nevznikají pravidelné krystaly, ale zpravidla krystaly nepravidelné, která nazýváme *zrna*. Růst zrn začíná v tzv. krystalizačních centrech. Zrna se od sebe liší hlavně rozdílnou prostorovou orientací mřížek.

### 5.1 Charakteristika krystalových mřížek

Každý krystal, (viz obr. 5-1, což je jen zjednodušené, plošné naznačení krystalů) má vnitřní pravidelné uspořádání stavebních částic (atomů, iontů, molekul) podle určitého geometrického pořádku, což se nazývá prostorová nebo krystalová mřížka. Jedná se o geometrickou abstrakci, která nahrazuje atomy nebo jiné částice (ionty, molekuly) nehmotnými body. Krystalová mřížka je složena z velkého počtu *elementárních buněk*, viz obr. 5-2.



Obr. 5-2 Krystalová mřížka s vyznačením odpovídající elementární buňky [26]

Elementární buňky se pravidelně řadí v prostoru podle prodloužených hran rovnoběžnostěnu, kterými jsou určeny tři krystalografické osy. Místa, ve kterých jsou částice umístěny, se nazývají uzly krystalové mřížky. Nejmenší vzdálenost částic v mřížce je řádově  $10^{-10}$  m. Délka hrany elementární buňky se nazývá *mřížková konstanta* krystalové mřížky ve směru dané hrany. Jednotlivé rovnoběžnostěny jsou charakterizovány velikostí jejich stran  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , a protilehlými úhly  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ .

Francouzský krystalograf Bravais se zabýval uspořádáním atomů v prostoru. Zjistil, že to lze provést 14 způsoby. Pro každý z nich lze nalézt minimální prostorový útvar, jehož posouváním (translací) v prostoru získáme celý krystal.

Podle vztahu parametrů  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , resp. podle příslušné symetrie můžeme 14 elementárních buněk sdružit do 7 krystalografických soustav, viz tabulka 5.1. Různé látky krystalizující ve stejných krystalických soustavách se liší jen velikostí a vzdáleností částic.

### 5.1.1 Krystalové mřížky a buňky technicky důležitých kovů

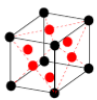
Mezi technicky důležité kovy se řadí železo, hliník, zinek, hořčík, wolfram, chrom, titan, molybden, niob, nikl, olovo, kobalt, atd. Krystalizace těchto kovů je v podstatě podle krystalické mřížky kubické prostorově nebo plošně centrované nebo podle krystalové mřížky hexagonální těsně uspořádané. V tabulce 5.2 je ukázka parametrů důležitých mřížek a v tabulce 5.3 jsou jejich další charakteristiky.

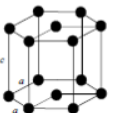
Tabulka 5.1 Krystalografické soustavy [26]

| Soustava                                           | Prvky symetrie                                                             | Elementární buňky                                                       | Varianty                                                                                   |
|----------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>I. Jednoklonná (monoklinická)</b>               | jedna osa nebo jedna rovina                                                | $a \neq b \neq c$<br>$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$      | (a) prostá<br>(b) bazálně centrovaná                                                       |
| <b>II. Trojklonná (triklinická)</b>                | -                                                                          | $a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$            | prostá                                                                                     |
| <b>III. Kosočtverečná (ortorombická)</b>           | tři navzájem kolmé dvojčetné osy nebo dvě roviny protínající se v této ose | $a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$               | (a) prostá<br>(b) bazálně centrovaná<br>(c) prostorově centrovaná<br>(d) plošně centrovaná |
| <b>IV. Klencová (terigonální, rhombocendrická)</b> | jedna trojčetná                                                            | $a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$                  | prostá                                                                                     |
| <b>V. Čtverečná (tetragonální)</b>                 | jedna čtyřčetná osa nebo jedna čtyřčetná inverzní osa                      | $a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                  | (a) prostá<br>(b) prostorově centrovaná                                                    |
| <b>VI. Krychlová (kubická)</b>                     | čtyři trojčetné osy                                                        | $a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                     | (a) prostá<br>(b) prostorově centrovaná<br>(c) plošně centrovaná                           |
| <b>VII. Šesterečná (hexagonální)</b>               | jedna šestičetná osa                                                       | $a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90^\circ$ ,<br>$\gamma = 120^\circ$ | prostá                                                                                     |

**Poznámka:** Technicky důležité kovy krystalizují v kubické soustavě prostorově a plošně centrované nebo v soustavě šesterečné.

Tabulka 5.2 Základní parametry vybraných krystalických mřížek [26]

| Buňka                                                                               |          | Typ mřížky | Počet atomů odpovídající buňce | Prostor na atom    | Koordinační číslo |
|-------------------------------------------------------------------------------------|----------|------------|--------------------------------|--------------------|-------------------|
| Typ                                                                                 | Označení |            |                                |                    |                   |
|  | FCC      | A1         | 4                              | $0,707 \cdot d^3$  | 12                |
|  | BCC      | A2         | 2                              | $0,7698 \cdot d^3$ | 8                 |

|                                                                                   |     |    |   |              |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------|-----|----|---|--------------|----|
|  | HCP | A3 | 6 | 0,707. $d^3$ | 12 |
|-----------------------------------------------------------------------------------|-----|----|---|--------------|----|

**Poznámka:** *prostorově středěná mřížka - BCC (body centered cubic); plošně středěná mřížka - FCC (face centered cubic); šesterečná nejměstnanější - HCP (hexagonal close packed)*

Tabulka 5.3 Další charakteristika vybraných krystalických mřížek [26]

| Mřížka |                                                                    | Krychlová<br>prostorově<br>středěná BCC             | Krychlová<br>plošně středěná<br>FCC                 | Šesterečná<br>nejměstnanější<br>HCP                                     |
|--------|--------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|
| 1.     | Parametry mřížky<br>a jejich vzájemné<br>vztahy                    | $a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | $a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | $a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90^\circ$ ,<br>$\gamma = 120^\circ$ |
| 2.     | Počet atomů připadající<br>jedné elementární<br>buňce $n_a$        | 2                                                   | 4                                                   | 6                                                                       |
| 3.     | Odvozený vztah pro<br>výpočet objemu<br>elementární buňky $V_{eb}$ | $a^3$                                               | $a^3$                                               | $\frac{3\sqrt{3}}{2} \cdot a^2 \cdot c$                                 |
| 4.     | Koordinační číslo                                                  | 8                                                   | 12                                                  | 12                                                                      |
| 5.     | Nejhustěji obsazené<br>roviny a směry                              | $\{110\}$<br>$\langle 111 \rangle$                  | $\{111\}$<br>$\langle 110 \rangle$                  | $\{0001\}$<br>$\langle 112\ 0 \rangle$                                  |
| 6.     | Poloměr atomu $r_a$<br>vyjádřený pomocí mříž.<br>parametru $a$     | $\frac{a \cdot \sqrt{3}}{4}$                        | $\frac{a \cdot \sqrt{2}}{4}$                        | $\frac{r}{2}$                                                           |
| 7.     | Hustota zaplnění<br>prostoru [%]                                   | 68                                                  | 74                                                  | 74                                                                      |
| 8.     | Způsob vrstvení rovin<br>zaplněnými atomy                          | ABAB                                                | ABCABC                                              | ABCABC                                                                  |

**Poznámka:** Mřížkový parametr se označuje  $a_0$  nebo  $a$ .

### 5.1.2 Geometrické podmínky – Lavesova kriteria

Lavesova kriteria pro charakteristiku krystalové struktury čistých kovů, jsou známé jako tři geometrické podmínky:

Princip nejmenšího objemu - částice při krystalizaci vyplňují co největší prostor (nejhospodárněji). V tom nejlepším případě je každá částice nejvíce 12 nejbližšími sousedy, což je nejvyšší počet, kterému říkáme **koordinační číslo**.

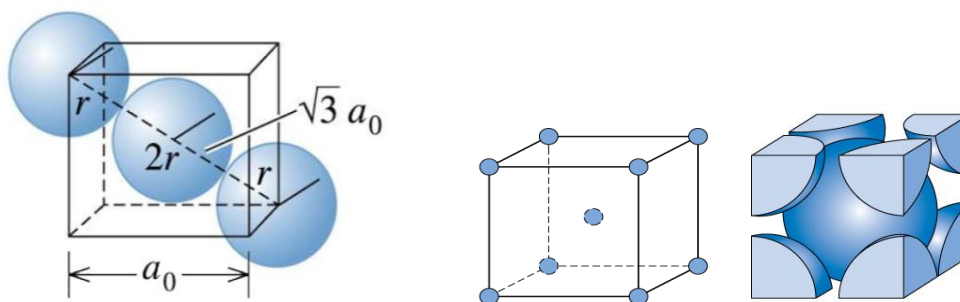
Princip nejvyšší souměrnosti - vyjadřuje snahu atomů při krystalizaci zaujmout co nejsouměrnější polohy. Koordinační číslo je v souladu s atomovým poloměrem [4]:

|                   |     |    |    |    |    |    |
|-------------------|-----|----|----|----|----|----|
| Koordinační číslo | 12  | 8  | 6  | 4  | 3  | 1  |
| Atom. poloměr [%] | 100 | 97 | 96 | 88 | 81 | 72 |

Princip nejkratších spojin - částice se mají snahu uskupovat tak, aby spojení mezi nimi mělo co největší násobnost.

**Krychlová prostorově středěná buňka**, viz obr. 5-3, je charakteristická mřížkovým parametrem  $a_0$ . Jedné této buňce náleží celkem 2 atomy ( $1 + 1/8 \cdot 8$ ). Označíme-li průměr atomu  $d$ , pak vzdálenost dvou atomů v hraně základní buňky je mřížkový parametr  $a_0 = d/2 \cdot \sqrt{2}$ . Koordinační číslo je 8. Nej hustěji jsou obsazeny roviny typu  $\{110\}$  a nej hustěji jsou obsazeny směry typu  $\langle 111 \rangle$ , což jsou tělesové úhlopříčky krychle. Činitel plnění je 68 %.

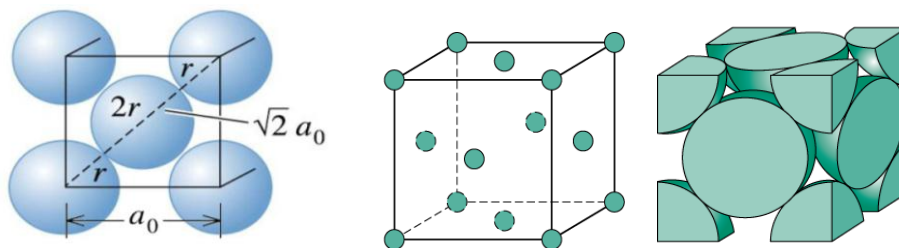
Podle této krystalické mřížky, resp. buňky krystalizuje 14 kovů, jsou to všechny alkalické kovy: Li, Na, K, Rb, Cs alkalická zemina Ba a z tranzitivních kovů Fe, Cr, V, Nb, Ta, Zr, Hf, Mo, W. Tyto kovy za studena jsou většinou málo plastické.



Obr. 5-3 Schéma krystalové buňky kubické prostorově centrované [26]

**Krychlová plošně středěná buňka**, viz obr. 5-4, je charakteristická mřížkovým parametrem  $a_0$ . Jedné této buňce náleží celkem 4 atomy ( $6 \cdot 1/2 + 1/8 \cdot 8$ ). Označíme-li průměr atomu  $d$ , pak vzdálenost dvou atomů v hraně základní buňky je mřížkový parametr  $a_0 = d/2 \cdot \sqrt{2}$ . Koordinační číslo je 12. Nej hustěji jsou obsazeny roviny typu  $\{111\}$ , což tvoří 4 osnovy rovin. Nej hustěji jsou obsazeny směry typu  $\langle 110 \rangle$ , což jsou plošné úhlopříčky. Činitel plnění je 74 %.

Podle této krystalické mřížky, resp. buňky krystalizuje 15 kovů, jsou to: Ca, Sn, Ce, Al, Fe, Co, Rh, Zr, Ni, Pd, Pt, Cu, Ar, Au, Pb. Všechny tyto kovy jsou velmi dobře tvárné.

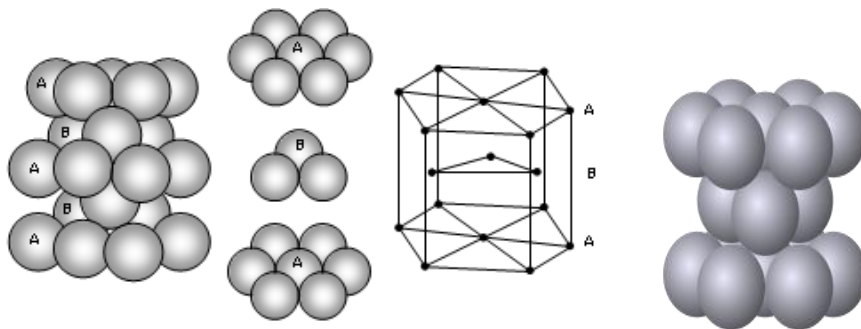


Obr. 5-4 Schéma krystalové buňky kubické plošně centrované [26]

**Nejmenší hexagonální buňka** - má 4 hlavní osy, viz obr. 5-5, tři z nich leží v rovině procházející hranami šestibokého hranolu, svírají spolu úhly  $120^\circ$  a jsou stejně dlouhé. Čtvrtá osa je kolmá k rovině těchto tří a má jinou délku. Poměr rozdílných délek je  $c : a = 1,633$  (ideální hodnota). Koordinační číslo je 12. Strukturní mřížka je dvojnásobná. Nej hustěji jsou obsazeny roviny typu  $(0001)$ , tzv. bazální roviny, které jsou rovnoběžné, tak,



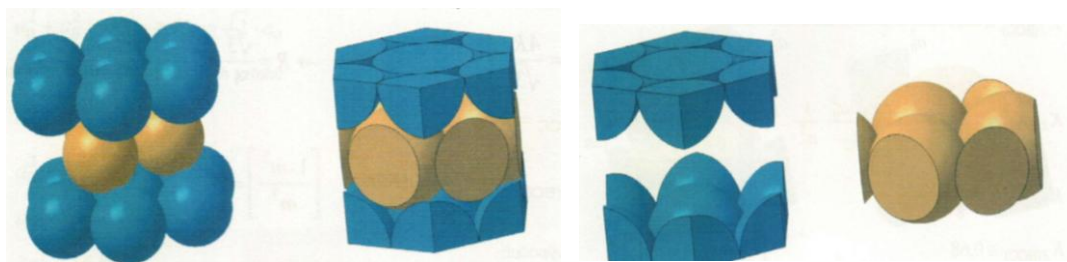
že tvoří jednu osovou rovinu. Nej hustěji jsou obsazeny směry obsazená roviny  $\langle 11\cdot20 \rangle$  a jsou tři.



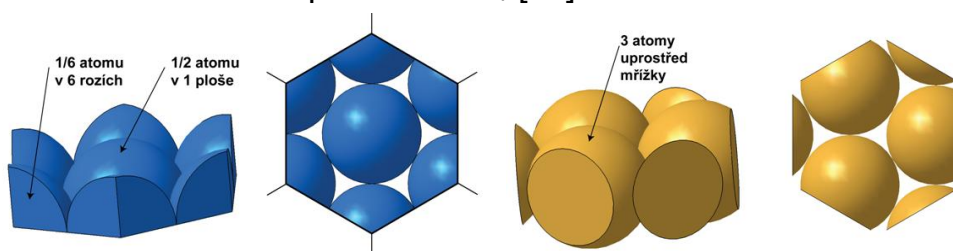
Obr. 5-5 Schéma krystalové buňky šesterečné, těsně uspořádané [40]

Na obr. 5-6 a) a 5-6 b) je uvedeno schéma šesterečné (hexagonální) buňky, která je rozdělena na části, tak aby bylo možno stanovit počet atomů připadající na tuto krystalickou buňku.

Podle této krystalické mřížky, resp. buňky krystalizuje: Cer, Mg, Zn, Zr, Ti,  $\text{Co}\alpha$ ,  $\text{Cr}\beta$  a převážná většina kovů vzácných zemin.



Obr. 5-6 a) Schéma částí hexagonální buňky pro stanovení počtu atomů, [36]



Obr. 5-6 b) Schéma částí hexagonální buňky pro stanovení počtu atomů, [36]

Z obr. 5-6 a) a 5-6 b) je zřejmé, že této buňce odpovídají tyto části atomů:

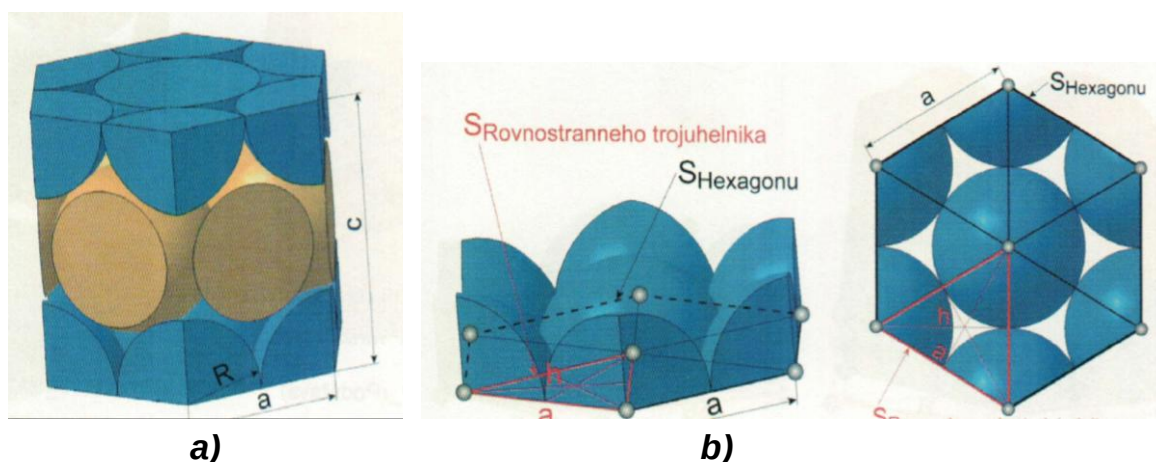
$2 \cdot (\text{části atomů v horní a spodní podstavě}), \text{viz obr. 5-6 a), tj. } 2 (6 \cdot 1/6 + 1 \cdot 1/2) = 3$   
 Střední partie buňky, viz obr. 5-6 b) – vpravo je tvořena celkem 3 atomy.  
 Celkový počet atomů připadající na tuto buňku je  $X_{\text{HCP}} = 6$ .



Na základě obr. 5-7 lze stanovit vztah mezi délkou hrany šestiúhelníku  $a$  [m] a poloměrem atomu  $R$  [m] pro hexagonální těsně uspořádanou mřížku HCP. Z obr. 5-7 je patrné, že  $a = 2R$ . Z obr. 5-7 je také zřejmé, že vzdálenosti středů atomů horní a dolní podstavy hexagonálu představují rozměr  $c$ . V publikaci [36] je odvozeno, pro představu dosti složitě, stanovení poměru  $c/a$ :

$$\frac{c^2}{a^2} = \frac{8}{3} \Rightarrow \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633, \quad (5.1)$$

kde značí:  $a$  - délku hrany šestihranu [m];  $c$  - výšku šestihranu [m].



Obr. 5-7 Upravená strukturní buňka HCP pro odvození velikosti délky hry  $a$  a poloměru atomu  $R$  – a); schéma pro stanovení plochy šestiúhelníka - b) [36]

Poměr ve vztahu (5.1) je ideální. Ve skutečnosti bývá tento poměr větší, či menší. Hodnoty tohoto poměru pro vybrané kovy krystalizující v hexagonální soustavě jsou uvedeny v tabulce 5.4.

Tabulka 5.4 Velikost hexagonálních buněk vybraných kovů

| Velikost hexagonálních buněk vybraných kovů |                                    |
|---------------------------------------------|------------------------------------|
| <b>Hořčík</b> ( $c:a = 1,6235$ )            | <b>Zinek</b> ( $c:a = 1,8563$ )    |
| <b>Titan</b> ( $c:a = 1,5873$ )             | <b>Berilium</b> ( $c:a = 1,5847$ ) |
| <b>Zirkon</b> ( $c:a = 1,8593$ )            |                                    |

### 5.1.3 Stanovení koeficientu zaplnění

Koeficient zaplnění krystalické buňky je možno vypočítat, viz (5.2). Pro tento výpočet je nutné znát počet atomů připadajících na krystalickou buňku

$X_{\text{BUŇKY}(X)}$ , objem krystalické buňky a objem atomu dané buňky. Objem koule, resp. atomu ( $V=4\pi R^3/3$ ). Objem kubické buňky je  $V_{\text{BUŇKY}} = a_0^3$ , objem hexagonální buňky je  $V_{\text{BUŇKY}} = 3/2 \cdot (\sqrt{3} \cdot a^2 \cdot c)$ .

$$K_z = \frac{X_{\text{BUŇKY}} \cdot V_{\text{ATOMU}}}{V_{\text{BUŇKY}}} [1] \quad (5.2)$$

kde značí:  $X_{\text{BUŇKY}}$  – počet atomů připadající na jednu buňku;  $V_{\text{ATOMU}}$  – objem atomu dané buňky;  $V_{\text{BUŇKY}}$  – objem dané buňky.

## 5.2 Alotropie - polymorfie

Řada kovových prvků se může vyskytovat v různých krystalových soustavách v závislosti na teplotě a tlaku, vykazuje tedy různé *alotropické modifikace*. Tento jev se nazývá *alotropie* (u prvků) a *polymorfie* (u slitin a chemických sloučenin). Jako klasický příklad může sloužit železo: při pokojové teplotě je stabilní BCC  $\alpha$ -Fe. Při teplotě 911 °C struktura přechází na FCC  $\gamma$ -Fe. Tím však výčet ještě nekončí. Další zvyšování teploty vede k rozpadu  $\alpha$ -Fe a vzniku BCC  $\delta$ -Fe (1392 °C). Podobně může dojít k polymorfní změně při působení vysokých tlaků. Příčinou polymorfie je výhodnější energetický stav jedné či druhé alotropické modifikace za daných vnějších podmínek (teplota, tlak). Vybrané, technicky důležité kovy, které vykazují alotropické modifikace jsou uvedeny v tabulce 5.5.

Tabulka 5.5 Vybrané alotropní kovy [7]

| Kov           | Oblast stálosti modifikace [°C]                                                          | Typ mřížky                                                                                         |
|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Železo</b> | $\alpha$ do 910<br>$\gamma$ 910 až 1392<br>$\delta$ 1392 až 1539                         | BCC<br>FCC<br>BCC                                                                                  |
| <b>Mangan</b> | $\alpha$ do 678<br>$\beta$ 678 až 1100<br>$\gamma$ 1100 až 1138<br>$\delta$ 1138 až 1245 | krychlová s 58 atomy v mřížce<br>krychlová s 20 atomy v mřížce<br>čtverečná plošně středěná<br>BCC |
| <b>Kobalt</b> | $\alpha$ do 417<br>$\beta$ 417 až 1495                                                   | HCP<br>FCC                                                                                         |
| <b>Titan</b>  | $\alpha$ do 882<br>$\beta$ 882 až 1668                                                   | HCP<br>BCC                                                                                         |
| <b>Cín</b>    | $\alpha$ do 13<br>$\beta$ nad 13                                                         | krychlová (tzv. šedý cín)<br>čtverečná (tzv. bílý cín)                                             |

### 5.3 Výpočet teoretické hustoty čistých kovů

Na základě charakteru krystalické buňky lze stanovit hustotu prvků, resp. kovů. Při výpočtu teoretické hustoty kovů se vychází z obecně známého vztahu  $\rho = m/V$  [kg·m<sup>-3</sup>], z hmotnosti částic připadající na krystalickou buňku a objemu krystalické buňky. Pro obecný prvek, resp. kov, lze psát:

$$\rho_{(X)} = \frac{m}{V} = \frac{X_{\text{BUŇKY}(X)} \cdot m_{a(X)}}{V_{\text{BUŇKY}(X)}}, \quad (5.3)$$

kde značí:  $m_{a(X)}$  - hmotnost atomu daného kovu (X) [kg];  $X_{\text{BUŇKY}(X)}$  – počet atomů připadajících na krystalovou buňku daného kovu (X);  $V_{\text{BUŇKY}(X)}$  - objem buňky kovu (X).

Z minulých výpočtů je známo, že  $m_{a(X)} = A_r(X) \cdot 1,6605 \cdot 10^{-27}$  [kg]. Pro výpočet objemu kubické buňky musí být známa hodnota mřížkového parametru  $a_0$ , u hexagonální (šesterečné) buňky hodnota  $a$  a  $c$ .

V tabulce 5.6 jsou uvedeny rozměry buněk vybraných prvků.

Vypočítané hustoty příslušných kovů lze porovnat s tabelovanými hodnotami, viz tabulky prvků – příloha č. 14 až 17.

Ukázka výpočtu hustoty hořčíku  $\rho_{\text{Mg}}$  [kg·m<sup>-3</sup>] při teplotě 25°C. Hořčík krystalizuje v hexagonální těsně uspořádané mřížce (HCP). Jak je známo HCP buňce přísluší 6 atomů ( $X_{\text{HCP}} = 6$ ). Relativní atomová hmotnost hořčíku  $A_{r(\text{Mg})} = 24,31$ . Rozměry krystalické buňky jsou  $a_{(\text{Mg})} = 3,203 \cdot 10^{-10}$  [m];  $c_{(\text{Mg})} = 5,199 \cdot 10^{-10}$  [m]. Dosazením do rovnice (5.3) lze psát:

$$\rho_{(\text{Mg})} = \frac{m_{(\text{Mg})}}{V_{(\text{Mg})}} = \frac{X_{\text{BUŇKY}(\text{Mg})} \cdot m_{a(\text{Mg})}}{V_{\text{BUŇKY}(\text{Mg})}} = \frac{X_{\text{HCP}} \cdot A_{r(\text{Mg})} \cdot m_u}{S_{\text{HEXAG}} \cdot c_{(\text{Mg})}} = \frac{X_{\text{HCP}} \cdot A_{r(\text{Mg})} \cdot m_u}{\frac{3 \cdot \sqrt{3}}{2} \cdot a^2_{(\text{Mg})} \cdot c_{(\text{Mg})}}$$

$$\rho_{(\text{Mg})} = \frac{X_{\text{HCP}} \cdot A_{r(\text{Mg})} \cdot m_u}{\frac{3 \cdot \sqrt{3}}{2} \cdot a^2_{(\text{Mg})} \cdot c_{(\text{Mg})}} = \frac{6 \cdot 24,31 \cdot 1,6605 \cdot 10^{-10}}{\frac{3 \cdot \sqrt{3}}{2} \cdot (3,203 \cdot 10^{-10})^2 \cdot 5,199 \cdot 10^{-10}} = 1747 [\text{kg} \cdot \text{m}^3]$$

**Výpočet přibližné hustoty slitin** se provádí na základě procentuálního zastoupení obsahu prvků ve slitině. Např. slitina hliníku s křemíkem AlSi12, obsahuje 88 % Al, 12 % Si. Hustota hliníku je  $\rho_{(\text{Al})} = 2700$  [kg·m<sup>-3</sup>], hustota

křemíku je  $\rho_{(\text{Si})} = 2330 \text{ [kg}\cdot\text{m}^{-3}]$ . Hustota slitiny AlSi12 se vypočítá  $0,88 \cdot 2700 + 0,12 \cdot 2330 = 2657 \text{ [kg}\cdot\text{m}^{-3}]$ .

Tabulka 5.6 Hodnoty mřížkových parametrů kovů a některých prvků [38],[39]

| Prvek    |             | Mřížkový parametr $a_0$ [m]                        | Mřížkový parametr $a$ [m] | Mřížkový parametr $c$ [m] | Počet atomů pro buňku | Krystalická struktura |
|----------|-------------|----------------------------------------------------|---------------------------|---------------------------|-----------------------|-----------------------|
| Měď      | Cu          | $3,6078 \cdot 10^{-10}$<br>$3,6139 \cdot 10^{-10}$ | -                         | -                         | 4                     | FCC [38]              |
| Hliník   | Al          | $4,0486 \cdot 10^{-10}$                            |                           |                           | 4                     | FCC                   |
| Zinek    | Zn          | -                                                  | $2,6647 \cdot 10^{-10}$   | $4,9469 \cdot 10^{-10}$   | 6                     | HCP                   |
| Hořčík   | Mg          | -                                                  | $3,2030 \cdot 10^{-10}$   | $5,1990 \cdot 10^{-10}$   | 6                     | HCP                   |
| Železo   | Fe $\alpha$ | $2,8680 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 2                     | BCC                   |
|          | Fe $\gamma$ | $3,6810 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 4                     | FCC                   |
| Olovo    | Pb          | $4,9450 \cdot 10^{-10}$                            | -                         |                           | 4                     | FCC                   |
| Platina  | Pt          | $3,9231 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 4                     | FCC                   |
| Wolfram  | W           | $3,1550 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 2                     | BCC                   |
| Molybden | Mo          | $3,1420 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 2                     | BCC                   |
| Nikl     | Ni          | $3,4990 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 4                     | FCC                   |
| Platina  | Pt          | $3,9231 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 4                     | FCC                   |
| Stříbro  | Ag          | $4,0860 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 4                     | FCC                   |
| Zlato    | Au          | $4,0876 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 4                     | FCC                   |
| Berylium | Be          | -                                                  | $2,2870 \cdot 10^{-10}$   | $3,5830 \cdot 10^{-10}$   | 6                     | HCP                   |
| Nikl     | Ni          | $3,5168 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 4                     | FCC                   |
| Kobalt   | Co          | -                                                  | $2,5017 \cdot 10^{-10}$   | $4,0614 \cdot 10^{-10}$   | 6                     | HCP                   |
| Mangan   | Mn          | $2,8940 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 2                     | BCC                   |
| Titan    | Ti          | -                                                  | $2,9504 \cdot 10^{-10}$   | $4,6833 \cdot 10^{-10}$   | 6                     | HCP                   |
| Chrom    | Cr          | $2,8791 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 2                     | BCC                   |
| Molybden | Mo          | $3,1490 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 2                     | BCC                   |
| Wolfram  | W           | $3,1647 \cdot 10^{-10}$                            | -                         | -                         | 2                     | BCC                   |
| Bismut   | Bi          | -                                                  | $4,5370 \cdot 10^{-10}$   | $11,838 \cdot 10^{-10}$   | 6                     | HCP                   |
| Arzen    | As          | -                                                  | $3,7680 \cdot 10^{-10}$   | $10,574 \cdot 10^{-10}$   | 6                     | HCP                   |
| Grafit   | C           | -                                                  | $2,4640 \cdot 10^{-10}$   | $6,7360 \cdot 10^{-10}$   | 4                     | HCP                   |

## 5.4 Stanovení rovin a směrů krystalickým mřížek

Při sledování dějů, které probíhají v kovech např. při tváření, tepelném zpracování, atd., je někdy třeba sledovat roviny a směry v krystalické mřížce, resp. v krystalické buňce. K tomuto účelu se používají tzv. Millerovy indexy, které se používají pro všechny krystalografické soustavy. V metalurgické praxi

se používají především pro kubickou soustavu. Lze je také použít pro hexagonální soustavu, ale zde se častěji používají tzv. Bravaisovy indexy.

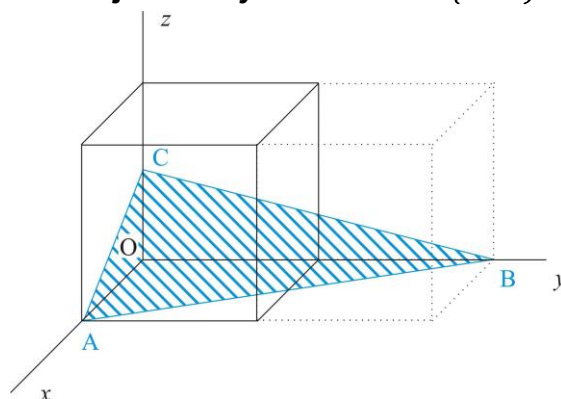
1. Značení krystalografických rovin kovů – k značení se obvykle používají tzv. **Millerovy indexy rovin** ( $h\ k\ l$ ), které jednoznačně popisují orientaci krystalografické roviny vůči krystalografickým osám  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Indexy  $h$ ,  $k$ ,  $l$  jsou celá nesoudělná čísla, jejichž převrácené hodnoty odpovídají poměrným úsekům, které vytíná příslušná rovina na krystalografických osách. Úseky na jednotlivých osách se neměří absolutními rozměry (mm,  $\mu\text{m}$ ), ale rozměry elementární buňky, tj. délkami, které elementární buňka vytíná na krystalografických osách.

### Postup při stanovení Millerových indexů rovin

1. Určíme úseky, které vytíná uvažovaná rovina na osách jako násobky nebo zlomky rozměrů elementární buňky na odpovídajících osách.
2. Stanovíme její převrácené hodnoty.
3. Převědeme tyto hodnoty na nejmenší možná celá čísla o stejném poměru.
4. Takto získaná čísla uzavřeme do kulatých závorek ( $h\ k\ l$ ).

Na obr. 5-8 je uvedena ukázka stanovení Millerových indexů roviny ABC.

**Poznámka:** Jedna rovina se označuje do kulatých závorek ( $h\ k\ l$ ); systém ekvivalentních rovin se označuje složenými závorkami  $\{h\ k\ l\}$ .

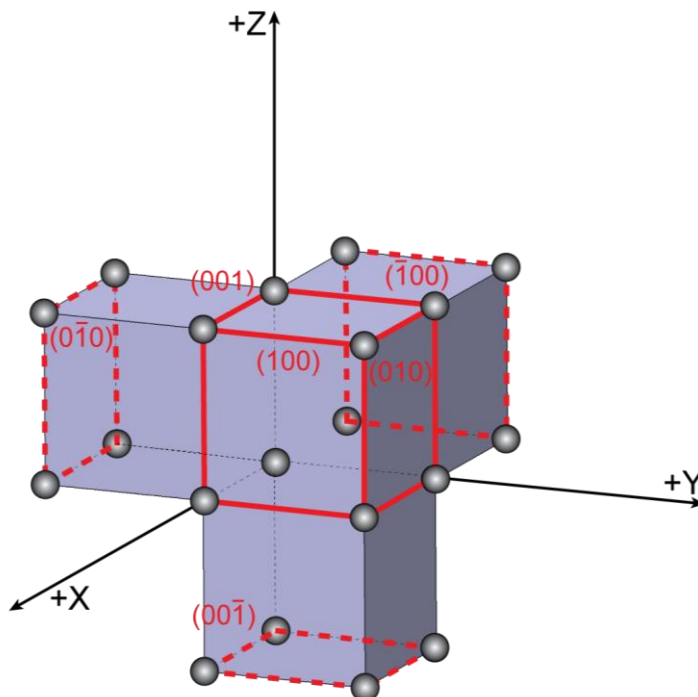


Obr. 5-8 Stanovení Millerových indexů roviny ABC [26]

Jak je patrné z obr. 5-8, úkol je najít Millerovy indexy k rovině ABC, která v krystalické buňce vytíná úseky  $1\ 2\ \frac{1}{2}$ . Převrácené hodnoty  $1\ \frac{1}{2}\ 2$ . Převedení hodnot na nejmenší možná celá čísla o stejném poměru, tj.  $2\ 1\ 4$ . Millerovy indexy k výše uvedené rovině jsou  $(2\ 1\ 4)$ .

Skupina symetricky ekvivalentních krystalografických rovin se nazývá *forma* a značí se symbolem  $\{h\ k\ l\}$ . V krychli jsou symetricky ekvivalentní všechny její

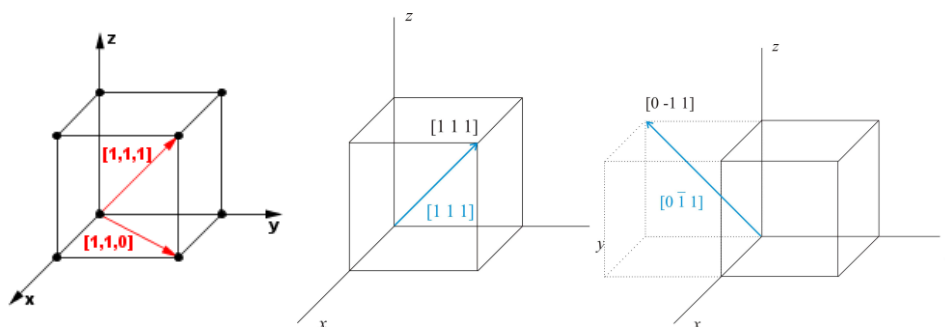
stěny. Z pohledu symetrie je nerozeznáme. Proto v krychlové krystalové mřížce jsou symetricky ekvivalentní všechny roviny s Millerovými indexy (001), (010), (100), ( $\bar{0}\bar{0}1$ ), ( $\bar{0}1\bar{0}$ ), ( $\bar{1}0\bar{0}$ ) a souhrnně se označují  $\{100\}$ . Ukázka těchto ekvivalentních rovin je na obr. 5-9.



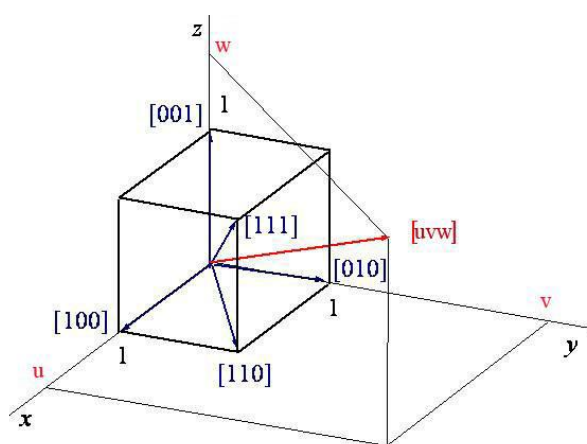
Obr. 5-9 Millerovy indexy krystalografických ekvivalentních rovin stěn kubické mřížky [37]

2. Značení krystalografických směrů mřížek – k značení se používají tzv. **Millerovy indexy směrů**  $[u\ v\ w]$ , kde  $u$ ,  $v$ ,  $w$  jsou celá nesoudělná čísla, která odpovídají složkám vektoru vedeného z počátku systému krystalografických os do nejbližšího mřížkového bodu, který leží ve směru, který popisujeme. Tak např. v prosté krychlové soustavě, obr. 5-10, je směr uzlového bodu na ose  $x$  popsán jako  $[100]$ . Podobně směr podél osy  $y$  je  $[010]$  a směr podél osy  $z$  je  $[001]$ . Tyto indexy tedy udávají směry rovnoběžné s hranami krychle. Stranová úhlopříčka spojuje počátek souřadné soustavy s bodem se souřadnicemi „1“ na ose  $x$  a „1“ na ose  $y$  a její označení je tedy  $[110]$ . Podobně indexy tělesové úhlopříčky jsou  $[111]$ .

Protože volba počátku souřadného systému je libovolná, lze směry  $[100]$ ,  $[010]$ , atd. považovat za rovnocenné. Tvoří tedy skupinu, kterou lze zapsat výběrem jednoho zástupce této skupiny, kterého zapíšeme do lomených závorek, např.  $\langle 100 \rangle$ . Má-li počátek systému v krychlové mřížce souřadnice  $[000]$ , jsou Millerovy indexy libovolného směru, který reprezentuje vektor vedený z počátku systému, číselně rovny souřadnicím koncového mřížkového bodu tohoto vektoru, viz obr. 5-11.

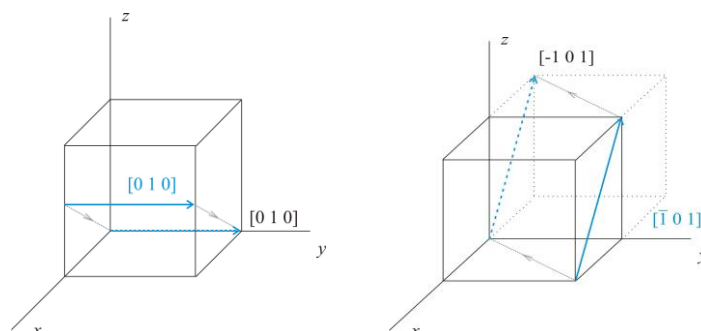


Obr. 5-10 Millerovy indexy směrů popsaných vektory s počátečním bodem ve středu souřadného systému [26]



Obr. 5-11 Ukázka Millerových indexů směrů kubické soustavy [26]

Nemá-li vektor počátek v souřadném systému  $[000]$ , je možné tento vektor rovnoběžně posunout tak, aby z počátku vycházel. Tato translace je přípustná, neboť posunutý vektor reprezentuje tentýž směr. Jeho Millerovy indexy pak odpovídají souřadnicím koncového bodu posunutého vektoru, viz obr. 5-12.



Obr. 5 -12 Stanovení Millerových indexů směrů pomocí translace směřového vektoru [26]

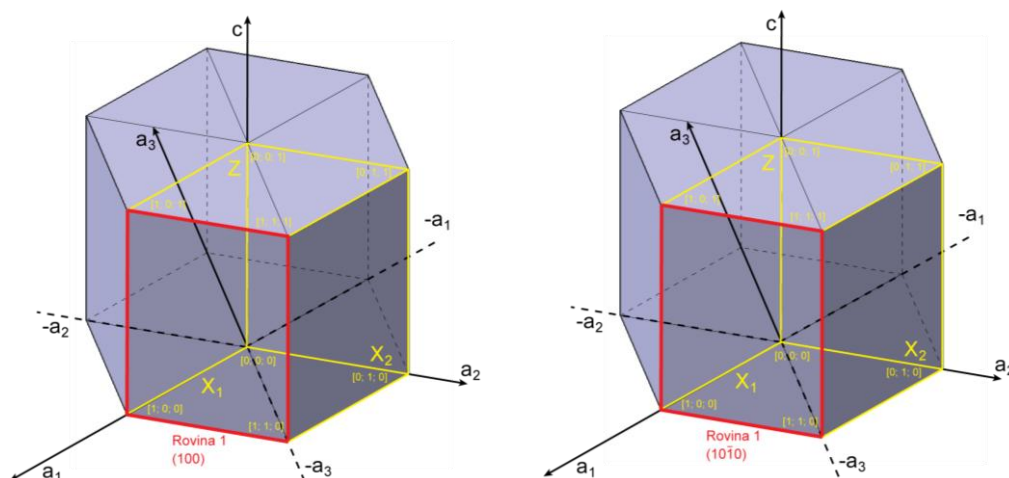
Není-li koncový bod vektoru bodem mřížky, pak se navíc prodlouží úsečka vektoru do nejbližšího bodu mřížky, viz obr. 5 -11.

**Hexagonální soustava** – lze zde použít Millerovy indexy směrů a rovin. Zde se využívá tzv. ortogonální soustava  $[X_1; X_2; Z]$ . Při popisu hexagonální soustavy se častěji používají čtyři osy  $[a_1; a_2; a_3; c]$ , které se používají pro Bravaisovy indexy rovin a směrů.

*Transformace Millerových indexů roviny (MIR) do Bravaisových indexů roviny (BIR), se provádí na základě transformace souřadného systému:  $[X_1; X_2; Z] \rightarrow [a_1; a_2; a_3; c]$ .*

Dále následuje transformace indexů roviny  $(h\ k\ l) \rightarrow (h\ k\ i\ l)$ , lze psát,  $h = h$ ,  $k = k$ ,  $i = -(h + k)$ ,  $l = l$ .

Na obr. 5 – 12 jsou uvedeny Millerovy a Bravaisovy indexy roviny.

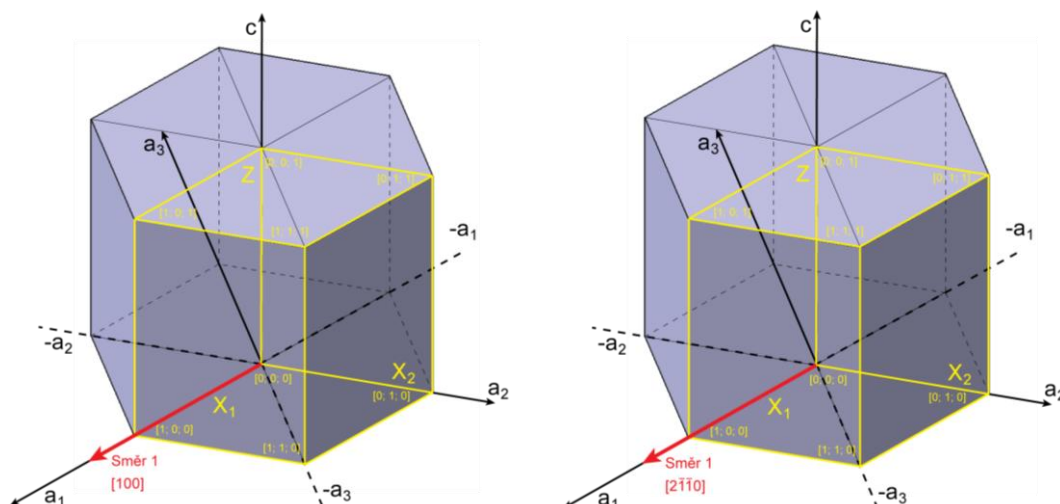


Obr. 5 – 12 Millerovy indexy (vlevo) a Bravaisovy indexy (vpravo) roviny [37]

*Transformace Millerových indexů roviny do Bravaisových indexů směrů, se provádí na základě transformace souřadného systému:  $[X_1; X_2; Z] \rightarrow [a_1; a_2; a_3; c]$ .*

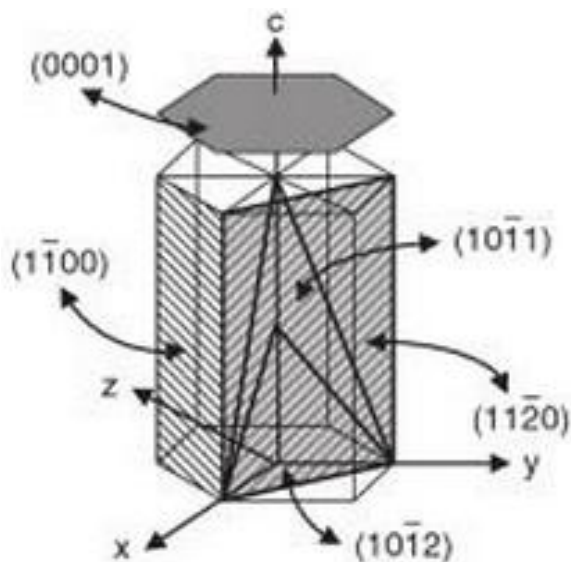
Dále se provádí transformace indexů směru:  $[u\ v\ w] \rightarrow [p\ q\ s\ t]$ . Lze psát, že  $p = 1/3 (2u - v)$ ,  $q = 1/3 (2v - u)$ ,  $s = -1/3 (u + v)$ ,  $t = w$ .

Na obr. 5 -13 jsou uvedeny Millerovy a Bravaisovy indexy směrů.





Obr. 5-13 Milerovy indexy (vlevo) a Bravaisovy indexy (vpravo) směrů [37]



Obr. 5-14 Ukázka Bravaisových rovin v hexagonální krystalické buňce [66]

3. Stanovení vzdáleností mezi rovinami krystalových mřížek kovů - se provádí mezi rovinami se stejnými Millerovými indexy rovin. Sledování těchto vzdáleností je důležité pro výzkum krystalových mřížek pomocí rentgenové difrakce.

Pro **kubickou soustavu** lze psát:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a_0^2} \quad (5.4)$$

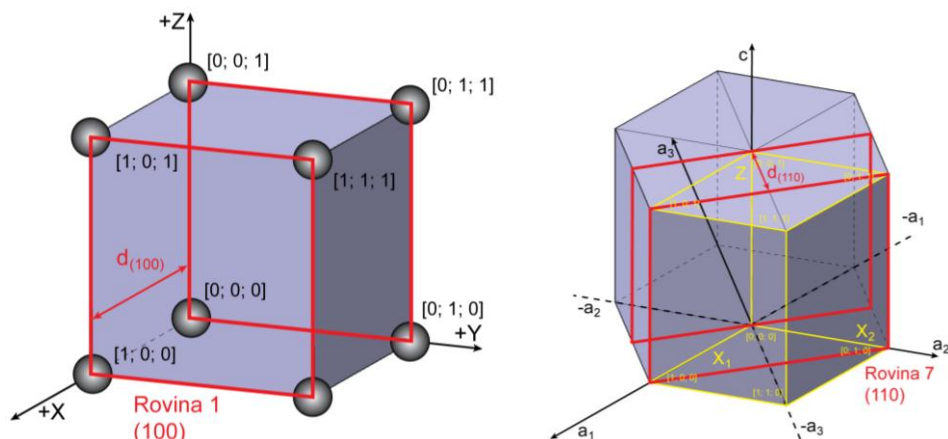
kde značí:  $d$  – vzdálenost mezi rovinami;  $(h \ k \ l)$  – Milerovy indexy roviny;  $a_0$  - mřížkový parametr.

Pro **hexagonální soustavu** lze psát:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4(h^2 + k^2 + l^2)}{3a_0^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (5.5)$$

kde značí:  $d$  – vzdálenost mezi rovinami;  $(h \ k \ l)$  – Milerovy indexy roviny;  $a$  - mřížkový parametr (hrana šestihranu),  $c$  – výšku mřížky.

Na obr. 5-15 jsou ukázky vzdáleností mezi rovinami, jak u kubické, tak u hexagonální mřížky.



Obr. 5-15 Ukázka vzdáleností mezi rovinami u kubické a hexagonální mřížky [37]

## 5.5 Řešení ukázkových příkladů

### Příklad č. 1

Stanovte tzv. koeficient zaplnění základní hexagonální buňky HCP (Hexagonal Close Packed). Je známo, že  $X_{\text{HCP-BUNKY}} = 6$ ,  $a = 2R$ . Objem koule, resp. atomu ( $V=4\pi R^3/3$ ). Objem buňky je  $S_{\text{ŠESTIHR.}} \cdot c$ .

Dosazením do rovnice (5.2) lze vypočítat:

$$K_z = \frac{6 \cdot \frac{4\pi \cdot R^3}{3}}{V_{\text{HCP-BUŇKA}}} = \frac{8\pi R^3}{6 \cdot \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot a^2 \cdot c} = \frac{8\pi R^3}{6 \cdot \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 \cdot \sqrt{\frac{8}{3}} \cdot a} = \frac{8\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{3\sqrt{2} \cdot a^3} = \frac{\pi}{3 \cdot \sqrt{2}} \cong 0,72$$

### Příklad č. 2

Stanovte tzv. koeficient zaplnění základní krystalické buňky (SC-Simple Cubic). Je známo, že  $X_{\text{BUNKY}}=1$ ,  $a_0 = 2R$ . Objem koule, resp. atomu ( $V=4\pi R^3/3$ ). Objem buňky je  $a_0^3$ .

Dosazením do rovnice (5.2):

$$K_z = \frac{1 \cdot \frac{4\pi \cdot R^3}{3}}{a_0^3} = \frac{1 \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{a_0}{2}\right)^3}{a_0^3} = \frac{4\pi \cdot a_0^3}{a_0^3 \cdot 3 \cdot 8} = \frac{4\pi}{24} = \frac{\pi}{6} \cong 0,52$$

### Příklad č. 3

Stanovte tzv. koeficient zaplnění základní hexagonální buňky HCP (Hexagonal Close Packed). Je známo, že  $X_{\text{HCP-BUNKY}} = 6$ ,  $a = 2R$ . Objem koule, resp. atomu ( $V=4\pi R^3/3$ ). Objem buňky je  $S_{\text{ŠESTIHR.}} \cdot c$ .

Dosazením do rovnice (5.2) lze vypočítat:

$$K_z = \frac{6 \cdot \frac{4\pi \cdot R^3}{3}}{V_{HCP-BU\check{N}U\check{N}}} = \frac{8\pi R^3}{6 \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot a^2 \cdot c} = \frac{8\pi R^3}{6 \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 \cdot \sqrt{\frac{8}{3}} \cdot a} = \frac{8\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{3\sqrt{2} \cdot a^3} = \frac{\pi}{3 \cdot \sqrt{2}} \cong 0,72$$

#### Příklad č. 4

Stanovte Millerovy indexy roviny (h k l) v kubické mřížce. Rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: 2,1,1.

**Řešení:**

stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků:

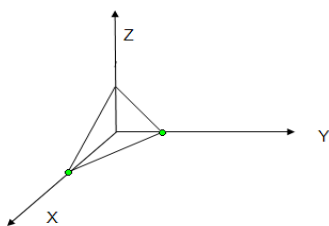
$$\frac{2}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{1} \rightarrow \frac{1}{2}, \frac{1}{1}, \frac{1}{1}$$

převedení na společného jmenovatele, číselník pak představuje Millerovy indexy rovin (MIR):

$$\frac{1}{2}, \frac{1}{1}, \frac{1}{1} \rightarrow \frac{1,2,2}{2} \rightarrow 1,2,2$$

stanovené Millerovy indexy roviny jsou (122).

**Poznámka:** Již s našimi znalostmi víme, že stanovené Millerovy indexy musíme vkreslit do krychle o jednotkové hraně. Rovina nesmí vyčnívat z krychle. V tomto případě 2 znamená, že na osu X zakreslíme úsek 1/2 a též na osu Z zakreslíme úsek 1/2. Samozřejmě, že na osu X zakreslíme úsek 1. Analogická jsou všechna další řešení MIR.



#### Příklad č. 5

Stanovte Millerovy indexy roviny (h k l) v kubické mřížce. Rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: 2,3,1.

**Řešení:**

stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků:

$$\frac{2}{1}, \frac{3}{1}, \frac{1}{1} \rightarrow \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{1}$$

převedení na společného jmenovatele, číselník pak představuje Millerovy indexy rovin (MIR):

$$\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{1} \rightarrow \frac{3,2,6}{6} \rightarrow 3,2,6$$

stanovené Millerovy indexy roviny jsou (326).

**Poznámka:** V tomto případě 3 znamená, že na osu X zakreslíme úsek 1/3 na osu Y zakreslíme úsek 1/2 a na osu Z zakreslíme úsek 1/6.

### Příklad č. 6

Stanovte Millerovy indexy roviny (h k l) v kubické mřížce. Rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: 1/4, 1/2, ∞.

**Řešení:**

stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků:

$$\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{\infty}{1} \rightarrow \frac{4}{1}, \frac{2}{1}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 4,2,0$$

převedení těchto hodnot na co nejmenší možná celá čísla, číselník představuje Millerovy indexy rovin (MIR):

$$4,2,0 \rightarrow \frac{4,2,0}{1} \rightarrow 4,2,0$$

stanovené Millerovy indexy roviny jsou (420).

**Poznámka:** V tomto případě 4 znamená, že na osu X zakreslíme 1/4, na osu Y 1/2, ose Z přísluší 0.

### Příklad č. 7

Stanovte Millerovy indexy roviny (h k l) v kubické mřížce. Rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: ∞, 1, ∞.

**Řešení:**

stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků:

$$\frac{\infty}{1}, \frac{1}{1}, \frac{\infty}{1} \rightarrow \frac{1}{\infty}, \frac{1}{1}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 0,1,0$$

převedení těchto hodnot na co nejmenší možná celá čísla, číselník pak představuje Millerovy indexy rovin (MIR):

$$0,1,0 \rightarrow \frac{0,1,0}{1} \rightarrow 0,1,0$$

stanovené Millerovy indexy roviny jsou (010).

**Poznámka:** V tomto případě 0 je na ose X, na ose Y je 1 a na ose Z je 0. Tato rovina je stěnou krychle, která je protilehlá k ose x (rovnoběžná s osou X).

**Příklad č. 8**

Stanovte Millerovy indexy (h k l) a Bravaisovy indexy (h k i l) dané krystalické roviny v hexagonální soustavě. V ortogonální soustavě vytíná tato rovina na osách  $X_1, X_2, Z$ , úseky  $1, \infty, \infty$ .

*Řešení:*

*Millerovy indexy*

úseky na příslušných osách ( $X_1, X_2, Z$ ) jsou  $1, \infty, \infty$ ;

stanovíme převrácené hodnoty:

$$1, \infty, \infty \rightarrow \frac{1}{1}, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 1, 0, 0$$

převedení těchto hodnot na nejmenší co možná celá čísla:

$$1, 0, 0 \rightarrow \frac{1, 0, 0}{1} \rightarrow 1, 0, 0$$

stanovené Millerovy indexy roviny jsou (100).

*Bravaisovy indexy*

zde je nejdříve nutný přepočet (transformace) do nového krystalografického systému, tj. ze souřadnic  $[X_1, X_2, Z]$  do souřadnic  $[a_1, a_2, a_3, c]$ , dle vztahů, viz str. 58.

Výše stanovené Millerovy indexy (1 0 0)  $\rightarrow$  (h k l), dále vlevo jsou vztahy pro transformaci:

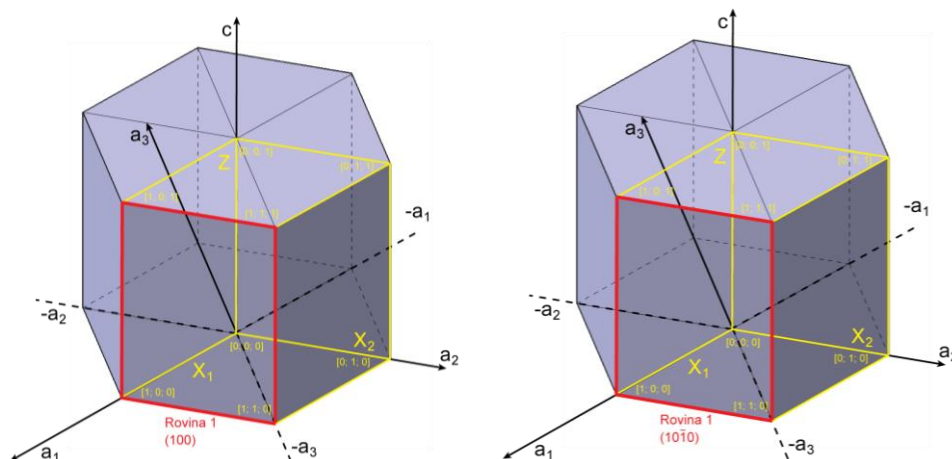
$$\begin{aligned} h &= h && \rightarrow 1 && \rightarrow 1 \\ k &= k && \rightarrow 0 && \rightarrow 0 \\ i &= -(h+k) && \rightarrow -(1+0) && \rightarrow -1 \\ l &= l && \rightarrow 0 && \rightarrow 0 \end{aligned}$$

převedeme na nejmenší možná celá čísla a čísla v čitateli jsou Bravaisovy indexy rovin:

$$1, 0, -1, 0 \rightarrow \frac{1, 0, -1, 0}{1} \rightarrow 1, 0, -1, 0$$

stanovené Bravaisovy indexy roviny jsou  $(10\bar{1}0)$ .

Na následujících obrázcích jsou MIR – vlevo; BIR – vpravo [37].



### Příklad č. 9

Stanovte Millerovy indexy ( $h\ k\ l$ ) a Bravaisovy indexy ( $h\ k\ i\ l$ ) dané krystalické roviny v hexagonální soustavě. V ortogonální soustavě vytíná tato rovina na osách  $X_1, X_2, Z$ , úseky  $\infty, \infty, 1$ .

**Řešení:**

*Millerovy indexy*

úseky na příslušných osách ( $X_1, X_2, Z$ ) jsou  $\infty, \infty, 1$   
stanovíme převrácené hodnoty:

$$\infty, \infty, 1 \rightarrow \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{1} \rightarrow 0, 0, 1$$

převedení těchto hodnot na co nejmenší možná celá čísla:

$$0, 0, 1 \rightarrow \frac{0, 0, 1}{1} \rightarrow 0, 0, 1$$

stanovené Millerovy indexy roviny jsou  $(0\ 0\ 1)$ .

*Bravaisovy indexy*

přepočet (transformace) do nového krystalografického systému, tj. ze souřadnic  $[X_1, X_2, Z]$  do souřadnic  $[a_1, a_2, a_3, c]$ .

Výše stanovené Millerovy indexy  $(0\ 0\ 1) \rightarrow (h\ k\ l)$ , dále vlevo jsou vztahy pro transformaci:

$$h = h \rightarrow 0 \rightarrow 0$$

$$k = k \rightarrow 0 \rightarrow 0$$

$$i = -(h+k) \rightarrow -(0+0) \rightarrow 0$$

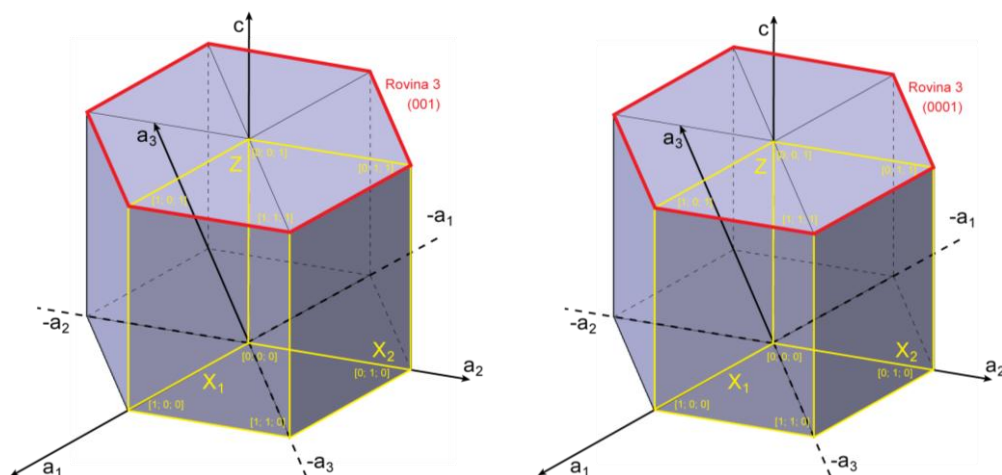
$$l = l \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

převědeme na nejmenší možná celá čísla a čísla v čitateli jsou Bravaisovy indexy rovin:

$$0,0,0,1 \rightarrow \frac{0,0,0,1}{1} \rightarrow 0,0,0,1$$

stanovené Braivaisovy indexy roviny jsou (0001).

Na následujících obrázcích jsou MIR – vlevo; BIR – vpravo [37].



### Příklad č. 10

Stanovte Millerovy indexy (h k l) a Bravaisovy indexy (h k i l) dané krystalické roviny v hexagonální soustavě. V ortogonální soustavě vytíná tato rovina na osách  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $Z$ , úseky 1,1,∞.

**Řešení:**

*Millerovy indexy*

úseky na příslušných osách ( $X_1$ ,  $X_2$ ,  $Z$ ) jsou 1,1,∞.

stanovíme převrácené hodnoty:

$$1,1,\infty \rightarrow \frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 1,1,0$$

převedení těchto hodnot na co nejmenší možná celá čísla:

$$1,1,0 \rightarrow \frac{1,1,0}{1} \rightarrow 1,1,0$$

stanovené Millerovy indexy roviny jsou (1 1 0).

*Bravaisovy indexy*

přepočít (transformace) do nového krystalografického systému, tj. ze souřadnic [ $X_1$ ,  $X_2$ ,  $Z$ ] do souřadnic [ $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ ,  $c$ ].

Výše stanovené Millerovy indexy (1 1 0) → (h k l), dále vlevo jsou vztahy pro transformaci:

$$\begin{array}{lll} h = h & \rightarrow 1 & \rightarrow 1 \\ k = k & \rightarrow 1 & \rightarrow 1 \end{array}$$

$$i = -(h+k) \rightarrow -(1+1) \rightarrow -2$$

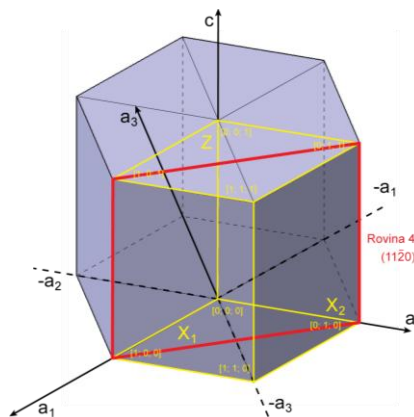
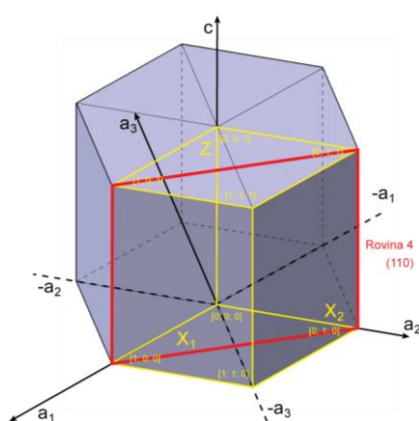
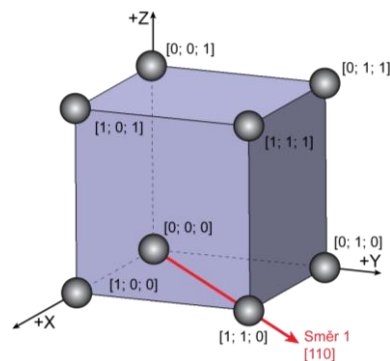
$$l = l \rightarrow 0 \rightarrow 0$$

převeďme na nejmenší možná celá čísla a čísla v čitateli jsou Bravaisovy indexy rovin:

$$1,1,-2,0 \rightarrow \frac{1,1,-2,0}{1} \rightarrow 1,1,-2,0$$

stanovené Bravaisovy indexy roviny jsou  $\bar{1}1\bar{2}0$

Na následujících obrázcích jsou MIR – vlevo; BIR – vpravo [37].



### Příklad č. 11

Stanovte Millerovy indexy  $[u \ v \ w]$  daného krystalografického směru v kubické soustavě. Jsou-li zadány 2 body o souřadnicích  $[0,0,0]$  a  $[1, 1, 0]$ .

**Řešení:**

Jsou zadány body  $[0,0,0]$  a  $[1, 1, 0]$ ,

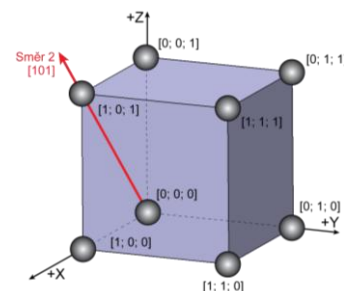
odečtení patového (zadního) a hlavového (předního) bodu v daném směru:

$$[1, 1, 0] - [0,0,0] \rightarrow [1,1,0]$$

Převeďme na co nejmenší celá čísla:

$$[1,1,0] \rightarrow \left[ \frac{1,1,0}{1} \right] \rightarrow [1,1,0]$$

Millerovy indexy tohoto směru jsou  $[110]$  dle [37].



### Příklad č. 12

Stanovte Millerovy indexy  $[u \ v \ w]$  daného krystalografického směru v kubické soustavě. Jsou-li zadány 2 body o souřadnicích  $[0,0,0]$  a  $[1, 0, 1]$ .

**Řešení:**

Jsou zadány body  $[0,0,0]$  a  $[1, 0, 1]$ ,



odečtení patového (zadního) a hlavového (předního) bodu v daném směru:

$$[1, 0, 1] - [0,0,0] \rightarrow [1,0,1]$$

převědeme na celá nejmenší možná čísla a číselník je pak MIS:

$$[1,0,1] \rightarrow \left[ \frac{1,0,1}{1} \right] \rightarrow [1,0,1]$$

Millerovy indexy tohoto směru jsou  $[101]$

dle [37].

### Příklad č. 13

Stanovte Millerovy indexy  $[u \ v \ w]$  a Bravaisovy indexy  $[p \ q \ s \ t]$  daného krystalografického směru v hexagonální soustavě. Jsou-li zadána 2 body o souřadnicích  $[0, 0, 0]$  a  $[1, 0, 0]$ .

*Řešení:*

*Millerovy indexy směrů*

zadané dva body  $[0, 0, 0]$  a  $[1, 0, 0]$ ,

odečtení patového (zadního) hlavového (předního) bodu v daném směru:

$$[1, 0, 0] - [0, 0, 0] \rightarrow [1, 0, 0],$$

převědeme na co nejmenší možná čísla a číselník je MIS:

$$[1,0,0] \rightarrow \left[ \frac{1,0,0}{1} \right] \rightarrow [1,0,0]$$

Millerovy indexy směru jsou  $[1 \ 0 \ 0]$ .

*Bravaisovy indexy směrů*

Ke stanovení Bravaisových indexů je nutno převést transformaci (přepočít) do nového krystalografického systému, tj. z  $[X_1, X_2, Z]$  do  $[a_1, a_2, a_3, c]$ .

Výše stanovené Millerovy indexy směrů jsou  $[1 \ 0 \ 0] \rightarrow [u \ v \ w]$ , dále vlevo jsou uvedeny vztahy pro transformaci:

$$p = 1/3 (2u - v) \rightarrow 1/3 (2 \cdot 1 - 0) \rightarrow 2/3$$

$$q = 1/3 (2v - u) \rightarrow 1/3 (2 \cdot 0 - 1) \rightarrow -1/3$$

$$s = -1/3 (u + v) \rightarrow -1/3 (1 + 0) \rightarrow -1/3$$

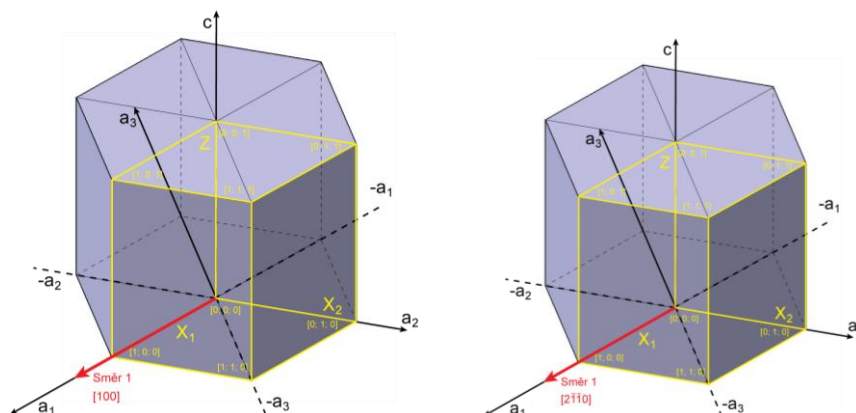
$$t = w \rightarrow 0 \rightarrow 0$$

stanovené hodnoty převědeme na co nejmenší možná celá čísla a číselník je BIS:

$$\left[ \frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, 0 \right] \rightarrow \left[ \frac{2, -1, -1, 0}{3} \right] \rightarrow [2, -1, -1, 0]$$

Bravaisovy indexy směrů jsou  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ .

Na následujících obrázcích jsou uvedeny Millerovy indexy (vlevo) a Bravaisovy indexy směrů (vpravo).



### Příklad č. 14

Vypočítejte vzdálenost roviny v kubické soustavě, která má Millerovy indexy (100). To znamená, že  $(100) \rightarrow (h\ k\ l)$ .

**Řešení:**

Pro kubickou soustavu se vzdálenost rovin  $d_{hkl}$  vypočítá dle vztahu (5.4):

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a_0^2}$$

Dosazením hodnot do rovnice (5.4):  $\frac{1}{d_{(100)}^2} = \frac{1^2 + 0^2 + 0^2}{a_0^2} = \frac{1}{a_0^2}$ .

$$d_{(100)} = \sqrt{a_0^2} = a_0$$

## 5.6 Úlohy k procvičení

*Úkoly k procvičení - krystalické buňky*

### Úloha č. 1

Nakreslete schematicky krystalické buňky technicky důležitých kovů.

### Úloha č. 2

Odvoďte, kolik atomů připadá krystalickým buňkám (SC, BCC, FCC a HCP).

### Úloha č. 3

Stanovte vztah mezi atomovým poloměrem  $R$  a mřížkovým parametrem  $a_0$  [m] u kubické jednoduché buňky SC (Simple Cubic).

### Úloha č. 4

Stanovte vztah mezi atomovým poloměrem  $R$  a mřížkovým parametrem  $a_0$  [m] u kubické buňky BCC (Body Centered Cubic).

### Úloha č. 5

Stanovte vztah mezi atomovým poloměrem  $R$  a mřížkovým parametrem  $a_0$  [m] u kubické buňky FCC (Face Centered Cubic).

### Úloha č. 6

Stanovte vztah mezi atomovým poloměrem  $R$  a délkou hrany hexagonu (šestiúhelníku)  $a$  [m] u hexagonální těsně uspořádané buňky HCP (Hexagonal Close Packed).

### Úloha č. 9

Stanovte tzv. koeficient zaplnění základní kubické buňky BCC (Body Centered Cubic). Je známo, že této buňce přísluší dva atomy, tj.  $X_{\text{BCC-BUNKY}} = 2$ ,  $a = 2R$ . Objem koule, resp. atomu ( $V = 4\pi R^3/3$ ). Objem buňky je  $a_0^3$ .

*Úkoly k procvičení – výpočet teoretické hustoty čistých kovů*

### Úloha č. 10

Vypočítejte hustotu olova  $\rho_{\text{(Pb)}}$  [kg.m<sup>-3</sup>] pro jeho pevný stav (teplota cca 25 °C). K výpočtu použijeme rovnici (5.3). Olovo krystalizuje v soustavě FCC. Hodnota mřížkového parametru je  $4,9450 \cdot 10^{-10}$  [m], viz tabulka 5.6, je zřejmé, že na tuto buňku připadají 4 atomy ( $X_{\text{FCC-BUNKY}} = 4$ ). Atomová relativní hmotnost je 207,20. Hmotnostní atomová konstanta  $m_u$  je  $1,6605 \cdot 10^{-10}$  [kg]. Vypočítanou hustotu porovnejte s tabelovanými hodnotami, viz tabulky v příloze č. 14 až 17.

### Úloha č. 11

Vypočítejte hustotu chromu  $\rho_{\text{(Cr)}}$  [kg.m<sup>-3</sup>] pro jeho pevný stav (teplota cca 25 °C). K výpočtu použijeme rovnici (5.3). Chrom krystalizuje v soustavě BCC. Hodnota mřížkového parametru je  $4,9450 \cdot 10^{-10}$  [m], viz tabulka 5.6, je zřejmé, že na tuto buňku připadají 2 atomy ( $X_{\text{BCC-BUNKY}} = 2$ ). Atomová relativní hmotnost je 207,20. Hmotnostní atomová konstanta  $m_u$  je  $1,6605 \cdot 10^{-10}$  [kg].

Vypočítanou hustotu porovnejte s tabelovanými hodnotami, viz tabulky v příloze č. 14 až 17.

### Úloha č. 12

Vypočítejte hustotu wolframu  $\rho_{(W)}$  [kg.m<sup>-3</sup>] pro jeho pevný stav (teplota cca 25 °C). K výpočtu použijeme rovnici (5.3). Wolfram krystalizuje v soustavě BCC. Hodnota mřížkového parametru je  $3,1405 \cdot 10^{-10}$  [m], viz tabulka 5.6, je zřejmé, že na tuto buňku připadají 2 atomy ( $X_{\text{BCC-BUNKY}} = 2$ ). Atomová relativní hmotnost je 183,85. Hmotnostní atomová konstanta  $m_u$  je  $1,6605 \cdot 10^{-10}$  [kg]. Vypočítanou hustotu porovnejte s tabelovanými hodnotami, viz tabulky v příloze č. 14 až 17.

### Úloha č. 13

Vypočítejte hustotu molybdenu  $\rho_{(Mo)}$  [kg.m<sup>-3</sup>] pro jeho pevný stav (teplota cca 25 °C). K výpočtu použijeme rovnici (5.3). Molybden krystalizuje v soustavě BCC. Hodnota mřížkového parametru je  $3,1490 \cdot 10^{-10}$  [m], viz tabulka 5.6, je zřejmé, že na tuto buňku připadají 2 atomy ( $X_{\text{BCC-BUNKY}} = 2$ ). Atomová relativní hmotnost je 95,94. Hmotnostní atomová konstanta  $m_u$  je  $1,6605 \cdot 10^{-10}$  [kg]. Vypočítanou hustotu porovnejte s tabelovanými hodnotami, viz tabulky v příloze č. 14 až 17.

### Úloha č. 14

Vypočítejte hustotu beryllia  $\rho_{(Be)}$  [kg.m<sup>-3</sup>] pro jeho pevný stav (teplota cca 25 °C). K výpočtu použijeme rovnici (5.3). Beryllium krystalizuje v soustavě HCP. Hodnota mřížkového parametru  $a$  je  $2,287 \cdot 10^{-10}$  [m] a  $c = 3,583 \cdot 10^{-10}$  [m], viz tabulka 5.6, je zřejmé, že na tuto buňku připadá 6 atomů ( $X_{\text{HCP-BUNKY}} = 6$ ). Atomová relativní hmotnost je 9,01. Hmotnostní atomová konstanta  $m_u$  je  $1,6605 \cdot 10^{-10}$  [kg]. Vypočítanou hustotu porovnejte s tabelovanými hodnotami, viz tabulky v příloze č. 14 až 17.

### Úloha č. 15

Vypočítejte mřížkový parametr hliníku  $a_0$  [m] (25 °C) je-li hustota hliníku 2700 [kg.m<sup>-3</sup>]. K výpočtu použijeme rovnici (5.3). Hliník krystalizuje v kubické plošné soustavě, čímž je zřejmé, že na jeho buňku připadají 4 atomy ( $X_{\text{FCC-BUNKY}} = 4$ ). Atomová relativní hmotnost hliníku je 26,982. Hmotnostní atomová konstanta  $m_u$  je  $1,6605 \cdot 10^{-10}$  [kg]. Vypočítanou hodnotu porovnejte s hodnotou mřížkového parametru uvedenou v tabulce 5.6.

**Úloha č. 16**

Vypočítejte mřížkový parametr niklu  $a_0$  [m] (25 °C) je-li hustota niklu je 8880 [kg.m<sup>-3</sup>]. K výpočtu použijeme rovnici (5.3). Nikl krystalizuje v kubické plošné soustavě, čímž je zřejmé, že na jeho buňku připadají 4 atomy ( $X_{\text{FCC-BUNKY}} = 4$ ). Atomová relativní hmotnost niklu je 57,710. Hmotnostní atomová konstanta  $m_u$  je  $1,6605 \cdot 10^{-10}$  [kg]. Vypočítanou hodnotu porovnejte s hodnotou mřížkového parametru uvedenou v tabulce 5.6.

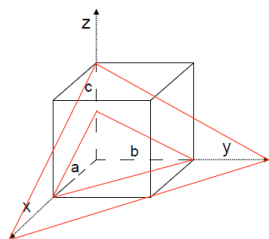
**Úloha č. 17**

Vypočítejte hustotu následujících slitin: ZnAl12, ZnAl27, AlSi9Cuš, CuSn5, CuSn10Pb5. Hustoty jednotlivých prvků naleznete v tabulkách, viz příloha 14 až 17.

*Úkoly k procvičení - roviny krystalické buňky*

**Úloha č. 18**

Stanovte Millerovy indexy roviny, viz obr. Vybereme rovinu, která je ze zadanou rovinou rovnoběžná a protíná jeden z vektorů  $a, b, c$  základní buňky v jeho koncovém bodě.

**Úloha č. 19**

Stanovte Millerovy indexy roviny ( $h\ k\ l$ ) v kubické mřížce. Rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: 1,1,1. Rovinu zakreslete do kubické krystalické buňky.

**Úloha č. 20**

Stanovte Millerovy indexy roviny ( $h\ k\ l$ ) v kubické mřížce. Rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: 4,3,2. Rovinu zakreslete do kubické krystalické buňky.

*Úkoly k procvičení - směry krystalické buňky*

**Úloha č. 21**

Stanovte Millerovy indexy  $[u\ v\ w]$  daného krystalografického směru v kubické soustavě; směr je dán body  $[1/2; 1; 0]$  a  $[0; 0; 1]$ .

**Úloha č. 22**

Stanovte Millerovy indexy  $[u\ v\ w]$  daného krystalografického směru v kubické soustavě; směr je dán body  $[1; 1; 1]$  a  $[0; 0; 1]$ .

## 6. VADY KRYSTALICKÝCH MŘÍŽEK

Kovy nemají *ideální krystalovou stavbu*, ale obsahují řadu *poruch* (chyb).

Poruchy krystalů kovů lze rozdělit do tří skupin:

- *strukturní* (jsou odchylky uspořádání částic v uzlových bodech),
- *chemické* (přítomnost atomů cizích částic),
- *elektrické* (odchylky od periodického průběhu elektrického potenciálu).

Největší význam pro *technickou praxi* mají strukturní poruchy, které lze podle geometrického tvaru rozdělit na:

- bodové,
- čárové (dislokace),
- plošné (rovinné) a objemové.

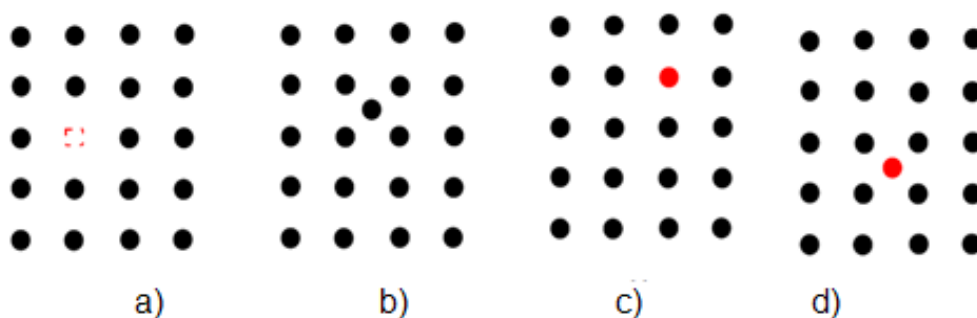
### 6.1 Bodové poruchy

*Bodové poruchy* - jsou nejjednodušší poruchy krystalové mřížky, označují se také jako Schottkyho poruchy.

*Základní typy bodových poruch jsou:*

- vakance*, která představuje neobsazený uzlový bod struktury,
- intersticiál*, je atom vlastního kovu, který leží v neuzlové poloze;
- substituce*, to je atom příměsi, který nahrazuje atom základního kovu v jeho uzlové poloze;
- intersticiál příměsi (adice)*, kterým je cizí atom v neuzlové poloze.

Na obr. 6-1 jsou schémata bodových poruch



*a - vakance, b - intersticiál, c - substituce, d – adice*

Obr. 6-1 Schéma bodových poruch ve zjednodušené, plošné krystalické mřížce

V tabulce 6.1 jsou uvedeny poloměry atomů kovů.

Tabulka 6.1 Hodnoty poloměrů atomů kovů

| Prvek    | Poloměr atomu [m]                        |
|----------|------------------------------------------|
| Vodík    | $(0,30 \text{ až } 0,46) \cdot 10^{-10}$ |
| Bór      | $0,88 \cdot 10^{-10}$                    |
| Uhlík    | $(0,73 \text{ až } 0,77) \cdot 10^{-10}$ |
| Dusík    | $0,71 \cdot 10^{-10}$                    |
| Kyslík   | $(0,60 \text{ až } 0,66) \cdot 10^{-10}$ |
| Železo   | $(1,26 \text{ až } 1,28) \cdot 10^{-10}$ |
| Chrom    | $1,30 \cdot 10^{-10}$                    |
| Mangan   | $1,28 \cdot 10^{-10}$                    |
| Kobalt   | $1,26 \cdot 10^{-10}$                    |
| Nikl     | $1,25 \cdot 10^{-10}$                    |
| Měď      | $1,28 \cdot 10^{-10}$                    |
| Zinek    | $1,27 \cdot 10^{-10}$                    |
| Hliník   | $1,43 \cdot 10^{-10}$                    |
| Křemík   | $1,17 \cdot 10^{-10}$                    |
| Titan    | $1,47 \cdot 10^{-10}$                    |
| Vanad    | $1,36 \cdot 10^{-10}$                    |
| Wolfram  | $1,41 \cdot 10^{-10}$                    |
| Molybden | $1,39 \cdot 10^{-10}$                    |

**Poznámka:** Je nutno poznamenat, že v jiných tabulkách jsou uvedeny trochu odlišné hodnoty, ale řádově jsou vyhovující.

Pro vznik vakancí je třeba relativně *nízká energie* cca 1 eV. Tuto energii krystal kovu může získat na základě tepelných kmitů svých částic (atomů, atd.). Vakance se ve struktuře kovů objevují běžně a jejich *počet roste úměrně s teplotou*.

Bodové poruchy krystalové mřížky kovů mají značný vliv na řadu fyzikálních vlastností (elektrické, tepelné vlastnosti kovů). Jsou rozhodující pro průběh difúze v kovech. Působí na mechanické vlastnosti kovů (např. na tvrdost).

Vznik bodových poruch může vznikat na základě ozařování kovů neutrony (vysokou energií), ohřevem kovů na vysoké teploty cca 50 °C pod teplotu tavení, rychlým ochlazováním kovů nebo plastickou deformací kovů (se vzrůstající deformací jejich počet roste).

## 6.2 Čárové poruchy

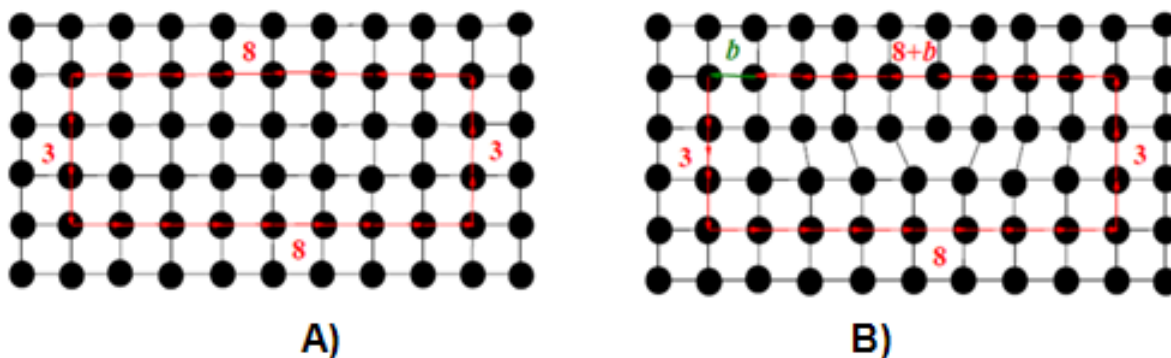
Čárové poruchy - se označují *dislokace*, představují řadu atomů, která má jiné uspořádání než ostatní částice v krystalové mřížce, to znamená, že čárové poruchy představují *porušení pravidelného uspořádání částic*.



Dislokace jsou definovány 4 parametry:

- A) *dislokace* je možno definovat pomocí tzv. *Burgersovy smyčky*;
- B) *dislokace* je možno definovat pomocí tzv. *Burgersova vektoru*;
- C) *dislokace* je možno definovat pomocí tzv. *dislokační čáry*;
- D) *dislokace* je možno definovat pomocí skluzové roviny.

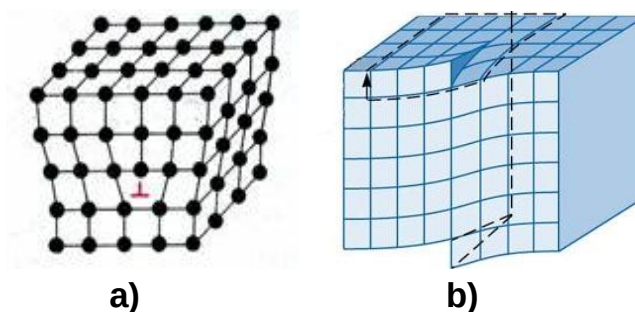
V neporušené oblasti krystalové mřížky je *Burgersova smyčka* uzavřená, naopak v porušené oblasti krystalové mřížky je *Burgersova smyčka* otevřená a uzavírá ji Burgersův vektor. Na obr. 6-2 je uvedena uzavřená a neuzavřená Burgersova smyčka. Na obr. 6-2A) je uvedena uzavřená Burgersova smyčka, na obr. 6-2B) je uvedena neuzavřená Burgersova smyčka. Jak je z obrázku patrné, horní část je uzavřena vektorem  $b$  (Burgersovým vektorem).



A) uzavřená Burgersova smyčka, B) neuzavřená Burgersova smyčka

Obr. 6-2 je uvedena uzavřená a neuzavřená Burgersova smyčka

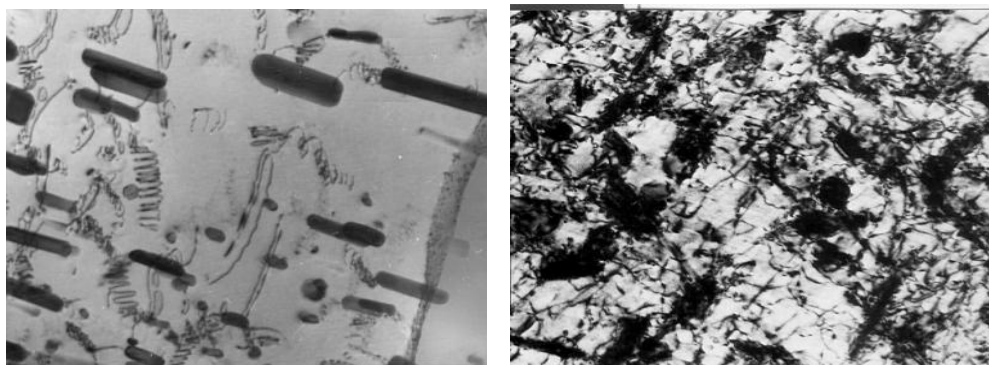
Existují dva mezní druhy dislokací *hranová* a *šroubová*, viz obr. 6-3, jak bylo výše uvedeno, jsou definovány: Burgersovým vektorem, Burgersovou smyčkou, dislokační čarou a rovinou kluzu.



a - hranová dislokace, b - šroubová dislokace

Obr. 6-3 Schéma hranové a šroubové dislokace

Na obr. 6-4 jsou dislokace ve slitině hliníku po tváření za tepla.

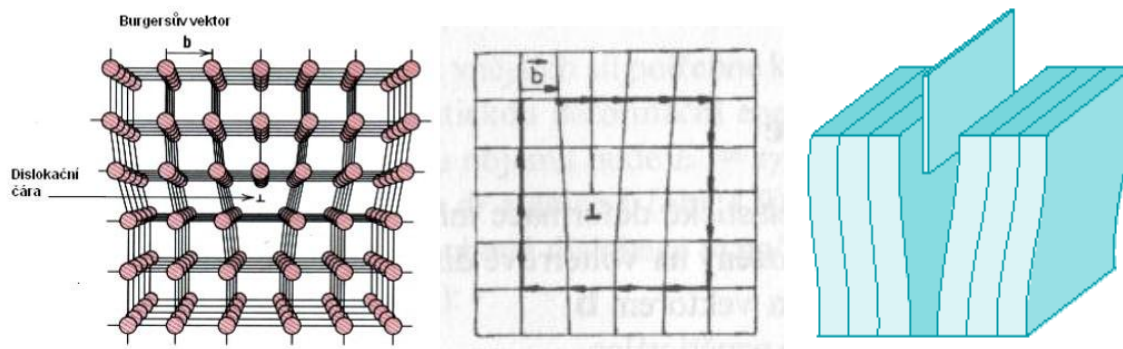


Obr. 6-4 Dislokace ve slitině hliníku po tváření za tepla (vlevo) a po tváření za studena (vpravo)

**Hranová dislokace** - je dislokace, která vzniká tak, že do krystalické mřížky byla vložena část, která je obsazena atomy, viz obr. 6-5.

V obrázku je zakreslen tzv. *Burgersův vektor*  $b$ , který zkonstruuujeme tak, že kolem dislokace vytvoříme *Burgersovu smyčku* skládající se ze stejného počtu kroků doprava jako doleva a nahoru jako dolů.

*Volný vektor*  $b$ , který smyčku uzavírá, je kolmý na *dislokační čáru* (hranu nadbytečné poloroviny) a vytváří s ní tzv. *skluzovou rovinu* v níž se hranová dislokace pohybuje.

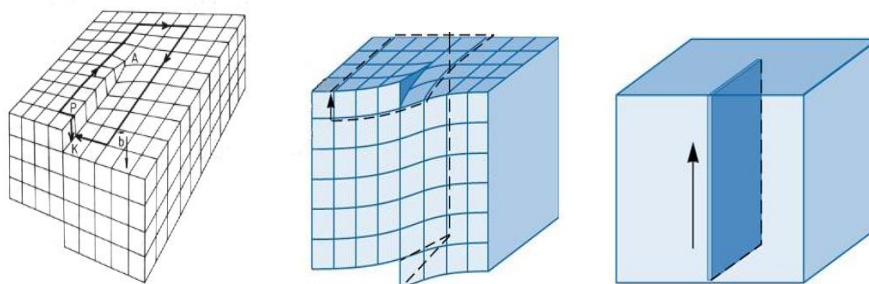


Obr. 6-5 Schéma hranové dislokace

**Šroubová dislokace** - vznikne tak, že jakoby rozříznutý krystal podrobíme stříhové deformaci.

*Burgersův vektor* této dislokace je rovnoběžný s *dislokační čarou* a existuje tedy velký počet skluzových rovin, v nichž se dislokace může pohybovat (*dislokační čára* je osou svazku všech těchto skluzových rovin). *Burgersova smyčka* vedená kolem této dislokace je uzavřena Burgersovým vektorem,

který je kolmý na rovinu smyčky. Burgersův vektor je rovnoběžný s dislokační čarou. Na obr. 6-6 je schéma šroubové dislokace.



Obr. 6-6 Schéma vzniku šroubové dislokace

### 6.2.1 Pohyb dislokací a hustota dislokací

**Pohyb dislokací** je jednou z nejdůležitějších vlastností dislokací. Dislokace se mohou pohybovat *jako celek* nebo se pohybují její části různou rychlostí. Při pohybu se může měnit tvar dislokační čáry. U dislokací rozlišujeme *dva druhy pohybu*:

**skluz** - tj. pohyb ve *skluzové* rovině dané směrem Burgersova vektoru a směrem dislokační čáry;

**šplhání** – tj. pohyb v jiné, než skluzové rovině.

*Skluzové roviny* hranových dislokací jsou obvykle roviny s největší hustotou atomů.

**Hustota dislokací** charakterizuje celkovou délku dislokačních čar vztaženou na jednotku objemu  $V$ :

$$\rho = \frac{l}{V} \quad [\text{cm}^{-2}] \quad (6.1)$$

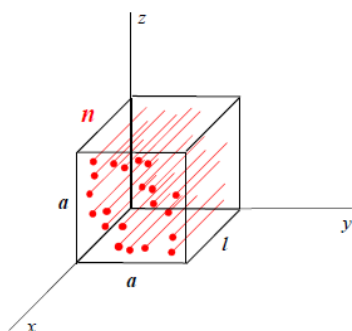
kde značí:  $l$  - celkovou délku dislokačních čar  $[\text{cm}]$ ;  $V$  – jednotku objemu  $[\text{cm}^3]$ .

Hustotu dislokací lze odhadnout z počtu průsečíků dislokačních čar s povrchem:

$$\rho = 3 \frac{n \cdot l}{a^2 \cdot l} = 3 \cdot \frac{n}{a^2} \quad (6.2)$$

kde značí:  $n$  – počet výstupků dislokací na povrchu materiálu;  $a^2$  – čtvercovou plochu vzorku  $[\text{cm}^2]$ .

Na obr. 6-7 je uvedeno schéma počtu výstupků dislokací.



Obr. 6-7 Schéma průsečíků dislokací na sledovaném vzorku kovu

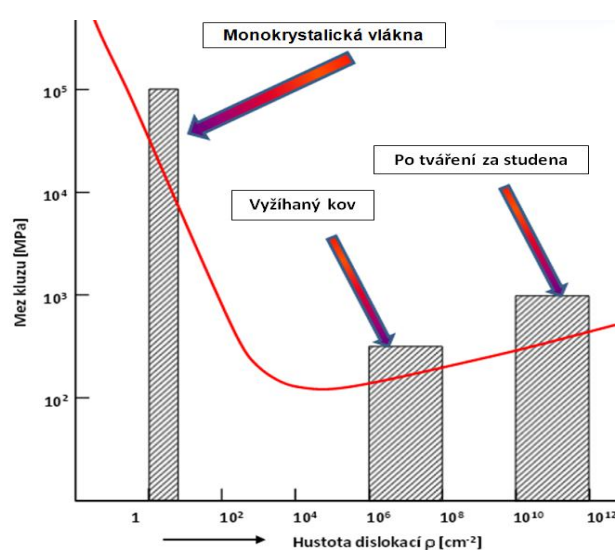
### 6.2.2 Množství dislokací v kovech

Množství dislokací je závislé na zpracování kovu. Tak např. odlitý materiál vykazuje hustotu dislokací cca  $10^8$  [cm<sup>-2</sup>], obecně monokrystaly cca  $10^6$  až  $10^7$ . Monokrystaly polovodičů křemíku a germania  $10^2$  až  $10^4$  [cm<sup>-2</sup>]. Také vyžíhaný materiál vykazuje nižší hustotu dislokací, cca  $10^8$  [cm<sup>-2</sup>]. Na obr. 6-8 je uveden hustota dislokací ve vybraných materiálech s ohledem na mez kluzu.

V tabulce 6.2 jsou uvedeny počty dislokací

Tabulka 6.2 Souvislost mezi stavem kovového materiálu a hustoty dislokací

| Stav kovového materiálu          | Hustota dislokací $\rho$ [cm <sup>-2</sup> ] |
|----------------------------------|----------------------------------------------|
| Velmi poškozený                  | $10^{13}$                                    |
| Po mechanickém namáhání          | $10^{11}$ až $10^{12}$                       |
| Vyžíhaný polykrystalický         | $10^8$                                       |
| Monokrystal                      | $10^6$ až $10^7$                             |
| Monokrystaly polovodičů (Si, Ge) | $10^2$ až $10^4$                             |

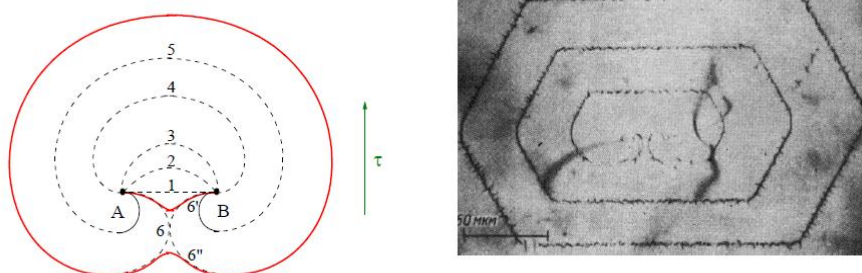


Obr. 6-8 Mez kluzu materiálu v souvislosti s hustotou jeho dislokací

Vznik dislokací - dislokace vznikají za různých podmínek, např. při krystalizaci kovů, při srůstu bloků zrn, při shlukování vakancí, při použití vysokých napěťových stavů materiálu, vznikem a působením tzv. Frank - Readova zdroje v kovu.

Frankův–Readův zdroj představuje *základní mechanismus* vzniku dislokací v krystalu. Je založen na představě, že zdrojem dislokací je dislokační segment, zakotvený na obou koncích na nějaké *překážce ve skluzové rovině*. Touto překážkou mohou být např. disperzní částice jiné fáze, dislokační les, atd.

Na obr. 6-9 je schéma a ukázka Frank - Readův zdroje. Uvažujme úsek dislokační čáry  $AB$ , délky  $L$ , který leží ve skluzové rovině, kde působí smykové napětí  $\tau$ , jednotlivé polohy dislokační čáry jsou označeny číslicemi [Frank - Readův zdroj v rovině (111) Si].



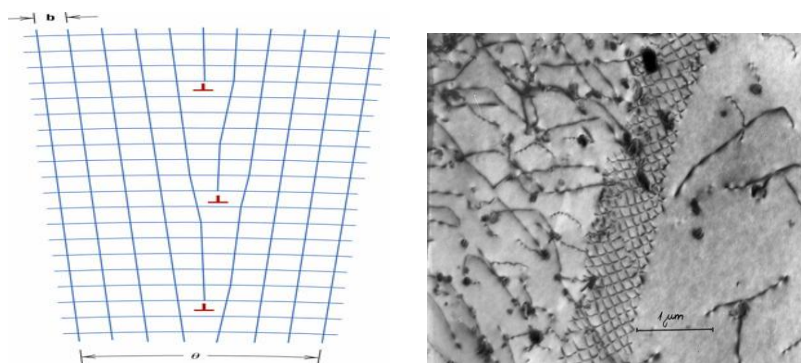
Obr. 6-9 Schéma Frank - Readůva zdroje

### 6.3 Rovinné poruchy krystalové mřížky

Za rovinné (plošné) poruchy krystalové mřížky se považují poruchy, které lze odvodit ze vzájemného vztahu krystalografických rovin reálných krystalů a polykrystalických shluků.

**Hranice podzrn** - jsou hranice mezi jednotlivými podzrny (bloky) je seskupení hranových dislokací. Další poloroviny jsou vkládány mezi sousední podzrna. Hranice podzrn existují mezi oblastmi s málo rozdílnou orientací krystalové mřížky. Jsou tvořeny seskupením hranových dislokací mezi oběma podzrny, viz obr. 6-10.

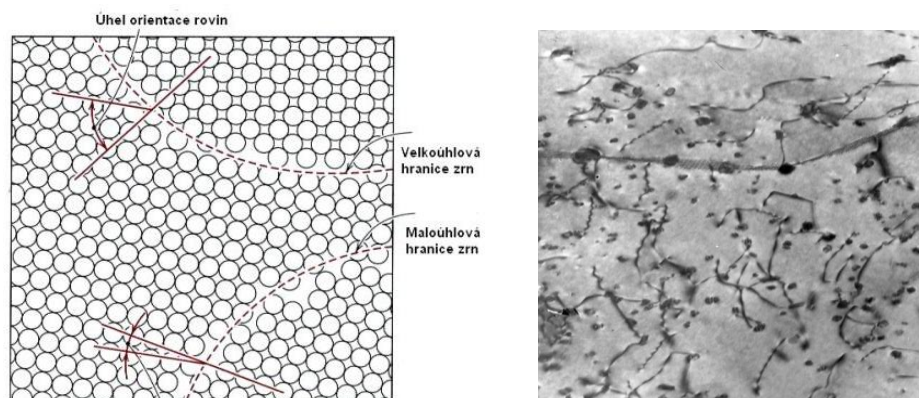




Obr. 6-10 Rovinné (plošné) poruchy krystalové mřížky - hranice podzrn

**Hranice zrn** – jsou oblasti mezi zrny v polykrystalické látce se nazývá hranice zrn. Hranice zrn se dělí na malouhlové a velkouhlové, viz obr. 6-11.

*Malouhlové hranice zrn* (hranice podzrn jsou tvořeny řadou hranových dislokací). *Velkouhlové hranice zrn* jsou složitější, jde o rovinné poruchy hranice zrn.



Obr. 6-11 Malouhlové a velkouhlové hranice zrn

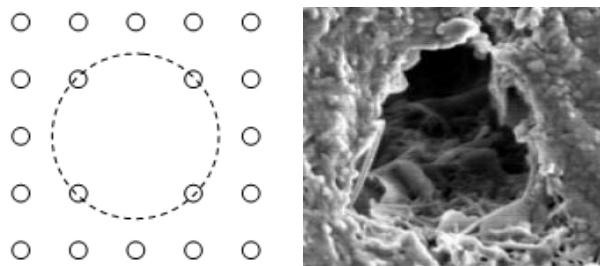
**Vrstevné chyby** se řadí také mezi *plošné poruchy* struktury kovů, je to porušení pravidelnosti ve sledu krystalografických rovin. Jedním z mechanismů vzniku *vrstevné chyby* je rozštěpení dislokace ve dvě neúplné dislokace. Vrstevná chyba může být úbytková, přebytková, zborcení mřížky a vznik neúplné dislokace. Na následném obr. 6-12 je vrstevná chyba *neúplná* (vlevo) a *přebytková* (vpravo).

Obr. 6-12 Vrstevná chyba *neúplná* (vlevo) a *přebytková* (vpravo)

#### 6.4 Poruchy objemu krystalů

Poruchy, které v krystalu *zaujímají určitý objem* jsou obecně *dutiny* (angl. cavities). Dutiny v materiálu mohou vznikat při krystalizaci taveniny. Nebo v důsledku přítomnosti plynů (kulatý a hladký povrch reliéfu dutiny).

Nebo mohou vznikat v důsledku objemového smršťování (stahování) nebo kombinací obou důsledků. Také mohou vznikat *mikrodutiny* v důsledku *shlukování vakancí*. Na obr. 6-13 jsou poruchy objemů kovů.



Obr. 6-13 Poruchy objemu krystalů

#### 6.5 Úlohy k procvičení

##### Úloha č. 1

Nakreslete hranovou a šroubovou dislokaci. U těchto dislokací vyznačte Burgersovu smyčku, Burgersův vektor, dislokační čáru a skluzovou rovinu.

##### Úloha č. 2

Pro stejný typ kovového materiálu, určeného pro tváření, odhadněte, zda-li je více dislokací v materiálu po tváření za tepla nebo po tváření za studena.

##### Úloha č. 3

Stanovte hustotu dislokací v  $1\text{cm}^2$ , je-li počet průsečíků cca  $10^{10}$ .

##### Úloha č. 4

Na základě svých znalostí, odhadněte v které oblasti zpracování kovů mají dominantní postavení dislokace.

## 7. TERMODYNAMICKÉ VÝPOČTY KOVŮ

Termodynamické výpočty kovů se týkají *soustav* kovů. Pod pojmem soustava (systém) rozumíme nejčastěji souhrn těles, který je studován a je v protikladu k okolí (vnějšímu prostředí). Mezi soustavou a okolím je hranice. Aby soustava mohla být sledována z pozice termodynamiky, musí být mezi tělesy tvořící soustavu možný přechod tepla.

*Otevřená soustava* - s okolím vyměňuje látku i energii. *Uzavřená soustava* - s okolím nevyměňuje hmotu, ale jen energii.

*Tepelně izolovaná soustava* - nedovoluje výměnu tepla s okolím (probíhající procesy jsou *adiabatické*). *Mechanicky izolovaná soustava* - nevyměňuje práci s okolím. *Izolovaná soustava* - nevyměňuje teplo ani práci s okolím.

*Homogenní soustava* - má ve všech částech stejné vlastnosti. *Heterogenní soustava* - nemá ve všech částech stejné vlastnosti, neboť se skládá alespoň ze dvou homogenních oblastí, na jejichž rozhraní se mění vlastnosti skokem. Homogenní oblasti se nazývají fáze soustavy.

*Stav soustavy* - je určen termodynamickými stavovými podmínkami tj. tlak, objem, teplota, složení soustavy.

Termodynamický děj soustavy - je děj, kterým soustavy procházejí (např. tuhnutí kovů). Je ukončen rovnovážným stavem, kdy neprobíhají žádné termodynamické děje a termodynamické veličiny se nemění. Všechny reálné děje, které probíhají v konečném čase, jsou termodynamicky nevratné.

Termodynamické výpočty jsou mírou termodynamických dějů.

### 7.1 Fázové pravidlo (Gibbsův zákon fází)

Fázové pravidlo (Gibbsův zákon fází) udává největší počet fází, které mohou v dané soustavě za určitých vnějších podmínek existovat ve vzájemné rovnováze ( tj. beze změny):

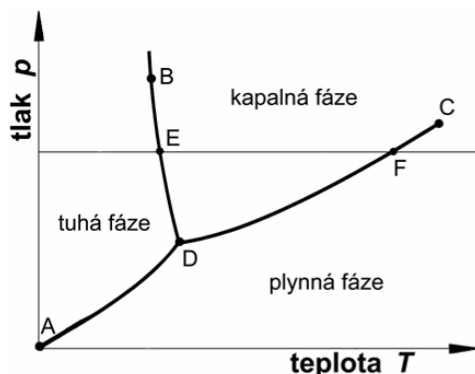
$$v = s + n - f , \quad (7.1)$$

kde značí:  $v$  - počet stupňů volnosti (soustavu ovlivňuje teplota, tlak, složení atd.);  $f$  - počet fází;  $s$  - počet složek (komponent), tj. nejmenší počet nezávislých chemických individuálních komponent z nichž je možno celou soustavu složit;  $n$  - počet vnějších proměnných činitelů (např. teplota, tlak).

Počet stupňů volnosti  $v$  představuje počet nezávisle proměnných veličin soustavy (teplota, tlak, složení), které se mohou měnit, aniž by se změnil počet a druh současně existujících fází.



Obecně má na rovnováhu vliv teplota a tlak (tj. dva vnější činitele,  $n = 2$ ), pak rovnice (7.1) má tvar  $v = s + 2 - f$ . Děje probíhají často za podmínky  $p = \text{konst.}$ , ( $p_{\text{atm}} \cong \text{konst.}$ ); pak  $n = 1$  (přímka E-F snižuje počet stupňů volnosti) a Gibbsův zákon fází má tvar  $v + f = k + 1$ .



Obr. 7-1 Obecný fázový diagram  $p - T$  pro jednosložkovou soustavu

U tuhých a kapalných kovových soustav (tzv. kondenzovaných soustav) bývá tlak konstantní, pak  $v = s + 1 - f$ .

Gibbsovo pravidlo je jednoduchým a jasným vodítkem při studiu kovových soustav. Např. u soustavy o jedné složce, tj. čistý kov, za předpokladu konstantního tlaku má rovnice (7.1) tvar  $v = 1+1 - 1 = 1$ . To znamená, že je možno měnit jednu proměnnou, např. teplotu, aby se s čistým kovem něco odehrávalo - měníme-li teplotu, čistý kov bude krystalizovat.

## 7.2 Termodynamické stavové funkce

*Termodynamické stavové funkce* - jsou to funkce, které popisují stav soustavy. Jsou závislé pouze na termodynamických stavových podmínkách. Jejich změny jsou závislé pouze na počátečním a konečném stavu soustavy (nezávisí na způsobu přechodu soustavy z počátečního stavu do konečného). Termodynamické stavové funkce jsou:

- vnitřní energie soustavy;
- entalpie soustavy;
- entropie soustavy;
- Gibbsova energie;
- Helmholzova energie.

Matematicky vykazují úplný diferenciál, rozdíl počátečního a konečného stavu je nezávislý na integrační cestě. Kruhový integrál z totálního diferenciálu je nulový, tj. cyklický děj s návratem do původního stavu odpovídá nulové změně termodynamické stavové funkce.

**Teplo a práce** nejsou termodynamické stavové funkce a jejich přechod z počátečního do konečného stavu závisí na integrační cestě.

**Práce** - je mírou makroskopického působení soustavy a okolí, energie předaná makroskopickým působením mezi soustavou a okolím, kladně počítáme soustavou vykonanou práci  $W$ , tj. práci vykonanou soustavou do okolí.

**Teplo** - je mírou mikroskopického působení soustavy a okolí, energie předaná mikroskopickému působení mezi soustavou a okolím, kladně počítáme soustavou přijaté teplo  $Q$ , tj. teplo přijaté soustavou od okolí.

Teplo a práce charakterizují *způsob přenosu energie*.

### 7.2.1 Energie

Celková energie soustavy při stálém objemu se označuje *vnitřní energie*. Význam pojmu vnitřní energie soustavy  $U$ , lze zjistit na základě I. věty termodynamiky, která formuluje jeden z nejobecnějších přírodních zákonů - zákon o zachování energie, ve formě zápisu:

$$\Delta U = Q + W, \quad (7.2)$$

kde značí:  $U$  - vnitřní energii soustavy;  $Q$  - teplo přivedené do soustavy;  $W$  - vykonanou práci soustavou.

*Vnitřní energie soustavy  $U$*  je souhrn energií uvnitř soustavy (tj. kinetických a potenciálních energií jader, elektronů, chemických vazeb atd.). Absolutní hodnotu vnitřní energie nelze výpočtem obecně určit, ale poměrně snadno se však měří její změna:

$$\Delta U = U_2 - U_1, \quad (7.3)$$

kde značí:  $U_2$  - energii konečného stavu soustavy;  $U_1$  - energii počátečního stavu soustavy.

Změna vnitřní energie soustavy  $dU$  je rovna součtu energií vyměněných s okolím prostřednictvím přenosu tepla a prostřednictvím *práce*. Jde v podstatě o zákon zachování energie. Vnitřní energie vykazuje vlastnosti termodynamické stavové funkce, indexy „1“ a „2“ charakterizují počáteční a konečný stav soustavy, viz (7.3). Teplo a práce nejsou stavovými funkcemi, proto pro diferenciální zápis I. věty termodynamiky je nutno uvést u těchto veličin odlišné značení diferenciálu ( $\delta$  - obecně nejde o úplný diferenciál):

$$dU = \delta Q + \delta W. \quad (7.4)$$

V rovnicích (7.2) a (7.4) budeme dodržovat dohodu, **kladně** budeme označovat veličiny dodané z okolí do soustavy a **záporně** veličiny dodané soustavou do jejího okolí, viz rovnice (7.4). Obě výše uvedené rovnice lze číst následovně: „**Teplo a práce dodané do soustavy vedou k přírůstku vnitřní energie soustavy**“, což je formulace I. věty termodynamiky.

Na základě rovnic (7.2), resp. (7.4), lze odvodit zvláštní případy charakteristiky soustavy:

- 1) Tepelně izolovaná soustava,  $\delta Q = 0$ , pak z rovnice (7.4) vyplývá, že  $dU = \delta A$ . **Práce dodaná soustavě vede k přírůstku vnitřní energie soustavy** a probíhající děje jsou **adiabatické**.
- 2) Mechanicky izolovaná soustava  $\delta W = 0$ , na základě rovnice (7.4) je možno psát:  $dU = \delta Q$ . **Teplo dodané soustavě vede k přírůstku vnitřní energie soustavy**.
- 3) Izolovaná soustava (tepelně i mechanicky)  $\delta Q = 0$ ,  $\delta W = 0$ , opět dosazením do rovnice (7.4) lze vyjádřit  $dU = 0$ , pak  $U = \text{konst.}$  ( $U_2 = U_1$ ). **V izolované soustavě je změna vnitřní energie soustavy nulová, tj. vnitřní energie je konstantní.** Toto konstatování lze také považovat za formulaci I. věty termodynamické.

V praxi, při práci s kovy a jejich slitinami, nás nejvíce zajímají změny za konstantního tlaku ( $p$ ), tj. izobarické podmínky, při níž všechna práce  $W$  se využije na změnu objemu. Při změně objemu  $\Delta V$  se vykoná objemová práce  $p \cdot \Delta V$ . Celkové teplo přijaté soustavou při izobarickém ohřátí nebo ochlazení soustavy je rovno součtu dvou termodynamických stavových funkcí (vnitřní energii soustavy a objemové práci), jak je patrné z popisu termodynamické stavové funkce entalpie.

### 7.2.2 Entalpie

Entalpie  $H$  vyjadřuje tepelný obsah soustavy. Její absolutní hodnotu nelze určit (stejně také nelze určit absolutní hodnotu vnitřní energie), lze určit její změnu. Entalpie je termodynamická stavová funkce, která je definovaná pro **izobarický děj**, tj.  $p = \text{konst.}$  ( $dp=0$ ). Na základě vyjádření I. věty termodynamické v diferenciální podobě (7.5):  $dU = \delta Q + \delta W$ , lze diferenciál práce  $\delta W$  vyjádřit pomocí objemové a tlakové práce. Protože entalpie je děj izobarický, pak tlaková práce ( $p \cdot dV$ ) je 0 a práce objemová je záporná ( $-p \cdot dV$ ), což lze dosadit do diferenciální podoby I. věty termodynamiky:

$$dU = \delta Q - p \cdot dV . \quad (7.5)$$

Protože entalpie je mírou tepla při izobarickém ději, pak lze psát:

$$\delta Q_p = dU + p.dV . \quad (7.6)$$

Pak lze místo  $\delta Q_p$  psát  $H$  a dostáváme vztah pro vyjádření termodynamické stavové funkce entalpie:

$$H = U + p.V . \quad (7.7)$$

Teplo dodané soustavě za stálého tlaku se spotřebuje na zvýšení vnitřní energie soustavy a na vykonání objemové práce. Je rovno změně entalpie soustavy.

Entalpie je v termodynamice metalurgických procesů označována jako *reakční teplo*. Veškeré fyzikálněchemické reakce jsou doprovázeny určitým reakčním teplem.

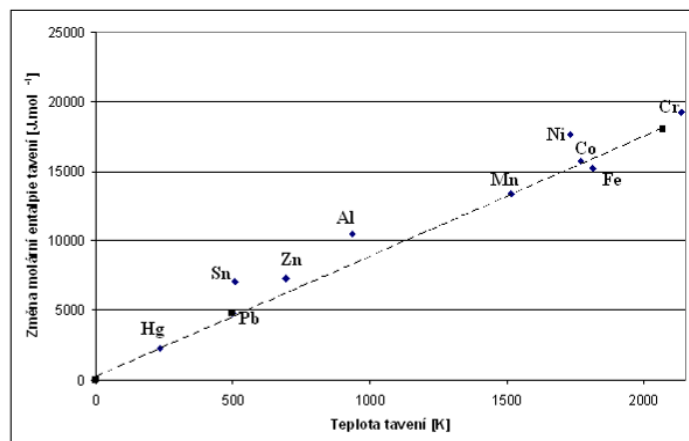
Podle reakčního tepla lze zjistit zabarvení reakce, zda-li se teplo při reakci spotřebovává nebo uvolňuje.

Reakční teplo se řídí podle dvou zákonů:

- 1) Zákon o slučovacích a rozkladných teplech - slučovací teplo je množství tepla, které se uvolní nebo spotřebuje při vzniku 1 molu sloučeniny z uvolněných prvků za standardních podmínek:  $T = 298 \text{ K}$  ( $25^\circ \text{C}$ ) a tlaku  $p = 1,01325 \cdot 10^5 \text{ Pa}$  ( $0,103 \text{ MPa}$ ). Hodnoty slučovacích tepel jsou tabelovány pro  $p = \text{konst.}$  ( $\Delta H_{298}^0$ )<sub>sluč</sub> [ $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ].
- 2) Hessův zákon - reakční teplo reakce závisí pouze na počátečním a konečném stavu látky. Změna reakčního tepla během chemické reakce se vypočítá jako rozdíl konečného a počátečního stavu:  $\Delta H = H_2 - H_1$ .

V tabulce 7.1 je ukázka veličin potřebných k výpočtu změny entalpie na hliníku.

Ve fyzikální metalurgii se u kovů uplatňuje molová entalpie (reakční teplo) a využívá se ve fázové přeměně tání v závislosti na teplotě tání. Pokud tuto závislost vyneseme pro různé kovy do grafické podoby, získáme přibližně lineární závislost. Směrnice přímky udává hodnotu entalpie tání, která je pro většinu kovů konstantní. Tuto závislost charakterizuje tzv. Richardsovo pravidlo. Podle tohoto pravidla jsou molární tepla tání  $\Delta H_{TA}$  jednoatomových prvků (např. kovů) úměrná jejich teplotě tání ( $T_{TA}$ ). Hodnoty vybraných kovů jsou uvedeny na obr. 7-2. Ve skutečnosti Richardův diagram zahrnuje více kovů, kde směrnice dosažené přímky je  $8,4 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ .



Obr. 7-2 Grafické znázornění Richardova pravidla

Současně je možno provést výpočet molární entalpie, která je třeba pro ohřátí zinku na teplotu 420 °C, tj 693 [K].

K tomuto účelu je potřeba uplatnit výpočet molární entalpie, který je proveden na základě integrace Kirchhoffovy rovnice, jenž vyjadřuje teplotní závislost změny molární entalpie za konstantního tlaku:

$$\left( \frac{d(\Delta H)}{dT} \right)_p = \Delta C_p, \quad (7.8)$$

kde značí:  $d\Delta H$  - diferenciál přírůstek molární entalpie;  $dT$  - diferenciál teploty;  $\Delta C_p$  - změnu molární tepelné kapacity látky za konstantního tlaku.

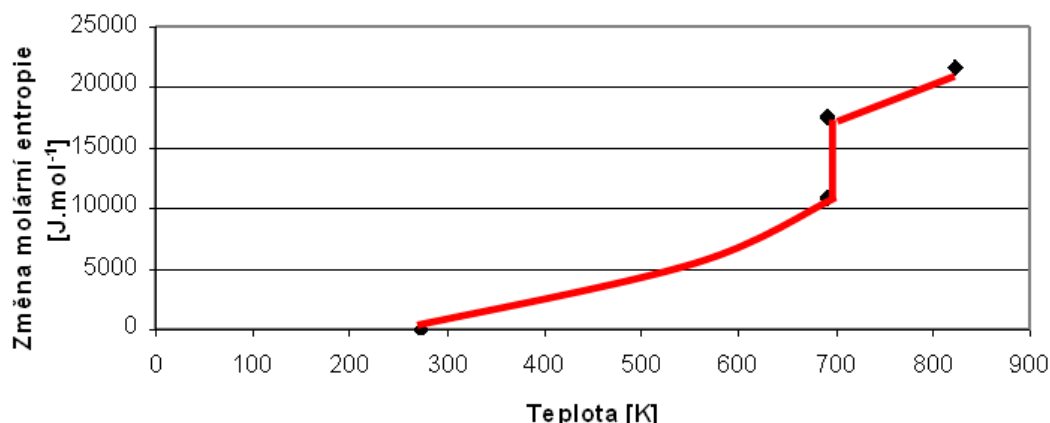
Hodnoty molární tepelné kapacity  $C_p$  pro výpočty s čistým zinkem jsou uvedeny v tabulce 7.1. Zde je molární tepelná kapacita pro tuhý zinek tabelována:

$$\text{Zn (s): } C_p = 22,40 + 10,05 \cdot 10^{-3} \cdot T \text{ [J.mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]. \Delta H_{298}^0 = 0 \text{ [J.mol}^{-1}].$$

Protože neproběhla žádná změna, je možno do rovnice za  $\Delta C_p$  přímo dosadit hodnotu  $C_p$ . Pro stanovení výpočtu změny molární entalpie pro tavení zinku z teploty 25 °C na teplotu 420 °C:

$$\begin{aligned} \Delta H_{693}^0 &= \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^{693} \Delta C_p dT = 0 + \int_{298}^{693} (22,4 + 10,05 \cdot 10^{-3} T) dT = 22,4 \cdot (693 - 298) + \frac{10,05 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (693^2 - 298^2) \\ \Delta H_{693}^0 &= 22,4 \cdot 395 + 2055,1 = 8848 + 2055,1 = 10903,1 \text{ [J.mol}^{-1}]. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Vypočítaná hodnota změny molární entalpie 10903 J je také patrná i z grafické závislosti na obr. 7-3.



Obr. 7-3 Závislost změny molární entalpie zinku na teplotě při jeho ohřevu z 25 °C na 550 °C

Dále je možno stanovit hodnotu rozdílu entalpií pro teploty roztaveného zinku na teplotu 550 °C, tj. 823 K. Hodnoty  $C_p$  pro tuhý stav zinku Zn (s):  $C_p = 22,40 + 10,05 \cdot 10^{-3} \cdot T$  [J.mol<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>].  $\Delta H^0_{298} = 0$  [J.mol<sup>-1</sup>]. Hodnota  $C_p$  zinku pro kapalný stav je Zn (l):  $C_p = 31,40$  T [J.mol<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>],  $\Delta H^0_{TA} = 7280$  [J.mol<sup>-1</sup>]. Výpočet je možno provést podle rovnice:

$$\Delta H^0_{823} = \Delta H^0_{298} + \int_{298}^{693} \Delta C_p \cdot dT + \Delta H^0_{TA} + \int_{693}^{823} \Delta C_p \cdot dT. \quad (7.10)$$

Dosazením do rovnice (7.10) lze psát:

$$\Delta H^0_{823} = 0 + \int_{298}^{693} (22,4 + 10,05 \cdot 10^{-3} T) \cdot dT + 7280 + \int_{693}^{823} 31,4 \cdot dT = 10903,1 + 7280 + 4082 =$$

$$\Delta H^0_{823} = 22265,1 \text{ [J.mol}^{-1}\text{]}.$$

### 7.2.3 Entropie

Entropie je termodynamická stavová funkce, která charakterizuje degradaci tepla (jeho znehodnocení při poklesu z vyšší teploty na nižší). Vyjadřuje termodynamickou pravděpodobnost stavu (při nevratném ději vzrůstá pravděpodobnost stavu, při vratném stavu se nemění). Současně je mírou **nevratnosti děje** (každou další proměnnou energie roste stupeň nevratnosti celé změny). Změnu entropie soustavy lze matematicky vyjádřit jako množství tepla připadající na jeden teplotní stupeň:

$$dS \equiv \frac{\delta Q}{T} \geq 0 \quad (7.11)$$

Rovnost v rovnici (7.11) platí pro děje vratné, nerovnost pro děje nevratné. V klasické termodynamice poměr  $\delta Q/T$  označuje redukované teplo. Výraz (7.11) má význam degenerace nebo-li degradace tepelné energie, tj. sníženou schopnost využití tepla. U čistých kovů se často uplatňují výpočty změny molární entropie při jejich tavení:

$$\Delta S^0_{T_A} = \frac{\Delta H_{T_A}}{T_{T_A}}, \quad (7.12)$$

kde značí:  $\Delta H_{T_A}$  - hodnotu entalpie tavení;  $T_{T_A}$  - teplotu tavení [K].

**Poznámka:**  $\Delta S^0$  - znamenají standardní podmínky, tj. normální tlak 101325 Pa (0,1M Pa) a teplotu 25 °C.

Pokud bychom chtěli např. vypočítat entropii, která je třeba pro tání (tavení) 1 kg zinku, je třeba pro tento výpočet použít rovnici (7.10), tj. rovnici pro stanovení změny molární entropie, neboť jsou v termodynamických tabulkách uvedeny hodnoty změny entalpie při tání a teplota tání (v našem případě viz tabulka 7-1).  $\Delta S^0_{T_A} = 7280/(420+273) = 10,51 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ , molekulová hmotnost zinku je  $65,35 \text{ g.mol}^{-1}$ . Současně je třeba použít přepočet molů na 1 kg, tj.:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{1000\text{g}}{65,35\text{g.mol}^{-1}}, \quad (7.13)$$

kde značí:  $m$  - hmotnost 1 kg = 1000 g;  $M$  - molární hmotnost daného prvku ( $\text{Zn} = 65,35 \text{ g.mol}^{-1}$ ).

Pro zinek dosazením do rovnice (7.9)  $n = 1000/65,35 = 15,30$  molů. Změna entropie pro tavení 1 kg čistého zinku  $\Delta s = \Delta S^0_{T_A} \cdot n = 10,55 \cdot 15,30 = 161,42 \text{ [J.K}^{-1}\text{]}$ .

Pro výpočet změny entropie pro ohřev zinku z teploty 25 °C na teplotu 420 °C, resp z teploty 298 K na teplotu 693 K lze použít rovnici:

$$\Delta S^0_{693} = \Delta S^0_{298} + \int_{298}^{693} \frac{C_p \cdot dT}{T} = 41,65 + \int_{298}^{693} \frac{(22,4 + 10,05 \cdot 10^{-3} \cdot T) dT}{T} = \quad (7.14)$$

$$\Delta S^0_{693} = 41,7 + 8,2 + 4,1 = 54 \text{ [J.K}^{-1}\text{]}$$

Tabulka 7.1 Hodnoty vybraných veličin kovů

| Kov               | Atom.,<br>molek.<br>hmot. | Modifikační<br>přeměna |                                           | Tání             |                                           | Tepelné kapacity<br>*) $C_p = a + b \cdot T + c \cdot T^2$ [ $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$ ] |                |                   |                       | Slučovací<br>entalpie<br>( $\Delta H_{298}^0$ )<br>[ $J \cdot mol^{-1}$ ] | Standardní<br>entropie<br>$S_{298}^0$<br>[ $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$ ] |
|-------------------|---------------------------|------------------------|-------------------------------------------|------------------|-------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|-------------------|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------|
|                   |                           | $T_{př}$<br>[°C]       | $\Delta H_{př}$<br>[ $J \cdot mol^{-1}$ ] | $T_{tá}$<br>[°C] | $\Delta H_{tá}$<br>[ $J \cdot mol^{-1}$ ] | a                                                                                              | $b \cdot 10^3$ | $c \cdot 10^{-5}$ | Rozmezí<br>teplot [K] |                                                                           |                                                                              |
| Al (s)            | 26,98                     | -                      | -                                         | 660              | 10 460                                    | 20,68                                                                                          | 12,39          | -                 | 298 až $T_{tá}$       | 0                                                                         | 28,33                                                                        |
| Al (l)            |                           | -                      | -                                         | -                | -                                         | 29,30                                                                                          | -              | -                 | $T_{tá}$ až 1273      | 0                                                                         | -                                                                            |
| Fe (s, $\alpha$ ) | 55,85                     | 760                    | 2 760                                     | -                | -                                         | 19,26                                                                                          | 21,01          | -                 | 273 až 1033           | 0                                                                         | 27,17                                                                        |
| Fe (s, $\beta$ )  |                           | 907                    | 920                                       | -                | -                                         | 37,67                                                                                          | -              | -                 | 1033 až 1181          | 0                                                                         | -                                                                            |
| Fe (s, $\gamma$ ) |                           | 1401                   | 1170                                      | -                | -                                         | 7,70                                                                                           | 1,51           | -                 | 1181 až 1674          | 0                                                                         | -                                                                            |
| Fe (s, $\delta$ ) |                           | -                      | -                                         | 1534             | 15 230                                    | 43,95                                                                                          | -              | -                 | 1672 - $T_{tá}$       | 0                                                                         | -                                                                            |
| Fe (l)            |                           | -                      | -                                         | -                | -                                         | 41,86                                                                                          | -              | -                 | 1873 až $T_{tá}$      | 0                                                                         | -                                                                            |
| Mg (s)            | 24,31                     | -                      | -                                         | 650              | 8 790                                     | 22,31                                                                                          | 10,63          | -0,42             | 293 až $T_{tá}$       | 0                                                                         | 32,57                                                                        |
| Mg (l)            |                           | -                      | -                                         | -                | -                                         | 33,90                                                                                          | -              | -                 | 1130 až $T_{tá}$      | 0                                                                         | -                                                                            |
| Mn (s, $\alpha$ ) | 54,94                     | 720                    | 2 009                                     | -                | -                                         | 23,15                                                                                          | 14,15          | -1,59             | 298 až 1000           | 0                                                                         | 31,77                                                                        |
| Mn (s, $\beta$ )  |                           | 1100                   | 2 300                                     |                  |                                           | 34,87                                                                                          | 2,76           |                   | 1000 až 1374          | 0                                                                         | -                                                                            |
| Mn (s, $\gamma$ ) |                           | 1136                   | 1 780                                     | -                | -                                         | 44,79                                                                                          | -              | -                 | 1374 až 1410          | 0                                                                         | -                                                                            |
| Mn (s, $\delta$ ) |                           | -                      | -                                         | 1244             | 13 390                                    | 47,30                                                                                          | -              | -                 | 1410 až $T_{tá}$      | 0                                                                         | -                                                                            |
| Mn (l)            |                           | -                      | -                                         | -                | -                                         | 46,05                                                                                          | -              | -                 | $T_{tá}$ až $T_{vyp}$ | 0                                                                         | -                                                                            |
| Zn (s)            | 65,37                     | -                      | -                                         | 420              | 7 280                                     | 22,40                                                                                          | 10,05          | -                 | 298 - 1600            | 0                                                                         | 41,65                                                                        |
| Zn (l)            |                           | -                      | -                                         | -                | -                                         | 31,40                                                                                          | -              | -                 | $T_{tá}$ až 1200      | 0                                                                         | -                                                                            |

**Poznámka:** Hodnoty a, b, c se z tabulky stanovují vyjádřením z rovnice tepelné kapacity. Prvky nevykazují hodnotu slučovací entalpie. Al (l):  $T_{vyp} = 2500$  °C,  $\Delta H_{vyp} = 291\,350$  J.mol<sup>-1</sup>; Mg (l):  $T_{vyp} = 3070$  °C,  $\Delta H_{vyp} = 340\,280$  J.mol<sup>-1</sup>; Zn (l):  $T_{vyp} = 907$  °C,  $\Delta H_{vyp} = 114\,280$  J.mol<sup>-1</sup>; Mn (l):  $T_{vyp} = 2\,060$  °C,  $\Delta H_{vyp} = 217\,670$  J.mol<sup>-1</sup>.



### 7.2.4 Gibbsova energie

Je stavová termodynamická funkce, která je kriteriem průběhu a samovolnosti (nevratnosti) dějů v uzavřených soustavách za podmínek  $p = \text{konst.}$ ,  $T = \text{konst.}$ :

$$G = H - T.S, \quad (7.15)$$

kde značí:  $G$  - Gibbsovu energii (volná energie) [J];  $H$  - entalpii [J];  $T$  - absolutní teplotu [K];  $S$  - entropii [ $\text{J.K}^{-1}$ ],  $T.S$  - vázanou energii [J].

*Gibbsova energie* je ta část energie, která může být ze soustavy uvolněna a může konat práci při podmínkách  $p = \text{konst.}$ ,  $T = \text{konst.}$  V podstatě to je entropie soustavy zmenšena o tzv. vázanou energii ( $T.S$ ), tj. energie sloužící pro existenci soustavy.

V diferenciálním tvaru lze psát:

$$\Delta G = \Delta H - T.\Delta S. \quad (7.16)$$

kde značí:  $\Delta G$  - změnu Gibbsovy energie v průběhu procesu (např. fázové přeměny kovů [J];  $\Delta H$  - změnu entalpie v průběhu procesu [J];  $T$  - teplotu procesu [K];  $T.S$  - vázanou energii v průběhu procesu [J].

Při stálé teplotě a tlaku soustava koná práci na úkor Gibbsovy energie, odtud lze vyvodit závěr pro průběh dějů, děj probíhá v žádaném směru, pokud  $dG < 0$  ( $\Delta G < 0$ ). Změnu Gibbsovy energie lze využít pro popis krystalizace kovů. Pro souvislost mezi stavovými veličinami dále platí:

$$\Delta G = \Delta U + p.\Delta V = T.\Delta S = \Delta A + p.\Delta V. \quad (7.17)$$

Tak např. hodnota změny Gibbsovy energie  $\Delta G_{693}^0$  pro teplotu zinku  $420^\circ\text{C}$  (693 K) je po dosazení hodnot z rovnic (7.9) a (7.14):

$$\Delta G_{693}^0 = \Delta H_{693}^0 - 693.\Delta S_{693}^0 = 10903 - 693.54 = 10903 - 37422 = -26519[\text{J}] \quad (7.18)$$

Je-li vypočítaná změna Gibbsova energie ( $\Delta G_{693}^0$ ) záporná, to znamená, že děj probíhá v žádaném směru, tj. se zvyšující se teplotou se blížíme k podmínkám tavení zinku.

### 7.2.5 Helmholtzova energie

Je termodynamická stavová funkce (izotermně-izochorní potenciál), kritéria vratnosti tedy rovnováhy nebo nevratnosti tedy samovolnosti dějů v uzavřených soustavách při podmínkách  $T = \text{konst.}$ ,  $V = \text{konst.}$ :

$$A = U - T.S, \quad (7.19)$$

kde značí:  $A$  - Helmholtzovu energii [J];  $U$  - vnitřní energii soustavy [J];  $T$  - teplotu [K];  $S$  - entropii soustavy [ $\text{J.K}^{-1}$ ];  $T.S$  - vázanou energii soustavy [J].

Pro změnu Helmholtzovy funkce lze analogicky použít rovnici (7.19):

$$\Delta A = \Delta U - T.\Delta S. \quad (7.20)$$

Díky tomu, že ve *fyzikální metalurgii* probíhají děje především za podmínek  $p = \text{konst.}$   $T = \text{konst.}$ , větší uplatnění má Gibbsova energie než Helmholtzova energie. Nehledě na to, že taveniny běžných kovů mají větší objem než jejich tuhé fáze.

### 7.3 Termodynamika fázových přeměn

Fázový přechod se uskutečňuje tehdy, když na rovnovážnou heterogenní soustavu se působí vnějšími silami a když se ustanoví nová termodynamická rovnováha tím, že k vyrovnání *chemického potenciálu* přejde část hmoty jedné fáze do druhé.

Klasifikace fázových přechodů je založena na tom, jaké vlastnosti se v bodě přechodu mění skokem. Rozlišujeme fázové přechody prvního a druhého druhu.

**Fázové přechody prvního druhu** jsou takové, při kterých se mění konečným skokem takové vlastnosti, které jsou prvními derivacemi Gibbsovy energie, tj.:

a) *objem* 
$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T \quad (7.21)$$

b) *entropie* 
$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p \quad (7.22)$$

**Fázové přechody druhého druhu** jsou takové, u kterých se mění konečným skokem druhá derivacemi Gibbsovy energie, tj.:

a) *molární tepelná kapacita* 
$$C_p = -T.\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_p \quad (7.23)$$

$$\text{b) stlačitelnost materiál} \quad \beta = \frac{1}{V_0} \cdot \left( \frac{\partial^2 G}{\partial p^2} \right)_T \quad (7.24)$$

$$\text{c) součinitel teplotní roztažnosti} \quad \alpha = \frac{1}{V_0} \cdot \frac{\partial^2 G}{\partial p \cdot \partial T} \quad (7.25)$$

Fázové přechody **prvního druhu** jsou na rozdíl od ostatních přechodů doprovázeny změnou objemu a vybavováním nebo pohlcováním fázového nebo skupenského tepla. Je to tání kovů, změna krystalografické modifikace, popř. vypařování. Fázové přechody druhého druhu je např. přechod ze stavu paramagnetického do feromagnetického, z normálního do supervodivého, atd.

I když přechody druhého řádu se řadí mezi fázové přechody, pak z hlediska formulace polymorfní modifikace nevzniká při nich nová fáze, neboť se u těchto přechodů nemění krystalická struktura.

## 7.4 Důležité matematické vzorce potřebné pro termodynamické výpočty

### Integrační vzorce

$$\text{a) } \int dx = x + C$$

$$\text{b) } \int x^n \cdot dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} + C; n \neq -1$$

$$\text{c) } \int \frac{1}{x} \cdot dx = \ln|x| + C$$

### Derivační vzorce

$$\text{a) } [C]' = 0, \text{ kde } C \text{ je konstanta}$$

$$\text{b) } [x^n]' = n \cdot x^{n-1}$$

$$\text{c) } [e^x]' = e^x$$

$$\text{d) } [\ln x]' = 1/x$$

### Vzorové integrály

$$\text{a) } \int_{100}^{400} T^{-2} \cdot dT = \left[ \frac{T^{-1}}{-1} \right]_{100}^{400} = - \left( \frac{1}{400} - \frac{1}{100} \right) = (0,0025 - 0,01 = -(-0,0075) = 7,5 \cdot 10^{-3}$$

$$b) \int_{300}^{400} 7 \cdot T \cdot dT = \frac{7}{2} \cdot (400^2 - 300^2) = 245000$$

$$c) \int_{298}^{700} \frac{50}{T} \cdot dT = 50 \ln \frac{700}{298} = 42,699$$

## 7.5 Ukázka řešených příkladů z termodynamiky kovů

### Příklad č. 1

Vypočítejte entropii Fe (s,β) pro teplotu 1033 K a tlaku 101 325 Pa, pro Fe(s,α):  $S_{298}^0 = 27,15 \text{ [J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}]$ ; Fe(s,α):  $C_p = 14,11 + 29,72 \cdot 10^{-3} \cdot T - 1,8 \cdot 10^5 \cdot T^{-2}$  [J.K<sup>-1</sup>. mol<sup>-1</sup>]; Teplota přeměny  $T_{\alpha-\beta}$  je 1033 K,  $\Delta H_{\alpha-\beta} = 1720 \text{ [J. mol}^{-1}]$ .

$$\begin{aligned} S_{1033\text{Fe}(\beta)}^0 &= S_{298\text{Fe}(\alpha)}^0 + \int_{298}^{1033} \frac{C_p}{T} dT + \frac{\Delta H_{\alpha-\beta}}{T_{\alpha-\beta}} = \\ &= 27,15 + \int_{298}^{1033} \left( \frac{14,11 + 29,72 \cdot 10^{-3} T - 1,8 \cdot 10^5 T^{-2}}{T} \right) dT + \frac{1720}{1033} = \\ &= 27,15 + 14,11 \ln \frac{1033}{298} + 29,72 \cdot 10^{-3} (1033 - 298) + \frac{1,8 \cdot 10^5}{2} (1033^{-2} - 298^{-2}) + 1,665 \\ S_{1033\text{Fe}(\beta)}^0 &= 27,15 + 17,54 + 21,8442 - 0,9291 + 1,665 = 67,27 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \end{aligned}$$

### Příklad č. 2

Vypočítejte změnu Gibbsovy energie při tání 1 kg mědi, je-li molární entalpie tání  $\Delta H_{T_A} = 13018 \text{ [J.mol}^{-1}]$ , teplota tání Cu je 1083 °C; molekulová hmotnost  $M(\text{Cu}) = 63,55 \text{ g.mol}^{-1}$ ; určení látkového množství v molech  $n = 1000/63,55 = 15,74 \text{ mol}$ ;  $T_{T_A} = 1356 \text{ K}$

$$\Delta S_{T_A}^0 = n \cdot \frac{\Delta H_{T_A}}{T_{T_A}} = 15,74 \cdot \frac{13018}{1083 + 273} = 151,11 \text{ [J.K}^{-1}]$$

$$\Delta G_{T_A}^0 = \Delta H_{T_A}^0 - T_{T_A} \cdot \Delta S_{T_A}^0;$$

$$\Delta G_{T_A}^0 = 15,74 \cdot 13018 - 1356 \cdot 151,11 = 2 \text{ J , tj. nepřesnost výpočtu}$$

$$\Delta G_{T_A}^0 = 0$$

Při teplotě tání kovů je změna Gibbsovy energie nulová ( $\Delta G_{T_A}^0 = 0$ ).

## 7.6 Úlohy k procvičení

### Úloha č. 1

Nakreslete rovnovážný diagram Fe-C metastabilní, označte jednotlivé oblasti. Určete počet složek v tomto diagramu, vyjmenujte fáze tohoto diagramu. Stanovte počet stupňů volnosti pro oblast taveniny, pro bod A, C a S.

### Úloha č. 2

Vypočítejte teplotu tání čistého železa, je-li  $\Delta H_{\text{TÁNÍ}} = 15,23 \text{ [kJ.mol}^{-1}\text{]}$  a entropie tání pro 1 mol železa je  $8,39 \text{ [J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}\text{]}$ .

### Úloha č. 3

Vypočítejte entropii tání pro 1 mol těchto kovů: *hliníku* - teplota tání čistého hliníku je  $660 \text{ }^{\circ}\text{C}$  a entalpie tání pro 1 mol hliníku  $\Delta H_{\text{TÁNÍ}} = 10,46 \text{ [kJ.mol}^{-1}\text{]}$ ; *olova* - teplota tání čistého olova je  $500 \text{ K}$  a entalpie tání pro 1 mol olova  $\Delta H_{\text{TÁNÍ}} = 4,55 \text{ [kJ.mol}^{-1}\text{]}$ ; *niklu* - teplota tání čistého niklu je  $1455 \text{ }^{\circ}\text{C}$  a entalpie tání pro 1 mol niklu  $\Delta H_{\text{TÁNÍ}} = 17,7 \text{ [kJ.mol}^{-1}\text{]}$ ; *hořčíku* - teplota tání čistého hořčíku je  $650 \text{ }^{\circ}\text{C}$  a entalpie tání pro 1 mol hořčíku  $\Delta H_{\text{TÁNÍ}} = 8,79 \text{ [kJ.mol}^{-1}\text{]}$ ; *zinku* - teplota tání čistého zinku je  $420 \text{ }^{\circ}\text{C}$  a entalpie tání pro 1 mol zinku  $\Delta H_{\text{TÁNÍ}} = 7,28 \text{ [kJ.mol}^{-1}\text{]}$ .

### Úloha č. 4

Vypočítejte entropii při tání 1 kg mědi, je-li molární entalpie tání  $H_{\text{TÁ}} = 13018 \text{ [J.mol}^{-1}\text{]}$ , teplota tání Cu je  $1083 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ; molekulová hmotnost  $M(\text{Cu}) = 63,55 \text{ g.mol}^{-1}$ ; určení látkového množství v molech  $n = 1000/63,55 = 15,74 \text{ mol}$ .

## 8. DIFÚZE V KOVECH

Difúze je jedním ze způsobů přenosu hmoty. K difúzi dochází v každém skupenství, avšak v tuhém prostředí je to jediný způsob přenosu hmoty. Při difúzi se částice hmoty i vakance pohybují vzhledem k sousedním částicím. Podstatou difúze je tepelný pohyb částic, proto je velmi závislá na teplotě, při vyšší teplotě je difúzní pohyb atomů intenzivnější.

Difúzí se zpravidla zmenšují koncentrační rozdíly, neboť hmota je přenášena z místa o vyšší koncentraci na místo o nižší koncentraci, v opačném případě se jedná o tzv. obrácenou difuzi.

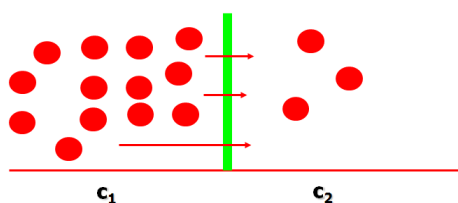
V jednosložkové soustavě nebo fázi se difúze nazývá *autodifúze* (můžeme ji pozorovat pouze pomocí radioaktivních izotopů daného prvku).

V mnohosložkové heterogenní soustavě se difúzí mění chemické složení jednotlivých fází a přenos hmoty se uskutečňuje i přes fázové rozhraní za předpokladu, že je difundující prvek v dané fázi alespoň částečně rozpustný.

Technický význam difúze spočívá jak v *prospěšných* tak i ve *škodlivých* změnách koncentrace a ve fázových či strukturních přeměnách buď jen v povrchových vrstvách kovů nebo v celém jejich objemu.

Difúze je samovolné pronikání molekul (atomů, iontů aj.) z oblasti vyšší koncentrace do oblasti nižší koncentrace vlivem tepelného pohybu částic (atomů, molekul, skupin molekul, atd.) a jejich srážek;

Na obr. 8 – 1 je schéma difúze. Částice o vyšší koncentraci ( $c_1$ ) přechází do míst o nižší koncentraci ( $c_2$ ). Jedná se o *přenos hmoty* ve směru proti gradientu koncentrace. Difúze je typický nevratný proces spojený se vzrůstem entropie.



Obr. 8 – 1 Schéma difúze částic z místa o vyšší koncentraci do míst s nižší koncentrací

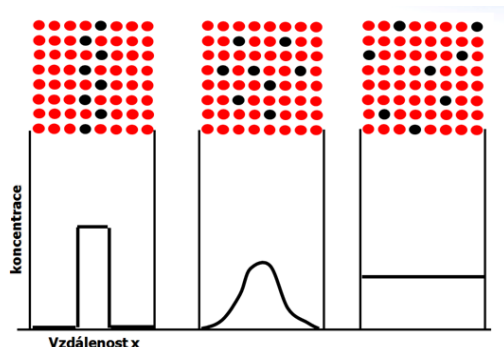
Difúzí se uskutečňují i všechny mezifázové procesy, například vznik roztoků, absorpce plynů atd.

V metalurgii je difúze jedním z *nejdůležitějších dějů* při tuhnutí kovů a slitin a při jejich tepelném a tepelně chemickém zpracování.

*Difúze v kovech* probíhá tak, že atomy difundujícího prvku vstupují do mřížky jiného kovu, buď do polohy uzlového bodu mřížky nebo do vzniklého volného místa. Možnost vniknutí atomu nového prvku do struktury jiného kovu závisí hlavně na jeho rozměrech. Prvek s malým poloměrem atomu difunduje do mřížky kovu s větším poloměrem atomu snadněji, příkladem je difúze *uhlíku* a *dusíku* do *železa*.

Difúze je důležitá při perlitické, bainitické přeměně, při martenzitické přeměně se neuplatňuje.

*Samodifúze* se používá ve dvou významech. Samodifúzí se rozumí difúze atomů, (molekul iontů, apod.) téhož druhu v čistém jednosložkovém plynu. Samodifúze je difúze atomů téhož druhu v krystalové mřížce, podstatou této samodifúze je vyrovnávání kinetických energií tepelného pohybu jednotlivých atomů. Samodifúze ovlivňuje růst krystalů nové fáze, který pokračuje přesuny atomů tak dlouho, až se původní fáze zcela spotřebuje, resp. přemění ve fázi novou. Samodifúzí také rostou zrna při ohřevu kovu. Na obr. 8 – 2 je schéma samodifúze.



Obr. 8-2 Schéma samodifúze

Difúze v kovech probíhá tak, že atomy difundujícího prvku vstupují do mřížky jiného kovu, podle okolností, buď do polohy mezi atomy mřížky, nebo do volného místa uzlového bodu.

Možnost vniknutí atomu jiného prvku do struktury daného kovu závisí hlavně na rozměrech jeho krystalické mřížky, resp. buňky i rozměru atomu difundujícího prvku.

Prvek s malým poloměrem atomu difunduje do mřížky kovu s větším poloměrem atomu snadněji, příkladem je např. difúze *uhlíku* a *dusíku* do *železa*.

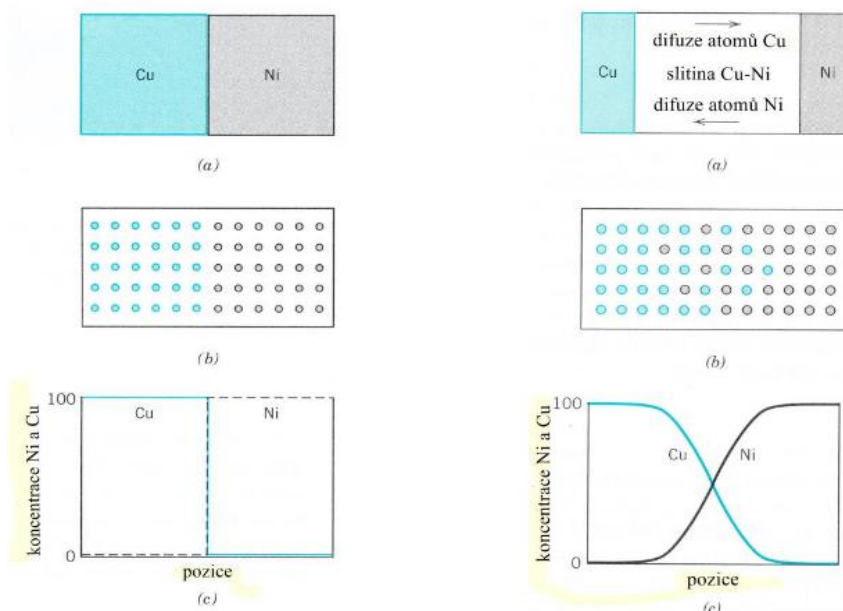
### **Velikosti atomů vybraných prvků**

poloměr atomu vodíku:  $0,46 \cdot 10^{-10}$  [m]; poloměr atomu dusíku:  $0,71 \cdot 10^{-10}$  [m];  
 poloměr atomu uhlíku:  $0,77 \cdot 10^{-10}$  [m]; poloměr atomu kyslíku:  $0,60 \cdot 10^{-10}$  [m];  
 poloměr atomu železa:  $1,28 \cdot 10^{-10}$  [m].

**Technická interpretace difúze**, viz obr. 8-3.

**Počáteční stav** (obrázky vlevo), máme dva kovy (Cu a Ni), které jsou v těsném spojení – obr. a); rozložení atomů v kovů, které jsou v těsném spojení – obr. b); koncentrace Cu a Ni před difúzí – obr. c).

**Průběh difúze** (obrázky vpravo), proces difúze, atomy Cu nadifundovaly do Ni a naopak – obr. a), rozložení atomů v určitém časovém kroku difúze – obr. b), rozložení koncentrace Cu a Ni v obou materiálech v určitém časovém kroku difúze, na styčné ploše obou materiálů je určité rozložení koncentrací obou kovů (Cu a Ni), ale ve vzdálenějších partiích v Cu a v Ni se koncentrace příslušných kovů nezměnila – obr. c).



Obr. 8-3 Interpretace difuzního pochodu mezi Cu a Ni

## 8.1 Arrheniova rovnice

Arrheniova rovnice popisuje rychlost difúzního děje (difúze) uvádí do souvislosti rychlost pohybu atomů s aktivační energií. Aktivační energie je energie dodaná atomu (částici), která umožňuje jeho pohyb (přeskok). S rostoucí aktivační energií klesá rychlost difúzního děje. Difúzi podporuje teplota, která přispívá ke zvyšování pohyblivosti atomů. *Arrheniova rovnice*:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_d}{R \cdot T}\right), \quad (8.1)$$



kde značí:  $D$  - koeficient difúze [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ];  $D_0$  - frekvenční faktor difuze [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ];  $\Delta H_d$  - aktivační energii difúze [ $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ];  $R$  - plynovou konstantu 8314 [ $\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ] nebo 8,314 [ $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ];  $T$  - absolutní teplotu [K].

V tabulce 8.1 jsou vybrané hodnoty veličin pro výpočet koeficientu difúze ( $D$ ).

Tabulka 8.1 Hodnoty pro výpočet koeficientu difúze v různých kovech

| Difundující prvek | Difúzní prostředí | $D_0$<br>[ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ] | $\Delta H_d$<br>[ $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ] | Rozmezí teplot |          |
|-------------------|-------------------|-----------------------------------------------|-------------------------------------------------------|----------------|----------|
|                   |                   |                                               |                                                       | $T$ [K]        | $t$ [°C] |
| H                 | Fe $\alpha$       | $2,0 \cdot 10^{-7}$                           | 12,1                                                  | 293-1173       | 20-900   |
| H                 | Fe $\gamma$       | $6,7 \cdot 10^{-7}$                           | 45,1                                                  | 623-1323       | 350-1050 |
| C                 | Fe $\alpha$       | $2,0 \cdot 10^{-6}$                           | 84,1                                                  | 293-1123       | 20-850   |
| C                 | Fe $\gamma$       | $4,0 \cdot 10^{-5}$                           | 140,0                                                 | 773-1373       | 500-1100 |
| Mn                | Fe $\alpha$       | $7,6 \cdot 10^{-5}$                           | 225,0                                                 | 1063-1173      | 790-900  |
| Mn                | Fe $\gamma$       | $1,8 \cdot 10^{-5}$                           | 264,0                                                 | 1173-1153      | 900-1300 |
| Fe                | Fe $\alpha$       | $2,0 \cdot 10^{-4}$                           | 241,0                                                 | 673-1473       | 400-1200 |
| Fe                | Fe $\gamma$       | $5,0 \cdot 10^{-5}$                           | 284,0                                                 | 773-1373       | 500-1100 |
| Zn                | Cu                | $3,4 \cdot 10^{-5}$                           | 191,0                                                 | 673-1373       | 400-1100 |
| Cu                | Al                | $6,5 \cdot 10^{-5}$                           | 135,0                                                 | 673-873        | 400-600  |

## 8.2 Fickovy zákony

Proces a rychlost difúze se řídí Fickovými zákony, jejich mírou je součinitel difúze. Rozlišujeme dva Fickovy zákony (I. Fickův a II. Fickův zákon).

**První Fickův zákon** se zabývá difúzí při stacionárních podmínkách, tj. koncentrace  $c(x)$  se s časem nemění. Zavádíme pojem difúzní tok,  $J$ , který je dán počtem atomů, které projdou jednotkovou plochou kolmou ke směru difúze za jednotku času.

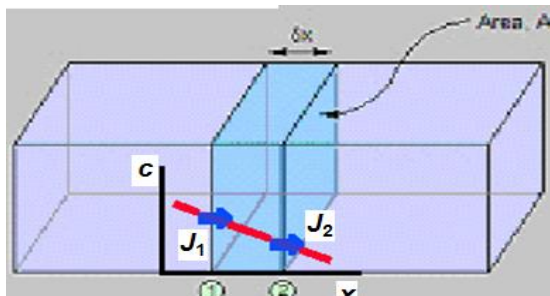
Z fenomenologického hlediska *I. Fickův zákon* platí pro stanovení difúzního toku  $J$  příslušného kovu (látky):

$$J = -D \cdot \frac{\partial c(x)}{\partial x}, \quad (8.2)$$

kde značí:  $J$  - difúzní tok [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ];  $D$  - koeficient difúze [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ];  $c(x)$  - koncentraci v místě  $x$ ;  $x$  - místo sledované difúze;  $\partial c(x)/\partial x$  - gradient koncentrace látky v místě  $x$  [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-4}$ ].

**Poznámka:** znaménko (-) je proto, že difúze jde proti koncentračnímu gradientu.

První Fickův zákon v podstatě říká, že rychlost přenosu látky difúzí je úměrná spádu, resp. gradientu koncentrace v uvažovaném místě. Význam I. Fickova zákona je patrný z obr. 8-4. Zde v místě 1 je difuzní tok  $J_1$ , v místě 2 je difuzní tok  $J_2$ .



Area = plocha, označovaná S

Obr. 8-4 Schéma významu I. Fickova zákona při interpretaci difuzního toku

Na základě I. Fickova zákona lze stanovit množství látky A v hmotnostních jednotkách přenesené difúzí:

$$J_A = \frac{dm_A}{S \cdot dt}, \quad dm_A = -D_A \cdot \frac{\partial c_A}{\partial x} \cdot S \cdot dt, \quad (8.3)$$

kde značí:  $dm_A$  – množství látky A přenesené difúzí [kg];  $D_A$  – součinitel difúze látky A [ $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ ];  $c_A$  – okamžitou objemovou koncentraci uvažované látky A [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ];  $x$  – souřadnici směru difúze [m];  $dc_A/dx$  – gradient koncentrace látky A [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-4}$ ];  $S$  – plochu přes kterou prochází difundující látka A, je kolmá na směr difúze [ $\text{m}^2$ ];  $dt$  – dobu difúze látky A [s].

**II. Fickův zákon** platí pro nestacionární podmínky difúze. Rychlost změny koncentrace v daném místě, způsobená difúzí je úměrná změně gradientu koncentrace v tomto místě. Konstanta úměrnosti ( $D$ ) se nazývá součinitel (koeficient) difúze. Pokud je součinitel difúze ( $D$ ) je nezávislý nekonzentraci (je konstanta), lze pro výpočet difúze použít tuto rovnici:

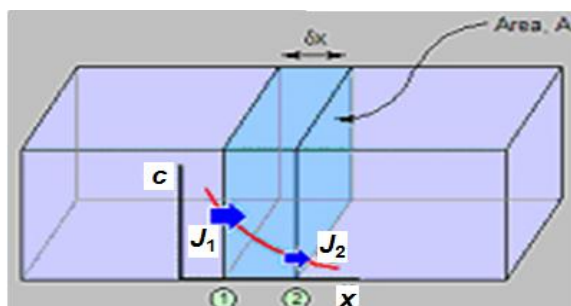
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (8.4)$$

Je-li součinitel difúze ( $D$ ) závislý na koncentraci  $c$  a poloze  $x$ , pak je nutno pro výpočet použít tento tvar rovnice:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial c} \left( D \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (8.5)$$

kde značí:  $\partial^2 c / \partial x^2$  – křivost koncentračního profilu v daném místě  $x$ ;  $\partial c / \partial t$  – změnu koncentrace v závislosti na čase (rychlost změny koncentrace).

Na obr. 8-5 je schéma významu II. Fickova zákona.



Obr. 8-5 Schéma významu II. Fickova zákona při interpretaci difuzního toku

Řešení parciální diferenciální rovnice II. Fickova zákona – závisí na zadání úlohy, nejčastější jsou 2 případy zadání:

***Difúze prvku v polonekonečném prostředí ( $0 < x < \infty$ )***

Počáteční podmínky před difúzí: ( $t=0$ ) je koncentrace  $c_0$  v každém místě ( $x > 0$ ); okrajová podmínka: na rovinném rozhraní v místě ( $x=0$ ) se udržuje stálá koncentrace  $c_1$  po celou dobu ( $t > 0$ ), je možno uplatnit při nasycování (např. cementace) nebo odsycování (oduhličování) vrstev pod rovinným povrchem.

***Řešení rovnice II. Fickova zákona – nasycování povrchu, vychází z řešení této rovnice:***

$$\frac{c - c_0}{c_1 - c_0} = 1 - \operatorname{erf} \left[ \frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}} \right] \quad (8.6)$$

***Řešení rovnice II. Fickova zákona – odsycování povrchu, vychází z řešení této rovnice:***

$$\frac{c - c_1}{c_0 - c_1} = \operatorname{erf} \left[ \frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}} \right] \quad (8.7)$$

***Difúze prvku v nekonečném prostředí ( $-\infty < 0 < \infty$ )***

Počáteční podmínky před difúzí: ( $t=0$ ) je koncentrace v každém místě ( $x < 0$ ) je koncentrace  $c_1$ , v každém místě  $x > 0$  je koncentrace  $c_2$ ;

Okrajová podmínka: na rovinném rozhraní v místě ( $x=0$ ) se udržuje po celou dobu ( $t > 0$ ) konstantní koncentrace  $\frac{1}{2}(c_1 + c_2)$ .

**Řešení rovnice II. Fourierovy rovnice, pro podmínky koncentrace  $c$  v místě  $x$  v čase  $t$ :**

pro  $c < (c_1 + c_2)/2$ : 
$$c = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{2} \cdot [1 - \operatorname{erf}(z)], \quad (8.8a)$$

$$z = \left[ \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \right] \quad (8.8b)$$

pro  $c > (c_1 + c_2)/2$ : 
$$c = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{2} \cdot [1 + \operatorname{erf}(z)], \quad (8.9a)$$

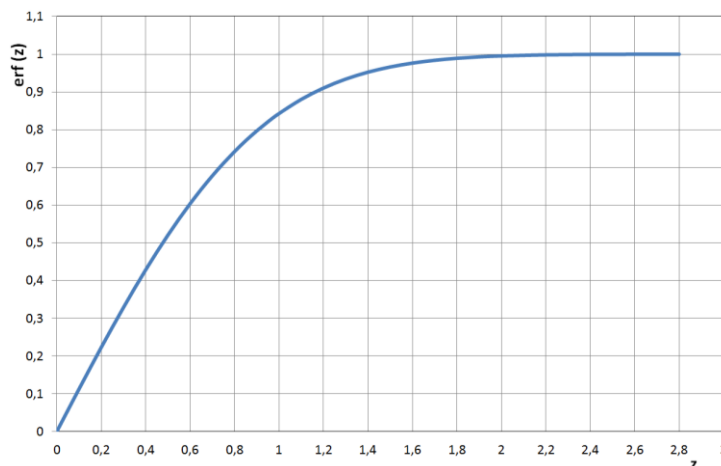
$$z = \left[ \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \right] \quad (8.9b)$$

Chybová funkce:  $\operatorname{erf}(z)$  = error function, tzv. *Gaussův integrál chyb*. Pro její určení je nutno nejdříve stanovit argument  $z$ , viz (8.8b) a 8.9b). Argument  $z$  se určí na základě hodnoty souřadnice  $x$ , hodnoty součinitele difúze  $D$  a času difúze  $t$ . tyto hodnoty musí být v podstatě zadane. Součinitel  $D$  lze vypočítat na základě Arrheniovy rovnice.

Pro stanovení chybové funkce je ještě nutno vědět, že existují tabelované hodnoty, viz tabulka 8.2, nebo existuje grafická závislost, viz obr. 8-6, které udávají souvislost mezi  $z$  a  **$\operatorname{erf}(z)$** .

Tabulka 8.2 Hodnoty chybové funkce – souvislost mezi  $z$  a  $\operatorname{erf}(z)$

| Hodnoty chybové funkce (error fiction) – tzv. Gaussův integrál chyb |                         |       |                         |       |                         |
|---------------------------------------------------------------------|-------------------------|-------|-------------------------|-------|-------------------------|
| $z$                                                                 | $\operatorname{erf}(z)$ | $z$   | $\operatorname{erf}(z)$ | $z$   | $\operatorname{erf}(z)$ |
| 0                                                                   | 0,0000                  | 0,550 | 0,5633                  | 1,300 | 0,9340                  |
| 0,025                                                               | 0,0282                  | 0,600 | 0,6038                  | 1,400 | 0,9523                  |
| 0,050                                                               | 0,0564                  | 0,650 | 0,6420                  | 1,500 | 0,9661                  |
| 0,100                                                               | 0,1125                  | 0,700 | 0,6778                  | 1,600 | 0,9763                  |
| 0,150                                                               | 0,1680                  | 0,750 | 0,7111                  | 1,700 | 0,9838                  |
| 0,200                                                               | 0,2227                  | 0,800 | 0,7421                  | 1,800 | 0,9891                  |
| 0,250                                                               | 0,2763                  | 0,850 | 0,7707                  | 1,900 | 0,9928                  |
| 0,300                                                               | 0,3286                  | 0,900 | 0,7969                  | 2,000 | 0,9953                  |
| 0,350                                                               | 0,3794                  | 0,950 | 0,8209                  | 2,200 | 0,9981                  |
| 0,400                                                               | 0,4284                  | 1,000 | 0,8427                  | 2,400 | 0,9993                  |
| 0,450                                                               | 0,4755                  | 1,100 | 0,8802                  | 2,600 | 0,9998                  |
| 0,500                                                               | 0,5205                  | 1,200 | 0,9103                  | 2,800 | 0,9999                  |



$$\operatorname{erf}(z) = \operatorname{erf} \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \quad z = \frac{x}{2 \sqrt{D \cdot t}}$$

Obr. 8-6 Souvislost mezi argumentem  $z$  a chybovou funkcí  $\operatorname{erf}(z)$ 

### 8.3 Ukázky řešení příkladů z difúze kovů

#### Příklad č. 1

Vypočtete difúzní tok uhlíku v desce z čistého železa ( $\text{Fe}_\alpha$ ) při teplotě 700 °C (973 K), je-li z jedné strany desky atmosféra bohatá na uhlík a z druhé strany chudá na uhlík, po ustálení procesu (tj. při dosažení stacionárního stavu) vypočtete difúzní tok uhlíku deskou. Je-li koncentrace uhlíku v hloubce  $x_A = 5$  mm (bod A) a  $x_B = 10$  mm (bod B) pod nauhličeným povrchem je  $c_A = 1,2$   $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$   $c_B = 0,8$   $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ . Součinitel difúze uhlíku v  $\text{Fe}_\alpha$  je  $D_{\text{C(Fe } \alpha)} = 3,0 \cdot 10^{-11}$   $[\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ .

**Řešení:** Protože se jedná o určení difúzního toku, proto pro řešení použijeme rovnici pro určení difúzního toku (I. Fickův zákon):

$$J = -D \cdot \frac{\partial c(x)}{\partial x}$$

Dosazení do této rovnice:

$$J_{\text{C(Fe}\alpha)} = D_{\text{C(Fe}\alpha)} \cdot \frac{c_A - c_B}{x_A - x_B} = -(3,0 \cdot 10^{-11}) \cdot \frac{1,2 - 0,8}{5 \cdot 10^{-3} - 10 \cdot 10^{-3}} = 2,40 \cdot 10^{-9} [\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$$

#### Příklad č. 2

Stanovte součinitel difúze při svařování na tupo. Svařením na tupo byly spojeny dvě tyče, tyč č. 1 má  $c_{A1} = 0,4$  složky A, tyč č. 2 má  $c_{A2} = 0,5$  složky A.

Spojené tyče byly ohřáté na teplotu  $T$  a po dobu 40 hodin ochlazeny na pokojovou teplotu. Chemickým rozбором bylo zjištěno, že tyč č. 1 ve vzdálenosti  $x = 0,002$  m od fázového rozhraní  $c_A = 0,430$ . Určete součinitel difúze a teplotu  $T$ .

**Řešení:** Pro řešení použijeme II. Fickův zákon, resp. rovnici pro jeho řešení, která je ve tvaru:

$$c = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{2} \cdot [1 - \operatorname{erf}(z)], \text{ rovnici zapíšeme do formálního tvaru:}$$

$c_{AX} = c_{A1} + \frac{c_{A2} - c_{A1}}{2} \cdot [1 - \operatorname{erf}(z)]$ , do rovnice dosadíme příslušné hodnoty podle zadání a vyjádříme hodnotu  $\operatorname{erf}(z)$ :

$$\operatorname{erf}(z) = 1 - \frac{c_{AX} - c_{A1}}{c_{A2} - c_{A1}} = 1 - \frac{0,43 - 0,40}{0,50 - 0,40} = 1 - 0,6 = 0,4$$

Výpočtem bylo zjištěno, že  $\operatorname{erf}(z) = 0,4$ . Z tabulky 8.2 stanovíme, že  $z = 0,375$ . Hodnotu součinitele difúze  $D$  stanovíme na základě rovnice 8.8b (8.9b):

$$z = \left[ \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \right] \quad D = \frac{x^2}{4 \cdot z^2 \cdot t} = \frac{0,002^2}{4 \cdot 0,375^2 \cdot 40 \cdot 3600} = 4,94 \cdot 10^{-11} [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$$

### Příklad č. 3

Vypočtete absolutní teplotu  $T[\text{K}]$  při difúzi. Jsou-li zadané, vypočítané nebo v tabulkách nelezené tyto hodnoty:  $D = 4,94 \cdot 10^{-11} [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ , vypočítáno;  $D_0 = 2,0 \cdot 10^{-4} [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ , tj. frekvenční faktor nalezen v tabulkách pro difúzi;  $\Delta H_d = 241\,000 [\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}]$ , tj. aktivační energie, nalezeno v tabulkách difúze;  $R = 8,314 [\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$  plynová konstanta.

**Řešení:** Vycházíme z Arrheniovy rovnice (8.1):

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_d}{R \cdot T}\right)$$

Protože teplota  $T$  je ve jmenovateli exponentu, je nutno tuto rovnici pro řešení vhodně upravit - převést do logaritmického tvaru:

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{\Delta H_d}{R \cdot T} \cdot \ln e, \quad \ln e = 1;$$

$$T = \frac{-\Delta H_d}{(\ln D - \ln D_0) \cdot R}$$

$$T = \frac{-241000}{(\ln 4 \cdot 10^{-11} - \ln 2,0 \cdot 10^{-4}) \cdot 8,314} = 1905 \text{ K}$$

$$T = 1905 - 273 = 1632 \text{ } ^\circ\text{C}$$

**Příklad č. 4**

Vypočtete dobu  $t$  potřebnou pro cementaci nízkouhlíkové oceli s koncentrací  $c_0 = 0,22 \text{ hm.\% C}$ , teplota cementace je  $T = 930 \text{ }^\circ\text{C}$ , povrch této oceli bude vystaven působení nauhličující atmosféry, která vytvořila na syceném povrchu koncentraci  $c_1 = 1,3 \text{ hm.\% C}$ . Vypočítaná doba  $t$  je potřebná k získání požadované koncentrace uhlíku  $c = 0,76 \text{ hm.\% C}$  v hloubce  $x$  pod povrchem (pro  $x = 0,33 \text{ mm}$ ;  $0,47 \text{ mm}$  a  $0,74 \text{ mm}$ ).

V tomto případě, při teplotě  $930 \text{ }^\circ\text{C}$ , pracujeme s  $\text{Fe}\gamma$ , proto nejdříve musíme vypočítat součinitel difúze  $D_{\text{C (Fe } \gamma \text{)}}$  pro  $\text{Fe}\gamma$ . Frekvenční faktor  $D_0 \text{ C (Fe } \gamma \text{)} = 4,0 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  a  $\Delta H_{\text{d C (Fe } \gamma \text{)}} = 140000 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

**Řešení:** nejdříve vypočítáme součinitel difúze  $D$ , dále dobu  $t$  pro získání potřebné koncentrace v místech  $x$  pod povrchem.

Výpočet součinitele difúze  $D$ : při výpočtu vycházíme z Arrheniovy rovnice:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_d}{R \cdot T}\right)$$

$$D_{\text{C(Fe}\gamma\text{)}} = 4,0 \cdot 10^{-5} \cdot \exp\left(-\frac{140000}{8,314 \cdot 1203}\right) = 3,34 \cdot 10^{-11} [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$$

Výpočet doby  $t$  k získání potřebné koncentrace v místech  $x$  pod povrchem, využijeme II. Fickův zákon a rovnici pro jeho řešení:

$$\frac{c - c_0}{c_1 - c_0} = 1 - \operatorname{erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}}\right]$$

Po dosazení koncentrací a vypočítaného součinitele difúze ( $3,34 \cdot 10^{-11} [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$ )

$$\frac{0,76 - 0,22}{1,30 - 0,22} = 1 - \operatorname{erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{3,34 \cdot 10^{-11} \cdot t}}\right]; \quad 0,5 = 1 - \operatorname{erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{3,34 \cdot 10^{-11} \cdot t}}\right]; \quad \operatorname{erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}}\right] = 0,5;$$

Na základě výpočtu  $\operatorname{erf} = 0,5$  a křivky, viz obr. 8-6 lze stanovit, že argument:

$$\left[\frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}}\right] = 0,48$$

$$\text{Z tohoto vztahu lze vyjádřit čas } t: \quad 0,48 = \frac{0,00033}{2 \cdot \sqrt{3,34 \cdot 10^{-11} \cdot t}}$$

$$t = \left(\frac{0,00033}{2,5,77 \cdot 10^{-6} \cdot 0,48}\right)^2 = 3636 [\text{s}]$$

Pro dosažení koncentrace  $0,76 \text{ \% C}$  vrstvy pod povrchem  $0,33 \text{ mm}$  je třeba difúze po dobu cca  $3636 [\text{s}]$ .

Další hodnoty, které lze analogicky stanovit pro tuto cementaci jsou uvedeny v následující tabulce 8.3.

Tabulka 8.3 Vypočítané hodnoty pro cementaci, viz tento příklad

| <b>Výpočet doby t [s] potřebné pro získání koncentrace 0,76 % uhlíku při cementaci<br/>v různých vrstvách pod povrchem<br/>D = 3,34·10<sup>-11</sup> [m<sup>2</sup>·s<sup>-1</sup>]</b> |                                                           |                                                     |                   |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-------------------|
| Vrstva x pod povrchem [m]                                                                                                                                                               | $erf = \left[ \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \right]$ | $\left[ \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \right]$ | Čas cementace [s] |
| 0,00033                                                                                                                                                                                 | 0,5                                                       | 0,48                                                | 3636              |
| 0,00047                                                                                                                                                                                 | 0,5                                                       | 0,48                                                | 7377              |
| 0,00058                                                                                                                                                                                 | 0,5                                                       | 0,48                                                | 11235             |
| 0,00067                                                                                                                                                                                 | 0,5                                                       | 0,48                                                | 14547             |
| 0,00075                                                                                                                                                                                 | 0,5                                                       | 0,48                                                | 18768             |
| 0,00100                                                                                                                                                                                 | 0,5                                                       | 0,48                                                | 33397             |

### Příklad č. 5

Vypočtete koncentraci uhlíku při cementaci oceli (ČSN 14 020) v místě  $x = 1$  mm pod povrchem v době cementace  $t = 4$  hodiny. Teplota cementace je 930 °C. Jde o cementaci nízkouhlíkové oceli s koncentrací  $c_0 = 0,20$  hm. % C. V průběhu cementace je povrch oceli vystaven působení nauhličující atmosféry, která vytváří koncentraci  $c_1 = 1,2$  hm.% C. Vliv vzniklé difúzní vrstvy zanedbejte. V tomto případě, při teplotě 930 °C, pracujeme s  $Fe\gamma$ . Frekvenční faktor  $D_{0\text{ C (Fe } \gamma \text{)}} = 4,0 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  a  $\Delta H_{\text{d C (Fe } \gamma \text{)}} = 140000 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

**Řešení:** Nejdříve je nutno vypočítat součinitel difúze  $D_{\text{C(Fe}\gamma\text{)}}$  dle rovnice (8.1). Pak řešíme rovnici (8.6) při dosazení odpovídajících hodnot potřebných veličin. Čas 4 hod = 14 400 [s].

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_d}{R \cdot T}\right) \longrightarrow D_{\text{C(Fe}\gamma\text{)}} = 4,0 \cdot 10^{-5} \exp\left(-\frac{140000}{8,314 \cdot 1203}\right) = 3,34 \cdot 10^{-11} [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$$

$$\frac{c - c_0}{c_1 - c_0} = 1 - erf\left[\frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}}\right] \longrightarrow \frac{c(x,t) - 0,2}{1,2 - 0,2} = 1 - erf\left[\frac{0,001}{2 \cdot \sqrt{3,34 \cdot 10^{-11} \cdot \sqrt{14400}}}\right]$$

Je dosazeno do vztahu (8.6), avšak nyní ještě musíme určit hodnotu  $z$ , která se stanovuje z hodnot v hranaté závorce.

$$z = \left[ \frac{0,001}{2 \cdot \sqrt{3,34 \cdot 10^{-11} \cdot \sqrt{14400}}} \right] = 0,7209$$



K číslu  $z$  najdeme hodnotu **erf** ( $z$ ). Můžeme odečíst z grafu na obr. 8-6, ale to je nepřesné. Raději počítáme aproximací z hodnot v tabulce 8.2 takto:

**$z$                       erf ( $z$ )**

0,7000 ..... 0,6778

**0,7209 ..... erf ( $z$ )**

0,7500 ..... 0,7111

$$\frac{0,7209 - 0,7000}{0,7500 - 0,7000} = \frac{\text{erf}(z) - 0,6778}{0,7111 - 0,6778} \Rightarrow 0,4180 = \frac{\text{erf}(z) - 0,6778}{0,0333} \Rightarrow \text{erf}(z)$$

$$\text{erf}(z) = 0,4180 \cdot 0,0333 + 0,6778 = 0,6971$$

$$1 - \text{erf}(z) = 0,3029$$

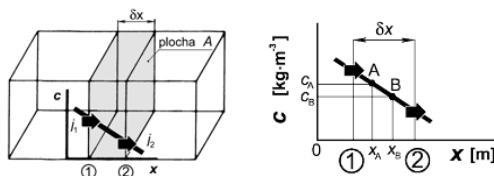
$$\frac{c_{(0,001,120)} - 0,20}{1,2 - 0,2} = 0,3029$$

$$c_{(0,001, 120)} = \mathbf{0,5029 \text{ hmot. \%}}$$

## 8.4 Úlohy k procvičení

### Úloha č. 1

Na tenkou desku z čistého železa, viz obr. 8-7, působí při dané teplotě  $T = 873 \text{ K}$  ( $600 \text{ }^\circ\text{C}$ ) z jedné strany uhlík bohatá nauhličující atmosféra ①, z druhé strany na uhlík chudá oduhličující atmosféra ②. Po ustálení procesu vypočítejte pro zadanou teplotu difúzní tok uhlíku  $J_{C(\text{Fe}\alpha)}$  deskou o jednotkové ploše  $A = 1 \text{ m}^2$  za jednotkový čas  $t = 1 \text{ s}$ , jsou-li okamžité objemové koncentrace uhlíku v hloubce  $x_A = 5 \text{ mm}$  a  $x_B = 10 \text{ mm}$  pod nauhličovaným povrchem  $c_A = 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  a  $c_B = 0,6 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ .



Obr. 8-7 Schéma podmínek difúze, viz úloha č.1

Pro výpočet použijte vztah  $J_{C(\text{Fe}\alpha)T} = -D_{C(\text{Fe}\alpha)T} \cdot \frac{c_A - c_B}{x_A - x_B}$

**Úloha č. 2**

Určete součinitel difúze uhlíku  $D_c$  v  $Fe_\alpha$  pro teploty 600, 625 a 650 °C (tj. 873, 898 a 923 K), je-li frekvenční faktor difúze pro  $Fe_\alpha$   $D_{0(C)} = 2,0 \cdot 10^{-6} \text{ [m}^2 \cdot \text{s}^{-1}\text{]}$ , aktivační energie  $\Delta H_{d(C)} = 84\,000 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ; plynová univerzální konstanta  $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

**Úloha č. 3**

Určete absolutní teplotu při difúzních procesech v  $Fe_\gamma$ , je-li součinitel difúze  $D_{C(Fe_\gamma)} = 3,34 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Frekvenční faktor  $D_{0C(Fe_\gamma)} = 4,0 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  a  $\Delta H_{dC(Fe_\gamma)} = 140\,000 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

**Úloha č. 4**

Nástrojová uhlíková ocel s obsahem uhlíku  $c_0 = 1,00 \text{ hm.\% C}$  omylem byla ponechána v peci při teplotě  $T = 930 \text{ °C}$  po dobu 3 hodin. Ohřevem došlo k nežádoucímu oduhličení povrchu oceli na koncentraci  $c_1 = 0,52 \text{ hm.\% C}$ . Vypočítejte hloubku vrstvy  $x$ , která bude muset být před následujícím tepelným zpracováním odbroušena, aby na povrchu oceli byla alespoň eutektoidní koncentrace uhlíku  $c = 0,76 \text{ hm.\% C}$ . Součinitel difúze  $D_{C(Fe_\gamma)} = 3,34 \cdot 10^{-11} \text{ [m}^2 \cdot \text{s}^{-1}\text{]}$ . Bude řešeno dle II. Fickova zákona (pro polonekonečný prostor – stav odsycení), jehož analytické řešení je s použitím rovnice (8.7).

## 9. LOMY KOVŮ

**Fraktografie** – *nauka o lomech* - latinského slova *fractus (lom)*. Fraktografie je součástí vědního oboru fyzikální metalurgie, která se zabývá příčinami vzniku lomů a jejich hodnocením.

**Morfologie lomů** (vzhled lomů, tvar lomů) každého lomu je podmíněna stavem materiálů (chemické složení, charakter struktury a substruktury) a podmínkami namáhání.

Dělení lomů v kovech je prováděno dle různých kritérií, např. *podle energie* potřebné ke vzniku lomové plochy rozlišujeme:

- *křehký lom* - nízká spotřeba energie na vznik lomové plochy,
- *houževnatý lom* - vysoká spotřeba energie na vznik lomové plochy.

### Mechanismy vzniku lomu

- 1) předchází-li lomu plastická deformace nebo přetvoření, pak mluvíme o *tvárném lomu*;
- 2) nepředchází-li lomu výrazná makroplastická deformace, pak se lom šíří po hranicích zrn nebo v krystalografických rovinách, pak mluvíme o *křehkém lomu*;

Podle mikromechanismu procesu porušování – vzniku lomové plochy (trhliny) a jejího přechodu vzhledem k hranicím zrn rozlišujeme:

- A) *transkrystalický štěpný lom*;
- B) *transkrystalický tvárný lom*;
- C) *interkrystalický štěpný lom*;
- D) *interkrystalický tvárný lom*;

Podle způsobu namáhání materiálu rozlišujeme porušení materiálu

- *silové* - vznikají při statickém anebo dynamickém jednorázovém zatížení, přičemž zatížení bylo obvykle vyšší než hodnota  $R_m$  daného materiálu;
- *únavové*, které vznikly při cyklickém zatížení materiálu s hodnotou zatížení většinou nižší, než je hodnota  $R_e$  daného materiálu. únavový lom je z hlediska morfologického a energetického *bezdeformační křehký lom* s minimální spotřebou energie na jeho vznik. Podle mikroskopického vzhledu má povrch únavového lomu typické žlábkování.
- *creepové* - které vznikly při namáhání materiálu za teplot obvykle vyšších než je teplota  $0,4 T_{TAV}$  daného materiálu.

## Lomy podle typu materiálu

*Čisté kovy* – s největší pravděpodobností lomu vždy bude předcházet plastická deformace, tím lze předpokládat, že lom bude *houževnatý*;

*Slitiny kovů* – závisí na typu slitiny, pokud obecně dochází k zablokování dislokací, pak lom bude *křehký* (např. zvonovina).

*Kovové materiály* – které krystalují s mřížkou FCC, nejsou závislé na přechodové teplotě (nerozhoduje teplota), lom bude s největší pravděpodobností *houževnatý*.

*Kovové materiály* – např. Fe  $\alpha$ , které krystalují s mřížkou BCC, jsou závislé na přechodové teplotě (rozhoduje teplota); při nízké teplotě bude lom křehký. O typu lomu rozhoduje rychlost zatěžování, napjatost (tloušťka stěny, vruby). naopak při vysoké teplotě cca 650 °C lom bude s největší pravděpodobností *houževnatý*.

Změna charakteru lomu vlivem poklesu teploty se označuje pojmem *tranzitní lomové chování* a teplota přechodu se označuje *tranzitivní teplota*

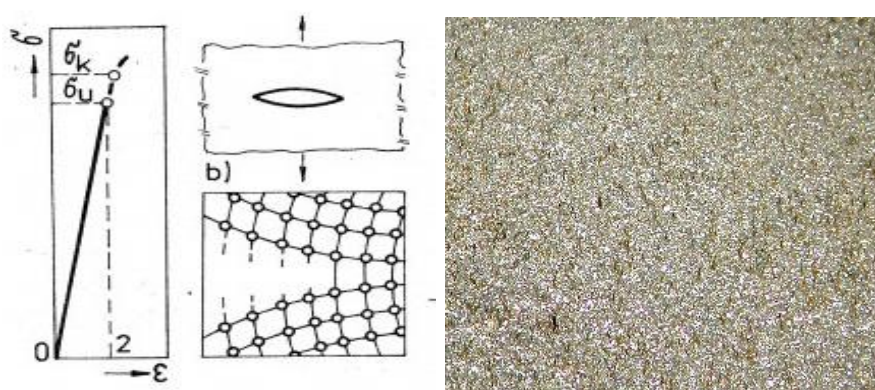
*Kovové materiály*, které krystalují s mřížkou HCP, jsou závislé na přechodové teplotě (rozhoduje teplota), protože jde o materiály, které mají malý počet kluzových rovin, proto lom bude zpravidla křehký. Pouze za vyšší teploty je možné vyvolat plastickou deformaci a lom bude *houževnatý*.

### 9.1 Charakteristika lomů v kovech vzniklých na základě síly

Dosud není v odborné literatuře zavedena jednotná klasifikace lomů, proto je možno uvést základní typy lomů.

#### 9.1.1 Křehký lom

*Křehký lom (štěpný), faktograficky je to štěpný lom*, probíhá při napětí, které je blízké mezi pružnosti, bez zřetelné plastické deformace, viz obr. 9-1.



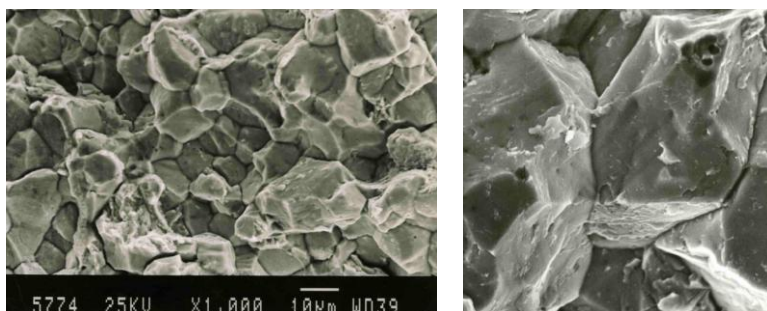
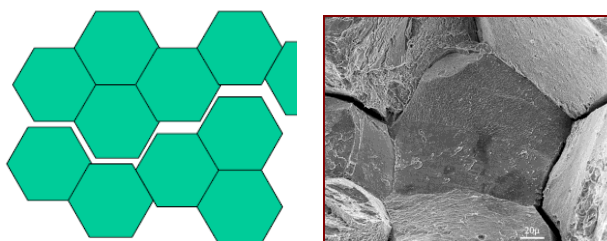
Obr. 9-1 Schéma vzniku křehkého lomu a struktura křehkého lomu [48]

Z hlediska fraktografie se vyskytují tři typy křehkých lomů:

- a) *štěpný lom* – probíhá přes zrna (interkrystalicky) po přesně definovaných krystalografických plochách;
- b) *vláknitý lom* – probíhá rovněž přes zrna a je doprovázen malou plastickou deformací, vyskytuje se u jemných materiálů;
- c) *mezikrystalický lom* – vzniká spojením trhlinek, které vznikly na rozhraní zrn.

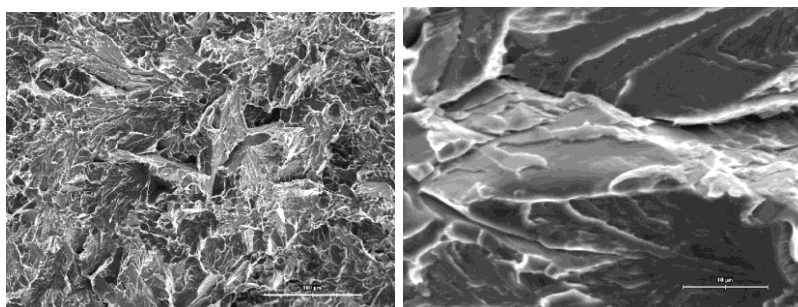
**Poznámka:** Někdy se vyskytují i všechny tři typy těchto lomů současně.

Na obr. 9-2 je uveden štěpný lom interkrystalický a na obr. 9-3 je štěpný transkrystalický lom.



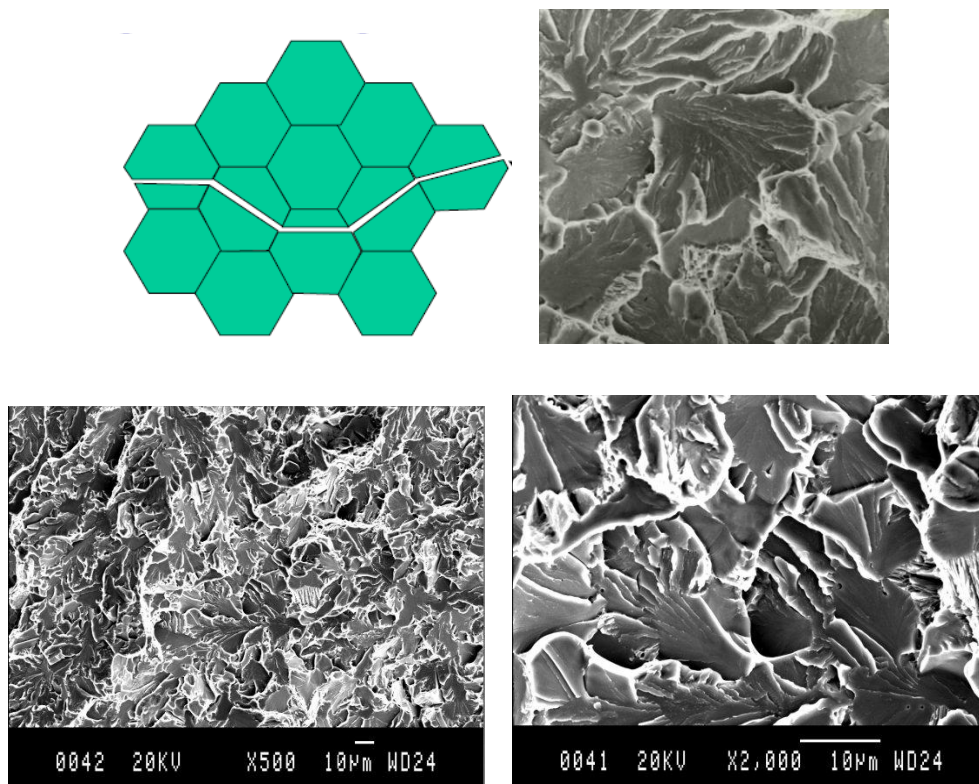
Obr. 9-2 Štěpný interkrystalický lom [46], [49]

Na obr. 9-3 je transkrystalické křehké porušení lamelárního perlitu oceli ČSN 12 060, fazety transkrystalického křehkého štěpení s jazýčkovými stupni.



Obr. 9-3 Transkrystalické křehké porušení oceli 12 060 při teplotě 20°C [48]

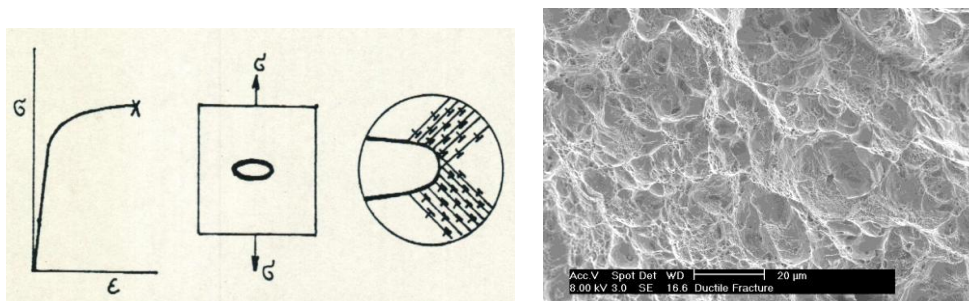




Obr. 9-4 Štěpný transkrystalický lom [46]

### 9.1.2 Houževnatý lom

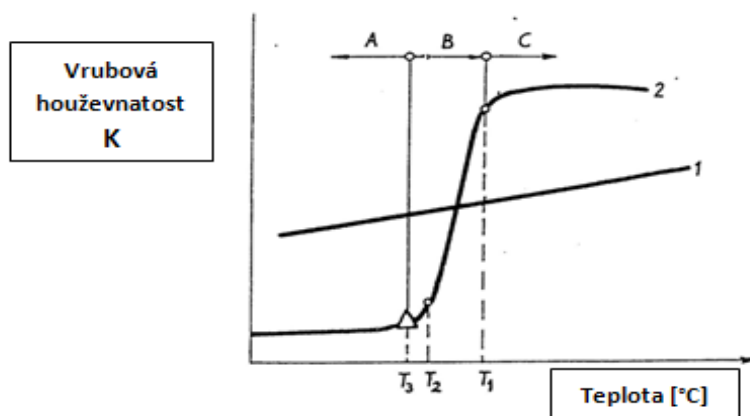
*Houževnatý lom (tvárný)*, faktograficky je to tvárný lom, nastává po předchozí plastické deformaci, viz obr. 9-5, zpravidla bývá doprovázen vznikem lokálního zúžení materiálu. Lom je iniciován ve střední partii zúžené plochy, např. *zkušební tyče*, a šíří se v rovině, přibližně kolmo na směr tahového namáhání. V určité vzdálenosti od povrchu tyče se charakter lomu mění, lom probíhá dále ve směru největší smykové složky napětí, přibližně pod úhlem  $45^\circ$  k ose tyče a má charakter smykového lomu. Rovněž tyto lomy na reálných tělesech jsou často kombinovány s jinými druhy a typy lomů.



Obr. 9-5 Schéma vzniku houževnatého (tvárného) lomu, houževnatý lom [48]

Houževnatý lom – vzniká u kovů a jejich slitin, které krystalizují s krystalickou mřížkou FCC, jako je např. hliník, austenitické ocele, atd. dochází pouze k houževnatému porušení.

Kombinace možnosti vzniku houževnatého a křehkého lomu je možná u kovů a jejich slitin, které krystalizují s krystalickou mřížkou BCC, jako např. feritické uhlíkové ocele, může dojít, jak ke křehkému, tak i k houževnatému porušení. Na obr. 9-6 je schéma závislosti rázové houževnatosti na teplotě pro *hliník*, viz přímka 1, pro *feritickou uhlíkovou ocel*, křivka 2. Křivka 2, při nižší teplotě, než je  $t_3$  (oblast A) vzniká *křehký lom*. Naopak od teploty, která je vyšší než je  $t_1$ , (oblast C) vzniká *houževnatý lom*. V oblasti mezi těmito teplotami (oblast B), má část lomové plochy charakter křehkého lomu a část houževnatého. Teplota  $t_2$  je tzv. přechodová neboli tranzitní teplota, od které směrem k vyšším teplotám prudce narůstá potřeba energie na vznik lomové plochy.



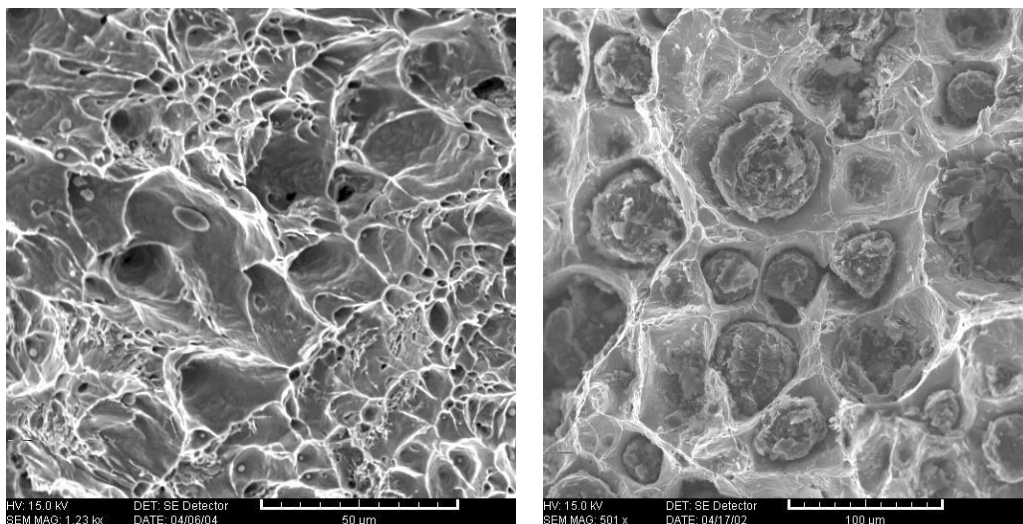
Obr. 9-6 Schéma závislosti rázové houževnatosti na teplotě 1 - hliník, 2 - feritická uhlíková ocel

Na obr. 9-7 jsou uvedeny makroskopické struktury, které odpovídají oblastem (A,B,C), viz obr. 9-6.



Obr. 9-7 Makroskopické struktury křehkého, smíšeného a tvárného lomu oceli ČSN 12 060 [48]

Na obr. 9-8 je tvárné porušení (tvárný lom). Pro tvárný lom je typická jamková struktura (morfologie) lomu. Jamková morfologie lomu je typická např. pro měkkou ocel (vlevo), tvárnou litinu (vpravo).



Obr. 9-8 Typická jamkovitá struktura tvárného lomu (vlevo – měkká ocel, vpravo - litina s kuličkovým grafitem a feritickou matricí), podle [47]

### 9.1.3 Adiabatický stříhový lom

*Adiabatický stříhový lom*, jeho vznik není tak typický, nastává při namáhání, které působí velkou rychlost. Stříhová deformace se lokalizuje v úzkých oblastech materiálu. V těchto oblastech materiálu dochází k pohlcení celkové energie, což vyvolává výrazné zvýšení teploty v této malé oblasti materiálu, nastává pokles mechanických hodnot.

V oblasti adiabatického stříhu se proto vyskytují strukturní složky, které vznikly rozpadem původních struktur v důsledku zvýšené teploty.

***Poznámka:*** Z praktického hlediska má význam hodnocení základních charakteristik křehkých lomů, dále sledování podmínek způsobujících přechod lomu tvárného na lom křehký, protože křehké lomy jsou příčinou mnoha vážných havárií.

## 9.2 Únavový lom

*Únavový lom* je bez deformační lom s minimální spotřebou energie na porušení materiálu.

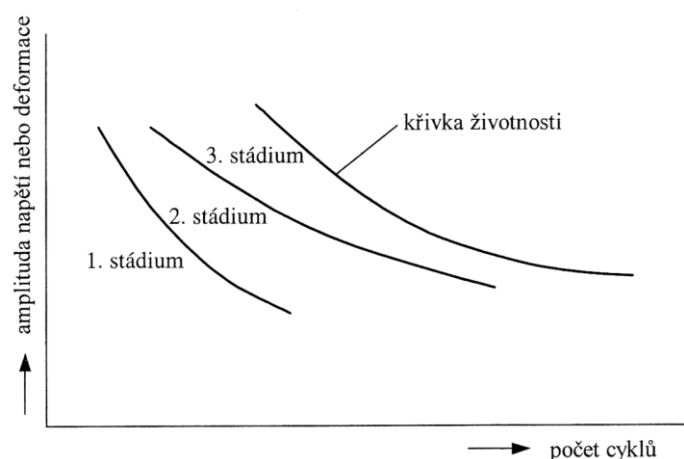
Vyazuje poměrně hladkou větší část lomové plochy (2/3) s viditelným místem prvního zárodku lomu (ohniska) a se zřetelnými pásmy postupu lomu.



Další část lomové plochy cca (1/3) vzniká konečným dolomením, podle typu materiálu a způsobu dolomení, má většinou hrubozrnnější charakter se známkami plastické deformace.

Rozlišují se 3 stádia procesu únavového poškození, viz obr. 9-9.

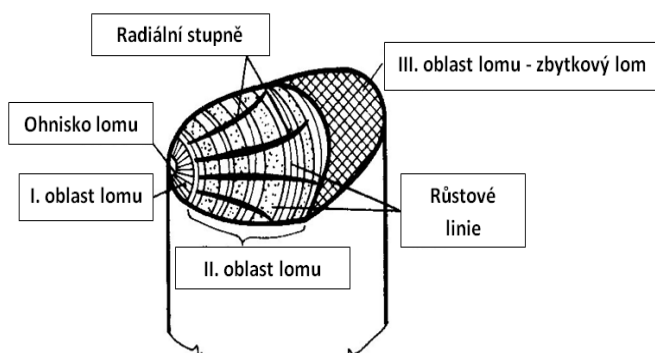
1. stádium - změny mechanických vlastností;
2. stádium - vzniku únavových trhlin;
3. stádium - šíření únavových trhlin, křivka životnosti materiálu.



Obr. 9-9 Stádia únavového poškození kovů [47]

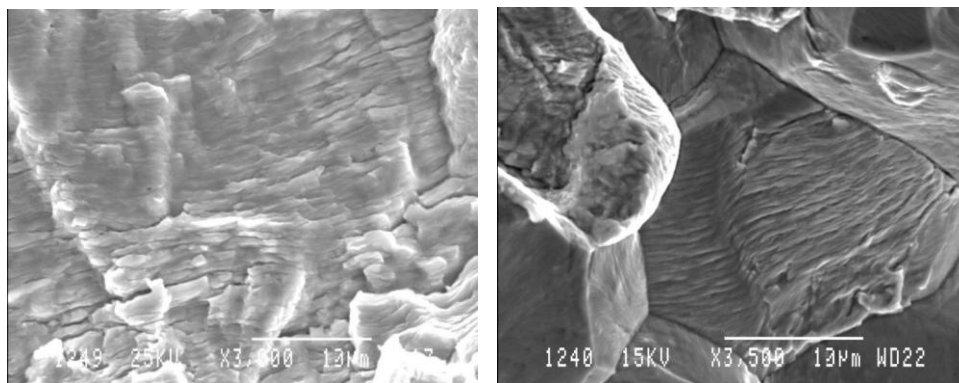
*Únavový lom* je bez deformační křehký lom s minimální spotřebou energie na porušení materiálu. Lomová plocha obsahuje 3 významné oblasti, viz obr. 9-10:

- I. oblast je oblastí iniciace únavového porušení, je totožné s oblastí ohniska lomu;
- II. oblast je únavová oblast lomu, je relativně hladká, obsahuje čáry růstových linií (1. retardační – odpočinkové, postupové čáry) a čáry 2. radiálních stupňů;
- III. oblast – oblast zbytkového lomu.



Obr. 9-10 Charakter únavové lomové plochy [46], [47]

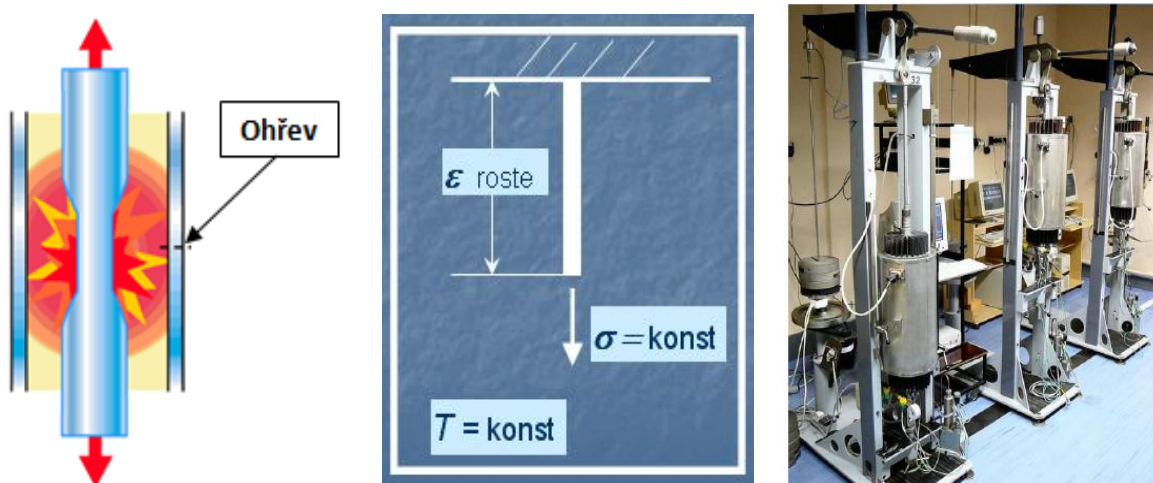
**Morfologie únavového lomu**, viz obr. 9-11, na lomu se objevují žlábký (striace), které snadno zjistitelné u tvárných materiálů (měkké oceli, slitiny hliníku, atd.). U jiných materiálů je jejich výskyt jen v určitých oblastech nebo zanikají v morfologii povrchu. Šířka žlábků přibližně odpovídá rychlosti šíření trhliny, významný je vliv struktury, která může být rozdílná v sousedních zrnech.



Obr. 9-11 Morfologie únavového lomu [47]

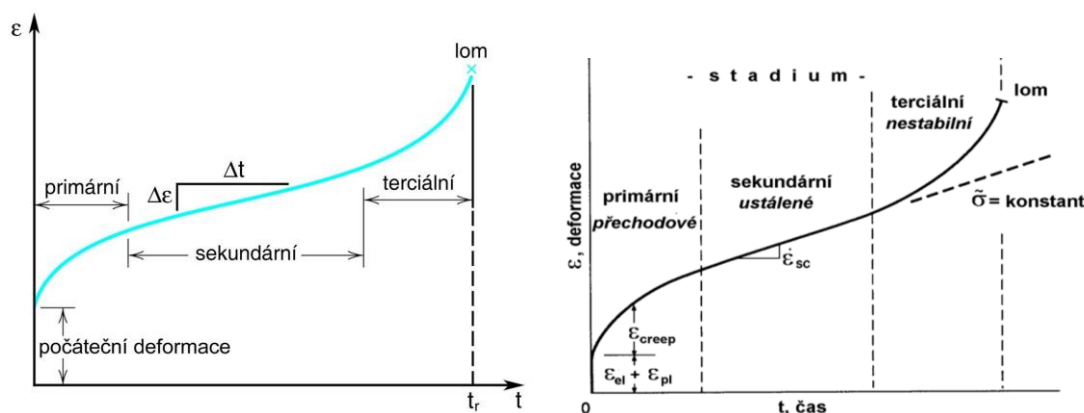
### 9.3 Creepové porušení materiálu

**Creep** (čti kríp = tečení) - je časově závislá trvalá deformace, ke které dochází za vysokých teplot ( $T > 0,4 \cdot T_{TAV}$ ) při konstantním zatížení nebo konstantním napětí nižším než je napětí na mezi kluzu. Na obr. 9-12 je uvedeno schéma zkoušky.



Obr. 9-12 Schéma creepové zkoušky a zařízení pro vykonání zkoušky [46]

**Křivka tečení** – creepová křivka, viz obr. 9-13, je závislost poměrného prodloužení  $\varepsilon$  a času  $t$ , získaná na základě výsledků série creepových zkoušek pro konkrétní napěťové a teplotní podmínky.



Obr. 9-13 Schéma křivky tečení kovů [46]

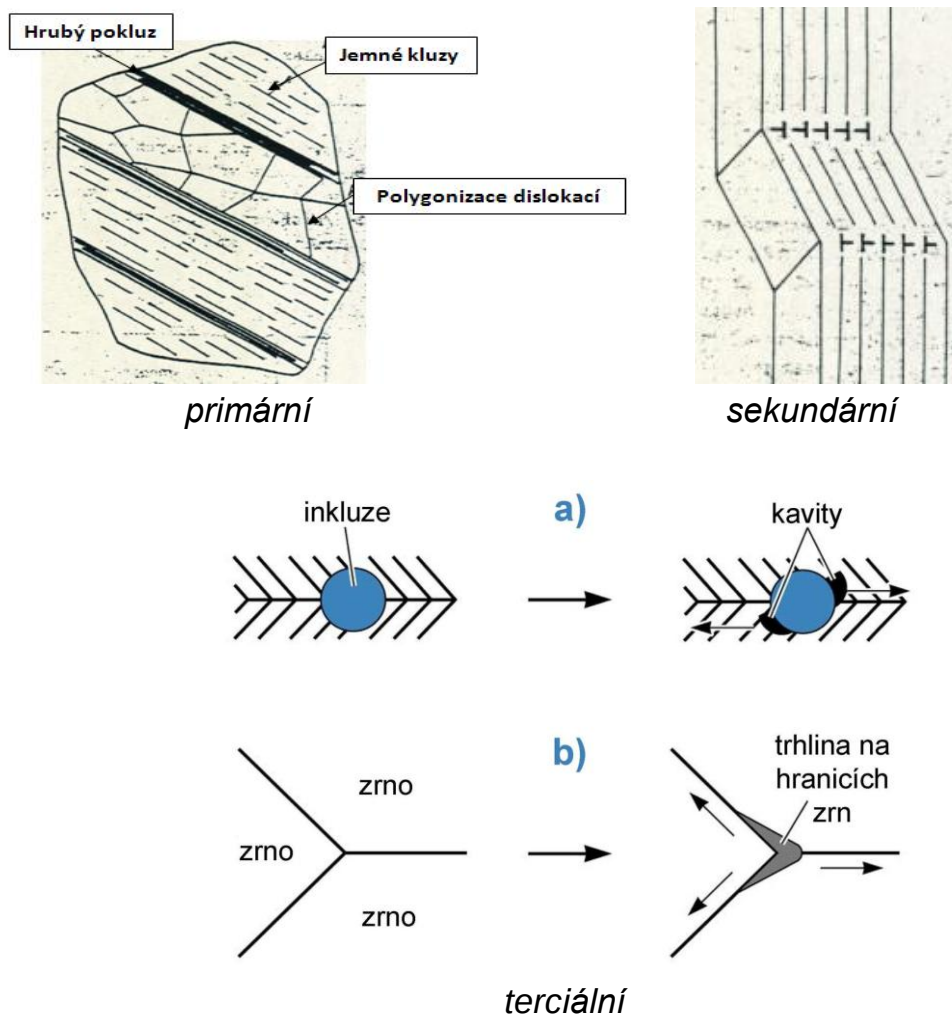
Z křivky na obr. 9-13 jsou patrná tři stádia tečení materiálu:

**Primární**, přechodové stádium, dochází k deformačnímu zpevňování, je pokles rychlosti tečení. Dislokace se dávají do pohybu a jsou postupně blokovány překážkami, avšak šplháním dislokace překážky obcházejí. Zrna se deformují tzv. hrubým *podkluzem*.

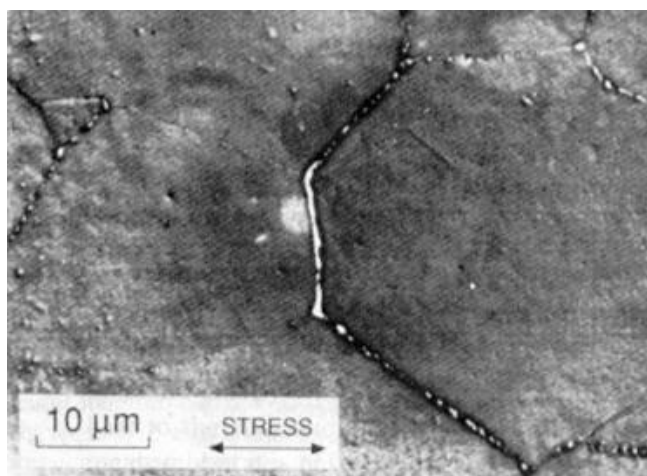
**Sekundární**, tzv. ustálený creep, v tomto stadiu se určuje rychlost creepu ( $\dot{\varepsilon}$ ). V objemu zrna vznikají v pásech tzv. *klink bands*, které vznikají v důsledku zablokování kluzů, dislokace se kumulují a řada dislokací opačných znamének vytváří rozhraní těchto pásem. Tím dochází k ustavení rovnováhy mezi blokováním a šplháním dislokací. Zrna materiálu se natáčí a dochází jejich markantnímu posuvu

**Terciální**, tzv. nestabilní creep dochází ke vzniku lokálních poruch soudržnosti materiálu na hranicích zrn (kavity, trhliny). Při nižších teplotách může na zkušební tyči začínat vznikat krček, napětí narůstá, rychlost deformace se zvyšuje až dojde ke konečnému lomu.

Na obr. 9-14 je schéma materiálových vlastností během primární, sekundární a terciální oblasti creepu.



Obr. 9-14 Schéma materiálových procesů během primárního, sekundárního a terciálního creepu



Obr. 9-15 Prokluzy po hranicích zrn – vznik kavit [46]

**Typy lomů při creepu** (tečení) - z hlediska typů *creepových lomů* hovoříme o tvárném a křehkém lomu.

*Tvárný creepový lom* - k němu dochází při relativně nízkých teplotách, rychlost creepu je poměrně vysoká - krátký čas do lomu. Před porušením se na zkušební tyči *vytváří krček*, v okolí lomové plochy jsou zrna protáhlá ve směru tahového namáhání. Ve struktuře porušeného tělesa *tvárným creepovým lomem* je řada dutin, které nemají žádný vztah k lomu.

*Křehký creepový lom* - vzniká za vyšších teplot a doba do lomu je poměrně dlouhá. Na porušeném zkušebním tělese není patrný krček. V okolí lomu jsou rovnoosá zrna. K lomu dochází vznikem trhlin *na styku tří hranic* případně kavit v okolí částic na hranicích zrn.

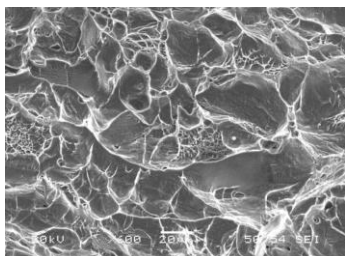
## 9.4 Úlohy k procvičení

### Úloha č. 1

Charakterizujte podmínky pro vznik křehkého a houževnatého lomu. Jaké mikroskopické metody byste použili pro dokumentování lomových ploch.

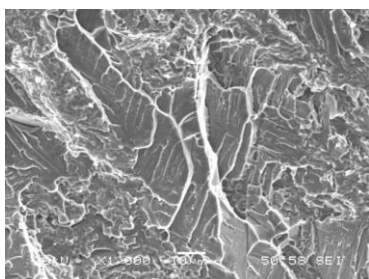
### Úloha č. 2

Určete, zda-li lomová plocha na přiloženém obrázku podle [53], odpovídá křehkému nebo houževnatému materiálu?



### Úloha č. 3

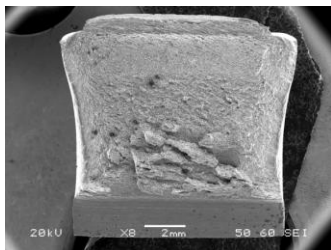
Určete, zda-li lomová plocha na přiloženém obrázku podle [53], odpovídá křehkému nebo houževnatému materiálu?



### Úloha č. 4

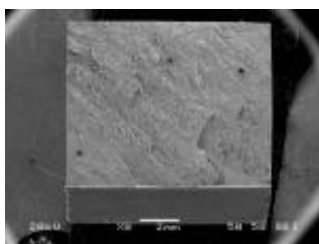
Na obrázku podle [53] je přeražený zkušební vzorek pro vrubovou houževnatost, určete, zda-li část vzorku s lomovou plochou na přiloženém

obrázku (zvětšení, viz obr.), odpovídá křehkému nebo houževnatému materiálu?



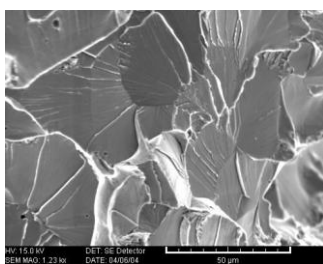
### Úloha č. 5

Na obrázku podle [53] je přeražený zkušební vzorek pro vrubovou houževnatost, určete, zda-li část vzorku s lomovou plochou na přiloženém obrázku (zvětšení, viz obr.), odpovídá křehkému nebo houževnatému materiálu?



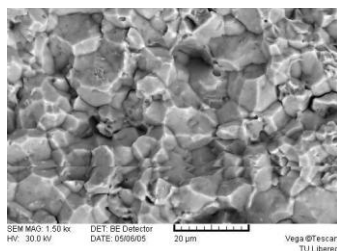
### Úloha č. 6

Určete, zda-li lomová plocha na přiloženém obrázku podle [47], odpovídá křehkému nebo houževnatému materiálu?



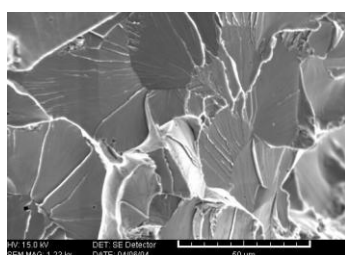
### Úloha č. 7

Určete, zda-li lomová plocha na přiloženém obrázku podle [47], odpovídá křehkému transkrystalickému porušení nebo křehkému interkrystalickému porušení?



### Úloha č. 8

Určete, zda-li lomová plocha na přiloženém obrázku podle [47], odpovídá křehkému transkrystalickému porušení nebo křehkému interkrystalickému porušení?



## 10. VYBRANÉ VLASTNOSTI KOVŮ

### 10.1 Fyzikální vlastnosti kovů

**Hustota** - je charakteristickou vlastností každého kovu. Je dána poměrem hmotnosti  $m$  k objemu  $V$  homogenní látky, v našem případě kovu nebo slitiny kovů při určité teplotě. Hustota kovů a jejich slitin se nechá stanovit orientačně výpočtem, pokud má těleso pravidelný geometrický tvar. Pak je možné určit jeho objem  $V$  přímým výpočtem z jeho rozměrů a jeho hmotnost  $m$  lze určit jeho zvážení. Jak je obecně známo, hustota je pak dána vztahem:

$$\rho = \frac{m}{V}, \quad (10.1)$$

kde značí:  $m$  - hmotnost kovu [kg];  $V$  - objem kovu [ $\text{m}^3$ ].

Velikost hustoty kovů závisí na atomové stavbě a na poloze kovu v periodické soustavě prvků. Hustotu kovů lze vyjádřit na základě rovnice:

$$\rho = \frac{A_r \cdot n}{V_B \cdot N_A} [\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}], \quad (10.2)$$

kde značí:  $A_r$  - relativní atomovou hmotnost kovu;  $n$  - počet atomů připadající na základní buňku daného kovu;  $V_B$  - objem krystalické buňky daného kovu.  $N_A$  – Avogadrovu konstantu  $6,023 \cdot 10^{23} [\text{mol}^{-1}]$ .

Kovy získané průmyslovou výrobou mají hustotu menší než je ideální předpoklad získaný na teoretickém základě. To je díky tomu, že technické materiály obecně, kovy nevyjímaje, obsahují vždy nedokonalosti pocházející z výrobního procesu, např. mikroskopické nebo i makroskopické póry, vměstky nebo nečistoty, které jsou lehčí než vlastní kov. Například lité kovy mohou mít hustotu až o 3 % menší než kovy hutné, což se docílí zpravidla tvářením. Hustota různých kovů bývá v širokém rozmezí. Na základě hustoty lze technicky používané kovy rozdělit do tří skupin: lehké kovy s hustotou 1700 až 4500 [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ], kam se řadí hořčík, hliník a titan. Další jsou kovy s hustotou 7000 až 9000 [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ], kam patří např. zinek, železo, nikl, měď. Poslední skupinou jsou kovy s větší hustotou než je 10 000 [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ], sem se řadí zlato, olovo a wolfram, nejtěžším kovem iridium (22 400  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ).

Další metodou pro určení hustoty je tzv. hydrostatická metoda. Zde využíváme možnost zjištění hmotnosti kovu klasickým zvážením (což se také označuje



jako metoda vážení na vzduchu), dostaneme hmotnost  $m_n$ . Dále ještě kov zvážíme ve vodě (na hydrostatických vahách) a získáme hmotnost  $m_{nh}$ .

Hmotnost  $m_{nh}$  je hmotnost kovu zvážena v kapalině hustoty  $\rho_v$ , pak  $\Delta m = m_n - m_{nh}$  je hmotnost kapaliny vytlačeného objemu  $V$  sledovaného kovu. Jestliže hustota vzduchu je  $\rho_z$ , pak pro vážení na vzduchu a vážení ve vodě platí rovnice:

$$V \cdot (\rho_n - \rho_v) = m_n \cdot \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_z}\right), \quad (10.3)$$

$$V \cdot (\rho_n - \rho_v) = m_{nh} \cdot \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_z}\right), \quad (10.4)$$

Po úpravách a zanedbáním korekce ve vakuu rovnic (10.3) a (10.4) pro hustotu kovu získáme vztah:

$$\rho_n = \frac{m_n}{m_n - m_{nh}} \cdot \rho_v, \quad (10.5)$$

kde značí:  $\rho_n$  - hustotu sledovaného kovu [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ];  $m_n$  - hmotnost kovu stanovená vážením na vzduchu [kg];  $m_{nh}$  - hmotnost kovu stanovená vážením ve vodě [kg];  $\rho_v$  - hustotu vody (hustota destilované vody je  $1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , hustota pitné vody bývá  $1110 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ).

V tabulce 10.1 jsou uvedeny hodnoty hustoty vybraných kovů, které se nejvíce uplatňují v metalurgii.

Tabulka 10.1 Hustoty vybraných kovů

| Kov             | Hustota [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ] |
|-----------------|---------------------------------------------|
| <b>Železo</b>   | 7 860                                       |
| <b>Hliník</b>   | 2 700                                       |
| <b>Hořčík</b>   | 1 740                                       |
| <b>Zinek</b>    | 7 140                                       |
| <b>Olovo</b>    | 11 300                                      |
| <b>Měď</b>      | 8 930                                       |
| <b>Nikl</b>     | 8 940                                       |
| <b>Titan</b>    | 4 500                                       |
| <b>Molybden</b> | 10 200                                      |
| <b>Wolfрам</b>  | 19 200                                      |

**Teplota tání a tuhnutí** - je to teplota, při níž kov nebo slitina kovů mění skupenství. Závisí rovněž na vnitřní stavbě kovu. Znalost této teploty je důležitá pro slévárenství, svařování, pokovování, apod. Čisté kovy se taví při konstantní teplotě. Některé slitiny kovů, sklo, keramické látky apod., přecházejí se stoupající nebo klesající teplotou z jednoho skupenství do druhého

pozvolna, nejčastěji v intervalu teplot. Proto je nutno uvádět teplotní rozsah (interval) tavení nebo tuhnutí. Teplota tání vybraných kovů je charakterizována v kapitole 4.

## 10.2 Tepelné vlastnosti kovů

**Měrná tepelná kapacita** - je množství tepla potřebného k ohřátí 1 kilogramu látky, v tomto případě kovu, aby se zvýšila jeho teplota o 1 teplotní stupeň (1 Kelvin nebo 1 stupeň Celsia). Ve starší literatuře se měrná tepelná kapacita označovala jako měrné teplo nebo specifické teplo. Měrná tepelná kapacita je mírně teplotně závislá, proto je nutné u přesnějších hodnot uvádět, k jaké teplotě látky se vztahuje. U kovů jsou hodnoty měrné tepelné kapacity poměrně nízké. Je-li hodnota měrné tepelné kapacity vysoká, pak látka se velmi pomalu zahřívá a také velmi pomalu chladne. Díky tomu, že kovy mají nižší hodnoty měrné tepelné kapacity, viz tabulka 10.3, zahřívají se a také chladnou poměrně rychle.

**Délková a objemová roztažnost**, délková resp. teplotní roztažnost, jedná se o zvětšení délky nebo zvětšení objemu vlivem zvýšení teploty látky. Je vztažena na počáteční délku nebo objem. Teplotní součinitel délkové roztažnosti a objemové roztažnosti je změna délkové nebo objemové jednotky při změně teploty o 1 K. Např. u odlitků, spékáných materiálů, atd., se naopak musí počítat se smršťivostí, která je opakem teplotní roztažnosti. Se vzrůstající teplotou se většina kovů roztahuje, což je dáno většími amplitudami atomů při kmitání. Teplotní součinitel délkové roztažnosti závisí na poloze prvku v periodické soustavě. Sledujeme-li změny délky kovů v závislosti na teplotě, zjistíme, že růst délky s rostoucí teplotou je přibližně **lineární**.

Střední hodnotu teplotní roztažnosti lze určit:

$$\overline{\alpha_l} = \frac{1}{l_0} \cdot \frac{\Delta l}{\Delta T} = \frac{1}{l_0} \cdot \frac{l_1 - l_0}{T_1 - T_0}, \quad (10.6)$$

kde značí:  $l_0$  - původní délku kovu;  $l_1$  - délku kovu při teplotě  $T_1$ ;  $T_0$  - počáteční teplotu kovu;  $T_1$  - teplota při které se kov prodloužil na délku  $l_1$ .

V rovnici (10.6) rozdíl  $l_1 - l_0 = \Delta l$ . Hodnoty teplotní roztažnosti vybraných kovů jsou uvedeny v tabulce 10.2.

V technické praxi je prokázána souvislost mezi teplotou tání daného kovu a teplotní roztažností kovu. Souvislost mezi teplotou tání kovů a teplotní roztažností souvisí s vazebnými silami příslušného kovu. Má-li kov silné strukturní vazebné síly, pak se špatně taví, což vede k jeho poměrně vysoké teplotě tání. Silné vazebné síly současně také nedovolí, aby kov vykazoval

vysokou hodnotu teplotní roztažnosti. Příkladem je např. wolfram (teplota tání je 3 422 °C, součinitel teplotní roztažnosti je  $4,5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ , součin těchto hodnot činí  $1,6 \cdot 10^{-2}$ ).

Tabulka 10.2 Hodnoty součinitele teplotní roztažnosti, teploty tání, hodnoty součinu teploty tání a teplotní roztažnosti vybraných kovů

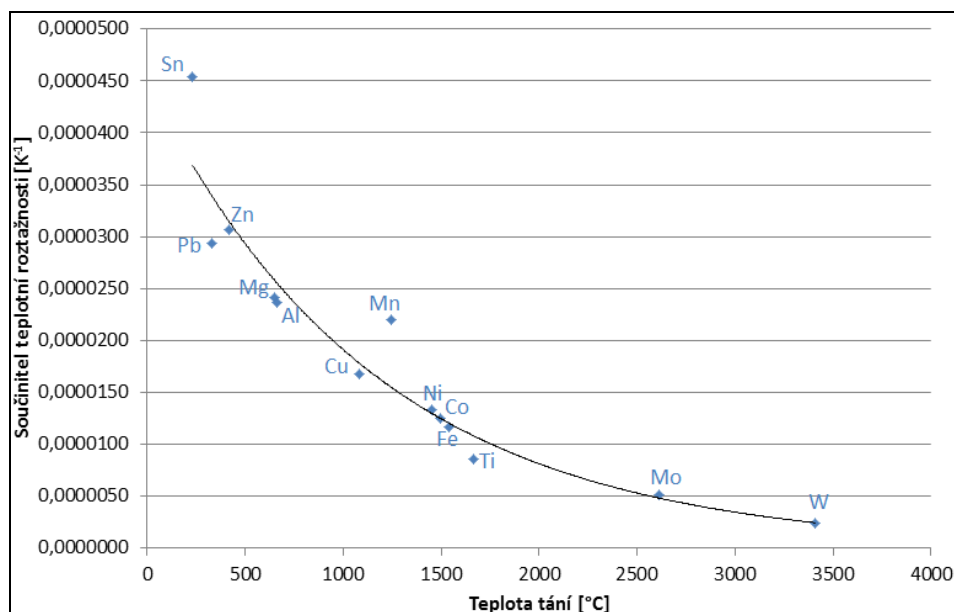
| Kov      | Součinitel teplotní roztažnosti $\alpha \text{ [K}^{-1}\text{]}$ | Teplota tání $T_t \text{ [}^\circ\text{C}\text{]}$ | Součin teplotní roztažnost a teploty tání ( $\alpha_t \cdot T_t$ ) |
|----------|------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|
| Železo   | $11,7 \cdot 10^{-6}$                                             | 1 539                                              | $2,1 \cdot 10^{-2}$                                                |
| Hliník   | $24,9 \cdot 10^{-6}$                                             | 660                                                | $2,3 \cdot 10^{-2}$                                                |
| Hořčík   | $26,0 \cdot 10^{-6}$                                             | 650                                                | $2,3 \cdot 10^{-2}$                                                |
| Zinek    | $30,7 \cdot 10^{-6}$                                             | 420                                                | $2,1 \cdot 10^{-2}$                                                |
| Měď      | $17,2 \cdot 10^{-6}$                                             | 1 083                                              | $2,3 \cdot 10^{-2}$                                                |
| Nikl     | $13,3 \cdot 10^{-6}$                                             | 1 453                                              | $2,3 \cdot 10^{-2}$                                                |
| Titan    | $8,0 \cdot 10^{-6}$                                              | 1 668                                              | $1,5 \cdot 10^{-2}$                                                |
| Molybden | $4,6 \cdot 10^{-6}$                                              | 2 610                                              | $1,3 \cdot 10^{-2}$                                                |
| Wolfram  | $2,5 \cdot 10^{-6}$                                              | 3 422                                              | $0,9 \cdot 10^{-2}$                                                |

**Poznámka:** Do součinu ( $\alpha_t \cdot T_t$ ) se dosazuje teplota ve stupních Kelvina.

Většina kovů leží v úzkém pásmu, pro který platí vztah:

$$\alpha_t \cdot T_t = (1,5 \text{ až } 2,2) \cdot 10^{-2} . \quad (10.7)$$

Na obr. 10 - 1 je uvedena souvislost mezi teplotou tání a teplotní roztažností kovů.



Obr. 10 - 1 Souvislost mezi teplotou tání kovů a jejich teplotní roztažností

**Tepelná vodivost** - je to schopnost přenášet tepelnou energii, tj. kinetickou energii neuspořádaného tepelného pohybu od atomu k atomu vedením (bez přenášení látky). Ohřejí-li se atomy v jednom místě, zvětší se jejich rozkmit a rozkmitávají i atomy sousední, protože mezi atomy působí vazební síly - to se projevuje jako vedení tepla. Tepelná vodivost vyjadřuje kolik tepla projde stěnou za jednotku času (1 sekundu), je-li rozdíl teplot mezi vstupní a výstupní plochou stěny. Nejlepším vodičem tepla je stříbro. Tepelná vodivost ostatních kovů se často zjišťuje porovnáním s tepelnou vodivostí stříbra a udává se v procentech. Nekovové materiály mají tepelnou vodivost 10 až 100 krát nižší než kovové konstrukční materiály. Velká tepelná vodivost kovů je dána volnými vodivostními elektrony. Protože u kovů má jejich dobrá tepelná i elektrická vodivost společnou příčinu, tj. přítomnost volných elektronů, mají oba tyto druhy vodivosti úzký vzájemný vztah.

Tepelná vodivost je konstantou úměrnosti stacionárních tepelných dějů.

**Teplotní vodivost** - je mírou tepelných nestacionárních dějů. Lze ji vypočítat:

$$a = \frac{\lambda}{c \cdot \rho}, \quad (10.8)$$

kde značí:  $\lambda$  - teplotní vodivost [ $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ];  $c$  - měrnou tepelnou kapacitu [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ];  $\rho$  - hustotu [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ].

V tabulce 10.3 jsou uvedeny hodnoty tepelné a teplotní vodivosti a měrné tepelné kapacity vybraných kovů.

Tabulka 10.3 Hodnoty teplotní, tepelné vodivosti a měrné tepelné kapacity vybraných kovů

| Kov             | Teplotní vodivost<br>[ $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ] | Měrná tepelná<br>kapacita<br>[ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ] | Teplotní vodivost<br>[ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ] |
|-----------------|-----------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|
| <b>Železo</b>   | 80,2                                                                        | 452                                                                                  | $2,3 \cdot 10^{-5}$                                       |
| <b>Hliník</b>   | 237,0                                                                       | 896                                                                                  | $9,8 \cdot 10^{-5}$                                       |
| <b>Hořčík</b>   | 156,0                                                                       | 1 020                                                                                | $8,8 \cdot 10^{-5}$                                       |
| <b>Zinek</b>    | 116,0                                                                       | 385                                                                                  | $4,2 \cdot 10^{-5}$                                       |
| <b>Měď</b>      | 386                                                                         | 383                                                                                  | $1,1 \cdot 10^{-5}$                                       |
| <b>Nikl</b>     | 90,9                                                                        | 448                                                                                  | $2,3 \cdot 10^{-5}$                                       |
| <b>Titan</b>    | 21,9                                                                        | 520                                                                                  | $9,4 \cdot 10^{-5}$                                       |
| <b>Molybden</b> | 138                                                                         | 251                                                                                  | $5,4 \cdot 10^{-5}$                                       |
| <b>Wolfram</b>  | 174                                                                         | 135                                                                                  | $6,7 \cdot 10^{-5}$                                       |

Teplotní vodivost uvádí jakou měrou je materiál, v tomto případě kov vyrovnávat teplotu ve svém objemu. Čím je vyšší hodnota teplotní vodivosti daného kovu, tím rychleji se v kovu vyrovnává teplota při nestacionárních podmínkách sdílení tepla. Tím je teplotní pole kovu homogennější.

### 10.3 Elektrické vlastnosti kovů

**Elektrická vodivost kovů** - pod pojmem elektrická vodivost se rozumí schopnost materiálů, resp. kovů vést elektrický proud. Je to jedna z nejdůležitějších vlastností. Podle elektrické vodivosti rozdělujeme všechny látky do tří skupin: jsou to *vodiče (typu I nebo II)*, *polovodiče* a *izolanty*. Kovy patří do skupiny vodičů I. typu, přičemž jejich elektrická vodivost je v porovnání s izolanty o 15 až 24 řádu vyšší.

Podstatu elektrické vodivosti kovů vystihuje *pásová elektronová teorie kovů*, a při podrobnějším studiu je potřeba zvládnout i kvantovou teorii tuhých látek. Zjednodušeně se dá elektrická vodivost kovů vysvětlit následovně. Uvažujeme kovový krystal, který se skládá z určitého počtu atomů. Tyto atomy mají ve svých orbitech počet elektronů, které jsou podle Fermiho–Diracovy rozdělovací funkce rozložené do energetických hladin ( $1s^2$ ,  $2s^2$ ,  $2p^6$ ,  $3s^2$ ,  $3p^6$ , atd.), což je důsledek toho, že elektrony získávají energii po kvantech a ne spojitě. Představme si, že každý atom v krystalu má svoje elektrony začleněné do této konfigurace. Současně funguje Pauliho vylučovací princip, podle kterého se nemohou v krystalu nacházet dva elektrony se stejnou energií. Potom můžeme dojít k závěru, že každý atom přispěje do energetického spektra elektronů krystalu energií svých elektronů. Tak vznikne v krystalu pás energií  $1s^2$ , další pás energií  $2s^2$ , potom pás energií  $2p^6$ , atd. Tyto pásy označujeme *pásy dovolených energií*, protože jsou to energetické oblasti, do kterých se elektrony mohou dostat. Pásy dovolených energií, jsou však mezi sebou oddělené *pásy zakázaných energií*. To jsou energie, které elektrony nemohou získat a které představují určitou energetickou bariéru pro elektrony pohybujících se v dovolených pásích. Takto jsou elektrony v krystalu “poukládané” do těchto pásů dovolených energií (šířka dovolených a zakázaných pásů se udává v jednotkách energie, konkrétně v [eV]). Nejvíce nás zajímá situace, která nastává na posledním (tzv. valenčním) páse, který je daný krystal schopný vytvořit. Tento pás může být elektrony obsazený buď částečně nebo úplně. Krystal se chová jako kov pokud má valenční pás zaplněný jen částečně. Elektrony, kterými je tento *valenční pás* obsazený, nazýváme *volné elektrony* a spolu tvoří v kovovém krystalu *tzv. fermiónový plyn*.

Pokud budeme jako příklad dobré elektrické vodivosti uvažovat měď, její elektronová konfigurace je  $1s^2$ ,  $2s^2$ , ... ,  $3d^{10}$ ,  $4s^1$ . Z popisu elektronové konfigurace je zřejmé, že valenční pás je u mědi zaplněný elektrony jen do poloviny, protože orbitál  $4s$  může být obsazený dvěma elektrony. Z předchozího konstatování je zřejmé, že na elektrické vodivosti se budou podílet elektrony z orbitalu  $4s^1$ , ale až potom, co získají dostatečnou energii na to, aby přeskočily do druhé, neobsazené poloviny orbitalu  $4s^1$ , kde se už nachází Fermiho plocha. Vodivostní elektrony tak jednoduše získají vyšší energii a současně zůstanou ve svém energetickém pásu.

Jiný případ vykazuje železo. To má elektronovou konfiguraci  $1s^2$ ,  $2s^2$ , ... ,  $3d^6$ ,  $4s^2$ . Správně by se však měla jeho konfigurace zakončit v pořadí  $4s^2$ ,  $3d^6$ ,

protože orbital 4s je energeticky méně náročný, než orbital 3d, když je už z vyšší periody. Zvláštností proti mědi je to, že v železe mezi orbitály  $4s^2$  a  $3d^6$  nejen že není žádný zakázaný pás, ale ty dva pásy energií se nevzájemně částečně překrývají. To znamená, že na elektrické vodivosti železa se tak může podílet také elektronový orbital  $4s^2$ .

Pokud bychom chtěli zodpovědět otázku, který kov je nejlepším vodičem elektrického proudu, pak je možno dospět k tomuto závěru. Pokud neuvažujeme kovy a jejich slitiny v supravodivém stavu (tj. při teplotách pod 273,15 K), pak za standardních termodynamických podmínek je nejlepším vodičem elektrického proudu stříbro. Blízkou vodivost stříbra vykazuje měď. Elektrická vodivost se posuzuje podle měrného elektrického odporu. V tabulce 10.4 jsou uvedeny měrné elektrické odpory vybraných kovů. Jak je z tabulky zřejmé, nejlepším vodičem elektrického proudu je stříbro, potom měď, hliník. Nejlepším izolantem by bylo dokonalé vakuum. Největší elektrickou vodivost mají čisté kovy. Přísadami nebo nečistotami obsaženými v kovu se elektrická vodivost vždy jen snižuje. Je tomu tak proto, že vstupem cizorodých atomů (iontů) do mřížky základního (čistého) kovu se stavba mřížky stává méně pravidelnou. Pokles vodivosti může být tak značný, že z vysoce vodivých kovů se získají slitiny odporové.

Tabulka 10.4 Hodnoty měrného elektrického odporu vybraných kovů při teplotě 273,15 K

| Kov            | Měrný elektrický odpor<br>[nΩm] | Kov             | Měrný elektrický odpor<br>[nΩm] |
|----------------|---------------------------------|-----------------|---------------------------------|
| <b>Stříbro</b> | 15,05                           | <b>Chrom</b>    | 130,0                           |
| <b>Měď</b>     | 15,55                           | <b>Zinek</b>    | 54,5                            |
| <b>Hliník</b>  | 24,5                            | <b>Železo</b>   | 87,1                            |
| <b>Titan</b>   | 420                             | <b>Zlato</b>    | 20,4                            |
| <b>Vanad</b>   | 197,0                           | <b>Molybden</b> | 50,3                            |
| <b>Kobalt</b>  | 52,0                            | <b>Wolfram</b>  | 48,9                            |
| <b>Mangan</b>  | 1440                            | <b>Platina</b>  | 98,1                            |
| <b>Nikl</b>    | 65,8                            | <b>Iridium</b>  | 47,1                            |

**Supravodivost** - vlastnost některých kovů, u kterých se při velmi nízkých teplotách (blízkých absolutní teplotní nule) skokem sníží elektrický odpor na nezjistitelnou hodnotu (elektrický proud prochází vodičem prakticky bez odporu). U čistých kovů je přechod rychlý, u slitin pomalejší. Supravodivost se vykytuje u kovů i u polovodičů a projevuje se hlavně u stejnoměrného proudu.

## 10.4 Magnetické vlastnosti kovů

**Magnetické vlastnosti** kovů, se zjišťují na základě jejich chování v magnetickém poli (vnějším magnetickém poli). Vnější magnetické pole je definováno intenzitou magnetického pole  $H$  [A·m<sup>-1</sup>]. Magnetické pole uvnitř kovu definuje magnetická indukce:

$$B = \mu \cdot H, \quad (10.9)$$

kde značí:  $\mu$  - celkovou permeabilitu magnetického pole [ $\text{H}\cdot\text{m}^{-1}$ ];  $H$  - intenzitu magnetického pole [ $\text{A}\cdot\text{m}^{-1}$ ];  $B$  - magnetickou indukci [ $\text{T}$ ].

*Permeabilita* je fyzikální veličina, která vyjadřuje vliv kovu (materiálu nebo prostředí) na výsledné účinky působícího magnetického pole. Některé kovy tyto účinky zesilují (paramagnetika), jiné je zeslabují (diamagnetika).

V případě vakua, pro magnetickou indukci  $B_0$  platí:

$$B_0 = \mu_0 \cdot H, \quad (10.10)$$

kde značí:  $\mu_0$  – permeabilitu vakua ( $4 \cdot \pi \cdot 10^{-7} \text{H}\cdot\text{m}^{-1} = \text{N}\cdot\text{A}^{-2}$ );  $1,2566 \cdot 10^{-7} [\text{H}\cdot\text{m}^{-1}]$ ;  $B_0$  – magnetickou indukci ve vakuu [ $\text{T}$ ].

Poměr permeability daného kovu a permeability vakua získáme relativní permeabilitu kovu (je bezrozměrnou veličinou):

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} \quad (10.11)$$

Celkové magnetické pole v kovu lze určit:

$$B = (1 + \chi_m) \cdot B_0 = \mu_r \cdot B_0, \quad (10.12)$$

kde značí:  $\chi_m$  - magnetickou susceptibilitu;  $B_0$  - magnetickou indukci vnitřního magnetického pole;  $\mu_r$  - relativní permeabilitu ( $\mu = \mu_0 \cdot \mu_r$ );  $\mu_0 = 4 \cdot \pi \cdot 10^{-7} \text{Hm}^{-1}$ .

Materiálový parametr  $\chi_m$ , magnetická susceptibilita, může být větší i menší než nula. Podle hodnoty celkové permeability ( $\mu$ ), *resp. relativní permeability* ( $\mu_r$ ) se kovy rozdělují do tří základních skupin:

S hodnotou permeability úzce souvisí magnetický charakter látek, *resp.* kovů:

*diamagnetické kovy* ( $\mu_r < 1$ ;  $\chi_m < 0$ ) – vnější magnetické pole mírně zeslabují.

*paramagnetické kovy* ( $\mu_r > 1$ ;  $\chi_m > 0$ ) – vnější magnetické pole mírně zesilují

*feromagnetické kovy* ( $\mu_r \gg 1$ ;  $\chi_m \gg 0$ ) – vnější magnetické pole výrazně zesilují.

V tabulce 10.5 jsou uvedeny hodnoty permeability vybraných kovů a látek

Příčiny chování kovů v magnetickém poli jsou jejich magnetické momenty, které jsou dány:

- a) orbitálními magnetickými momenty kovů, které vznikají v důsledku pohybu elektronů kolem jádra atomů kovů;
- b) spinovými magnetickými momenty kovů.

Tabulka 10.5 Hodnoty permeability vybraných kovů a látek

| Látka                | Hodnota permeability $\mu_r$<br>[1] | Magnetický charakter látky |
|----------------------|-------------------------------------|----------------------------|
| <b>Železo</b>        | 5 800 až 15000                      | feromagnetický             |
| <b>Nikl</b>          | 1120                                | feromagnetický             |
| <b>Kobalt</b>        | 80 až 200                           | feromagnetický             |
| <b>Ocel</b>          | 8000                                | feromagnetická             |
| <b>Permalloy</b>     | 50 000 až 140 000                   | feromagnetický             |
| <b>Supermalloy</b>   | 1 000 000                           | feromagnetický             |
| <b>Hliník</b>        | 1,00022000                          | paramagnetický             |
| <b>Hořčík</b>        | 1,00002300                          | paramagnetický             |
| <b>Chrom</b>         | 1,00032000                          | paramagnetický             |
| <b>Platina</b>       | 1,00026400                          | paramagnetická             |
| <b>Cín</b>           | 1,00000230                          | paramagnetický             |
| <b>Mangan</b>        | 1,00081000                          | paramagnetický             |
| <b>Měď</b>           | 0,99999200                          | diamagnetická              |
| <b>Zinek</b>         | 0,99998800                          | diamagnetický              |
| <b>Zlato</b>         | 0,99996600                          | diamagnetické              |
| <b>Stříbro</b>       | 0,99997500                          | diamagnetické              |
| <b>Vismut</b>        | 0,99984000                          | diamagnetický              |
| <b>Vzduch</b>        | 1,00000038                          | paramagnetický             |
| <b>Kyslík</b>        | 1,00000185                          | paramagnetický             |
| <b>Oxid uhličitý</b> | 0,99999900                          | diamagnetický              |
| <b>Dusík</b>         | 0,99999900                          | diamagnetický              |
| <b>Vodík</b>         | 0,99999900                          | diamagnetický              |
| <b>Voda</b>          | 0,99999100                          | diamagnetická              |

**Feromagnetické kovy** - výrazně zesilují vnější magnetické pole. To je dáno uspořádáním jejich atomů v krystalické mřížce. K těmto kovům patří Fe, Ni, Co, Gd, dále Sm, Dy a mnoha speciálních slitin Mn, většina ocelí, litin, kromě austenitických chromniklových a korozivzdorných ocelí. Uvažujeme, že tyto kovy mají pomyslné oblasti – domény. Domény mají magnetické momenty. Při působení vnějšího magnetického se magnetické momenty domén nastavují do jeho směru. To vede k makroskopické magnetizaci kovu. V praxi to znamená, že feromagnetické kovy jsou přitahovány k permanentnímu magnetu. Feromagnetická magnetizace je silný efekt,  $\mu_r \approx 1000$  a více, viz tabulka 10.5, závisí na vnějším poli, vede k permanentní magnetizaci, mizí při  $T > T_C$ , zvané Curieho teplota. Curieho teplota je u čistého železa 760 °C, kobalt 1075 °C, nikl 365 °C, Gadolinium 16 °C. Nad touto teplotou tyto kovy (feromagnetické) se mění na paramagnetické.

**Paramagnetické kovy** – nemají zcela vykompenzované orbitální a spinové magnetické momenty elektronů. To znamená, že atomy mají magnetický moment a chovají se tedy jako magnetické dipóly a snaží se srovnat ve směru vnějšího magnetického pole, čímž ho zesílí.

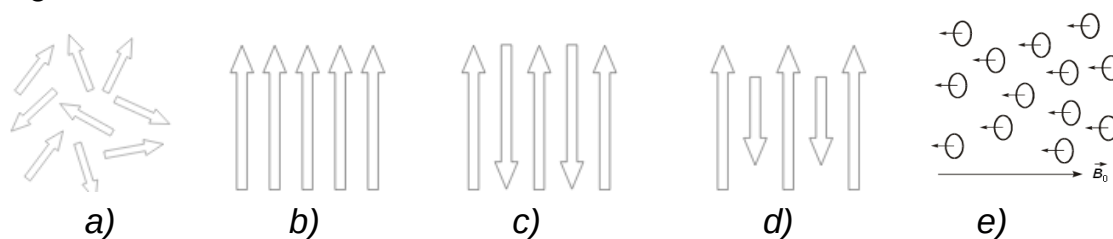


Paramagnetismus je forma magnetismu, která se objevuje jen v přítomnosti vnějšího magnetického pole. Paramagnetické kovy jsou přitahované magnetickým polem, proto mají relativní magnetickou permeabilitu větší než jedna (nebo kladnou magnetickou susceptibilitu). Ale na rozdíl od feromagnetických kovů, které jsou také přitahované magnetickým polem, paramagnetické kovy nedokážou udržet magnetismus bez přítomnosti vnějšího pole.

Paramagnetické kovy mají trvalý magnetický moment, dokonce i za nepřítomnosti vnějšího pole. Toto je obvykle způsobené přítomností nepárových elektronů v atomovém elektronovém orbitalu. V paramagnetech na sebe dipóly nepůsobí a při nepřítomnosti vnějšího pole jsou náhodně orientované, což je způsobeno tepelnými kmity mřížky, proto je celkový magnetický moment nulový. Když se tento kov vloží do vnějšího magnetického pole, dojde k natočení dipólů ve směru vnějšího pole a vzniká celkový magnetický moment, který je orientován ve směru působení vnějšího pole. Mezi paramagnetické kovy se např. řadí alkalické kovy, hliník, vápník, mangan, platina a hořčík. Tyto kovy zesilují účinek vnějšího magnetického pole zcela nepatrně.

**Diamagnetické kovy** – mají zcela vykompenzované orbitální a spinové magnetické momenty. Proto se v těchto kovech navenek magnetické momenty neprojevují. Vložíme-li tyto kovy do vnějšího magnetického pole, v poli se zmagnetizují tak, že ale toto pole zeslabují. Diamagnetismus je forma magnetismu, která se objevuje jen v přítomnosti vnějšího magnetického pole. Vložením diamagnetické látky do vnějšího magnetického pole dojde v látce k zeslabení magnetického pole. Mezi diamagnetické kovy se řadí měď, stříbro, zlato, rtuť, cín, olovo apod.

Na obr. 10-2 jsou schémata magnetických momentů pro jednotlivé typy magnetismů.



*a - paramagnetický; b - feromagnetický; c - antiferitický; d - ferimagnetický  
e - diamagnetický*

Obr. 10-2 Schémata magnetických momentů pro jednotlivé typy magnetismů

## 10.5 Pružnostní vlastnosti kovů

**Pružnost** (též elasticita či tuhost) je část fyziky, která studuje vztahy mezi deformacemi těles a vnějšími silami, které na toto těleso působí. V úlohách o pružnosti kovů se potom řeší, zda deformace tělesa, či konstrukce nepřesáhla dovolenou hodnotu. Pružné chování kovů se uskutečňuje v oblasti lineární závislosti deformace mezi silou a deformací, tj. v oblasti platnosti Hookeova zákona ( $\sigma = E \cdot \varepsilon$ ), kde jsou uvažovány obecně působící síly. Tento poznatek je v podstatě jedním ze základních kamenů matematické teorie pružnosti a v nezměněné podobě se využívá dodnes.

K vysvětlení této vlastnosti - pružnosti kovů - je však třeba využít tenzorový počet. Označíme-li poměrnou deformaci kovu v určitém směru tenzorem deformace  $\varepsilon_{mn}$  a sílu na jednotkový průřez způsobující změnu tvaru tenzorem napětí  $\sigma_{ik}$ , potom lze psát:

$$\sigma_{ik} = C_{ikmn} \cdot \varepsilon_{mn}, \quad (10.13)$$

kde značí:  $C_{ikmn}$  - fyzikální konstantu pružné tuhosti kovu.

Tenzor deformace lze vyjádřit:

$$\varepsilon_{mn} = S_{mnik} \cdot \sigma_{ik}, \quad (10.14)$$

kde značí:  $S_{mnik}$  - konstantu pružné poddajnosti.

Poznatky z pružnosti lze využít jen při splnění několika předpokladů, praxe ukazuje, že teoretické vztahy lze využít, i když se vlastnosti reálného tělesa, či konstrukce, prvním dvěma předpokladům pouze blíží:

- těleso je uvažováno jako *homogenní*, tj. těleso, které má stejné mechanické vlastnosti v každém bodě;
- těleso je uvažováno jako *izotropní*, tj. těleso, které má stejné mechanické vlastnosti ve všech směrech.

Deformace tělesa je *malá* a *pružná*, což jinými slovy znamená, že se tato deformace pohybuje v oblasti platnosti **Hookeova zákona** a těleso se po odlehčení vrátí do svého původního tvaru.

**Poznámka:** Jedním z prvních, kdo se zabýval hledáním vztahů mezi silami působícími na těleso a deformacemi tělesa způsobenými těmito silami, byl britský fyzik Robert Hooke. Hooke (čti Hook) v roce 1676 zformuloval zákon jenž říká, že při pružné deformaci je normálové napětí přímo úměrné relativnímu prodloužení.

**Robert Hooke (1635 - 1703)**

Hookův zákon udává závislost mezi napětím a poměrnou deformací:

$$\sigma = E \cdot \varepsilon, \quad (10.15)$$

kde značí:  $\sigma$  - normálové napětí;  $\varepsilon$  - poměrnou deformaci;  $E$  - Youngův modul pružnosti.

Zatížení tuhých těles vnějšími silami vede ke změně jejich tvaru, tj. k jejich deformaci. Pokud uvažované těleso po odlehčení dosáhne původního tvaru a rozměrů, pak materiál tělesa vykazuje pružné chování, jehož projevem je *pružná (elastická) deformace*. V případě jednoosového zatěžování isotropního tělesa v oblasti pružných deformací poměrnou deformaci je možno vypočítat:

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0}, \quad (10.16)$$

kde značí:  $\Delta l$  - změnu délky zatěžovaného tělesa;  $l_0$  - původní délku zatěžovaného tělesa.

Poměrná deformace  $\varepsilon$  je závislá na napětí:

$$\sigma = \frac{F}{S_0} \quad (10.17)$$

Obvykle se uvažují složky napětí působící ke sledované ploše tělesa kolmo (*normálové napětí* -  $\sigma$ ) a složky rovnoběžné s touto plochou (*smykové napětí* -  $\tau$ ).

Normálové tahové napětí způsobuje protažení tělesa ( $\varepsilon_a$ ) a příčné zúžení deformací ( $\varepsilon_p$ ); v případě tlakových normálových napětí dochází ke stlačení tělesa a jeho příčnému rozšíření. Závislost mezi  $\varepsilon_a$  a  $\varepsilon_p$  je též lineární:

$$\varepsilon_a = \mu \cdot \varepsilon_p, \quad (10.18)$$

kde značí:  $\mu$  - konstantu, která se nazývá *Poissonovo číslo*.

Hodnoty Poissonova čísla jsou uvedeny v tabulce 10.6.

Tabulka 10.6 Hodnoty Poissonova čísla vybraných kovů

| Materiál                                                 | Poissonovo číslo<br>$\mu$ [1] | Modul pružnosti E<br>[MPa] |
|----------------------------------------------------------|-------------------------------|----------------------------|
| Ocel                                                     | 0,3                           | $2,1 \cdot 10^5$           |
| Litina s lupínkovým<br>grafitem a perlitickou<br>matricí | 0,18                          | $1,3 \cdot 10^5$           |
| Slitiny hliníku                                          | 0,31                          | $0,7 \cdot 10^5$           |
| Bronz                                                    | 0,31                          | $1,17 \cdot 10^5$          |
| Mosaz                                                    | 0,33                          | $1,04 \cdot 10^5$          |

U většiny kovových materiálů se uplatňuje lineární pružnost (elasticita), to znamená, že deformace je přímo úměrná napětí a probíhá okamžitě. Pro tahové a tlakové napětí platí již zmíněný Hookův zákon (10.15), ze kterého je zřejmé:  $\varepsilon = 1/(E \cdot \sigma)$ . Pro smykové napětí se uplatňuje analogický vztah  $\gamma = 1/(G \cdot \tau)$ , zde G je modul pružnosti ve smyku (tzv. Coulombův modul pružnosti). Tento modul není tak v technické praxi běžně používaný.

V tabulce 10.7 jsou uvedeny hodnoty modulů pružnosti v tahu a ve smyku pro vybrané kovy.

Tabulka 10.7 Hodnoty modulů pružnosti v tahu a ve smyku vybraných kovů

| Kov    | Modul pružnosti v tahu<br>E [GPa] |           |           | Modul pružnosti ve smyku<br>G [GPa] |           |           | T <sub>tá</sub><br>[°C] |
|--------|-----------------------------------|-----------|-----------|-------------------------------------|-----------|-----------|-------------------------|
|        | Izotropní<br>materiál             | Maximální | Minimální | Izotropní<br>materiál               | Maximální | Minimální |                         |
| Železo | 210                               | 289       | 135       | 84                                  | 119       | 61        | 1539                    |
| Hliník | 70                                | 77        | 64        | 27                                  | 29        | 25        | 660                     |
| Měď    | 113                               | 196       | 70        | 46                                  | 98        | 32        | 1083                    |
| Zinek  | 103                               | 127       | 35        | 39                                  | 50        | 28        | 420                     |
| Hořčík | 44                                | 52        | 40        | 17                                  | 18        | 15        | 650                     |

Je-li těleso ve tvaru koule zatíženo všestranně působícím tlakem (hydrostatický tlak  $\sigma_{hyd}$ ), pak se jeho původní objem  $V_0$  změní o  $\Delta V$  podle vztahu:

$$\sigma_{hyd} = \frac{K \cdot \Delta V}{V_0}, \quad (10.19)$$

kde značí: K - objemový modul pružnosti.

Reciproká hodnota objemového modulu pružnosti se označuje  $\beta$  a nazývá se stlačitelnost. Pro materiály elasticky isotropní jsou ze čtyř výše uvedených konstant (E, G,  $\mu$  a K) jen dvě nezávislé, neboť mezi nimi platí tyto vztahy:

$$G = \frac{E}{2 \cdot (1 + \mu)}, \quad (10.20)$$

$$K = \frac{1}{3} = \frac{E}{3 \cdot (1 - 2\mu)}. \quad (10.21)$$

Kovové krystaly jsou elasticky výrazně *anizotropní*, tedy jejich elastické moduly se mohou výrazně lišit v jednotlivých krystalografických směrech. Technické kovové materiály jsou zpravidla polykrystalické a pokud je orientace jednotlivých zrn nahodilá, pak výše zmíněná anizotropie, dobře měřitelná na monokrystalech, mizí.

**Modul pružnosti v tahu**, neboli Youngův modul pružnosti, je číslo, které charakterizuje chování materiálu zatíženého tahovým napětím. Čím je Youngův modul pružnosti vyšší, tím je třeba větší napětí (při stejném průřezu je třeba větší tahová síla) na dosažení stejné deformace - prodloužení. Jak je obecně známo, Youngův modul vystupuje jako konstanta v Hookově zákoně. Označuje se písmenem  $E$ , udává se v jednotkách napětí (např. MPa = N.mm<sup>-2</sup>), někdy jeho vysoké hodnoty jsou udávány [GPa - gigapaskalech]. Hodnota modulu pružnosti kovů je také závislá na teplotě, s rostoucí teplotou může jeho hodnota klesat.

**Poznámka:** Modul pružnosti je pojmenovaný po anglickém fyzikovi Thomasovi Youngovi.



Thomas Young (1773 - 1829)

Modul pružnosti je definovaný přímo z Hookova zákona jako poměr napětí v tahu a poměrné deformace (např. poměrné prodloužení) v oblasti malých napětí. Lze vyjádřit na základě rovnice (10.15):

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon}, \text{ resp. } \sigma = E \cdot \varepsilon, \quad (10.22)$$

kde značí:  $E$  - Youngův modul pružnosti [MPa];  $\sigma$  - napětí v tahu [MPa];  
 $\varepsilon$  - poměrné prodloužení [1].

Experimentálně lze hodnotu modulu pružnosti stanovit na základě tahového diagramu z tahové zkoušky (napětí - poměrné prodloužení), je úměrný směrnici (tangens úhlu sklonu) lineární části křivky od nulového napětí po mez úměrnosti. U materiálů, které nevykazují lineární závislost tahového diagramu,

se hodnota modulu pružnosti  $E$  stanovuje na základě zkoušky ohybem. Zde se uplatňuje průhyb nosníku na dvou podporách zatěžovaný silou uprostřed:

$$E = \frac{F.l^3}{48.y.J}, \quad (10.23)$$

kde značí:  $F$  - zátěžnou sílu [N];  $l$  - délku zkoušeného materiálu [mm],  
 $y$  - průhyb nosníku [mm];  $J$  - modul setrvačnosti průřezu k neutrální ose [mm<sup>4</sup>].  
 Pro kruhový průřez  $J = \pi \cdot d^4 / 64$ .

V tabulce 10.8 jsou uvedeny moduly pružnosti pro vybrané kovy a slitiny kovů, které mají značné technické uplatnění.

Tabulka 10.8 Hodnoty modulů pružnosti pro vybrané kovy a slitiny kovů

| Kov, slitina kovů                   | Hodnota Youngova modulu pružnosti [MPa] | Poznámka                                |
|-------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|
| <b>Železo</b>                       | 200 000                                 |                                         |
| <b>Hliník</b>                       | 70 000                                  |                                         |
| <b>Mangan</b>                       | 202 000                                 |                                         |
| <b>Zinek</b>                        | 90 000                                  |                                         |
| <b>Měď</b>                          | 125 000                                 |                                         |
| <b>Nikl</b>                         | 196 000                                 |                                         |
| <b>Kobalt</b>                       | 208 000                                 |                                         |
| <b>Chrom</b>                        | 240 000                                 |                                         |
| <b>Vanad</b>                        | 149 000                                 |                                         |
| <b>Platina</b>                      | 171 000                                 |                                         |
| <b>Zirkon</b>                       | 68 000                                  |                                         |
| <b>Niob</b>                         | 106 000                                 |                                         |
| <b>Wolfram</b>                      | 396 000                                 |                                         |
| <b>Molybden</b>                     | 326 000                                 |                                         |
| <b>Ocel</b>                         | 210 000                                 | odpovídá téměř všem konstrukčním ocelím |
| <b>Litina s lupínkovým grafitem</b> | 130 000                                 | ČSN 422425                              |
| <b>Litina s červíkovým grafitem</b> | 160 000                                 | s perlitickou matricí                   |
| <b>Litina s kuličkovým grafitem</b> | 180 000                                 | s perlitickou matricí                   |

Modul pružnosti v tahu (Youngův modul) se používá v technické praxi pro různé účely, např. pro výpočty prodloužení ocelových zatěžovaných konstrukcí v pružnosti a pevnosti:

$$\Delta l = \frac{F.l}{E.S}, \quad (10.24)$$

kde značí:  $F$  - zátěžnou sílu [N];  $l$  - délku dílu konstrukce [mm];  $S$  - průřez konstrukce [mm<sup>2</sup>];  $E$  - Youngův modul pružnosti materiálu konstrukce [MPa].

Dále modul pružnosti  $E$  má uplatnění při výpočtech napětí zahříváných kovových dílů (kovových slévárenských forem, výfukových potrubí, atd.). Teplotní napětí, která mohou být tahová (+) nebo tlaková (-) lze stanovit:

$$\pm \sigma = E \cdot \alpha \cdot (T_2 - T_1), \quad (10.25)$$

kde značí:  $\sigma$  - teplotní napětí (tahové nebo tlakové) [MPa];  $\alpha$  - součinitel teplotní roztažnosti [K<sup>-1</sup>];  $T_2$  - teplotu v jednom místě tělesa [K];  $T_1$  - teplotu v druhém místě tělesa [K].

Podle rovnice (10.23) lze posoudit, který materiál bude výhodnější z hlediska menších teplotních napětí při srovnatelném rozdílu teplot. Např. je výhodnější litina než ocel. Proto se také litina s lupínkovým grafitem nebo kuličkovým grafitem používá pro výrobu výfukových svodů na spalovacích motorech.

## 10.6 Řešení ukázkových příkladů

### Příklad č. 1

Stanovte teoretickou hustotu železa a hliníku, výpočet proveďte s použitím Avogadrovy konstanty ( $6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ). Železo krystalizuje s kubickou mřížkou, resp. buňkou o rozměru  $2,86 \cdot 10^{-8} \text{ [cm]}$ , na tuto buňku připadají 2 atomy. Relativní atomová hmotnost železa je 55,86. Hliník krystalizuje s kubickou mřížkou, resp. buňkou o rozměru  $4,05 \cdot 10^{-8} \text{ [cm]}$ , na tuto buňku připadají 4 atomy. Relativní atomová hmotnost hliníku je 26,96.

**Řešení:** po dosazení hodnot do rovnice (10.2) lze stanovit hustotu železa a hliníku.

$$\rho = \frac{55,86 \cdot 2}{(2,86 \cdot 10^{-8})^3 \cdot 6,023 \cdot 10^{23}} = 7,88 \text{ [g.cm}^{-3}\text{]}.$$

$$\rho = \frac{26,96 \cdot 4}{(4,05 \cdot 10^{-8})^3 \cdot 6,023 \cdot 10^{23}} = 2,70 \text{ [g.cm}^{-3}\text{]}.$$

Hustota čistého železa je cca 7880 [kg.m<sup>-3</sup>] a hliníku je 2700 [kg.m<sup>-3</sup>]

### Příklad č. 2

Stanovte teoretickou hustotu mědi. Pro výpočet můžete použít vztah (5.3) hodnoty z tabulky 5.6 a hodnotu relativní atomové hmotnosti z tabulky 3.1.

Měď krystalizuje v kubické soustavě. Hodnota velikosti mřížkového parametru (hrany krystalické buňky) je  $3,6078 \cdot 10^{-10}$  [m], atomové buňce mědi přísluší 4 atomy. Hodnota relativní atomové hmotnosti je 63,55. Dosazením do rovnice (5.3) lze psát:

$$\rho_{(X)} = \frac{m}{V} = \frac{X_{\text{BUŇKY}(X)} \cdot m_{a(X)}}{V_{\text{BUŇKY}(X)}}; \quad \rho_{(Cu)} = \frac{m_{(Cu)}}{V_{(Cu)}} = \frac{4 \cdot 63,55 \cdot 1,6605 \cdot 10^{-27}}{(3,61 \cdot 10^{-10})^3} = 8970 [\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$$

kde značí:  $m_{a(X)}$  - hmotnost atomu daného kovu (x) [kg];  $X_{\text{BUŇKY}(X)}$  - počet atomů připadajících na krystalovou buňku daného kovu (X);  $V_{\text{BUŇKY}(X)}$  - objem buňky kovu (X).

K výpočtu je též možno použít vztah (10.2).

### Příklad č. 3

Stanovte hodnotu teplotní roztažnosti železa. Teplota tání železa je  $1539^\circ\text{C}$  (tj. 1812 K). K výpočtu využijeme vztah (10.7):

$$\alpha_l \cdot T_l = (1,5 \text{ až } 2,2) \cdot 10^{-2} \quad \alpha_{(Fe)} = \frac{2,0 \cdot 10^{-2}}{1812} = 11,03 \cdot 10^{-6} [\text{K}^{-1}]$$

### Příklad č. 4

Stanovte hodnotu teplotní vodivosti železa. K výpočtu použijeme vztah (10.8). Teplotní vodivost je funkce teploty. Pro jednoduchost ji budeme počítat pro teplotu cca  $20^\circ\text{C}$ . Pro výpočet je třeba znát hodnoty veličin pro teplotu  $20^\circ\text{C}$ . Hodnota tepelné vodivosti železa  $\lambda = 80,2$  [ $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ], měrná tepelná kapacita je cca  $452$  [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ] a hustota železa je  $7860$  [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ]. Teplota tání železa je  $1539^\circ\text{C}$  (tj. 1812 K). K výpočtu využijeme vztah (10.8):

$$a = \frac{\lambda}{c \cdot \rho}, \quad a_{Fe} = \frac{\lambda_{(Fe)}}{c_{(Fe)} \cdot \rho_{(Fe)}} = \frac{80,2}{452 \cdot 7860} = 2,26 \cdot 10^{-5} [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$$

kde značí:  $\lambda$  - teplotní vodivost [ $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ];  $c$  - měrnou tepelnou kapacitu [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ];  $\rho$  - hustotu [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ].

### Příklad č. 5

Stanovte, který materiál se méně prohne hliník nebo litina při ohybové zkoušce. Na oba materiály působí stejná ohybová síla  $10\,000$  N, délka vzdálenosti podpor je  $0,6$  m. Pro zkoušku byla použita tyč  $\varnothing 30$  mm. Úlohu řešíme jako stanovení průhybu nosníku na dvouch podporách. K řešení použijte rovnici (10.23).

$$E = \frac{F \cdot l^3}{48 \cdot y \cdot J}, \quad y_{(Al)} = \frac{F \cdot l^3}{48 \cdot E \cdot J} = \frac{11000 \cdot 600^3}{48 \cdot 70000 \cdot 39761} = 17,8 [\text{mm}]$$

$$y_{(LITINA)} = \frac{F \cdot l^3}{48 \cdot E \cdot J} = \frac{11000 \cdot 600^3}{48 \cdot 130000 \cdot 39761} = 9,6 [\text{mm}]$$



kde značí:  $E$  – Youngův modul pružnosti materiálu [MPa];  $F$  - zátěžnou sílu [N];  $l$  - délku zkoušeného materiálu [mm],  $y$  - průhyb nosníku [mm];  $J$  - modul setrvačnosti průřezu k neutrální ose [mm<sup>4</sup>]. Pro kruhový průřez  $J = \pi \cdot d^4 / 64$ .

### Příklad č. 6

Stanovte, který materiál bude výhodnější z hlediska menších teplotních napětí, např. pro rozdíl teplot 350 K, zda-li ocel nebo litina. Hodnoty pro ocel jsou:  $E = 2,1 \cdot 10^5$  [MPa],  $\alpha = 11,2 \cdot 10^{-6}$  [K<sup>-1</sup>]. Hodnoty pro litinu jsou:  $E = 1,3 \cdot 10^5$  [MPa],  $\alpha = 9,1 \cdot 10^{-6}$  [K<sup>-1</sup>]. K tomuto výpočtu použijeme rovnici (10.25):

$$\pm \sigma = E \cdot \alpha \cdot (T_2 - T_1), \quad \pm \sigma_{OCEL} = 2,1 \cdot 10^5 \cdot 11,2 \cdot 10^{-6} \cdot 350 = 810 [\text{MPa}]$$

$$\pm \sigma_{LITINA} = 1,3 \cdot 10^5 \cdot 9,1 \cdot 10^{-6} \cdot 350 = 415 [\text{MPa}]$$

kde značí:  $\sigma$  - teplotní napětí (tahové nebo tlakové) [MPa];  $\alpha$  - součinitel teplotní roztažnosti [K<sup>-1</sup>];  $T_2$  - teplotu v jednom místě tělesa [K];  $T_1$  - teplotu v druhém místě tělesa [K].

Na základě výpočtů získáme, že litina:  $\pm \sigma = 415$  [MPa] a ocel:  $\pm \sigma = 810$  [MPa]. To znamená, že výhodnější je litina, neboť vykazuje menší hodnotu napětí.

### Příklad č. 7

Stanovte prodloužení měděné tyče, byla-li její původní délka 305 mm a byla namáhána normálovým napětím 276 MPa. Youngův modul pružnosti  $E$  mědi je 110 000 MPa.

$$\sigma = E \cdot \varepsilon = E \cdot \frac{\Delta l}{l_0} \Rightarrow \Delta l = \frac{\sigma \cdot l_0}{E} = \frac{276 \cdot 305}{110000} = 0,75 [\text{mm}]$$

### Příklad č. 8

Stanovte Youngův modul pružnosti materiálu, který slouží jako konstrukční díl spalovacího vznětového motoru. Při provozu motoru bylo naměřeno napětí 75,4 MPa, rozdíl teplot v tělese zhotoveném z tohoto materiálu vykazoval 50 °C. Teplotní roztažnost materiálu je  $11,6 \cdot 10^{-6}$  [K<sup>-1</sup>]. Dle výsledku stanoveného modulu pružnosti odhadněte jaký materiál by se mohlo jednat.

## 10.7 Úlohy k procvičení

### Úloha č. 1

Stanovte teoretickou hustotu nikl. Pro výpočet můžete použít vztah (5.3) hodnoty z tabulky 5.6 a hodnotu relativní atomové hmotnosti z tabulky 3.1. Nikl krystalizuje v kubické soustavě. Hodnota velikosti mřížkového parametru (hrany krystalické buňky) je  $3,4990 \cdot 10^{-10}$  [m], atomové buňce mědi přísluší 4 atomy. Hodnota relativní atomové hmotnosti je 58,70. Vypočítanou hodnotu porovnejte s hodnotou uvedenou v tabulce 10.1.

**Úloha č. 2**

Stanovte hodnotu teplotní roztažnosti mědi. Teplota tání mědi je 1083 °C (tj. 1356 K). K výpočtu využijeme vztah (10.7).

**Úloha č. 3**

Stanovte hodnotu teplotní vodivosti zinku. K výpočtu použijeme vztah (10.8). Teplotní vodivost je funkce teploty. Pro jednoduchost ji budeme počítat pro teplotu cca 20 °C. Pro výpočet je třeba znát hodnoty veličin pro teplotu 20 °C. Hodnota tepelné vodivosti zinku  $\lambda = 116,0 \text{ [W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$ , měrnou tepelnou kapacitu má cca 385  $[\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$  a hustota zinku je 7140  $[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$ . Teplota tání železa je 420 °C (tj. 693 K). K výpočtu využijeme vztah (10.8). Vypočítanou hodnotu porovnejte s hodnotou uvedenou v tabulce 10.3.

**Úloha č. 4**

Stanovte hodnotu teplotní vodivosti zinku. K výpočtu použijeme vztah (10.8). Teplotní vodivost je funkce teploty. Pro jednoduchost ji budeme počítat pro teplotu cca 20 °C. Pro výpočet je třeba znát hodnoty veličin pro teplotu 20 °C. Hodnota tepelné vodivosti zinku  $\lambda = 116,0 \text{ [W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$ , měrnou tepelnou kapacitu má cca 385  $[\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$  a hustota zinku je 7140  $[\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}]$ . Teplota tání železa je 420 °C (tj. 693 K). K výpočtu využijeme vztah (10.8).

**Úloha č. 5**

Stanovte, který materiál ocel nebo litina, při ohybové zkoušce se více prohne. Na oba materiály působí stejná ohybová síla. Úlohu řešíme jako stanovení průhybu nosníku na dvou podpórách. K řešení použijte rovnici (10.23). Zátěžná síla  $F$ , délka  $l$  a modul setrvačnosti průřezu  $J$  jsou pro oba materiály stejné.

**Úloha č. 6**

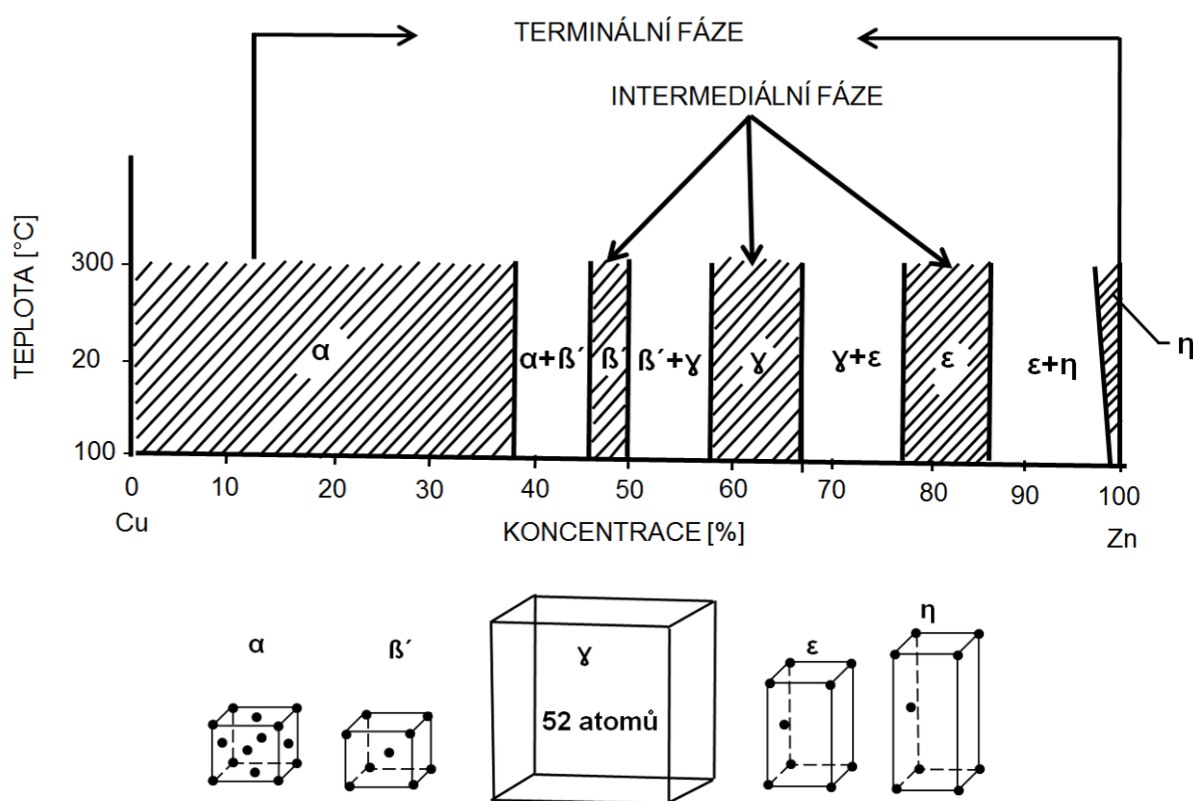
Stanovte, který materiál bude výhodnější z hlediska menších teplotních napětí, např. pro rozdíl teplot 100 K, zda-li litina nebo hliník. Hodnoty pro hliník jsou:  $E = 0,70\cdot 10^5 \text{ [MPa]}$ ,  $\alpha = 24,9\cdot 10^{-6} \text{ [K}^{-1}]$ . Hodnoty pro litinu jsou:  $1,3\cdot 10^5 \text{ [MPa]}$ ,  $\alpha = 9,1\cdot 10^{-6} \text{ [K}^{-1}]$ . K tomuto výpočtu použijeme rovnici (10.25):

**Úloha č. 7**

Relativní permeabilita hořčíku je 1,00002300 a mědi je 0,99999200. Určete do jaké skupiny, z hlediska magnetických vlastností, tyto kovy patří.

## 11. KRYSTALICKÁ STAVBA FÁZÍ SOUSTAV KOVŮ

Z tavenin několika kovů vznikají slitiny (někdy i slitiny kovů s nekovy). Slitiny kovů mají vlastnosti příslušných kovů a jsou velmi důležité pro technickou praxi (čisté kovy se používají v technické praxi jen výjimečně). Slitiny kovů jsou krystalické jako kovy. Slitinu - soustavu kovů tvoří alespoň dvě kovové složky. V jedné kovové soustavě se nachází několik fází, viz obr. 11-1, které se vzájemně liší krystalickou strukturou. Na obr. 11-1 je schéma binárního diagramu soustavy Cu - Zn. Celá oblast koncentrací těchto obou složek při teplotách do 300 °C vytváří řadu homogenních oblastí, které se označují  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\varepsilon$ ,  $\eta$  ( $\beta$  a  $\delta$  existují při vyšších teplotách) a 4 heterogenní oblasti ( $\alpha + \beta$ ,  $\beta + \gamma$ ,  $\gamma + \varepsilon$ ,  $\varepsilon + \eta$ ).



Obr. 11-1 Schéma binárního diagramu Cu-Zn [20]

Jak ukazují strukturní buňky na obr. 11-1, fáze  $\alpha$  má strukturu kubickou plošně centrovanou, fáze  $\beta$  kubickou prostorově centrovanou, fáze  $\gamma$  je složitá. Fáze  $\varepsilon$  a  $\eta$  mají nejsměštanější strukturu s rozdílným poměrem c:a. Mají-li být uvedeny podstatné charakteristiky jednotlivých fází a tím i obecné zákonitosti vnitřní stavby slitin kovů, je nutné tyto fáze rozřadit. Výhodným kritériem jejich klasifikace je strukturní hledisko.

## 11.1 Klasifikace kovových soustav

U čistých kovů krystalickou strukturu ovlivňují Lavesovy faktory (princip nejmenšího objemu, princip vyšší souměrnosti a princip nejkratších spojnic).

Většina technických kovových materiálů je tvořena více složkami (komponentami). Z těchto složek podle okolností vznikají **slitiny kovů**. Pro pochopení, jak může z několika těchto složek vznikat slitina kovů, je třeba porozumět pojmům roztok a rozpustnost.

*Roztok* je homogenní fáze, která je tvořená nejméně dvěma složkami. *Rozpustnost* je schopnost jedné látky (složky) rozpouštět se v druhé látce (složce). Míra rozpustnosti (mez rozpustnosti) je maximální množství jedné látky, které může být rozpuštěno v látce druhé. Obecně se roztoky dělí dle skupenství na kapalné a tuhé (pevné). Rozpustnost může být:

- **úplná** - např. voda - alkohol, z kovů Ni - Cu; Bi - Sb, Au - Ag;
- **částečná** - např. voda - cukr, z kovů Al - Si.

Dále také existuje tzv. **nerozpustnost**, kterou se např. vyznačuje např. voda - olej, z kovů Cu - Pb.

U fází kovových soustav, charakter krystalické struktury fází určují Hume-Rotheryho činitelé:

- a) velikostní faktor (velikost atomů);
- b) elektronová koncentrace, tj. počet valenčních elektronů připadajících na jeden atom;
- c) elektrochemický faktor (druh vazby).

Na základě těchto faktorů rozdělujeme fáze v kovových soustavách do dvou skupin: **tuhé roztoky** a **intermediární fáze**. V určité oblasti koncentrací mohou v některých kovových soustavách vedle tuhých roztoků a intermediálních fází být přítomné také heterogenní směsi.

### 11.1.1 Tuhé roztoky

Tuhé roztoky jsou homogenní tuhé krystalické fáze tvořené nejméně dvěma složkami (komponentami). V dvousložkové - tzv. binární slitině kovů jsou komponenty obecně označeny A a B. Složka A, tj. základní kov (rozpuštědlo) a složka B, tj. přísada (rozpuštěný prvek). Tuhé roztoky tvoří jediný druh krystalické mřížky s proměnným chemickým složením a představují pouze jednu fázi. Jedna složka si zanechává svou krystalovou stavbu a atomy druhé se v ní rozpouštějí. To znamená, že podle způsobu uložení atomů přísady v krystalické mřížce základního kovu se roztoky rozdělují na **tuhé roztoky substituční** a **tuhé roztoky intersticiální**. Tuhé roztoky se obvykle označují písmeny řecké abecedy:  $\alpha$ ,  $\beta$ .

### **Hume-Rotheryho pravidla pro vznik tuhého substitučního roztoku**

- 1) Poměr poloměrů atomů kovu A a kovu B ( $r_A:r_B$ ) = 0,85 až 1,15, tj., rozdíl poloměrů nepřesahuje 15%.
- 2) Podobnost elektrochemického chování, tj. blízkost elektronegativit.
- 3) Podobnost počtu valenčních elektronů (př.: Cu 1e + Zn 2e: rozpustnost 40%. Cu 1e + Si 4e 13%, As 5e 6%.)

### **Charakteristika pro vznik intersticiálního tuhého roztoku**

- A) existuje velký rozdíl poloměrů atomů, atom příměsi se musí vejít do dutiny v krystalické mřížce, to splňují prvky, které mají malé rozměry atomů - tj. C, H, B, N;
- B) elektrochemická podobnost;
- C) typ krystalické mřížky (FCC, BCC, HCP) hraje roli v geometrii dutin;
- D) nejdůležitější jsou intersticiální tuhé roztoky uhlíku v přechodových kovech, zejména v železe.

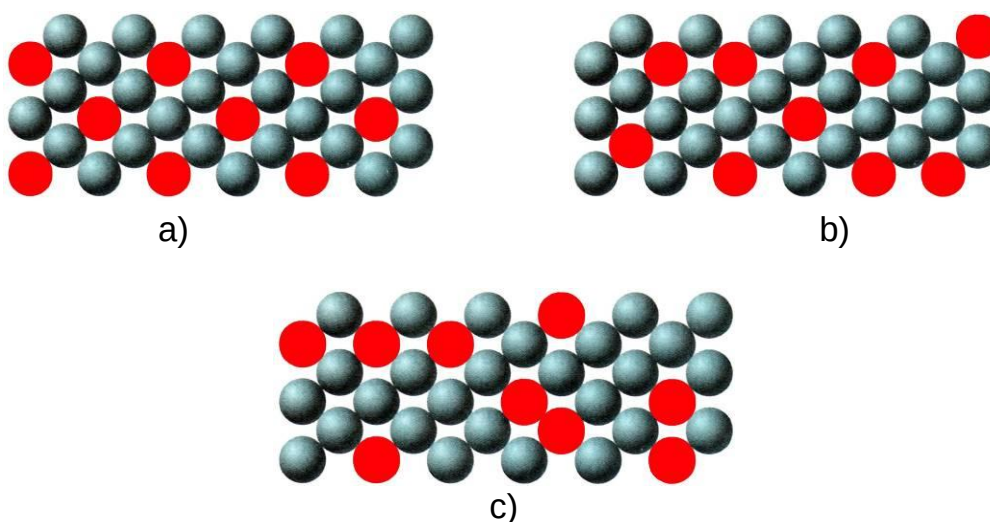
Z tuhých roztoků jsou ve slitině Fe-C metastabilní, důležité dva tuhé intersticiální roztoky. Je to **ferit** - tuhý intersticiální roztok uhlíku v  $Fe_\alpha$ , který krystalizuje v kubické, tzv. 9 bodové mřížce (mezinárodně označované BCC). Rozpustnost C v  $Fe_\alpha$  je 0,1 atomových % C. Ferit je hlavní strukturní složkou většiny běžných konstrukčních ocelí. Také je součástí rovnovážného binárního diagramu Fe-C metastabilního. Druhým velmi důležitým tuhým roztokem uhlíku v  $Fe_\gamma$  je **austenit**, který krystalizuje v 14 bodové krystalické mřížce (mezinárodně označované FCC). Maximální rozpustnost uhlíku v austenitu je 8,9 atomových % (2,14 hmotnostních % uhlíku). Austenit je důležitou strukturní součástí většiny nerezavějících ocelí. Současně je to důležitá struktura pro tváření i tepelné zpracování ocelí.

Je důležité připomenout, že když není splněno některé z Hume-Rotheryho pravidel, pak nevznikají tuhé roztoky, ale vznikají *intermediální (intermetalické) fáze*.

**Tuhé roztoky substituční** - v krystalické stavbě substitučních tuhých roztoků atomy přísady B zaujmou místa (nahradí) atomů základního kovu A. Na základě tzv. *Hume-Rotheryho pravidel* závisí rozpustnost na:

- a) rozdílu poloměrů atomů  $\Delta r$  obou složek;
- b) rozdílu elektronegativity obou složek;
- c) změně elektronové koncentrace při směšování.

Obecně lze říci, že mez rozpustnosti klesá s rostoucím poměrem  $|\Delta r|$  a s rostoucím rozdílem v elektronegativitě. Prvky s vyšším mocenstvím se naopak lépe rozpouštějí v kovech s nižším mocenstvím. Např. pro poměr  $|\Delta r|/r_A > 0,15$  je již existence substitučního tuhého roztoku obvykle nevýhodná.



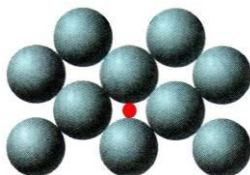
Obr. 11-2 Schéma substitučních tuhých roztoků [31]

- poměru velikosti atomu základního kovu A a přísady B;
- velikostním faktoru atomů základního kovu a přísady, přísadami B mohou být: vodík, bór, uhlík, dusík a kyslík;

Velikostní faktor musí být  $f = \frac{R_B}{R_A} \leq 0,59$

- c) krystalová mřížka základního kovu A musí mít prostory mezi atomy vhodně uspořádány, např. vhodné jsou dutiny v krystalické mřížce FCC a BCC.

146



Obr. 11-3 Schéma uspořádání atomů v intersticiálním tuhém roztoku [31]

Intersticiální tuhé roztoky vznikají ukládáním atomů do intersticiálních poloh těsně uspořádaných krychlových a hexagonálních struktur. Vzhledem k malému volnému prostoru těchto poloh je jen malý počet prvků (H, B, C, N a O) jejichž atomy mohou být do takových poloh umístěny. Vzhledem k tomu, že největší intersticiální poloha je v FCC struktuře oktaedrická (např. poloměr atomu, který může být takto umístěn v  $\text{Fe}_\gamma$ , je 0,052 nm), většina intersticiálně umístěných atomů působí určitou expanzi (zvětšení) mřížkového parametru, která bude záviset na koncentraci intersticiálně rozpuštěných atomů. Rozpustnost uhlíku s atomem o poloměru 0,077 nm v  $\text{Fe}_\gamma$  je kolem 8,8 atomových %.

Přesto někdy dochází i k přednostnímu obsazování menších poloh, jako jsou tetraedrické polohy v BCC struktuře. Pro to jsou především energetické důvody - zatímco při obsazení této polohy dochází k posunutí dvou sousedních atomů ze stabilních uzlových bodů, obsazování oktaedrických poloh vede k posunu čtyř nejbližších sousedů. Tím se ale také snižuje rozpustnost příměsi v matici základního kovu. Např. mezní rozpustnost C v  $\text{Fe}_\alpha$  je pouze 0,096 atomových %. Pak se struktura deformuje na tetragonální prostorově centrovanou strukturu, která je schopná přijmout větší množství uhlíku a může vzniknout přesycený tuhý roztok C v  $\text{Fe}_\alpha$ , tzv. martenzit. Takovou strukturu lze získat rychlým ochlazením austenitu (tuhého roztoku uhlíku v  $\text{Fe}_\gamma$ ), ve kterém je rozpustnost uhlíku výrazně vyšší než v  $\text{Fe}_\alpha$ .

### 11.1.2 Intermediální fáze

Intermediální nebo-li intermetalické fáze jsou chemické sloučeniny s vlastní krystalovou strukturou, která je však odlišná od struktury jednotlivých složek. V binárním systému existují na ose složení uprostřed a nenavazují na žádnou z obou složek. Všechny intermediální fáze se vyznačují tím, že na rozdíl od primárních tuhých roztoků nenavazují v rovnovážném diagramu na čisté složky. Mají samostatnou krystalovou strukturu a od čistých složek a tuhých (primárních) roztoků se obvykle značně liší mechanickými i fyzikálními vlastnostmi. Jsou to velmi často fáze značně tvrdé a křehké. Pro posouzení a rozřídění kovových fází je důležité přihlížet k tomu, že se v nich vedle kovové vazby uplatňuje i vazba kovalenční. Výlučně tato vazba je spojena s vysokým elektrickým odporem. Ve sloučeninách, které se řídí *velikostním faktorem*, jsou složení a struktura takové, aby dovolily těsné uspořádání atomů v mřížce. V rovnovážných diagramech se intermediální fáze označují písmeny řecké abecedy  $\varepsilon$ ,  $\eta$ ,  $\varepsilon'$ , atd.

Jednotné dělení intermediálních fází není přesně dáno, dělí se do různých skupin, jako např.:

- a) sloučeniny u kterých je důležitý velikostní faktor atomů,
  - Intersticiální sloučeniny;
  - Lavesovy fáze;
- b) elektronové (valenční) sloučeniny;
- c) elektronové sloučeniny.
- d) skupina zahrnující fáze  $\sigma$ , popř. další fáze.

Mezi skupinami není přesná hranice a jsou fáze, které můžeme zařadit zároveň do dvou skupin.

Charakteristika jednotlivých intermetalických fází je následující:

**1. Intersticiální sloučeniny**, pozor nezaměňovat s intersticiálními tuhými roztoky! Pro jejich vznik je také důležitý velikostní faktor atomů. Vznikají podobně jako intersticiální tuhé roztoky, tj. slučování prvků se značně odlišným atomovým poloměrem. Intersticiální sloučeniny tvoří přechodné prvky (Fe, Cr, Mn, W, Mo, Zr, Ti, Ta, V, Nb aj.) s C, H, N, B. Jsou běžně označovány jako karbidy, nitridy, hydridy a boridy.

Atomy nekovového prvku jsou umístěny intersticiálně v mřížce, která je často těsně uspořádána. Tyto slitiny mají kovový charakter. Tyto fáze mají jednoduchou krystalovou strukturu, pokud přísadový prvek má atomový poloměr menší než 0,59 atomového poloměru základního kovu. Je nutno upozornit, že ve fyzikální metalurgii se často pracuje s obecným značením kovu M - metal, X - nekovový prvek. Intermetalické sloučeniny se obvykle tvoří podle těchto poměrů  $M_4X$ ,  $Me_2X$ ,  $MX$ ,  $MX_2$ . Jsou většinou krychlové, plošně středěné nebo šesterečné, těsně uspořádané. Přesahuje-li poměr atomových poloměrů hodnotu 0,59, pak nekovový atom je příliš velký, neumístí se v intersticiální poloze a vytvoří mnohem komplikovanější strukturu. V soustavě Fe-C, ve které je poměr atomových poloměrů 0,63, vzniká intermediální fáze  $Fe_3C$  (karbid železa = cementit), který má kovové vlastnosti a komplexní strukturu, viz obr. 11-4.

Intersticiální sloučeniny, které tvoří slitiny hliníku jsou např.  $AlB_2$ ,  $Al_4C_3$ ,  $AlN$ , vykazují vysoký bod tání.

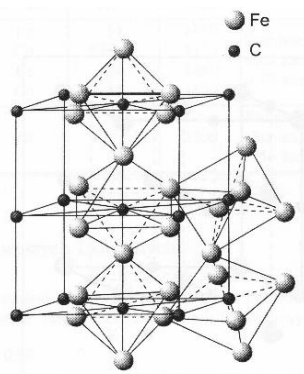
Intersticiální sloučeniny jsou charakteristické tím, že takto korespondují s **Hume-Rotheryho pravidly**

- a) nesplňují 1. pravidlo ( $r_A:r_B < 0,6$  jednoduché), poměr velikostí atomů je  $r_A:r_B > 0,6$ , složité.
- b) nejdůležitější intersticiální sloučeninou je karbid železa -  **$Fe_3C$ , (cementit)**, (je rhomboedrická intersticiální sloučenina). Naproti tomu ferit je intersticiální tuhý roztok uhlíku v železe  $\alpha$ , který krystalizuje v kubické soustavě *označované* BCC. Cementit je důležitou strukturní součástí ocelí a litin. Jiným typem intersticiální sloučeniny



je např. karbid obecně označovaný  $\text{Me}_6\text{C}$ ,  $\text{Me}_{23}\text{C}_6$  (Me - je obecné označení kovu, tj. metal);

- c) též velmi důležitými intersticiálními sloučeninami jsou nitridy, boridy a hybridy;
- d) mezi intersticiální sloučeninami se řadí tvrdé, elektricky vodivé sloučeniny s vysokou teplotou tání ( $T_t$ ).



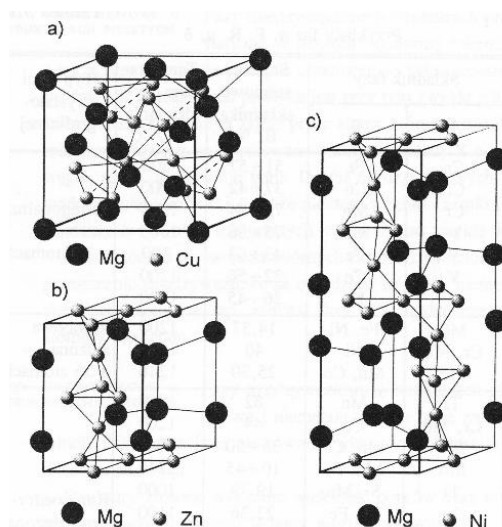
Obr. 11-4 Krystalografická mřížka karbidu typu  $\text{Fe}_3\text{C}$  [21], [31]

**2. Lavesovy fáze**, viz tabulka 11.1, vznikají tehdy, liší-li se velikost atomů složek od sebe přibližně o 22,5 %. Tím se mohou atomy velmi těsně uspořádat a dosáhnout vyšší koordinační číslo než lze dosáhnout u těsně uspořádané krychlové, plošně středěné struktury (koordinační číslo 12), obsahující atomy stejného poloměru, viz obr. 11-5, také nesplňují *Hume-Rotheryho pravidla*:

- a) též nesplňují 1. pravidlo ( $r_A:r_B < 0,6$  jednoduché), poměr velikostí atomů je  $r_A:r_B = 1,2$  až  $1,3$ ;
- b) u těchto fází výrazně převažuje velikostní faktor nad jinými;
- c) jejich obecný vzorec je  $\text{AB}_2$  (např.  $\text{MgCu}_2$ );
- d) rozdíl v chemické příbuznosti různých druhů atomů prvků, ze kterých jsou Lavesovy fáze složeny bývá nepatrný;
- e) počet valenčních elektronů je podobný;
- f) vykazují velmi těsné uspořádání, vysoké koordinační číslo.

Tabulka 11.1 Přehled Lavesových fází [21]

| Typ fáze        | Příklady fází                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|-----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\text{MgCu}_2$ | $\text{MgCu}_2$ , $\text{AgBe}_2$ , $\text{BiAu}_2$ , $\text{CaAl}_2$ , $\text{KBi}_2$ , $\text{NaAu}_2$ , $\text{NbCo}_2$ , $\text{TiBe}_2$ , $\text{ZrCo}_2$ , $\text{ZrFe}_2$ , $\text{ZrW}_2$ ,                                                                                                         |
| $\text{MgZn}_2$ | $\text{MgZn}_2$ , $\text{CaCd}_2$ , $\text{CaLi}_2$ , $\text{CaMg}_2$ , $\text{CrBe}_2$ , $\text{KNa}_2$ , $\text{MoBe}_2$ , $\text{MoBe}_2$ , $\text{NbFe}_2$ , $\text{NbMn}_2$ , $\text{SrMg}_2$ , $\text{TiFe}_2$ , $\text{TiMn}_2$ , $\text{VBe}_2$ , $\text{WBe}_2$ , $\text{WFe}_2$ , $\text{ZrCr}_2$ |
| $\text{MgNi}_2$ | $\text{MgNi}_2$ , $\text{UPt}_2$ ,                                                                                                                                                                                                                                                                          |

a) typ  $\text{MgCu}_2$ ; b) typ  $\text{MgZn}_2$ ; c) typ  $\text{MgNi}_2$ 

Obr. 11-5 Krystalografická stavba Lavesových fází [21]

**3. Elektrochemické (valenční) sloučeniny** - vznikají mezi silně elektropozitivními a elektronegativními prvky. Mnohé sloučeniny mají jednoduchou krystalovou strukturu a vyznačují se obvykle vysokou teplotou tání. Patří sem např. sulfidy  $\text{FeS}$ ,  $\text{NiS}$ , selenidy  $\text{NiSe}$ ,  $\text{FeSe}$  a dále  $\text{FeSn}$ ,  $\text{FeSb}$ ,  $\text{NiSb}$  atd. Také nesplňují Hume-Rotheryho pravidla:

- je rozdíl ve 2. Hume-Rotheryho pravidle°;
- stechiometrický poměr je dán podílem valencí;
- tyto sloučeniny tvoří elektropozitivní prvky (Be, Mg, Zn, Al) a prvky IV až VI. A podskupin (C-Sn, P-Bi, S-Te);
- fáze tvořené těmito sloučeninami jsou tvrdé, křehké a elektricky nevodivé a vykazují vysokou teplotu tavení;
- Valenční sloučeniny mají iontovou vazbu mezi silně elektropozitivními a negativními prvky. Mezi tyto sloučeniny se řadí např.  $\text{Mg}_2\text{Si}$ .

**4. Elektronové sloučeniny (Hume-Rotheryho fáze)** - jejich složení je charakterizováno určitým poměrem počtu valenčních elektronů ( $e$ ) k počtu atomů ( $n$ ) a to 3:2, 21:13, 7:4. Hume-Rothery zjistil, že se v různých systémech tvoří fáze s podobnými krystalovými strukturami, pokud je ve sloučenině podobný poměr valenčních elektronů k počtu atomů. Tyto fáze byly nazvány elektronové sloučeniny a mají význam pro specifické elektronové koncentrace, uvažujeme-li, že kovy mají mocenství dané jejich příslušností ke skupině v periodické soustavě a přechodné kovy 8. skupiny mají nulové mocenství. Elektronové sloučeniny tvoří přechodné kovy a kovy s dvěma až pěti valenčními elektrony. Např. Be, Mg, Zn, Cd, Al, viz tabulka 11.2.

Tabulka 11.2 Přehled elektronových sloučenin [21]

| Typ fáze   | Elektronový poměr | Příklady fází                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|------------|-------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\beta$    | <b>3/2</b>        | CuBe, CuZn, CuPb, AgMg, AgZn, AgCd, AuMg, AuZn, AuCd, FeAl, CoAl, NiAl                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|            |                   | AgHg, Ag <sub>4</sub> Al, Au <sub>3</sub> Al, CoZn, Mněn                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|            |                   | Cu <sub>3</sub> Ga, Cu <sub>5</sub> Ge, Agcd, Ag <sub>3</sub> Al, Ag <sub>3</sub> Ga, Ag <sub>3</sub> In, Ag <sub>5</sub> Sn, Ag <sub>7</sub> Sb, Au <sub>3</sub> In, Au <sub>5</sub> Sn                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| $\gamma$   | <b>21/13</b>      | Cu <sub>5</sub> Zn, Cu <sub>5</sub> Cd <sub>8</sub> , Cu <sub>5</sub> Hg <sub>8</sub> , Cu <sub>9</sub> Ga <sub>4</sub> , Ag <sub>5</sub> Zn <sub>8</sub> , Ag <sub>5</sub> Cd <sub>8</sub> , Au <sub>5</sub> Zn <sub>8</sub> , Mn <sub>5</sub> Zn <sub>21</sub> , Fe <sub>5</sub> Zn <sub>21</sub> , Co <sub>5</sub> Zn <sub>21</sub> , Ni <sub>5</sub> Be <sub>21</sub> , Ni <sub>5</sub> Zn <sub>21</sub> , Ni <sub>5</sub> Cd <sub>21</sub> , Pt <sub>5</sub> Be <sub>21</sub> , Pt <sub>5</sub> Zn <sub>21</sub> |
| $\epsilon$ | <b>7/4</b>        | Al <sub>2</sub> Cu, CuZn <sub>3</sub> , Cu <sub>3</sub> Sn, Cu <sub>3</sub> Ge, Cu <sub>3</sub> Si, AgZn <sub>3</sub> , AgCd <sub>3</sub> , Ag <sub>3</sub> Sn, Ag <sub>5</sub> Al <sub>3</sub> , AuZn <sub>3</sub> , AuCd <sub>3</sub> , Au <sub>3</sub> Sn                                                                                                                                                                                                                                                          |

Elektronové sloučeniny tvoří tzv. sekundární tuhé roztoky, tj. fáze s jednoznačnou krystalografickou strukturou, která zůstává zachována v určitém širším rozmezí koncentrace výchozích složek.

Fáze s poměrem 3:2 (beta mosazi) mají strukturu krychlovou prostorově středěnou, nebo komplexní krychlovou, nebo šesterečnou těsně uspořádanou. Fáze s poměrem 21:13 (fáze gama mosazi) tvoří komplexní mřížku krychlovou např. Cu<sub>5</sub>Zn<sub>3</sub>, Cu<sub>9</sub>Al<sub>4</sub>.

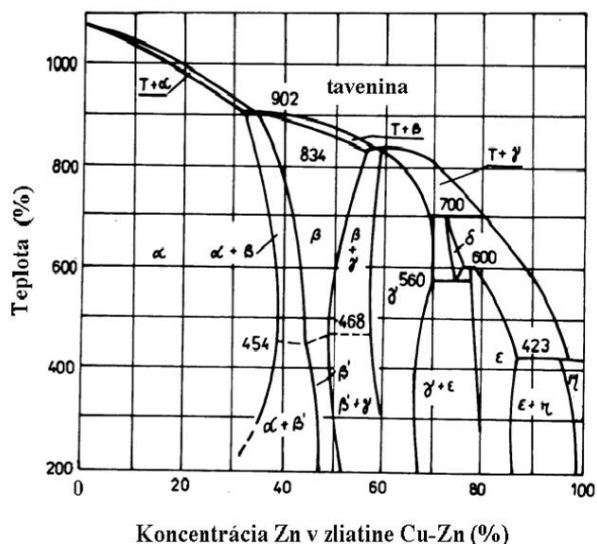
Při poměru 7:4 (fáze  $\epsilon$ ), vznikají fáze s krystalovou strukturou šesterečnou těsně uspořádanou, např. CuZn<sub>3</sub>, CuSn<sub>3</sub>.

Největší význam mají tyto fáze v mosazích (slutinách Cu-Zn), viz rovnovážný diagram na obr. 11-6.

Z elektronových sloučenin jsou pro slitiny hliníku důležité sloučeniny, resp. fáze, s poměrem valenčních elektronů/počet atomů 7/4. Tyto fáze jsou méně stabilní a vykazují nižší tavicí teplotu. Mezi tyto fáze se řadí např. Al<sub>2</sub>Cu, Al<sub>3</sub>Ni.

Z hlediska Hume-Rotheryho pravidel:

- nesplňují v podstatě 3. Hume-Rotheryho pravidlo - elektrochemický faktor;
- jsou to sekundární tuhé roztoky a vykazují kovový charakter, široký rozsah koncentrace;
- dodržují určité tzv. elektronové koncentrace: počet všechvalenčních elektronů/počet všech atomů. e/n (3:2, 21:13, 7:4) aj;
- tvoří je přechodové kovy s kovy nepřechodovými s 2 až 5 valenčními elektrony;
- jsou méně stálé než valenční sloučeniny.

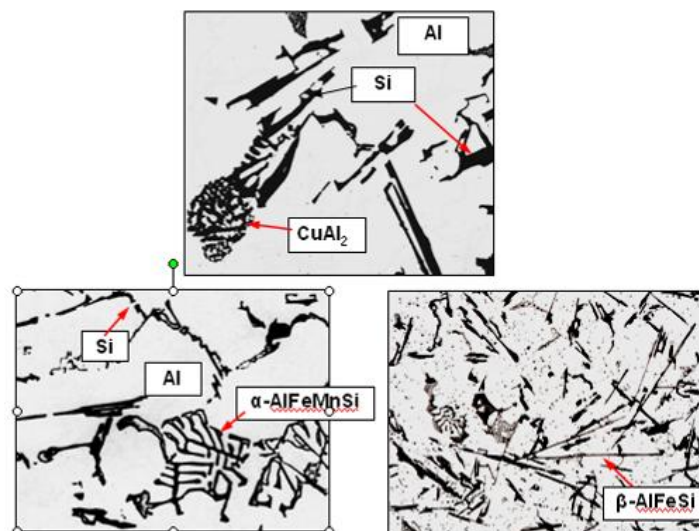


Obr. 11-6 Rovnovážný diagram Cu - Zn

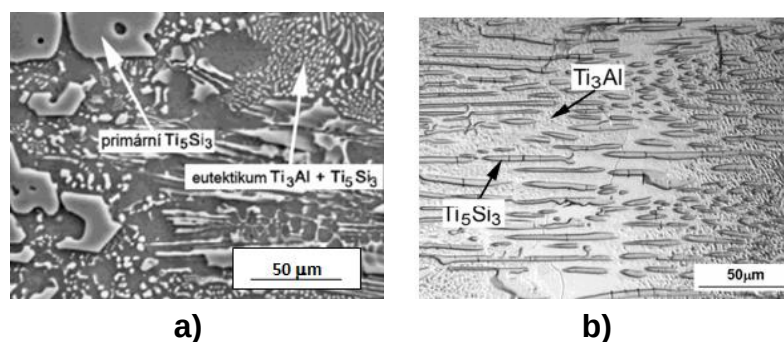
**5. Fáze sigma** - objevují se ve slitinách s přechodovými kovy, jsou typu AB. Vytváří se z tuhého roztoku  $\alpha$  u slitin Fe-Cr při pomalém ochlazování, za vzniku fází typu FeCr, které se vyskytují v řadě legovaných ocelí a jejich přítomnost podstatně ovlivňuje mechanické vlastnosti materiálu. Přítomnost fáze  $\sigma$  v legovaných ocelích je např. současně příčinou jejich značné křehkosti. Fáze  $\sigma$  jsou tvrdé a za nízkých teplot nemagnetické. Bývají přítomné v ocelích s chromem nad 25 %. Tyto fáze se vyznačují tím, že vznikají v systémech s velmi malými rozdíly poloměrů atomů složek (max. 8 %). Koncentrační rozsahy jejich existence jsou poměrně široké, pohybují se okolo 5 až 20 %. Jejich struktura je tetragonální. Elementární buňka je poměrně velká, např. u FeCr obsahuje 30 atomů. Koordinační číslo se pohybuje mezi 12 a 15 podle polohy atomu v elementární buňce. Charakteristické jsou pro tyto fáze i celkové koncentrace s a d elektronů (6 až 7 elektronů na atom). Kromě systému Fe-Cr lze najít podobné fáze v systémech V-Mn, V-Fe, V-Ni, Cr-Mn či Cr-Co. Z hlediska Hume-Rotheryho pravidel a dalších okolností je možno fáze  $\sigma$  charakterizovat:

- vznikají u přechodových kovů s velmi podobným poloměrem atomů;
- je pro ně charakteristická široká oblast koncentrací;
- jsou typické především ve feritických nerezových ocelích (Fe-Cr);
- jsou tvrdé a křehké;
- vykazují velmi komplikovanou strukturu.

Na obr. 11-7 je ukázka intermetalických fází, které se nachází ve slitinách hliníku. Na obr. 11-8 jsou uvedeny intermediální fáze ve slitině TiAl<sub>23</sub>Si<sub>7</sub>.



Obr. 11-7 Typy intermediálních fází ve slitině Al-Si [50]



a) - struktura po odlití,  
b) - po záměrné směrové krystalizaci

Obr. 11-8 Intermediální fáze ve slitině TiAl<sub>23</sub>Si<sub>7</sub> (Ti<sub>3</sub>Al; Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>)

## 11.2 Úlohy k procvičení

### Úloha č. 1

Nakreslete schéma tuhého roztoku intersticiálního a tuhého roztoku substitučního.

### Úloha č. 2

Jaká kritéria platí pro vznik intersticiálního tuhého roztoku?

### Úloha č. 3

Do jaké skupiny intermediálních fází se řadí Al<sub>2</sub>Cu, která má význam při precipitačním vytvrzování slitin hliníku typu Al-Si-Cu.

## 12. FÁZOVÉ PŘEMĚNY V TUHÉM STAVU

Obecně fázové přeměny v tuhém stavu je možno rozdělit do dvou základních skupin na *rozpad tuhého roztoku* a *přeměnu tuhého roztoku*.

### A) Rozpad tuhého roztoku

- rozpad přesyceného tuhého roztoku při změně rozpustnosti;
- eutektoidní rozpad;
- rozpad při vzniku proeutektoidních fází.

### B) Přeměna tuhého roztoku

difúzní přeměna

- jednoho tuhého roztoku v jiný tuhý roztok;
- neuspořádaného tuhého roztoku v uspořádaný.

bezdifúzní přeměna

- martenzitická přeměna.

**Kinetika fázových přeměn** - rychlost fázových přeměn je jedním kritériem pro jejich sledování. Je závislá na aktivační energii pochodu, Boltzmanově konstantě, absolutní teplotě a konstantě procesu. Rychlost přeměny lze vypočítat:

$$v = A \cdot \exp\left(-\frac{Q}{k \cdot T}\right), \quad (12.1)$$

kde značí:  $v$  - rychlost přeměny;  $A$  - konstantu;  $Q$  - aktivační energii potřebnou pro fázovou přeměnu [J];  $k$  - Boltzmanovu konstantu ( $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ );  $T$  - absolutní teplotu přeměny [K].

### 12.1 Alotropické přeměny kovů

Při primární krystalizaci vzniká z taveniny *tuhá fáze*. U některých kovů při dalším ochlazování pod teplotou krystalizace se *mění jejich krystalická stavba*. Krystaly jednoho druhu se mění v krystaly druhého druhu, čímž dochází k tzv. *překrystalizaci* (alotropické přeměně, polymorfní přeměně);

Překrystalizace je také spojena se změnou charakteru krystalické mřížky (např.  $\text{Fe}_\gamma$  - FCC, tzv. kubická 14 bodová,  $\text{Fe}_\alpha$  – BCC, tzv. kubická 9 bodová).

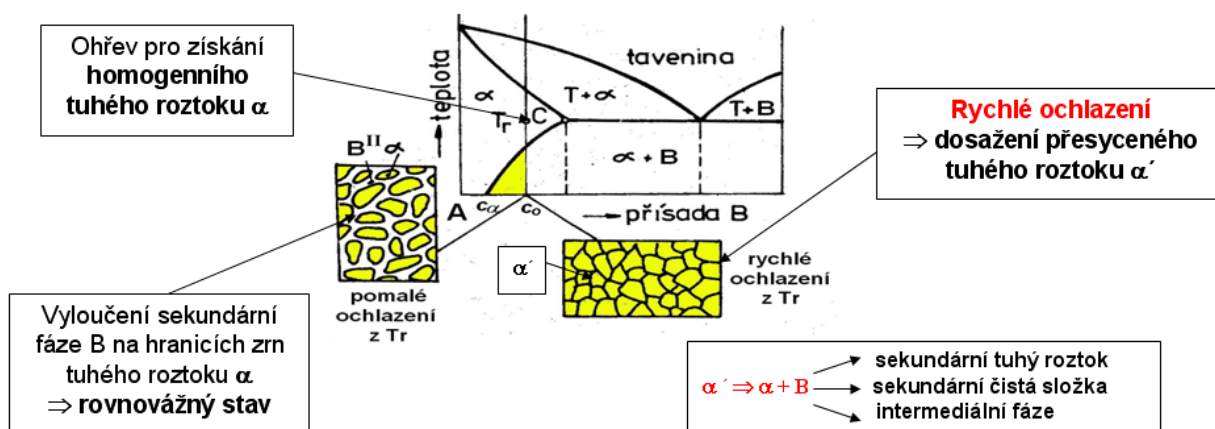
Schopnost látky, resp. kovů krystalizovat v různých soustavách se nazývá **alotropie**. U slitin kovů to je tzv. **polymorfie**.

Jednotlivé druhy *krystalů* se nazývají modifikace a označují se písmeny řecké abecedy ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ). Mezi alotropické kovy se řadí Fe, Mn, Co, Ti, Sn.

## 12.2 Rozpad tuhého roztoku

K rozpadu dochází tehdy, pokud dojde k *přesycení tuhého roztoku* při změně teploty rozpouštěnou složkou (křivka solvus). Základním předpokladem pro tuto fázovou přeměnu je změna rozpustnosti roztoku při změně teploty. Rozpad tuhého roztoku je jednou z nejdůležitějších fázových přeměn, využívá se při tepelném zpracování kovů: *ocelí, slitin hliníku a slitin zinku*.

Na obr. 12-1 je schéma diagramu s částečnou rozpustností v tuhém stavu s naznačením pomalého a rychlého ochlazení tuhého roztoku  $\alpha$ .



Obr. 12-1 Schéma diagramu s částečnou rozpustností v tuhém stavu s naznačením pomalého a rychlého ochlazení tuhého roztoku  $\alpha$

### 12.2.1 Segregace

Segregace je typická pro pomalé ochlazování, to znamená, že se důsledně *projevuje difúze přísadových prvků*. Do jisté míry je segregace opakem *precipitace*.

Při dostatečně vysoké teplotě rovnovážného stavu nasycení a při *pomalém ochlazování obecného tuhého roztoku*  $\alpha$  se na hranicích zrn  $\alpha$  vylučuje obecně označená rovnovážná fáze (např. B), viz obr. 12-1. Množství vyloučeného segregátu je velmi malé, takže jeho vylučování není spojeno s žádným teplotním jevem, po hranicích zrn  $\alpha$  je souvislé síťoví nové fáze.

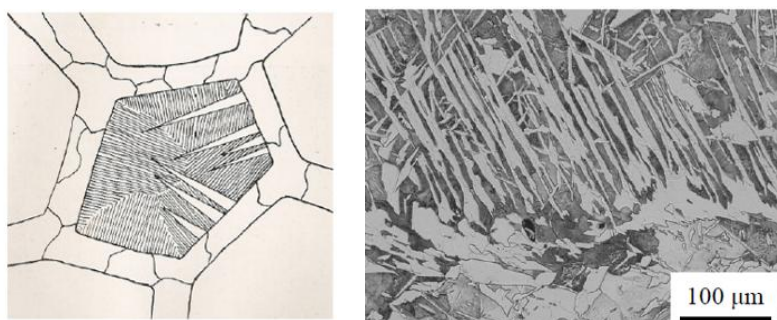
Segregace významně *snižuje mechanické vlastnosti* materiálu, např. snížení houževnatosti se projevuje zvýšením *křehkosti*.

V technické praxi se segregace vyskytuje u ocelí, jak při vzniku II. a III. cementitu.

### 12.2.2 Widmanstättenova struktura (WS)

Widmanstättenova struktura (WS), viz obr. 12-2, vzniká při *vyšší rychlosti ochlazování*, než je tomu u segregace. K vylučování *nové fáze* dochází jak *na hranicích*, tak *uvnitř zrn*.

Vzniká v soustavě *Fe-C*, její předpoklad závisí na rychlosti ochlazování, chemickém složení a velikosti zrna. Je typická pro *podeutektoidní oceli*, především při svařování. Nová fáze vzniká v těch rovinách, kde se projevuje největší podobnost původní a nové fáze. Widmanstättenova struktura vzniká pouze v důsledku *difúze uhlíku*, nikoliv v důsledku difúze substitučních prvků. Pro tuto strukturu je typický *jehlicovitý ferit*, který vzniká na hranicích zrn austenitu.



Obr. 12-2 Widmanstättenova struktura [70]

### 12.2.3 Precipitace

Precipitace je vylučování nové fáze z přesyceného tuhého roztoku, které může probíhat v různých podobách podle podmínek rozpadu a také původu přesyceného tuhého roztoku. Z tohoto pohledu se precipitace dělí na:

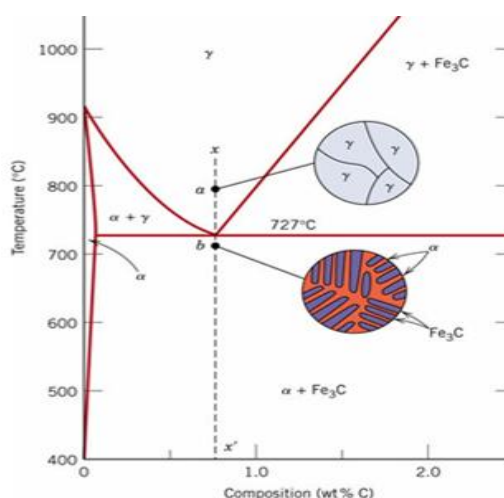
- *celkovou* - jednotlivé částice fáze  $\beta$  nukleují a rostou v přesyceném tuhém roztoku  $\alpha$ .
- *precipitace buňková* - nastává při nukleaci a růstu buněk polokulovitého tvaru, jež jsou tvořeny pravidelně rozloženými lamelami precipitátu  $\beta$  v ochuzeném tuhém roztoku  $\alpha$  (vyskytuje se např. při precipitaci cínu v soustavě Pb-Sn);
- *precipitace s tvorbou Gueinier-Prestonových zón (GP zón)* - je technicky nejvýznamnější, protože v jejím důsledku dochází k významnému zvýšení tvrdosti a pevnosti slitin kovů (GP zóny jsou návazné útvary u slitin Al-Si-Cu, Mg-Si, atd). V těchto soustavách vznikají fáze  $\text{Al}_2\text{Cu}$ ,  $\text{Mg}_2\text{Si}$ , které se mohou při přesycení tuhého roztoku  $\alpha$  vylučovat (precipitovat).



### 12.2.4 Eutektoidní přeměna

Eutektoidní přeměna je *difúzní rozpad tuhého roztoku* na dvě chemicky a krystalograficky odlišné fáze. U této přeměny je rozhodující difúze, proto je eutektoidní přeměna (rozpad) tuhého roztoku za konstantní teploty, při níž je difúze dosti intenzivní. Výsledná heterogenní struktura vzniklá eutektoidní přeměnou se nazývá *eutektoid*.

Typickým zástupcem eutektoidní přeměny je v soustavě Fe-C vznik *perlitu*, viz obr. 12-3, zde se jedná o *eutektoidní rozpad* tuhého roztoku uhlíku. V tomto případě to je austenit – tuhý roztok uhlíku v  $\text{Fe}_\gamma$ . Rozpad austenitu probíhá za teploty  $A_1$  (727 °C) a obsahu uhlíku 0,76 [hmot. %]. Vzniká směs dvou heterogenních fází: feritu (Fe) a II. cementitu ( $\text{Fe}_3\text{C}$ ).



Temperature - teplota, Composition wt % C – složení [hmot. %]

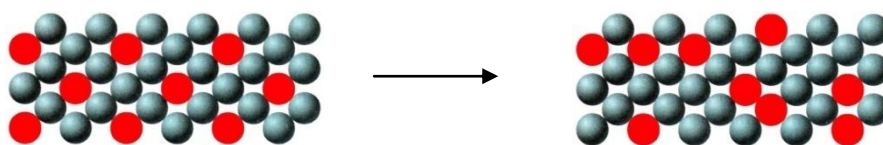
Obr.12-3 Eutektoidní přeměna, typická pro vznik perlitu v soustavě Fe-C [68]

### 12.3 Přeměny tuhého roztoku

Jsou přeměny, při kterých *původní tuhý roztok*, popř. fáze, se mění v novou fázi, jejíž konečné složení je stejné jako složení původní fáze. Ve srovnání s rozpadem *tuhého roztoku* je zásadní rozdíl v tom, že z homogenní fáze se tvoří opět jiná fáze stejného složení, ale odlišná krystalograficky. Přeměna je doprovázena *změnou vlastností*, což lze dobře využít v technické praxi v rámci tepelného zpracování:

- přeměna *uspořádaného tuhého roztoku* v *neuspořádaný roztok*, viz obr. 12-4.
- přeměna *tuhého roztoku* v *jiný tuhý roztok* - při pomalém ochlazování,

jsou to přeměny difúzního charakteru, je důležitý pro soustavu Fe-C, např. přeměna  $\text{Fe}_\delta$  na  $\text{Fe}_\gamma$ .

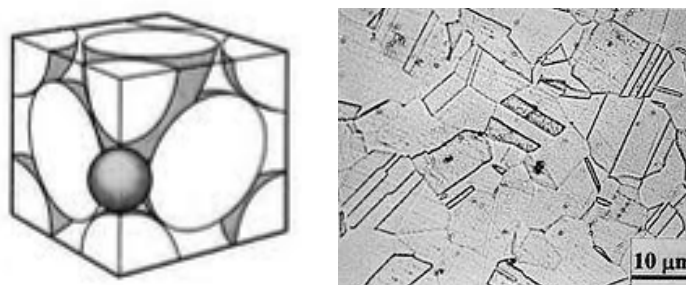


Obr. 12-4 Schéma přeměny uspořádaného tuhého roztoku v neuspořádaný

## 12.4 Technicky důležité přeměny

Technicky *důležité přeměny* kovů jsou především spojeny se soustavou Fe-C, resp. s oceli. Tuhý roztok, který se u ocelí prodělává přeměnou a je velmi důležitý, se nazývá **austenit**, viz obr. 12-5. Proces vzniku austenitu, jak je obecně známo, se nazývá *austenitizace*.

Austenit je jednou z nejdůležitějších struktur u ocelí. Austenit je tuhý intersticiální roztok C v  $\text{Fe}_\gamma$  je důležitou fází ze soustavy Fe-C pro vznik perlitické, bainitické a martenzitické přeměny.

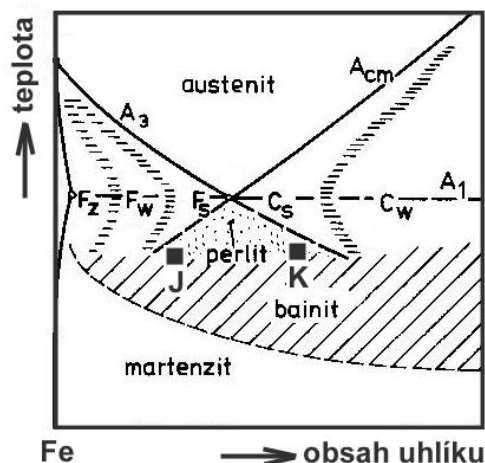


Obr. 12-5 Schéma krystalické buňky austenitu a struktura austenitu [67]

### 12.4.1 Perlitická přeměna

Perlitická přeměna je *difúzní přeměna* austenitu, na které se podílí jak *difúze železa*, tak *difúze uhlíku* za vzniku lamelární směsi *feritu* a *cementitu*.

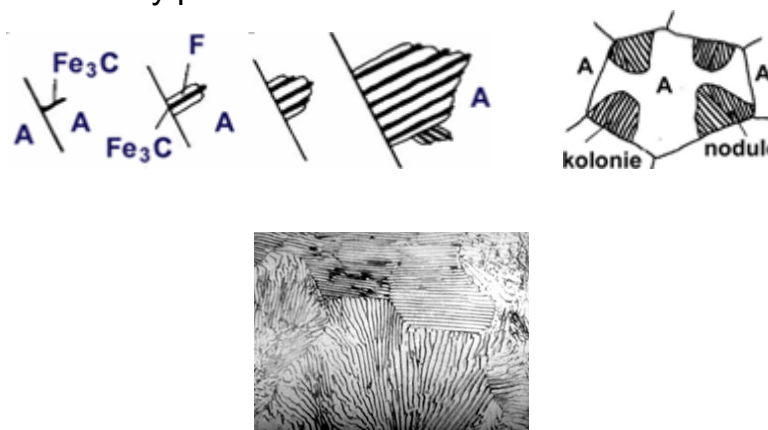
Hybnou silou přeměny je heterogenní nukleace na hranicích zrn austenitu zárodků feritu např. v *bodě J*, a zárodek cementitu např. v *bodě K*, viz obr. 12-6. Přeměna probíhá difúzí při teplotě pod  $A_1$ . Vzniká *lamelární perlit*, tloušťka lamel závisí na difúzní rychlosti uhlíku v austenitu, která je tím vyšší, čím vyšší je teplota. Proto perlit, který vzniká při vyšší teplotě je hrubozrnný. Je-li teplota těsně pod *eutektoidní*, vzniká *perlit globulární*.



Obr. 12-6 Část diagramu Fe-C s naznačením vzniku perlitu

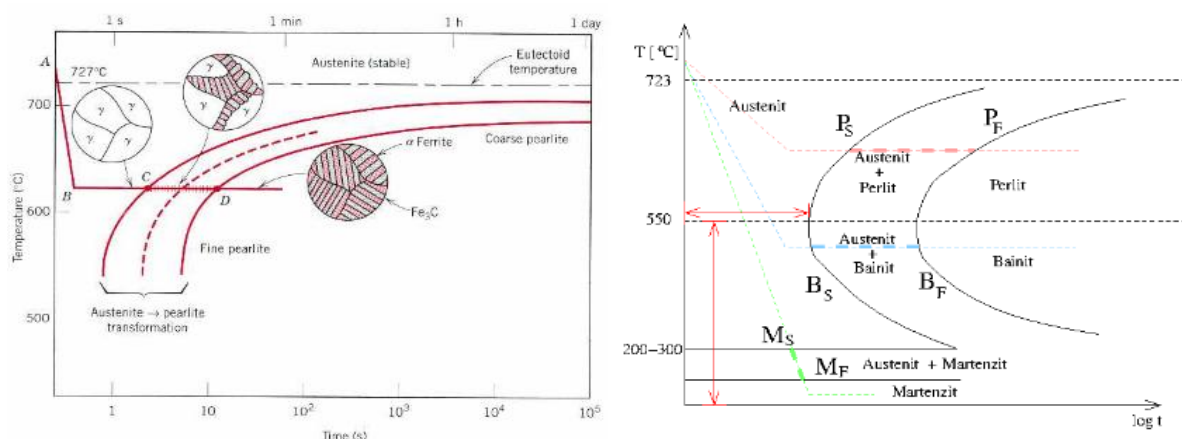
Perlitická přeměna probíhá růste kolonií perlitu, tak, že se v kolonii austenitu střídavě tvoří cementit a ferit, viz obr. 12-7. Tato přeměna je difúzní, difunduje jak železo, tak uhlík. Nejprve vzniká zárodek cementitu, je krystalograficky podobnější austenitu. Kolem vzniklého cementitu jsou místa ochuzená o uhlík, později začínají vznikat vedle cementitu lamely feritu. Lamely feritu odčerpávají z okolí železo a tím vznikají volná místa bohatá na uhlík a opět vznikají lamely cementitu, čímž dochází ke vzniku a růstu zrn perlitu. Pod teplotou  $A_1$  jsou lamely feritu a cementitu tlustější a perlit je menší, je označován jako *globulární perlit*. Při teplotách blízko nosu křivky (v IRA diagramu) jsou lamely feritu a cementitu jemnější a perlit je tvrdší.

Mezilamelární vzdálenost je tloušťka dvojice lamel (feritu a cementitu), která se zmenšuje s klesající teplotou přeměny. Rostou pevnostní vlastnosti, klesají deformační charakteristiky perlitu.



Obr. 12-7 Schéma vzniku perlitu, kolonie perlitu a jeho struktura [55]

Na obr. 12-8 je naznačena perlitická přeměna v diagramu IRA.



Obr. 12-8 Schéma vzniku politické přeměny v podmínkách izotermického rozpadu austenitu

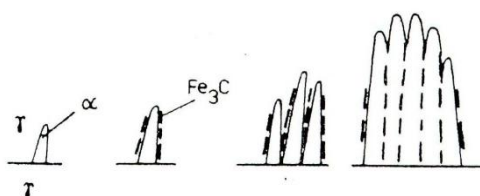
### 12.4.2 Bainitická přeměna

Bainitická přeměna je polodifúzní přeměna vznikající pouze *difúzí uhlíku*, železo se na difúzi nepodílí. Přeměnou vzniká *bainit*, tj. směs dvou fází tzv. *bainitického feritu* a *karbidu*. Rozlišujeme horní a dolní bainit. Při tvorbě *horního bainitu* karbidem je  $Fe_3C$ , při tvorbě *dolního bainitu* karbidem je  $\epsilon$  karbid ( $Fe_{2,4}C$ ).

Bainitický ferit je nerovnovážní ferit, je mírně přesycen uhlíkem, tento ferit vzniká smykovým mechanismem. O vzniku horního, nebo spodního bainitu rozhoduje teplota přeměny (transformační teplota). Obecně platí, že při vyšších teplotách a pomalejším ochlazování vzniká horní bainit, při nižších teplotách cca 350 °C a větších rychlostech ochlazování *dolní bainit*;

*Bainit* je feriticko karbidická směs (vzniká za jiných podmínek než perlit). Je to také nerovnovážná a nelamelární směs deskových nebo jehlicových (laťkových) krystalů více nebo méně přesyceného feritu a drobných částic karbidů.

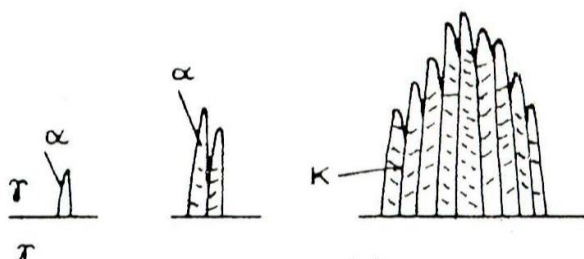
**Horní bainit** se více blíží perlitu, naopak dolní bainit martenzitu. Horní bainit vzniká při teplotách nad asi 350 °C při obsahu asi 0,6 % C. Proti dolnímu bainitu vykazuje nižší pevnostní vlastnosti, větší houževnatost. Je však pevnější a tvrdší než perlit. Na obr. 12-9 je schéma vzniku horního bainitu.



Obr. 12-9 Schéma vzniku horního bainitu

Difúze je *částečně potlačena*, z *austenitu* se vylučuje *ferit* ve formě jehlic, které jsou přesycené uhlíkem (ve formě cementitu), uhlík difunduje na povrch jehlic feritu, kde se vylučuje ve formě cementitu. Je tvrdší než jemný perlit.

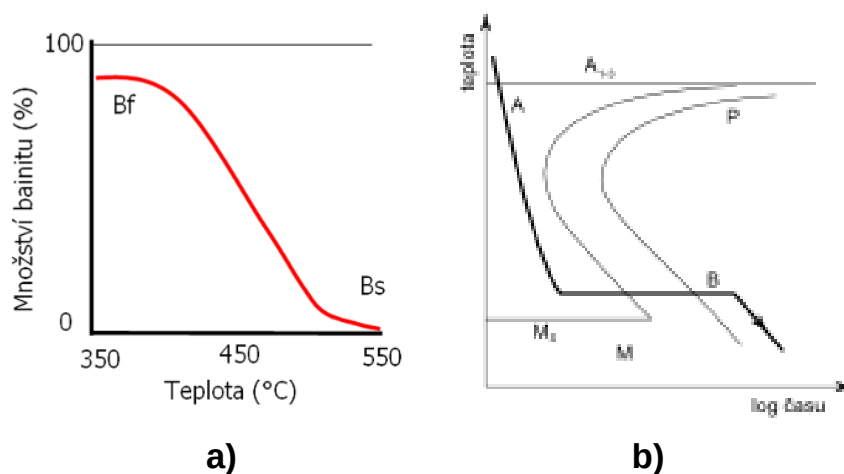
**Dolní bainit** vzniká při teplotách mezi 350 °C a teplotou  $M_s$  (martenzit start) u ocelí s 0,6 % C. Vykazuje vyšší pevnostní vlastnosti, avšak nižší houževnatost než horní bainit. Mechanismus vzniku dolního bainitu je jiný než u horního bainitu. Zde je difúze více potlačována, než u horního bainitu. Z *austenitu* se vylučuje *ferit* ve formě jehlic, které jsou přesycené uhlíkem (ve formě cementitu). Uhlík zůstává uvnitř jehlic feritu ve formě karbidů, protože uhlík nedifunduje k povrchu jehlic feritu. Dolní bainit je tvrdší než horní bainit. Schéma vzniku dolního bainitu je na obr. 12-10.



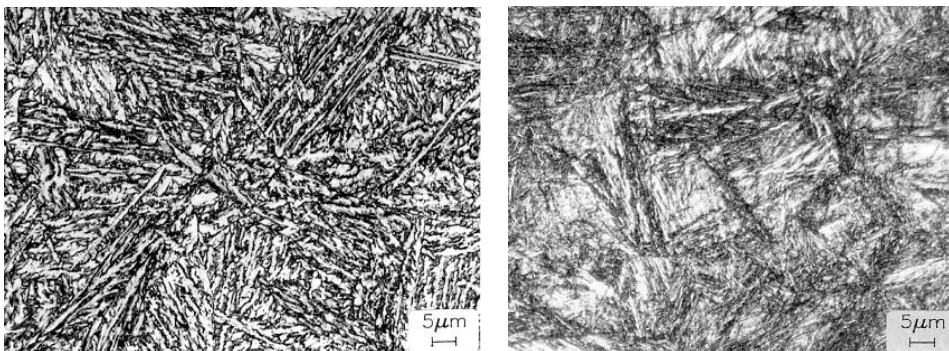
Obr. 12-10 Schéma vzniku dolního bainitu

Dolní bainit, který vzniká při teplotě 250 až 400 °C, má více acikulární formu (protáhlý tvar) než *horní bainit*. u dolního bainitu se nevyskytuje takové množství hran o malých úhlech mezi jehlicemi. Zrna cementitu vznikají na rozhraní mezi *feritem* a *austenitem*.

Na obr. 12-11a) je bainitická křivka oceli, udává množství austenitu, který je možno přeměnit na bainit v závislosti na teplotě přeměny; teplota  $B_s$  (bainit start);  $B_f$  (bainit finish). Na obr. 12-11b) je IRA diagram s naznačením vzniku dolního bainitu. Na obr. 12-12 je struktura bainitu.



Obr. 12-11 Bainitická křivka a diagram IRA vzniku dolního bainitu



Obr 12-12 Mikrostruktura bainitu [56]

### 12.4.3 Martenzitická přeměna

Martenzitická přeměna je *bezdifuzní* přeměna to znamená, že nedifunduje železo ani uhlík.

Jedná se o přeměnu *tuhého roztoku* na bázi železa, resp. austenitu ( $\text{Fe}\gamma$ ) v jiný tuhý roztok, který je však *přesycen uhlíkem*, (přesycený tuhý roztok uhlíku v  $\text{Fe}\alpha$ ).

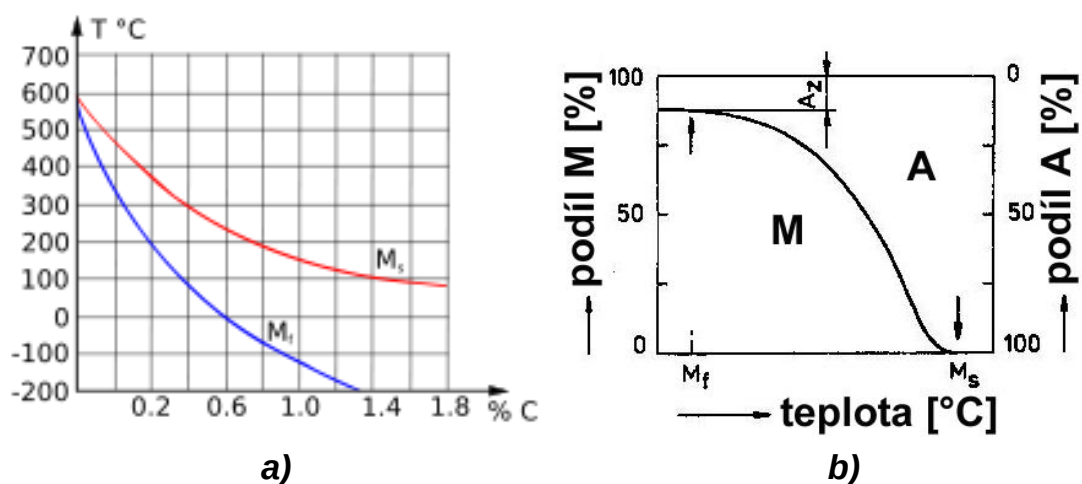
Při martenzitické přeměně (transformaci) je austenit ochlazen tak rychle, aby přes oblast teplot perlitické a bainitické přeměny (transformace) přešel beze změny a při nízkých teplotách pak se přeměnil (transformoval) na martenzit.

Teploty martenzitické přeměny jsou tak nízké, že je při nich prakticky nemožná difúze substitučních ani intersticiálních atomů. Proto je chemické složení vznikajícího martenzitu totožné se složením původního austenitu a přesuny atomů při transformaci jsou možné jen na vzdálenost kratší než je meziatomová vzdálenost v mřížce. Proto je tato přeměna označena jako *bezdifuzní*.

Martenzit je definován jako přesycený tuhý roztok uhlíku v železe  $\alpha$ , který vzniká stříhovým mechanismem. Přesycený roztok říkáme proto, že difúze atomu uhlíku je zanedbatelná, takže atomy uhlíku zůstanou „uvězněny“ v mřížce železa  $\alpha$ . Přesycení mřížky atomy uhlíku vyvolá její deformaci. Ve skutečnosti se již nejedná o mřížku kubickou prostorově centrovanou, ale o mřížku tetragonální prostorově centrovanou. Hlavním rysem martenzitické přeměny je zvláštní způsob tvorby nové fáze (martenzitu), který probíhá souborným přemístěním atomů železa, který nepřesahuje meziatomovou vzdálenost.

Na obr. 12-13a) je závislost teplot  $M_s$  a  $M_f$  na obsahu uhlíku. Na obr. 12-13b) je křivka martenzitu a zbytkového austenitu.



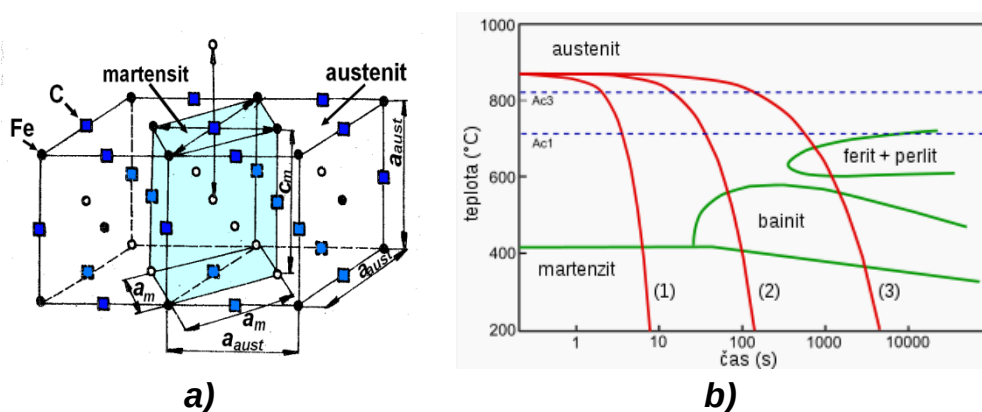


Obr. 12-13 Závislost teplot  $M_s$ ,  $M_f$  na obsahu uhlíku a křivka podílu martenzitu a zbytkového austenitu na teplotě

Teplota  $M_s$  je závislá na chemickém složení, lze ji vypočítat:

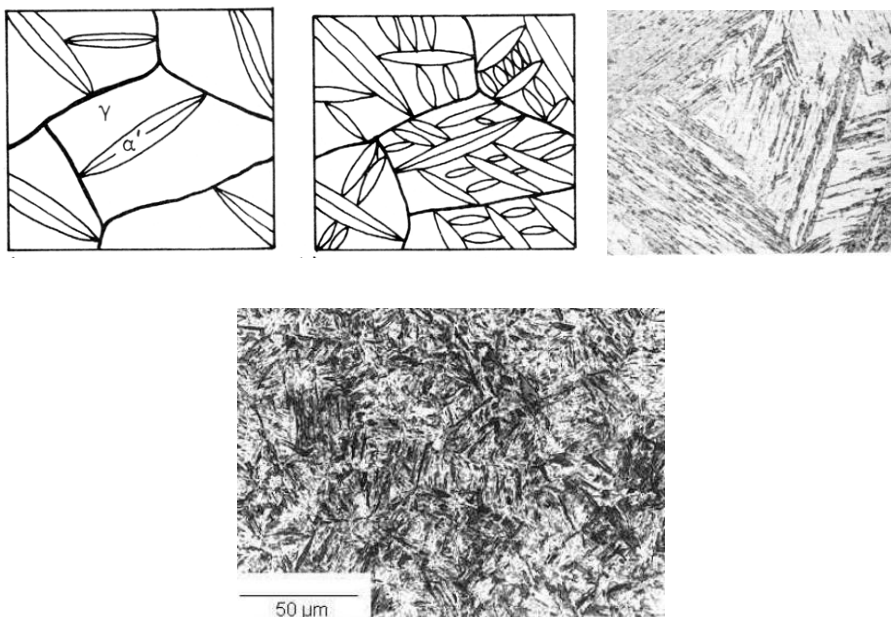
$$M_s = 530 - 415\%C + 90\%C^2 - 35\%Mn - 30\%Cr - 20\%Ni - 15\%W - 10\%Mo [^{\circ}\text{C}] \quad (12.2)$$

Na obr. 12-14a) je uvedena krystalická buňka martenzitu, která vznikla transformací austenitu. Na obr. 12-14b) jsou naznačeny ochlazovací účinky v diagramu ARA ta účelem vzniku různých struktur. Křivka (1) je ochlazovací účinek pro vznik martenzitu (a zbytkového austenitu).



Obr. 12-14 Vznik martenzitu na základě krystalické buňky austenitu a na základě transformace ochlazování austenitu

Na obr. 12-15 je schéma vzniku struktury martenzitu ( $\alpha'$ ) z austenitu ( $\gamma$ ) a struktura martenzitu.



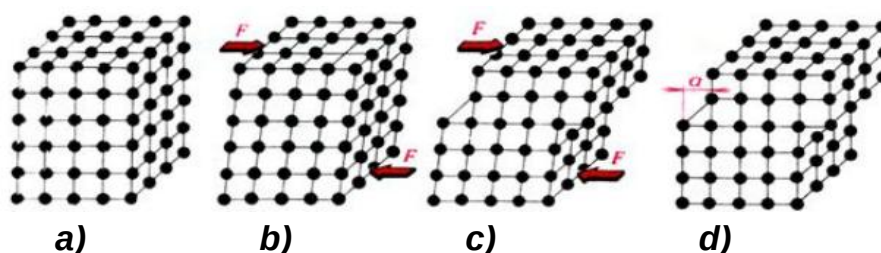
Obr. 12-15 Schéma vzniku struktury martenzitu ( $\alpha'$ ) z austenitu ( $\gamma$ ),  
struktura martenzitu [57]



## 13. DEFORMAČNÍ CHOVÁNÍ KOVŮ

Působíme-li na kovové těleso *vnější silou* a překročíme-li mez pevnosti, dojde k jeho *porušení (destrukci)*. Pokud je vnější síla *menší*, pak způsobí jen deformaci tělesa, rozlišujeme deformaci:

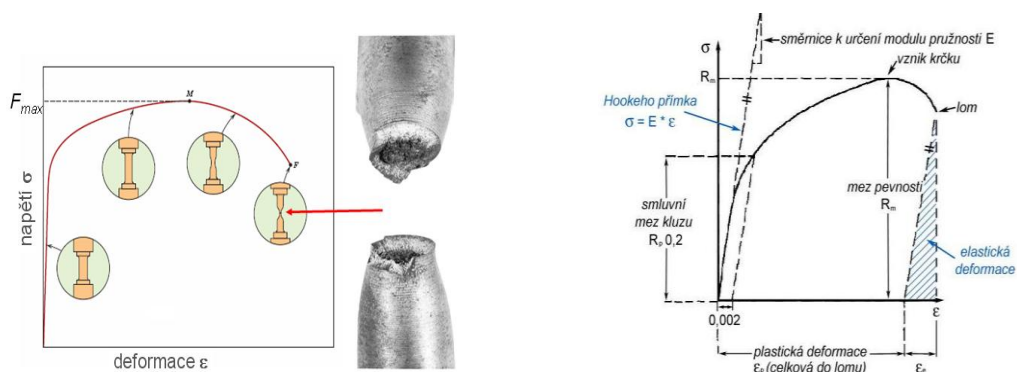
- *elastickou* - po odlehčení síly se těleso vrací do původního tvaru;
- *plastickou* - po odlehčení síly těleso zůstane tvarově deformované, viz krystalická mřížka deformovaná o hodnotu  $a$  (mřížkového parametru).



*a - výchozí stav krystalové mřížky, b - působící síla způsobuje pružnou deformaci, c - zvětšení deformační síly způsobilo plastickou (trvalou) deformaci, d - po odlehčení zůstává krystalická mřížka trvale deformovaná, došlo k posuvu atomů o mřížkový parametr  $a$*

Obr. 13-1 Schéma vzniku plastické deformace

Na obr. 13-2 je vyznačení plastické a elastické deformace v diagramu pro zkoušku tahem. Elastická deformace (pružná), po odlehčení síly se těleso vrací do původního tvaru. Plastická deformace (trvalá), po odlehčení síly těleso zůstane tvarově deformované.



Obr. 13-2 Schéma vzniku pružné a plastické deformace při zatěžování zkušebního tělíska tahovou silou [68]

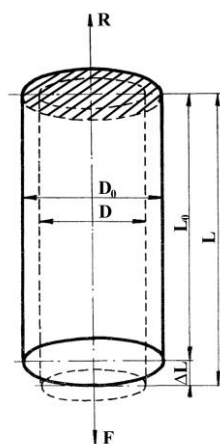
### 13.1 Pružná (elastická) deformace

Působí-li na kovový materiál malá síla, pak dochází k vychylování atomů z rovnovážných uzlových bodů krystalické mřížky ve směru působící síly. Přitom však nedochází k trvalým změnám vazebného stavu jednotlivých atomů. Síla natahující zkušební těleso o průřezu  $S_0$  ve směru jeho osy způsobí prodloužení a současně zúžení zkušebního tělesa. Jestliže se nemění teplota zkušebního tělesa a působící síla vyvolá malé napětí, bude se materiál tělesa deformovat elasticky. *Poměrné prodloužení tělesa  $\varepsilon$  a deformaci v příčném směru  $\psi$* , viz obr. 13-3, lze vypočítat:

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L_0} = \frac{L - L_0}{L_0} \quad [1] \quad (13.1)$$

$$\psi = \frac{\Delta D}{D_0} = \frac{D_0 - D}{D_0} \quad [1] \quad (13.2)$$

kde značí:  $\Delta L$  – změnu délky [mm];  $L_0$  – původní délku zkušební tyče [mm];  $L$  – délku tyče po přetržení [mm];  $\Delta D$  – změnu průměru tyče [mm];  $D_0$  – původní průměr tyče [mm];  $D_0$  – průměr tyče před zkouškou [mm];  $D$  – průměr tyče po zkoušce [mm].



Obr. 13-3 Schéma dřívku zkušební tyče s označením veličin před a po zkoušce

Poměr příčné a podélné deformace je *Poissonovo číslo*:

$$\mu = \frac{\psi}{\varepsilon} \quad [1] \quad (13.3)$$

Obvyklé hodnoty Poissonova čísla jsou u kovů:  $0,25 \leq \mu \leq 0,35$ . Keramiky vykazují  $\mu \approx 0,25$  a polymery  $\mu \approx 0,40$ .

V tabulce 13.1 jsou hodnoty *Poissonova čísla* a hodnoty *Youngova modulu pružnosti*.

Základem elastické (pružná) deformace je vratná distorze krystalické mřížky. V oblasti pružných deformací je poměrné prodloužení  $\varepsilon$  přímo úměrné napětí  $\sigma = E \cdot \varepsilon$ .

*Youngův modul pružnosti v tahu (E)*, je to napětí, které působí na jednotkovou krychli ve směru osy x a způsobí její protažení o jednotkou délku, aniž dojde k porušení materiálu.

*Modul pružnosti ve smyku (G)*, souvisí s Youngovým modulem pružnosti v tahu (E) a *Poissonovým číslem*:

$$G = \frac{E}{2(1 + \mu)} \quad (13.4)$$

Modul pružnosti v tahu (E) a ve smyku (G) jsou funkcí mezioatomové vzdálenosti, teploty a složení kovové slitiny.

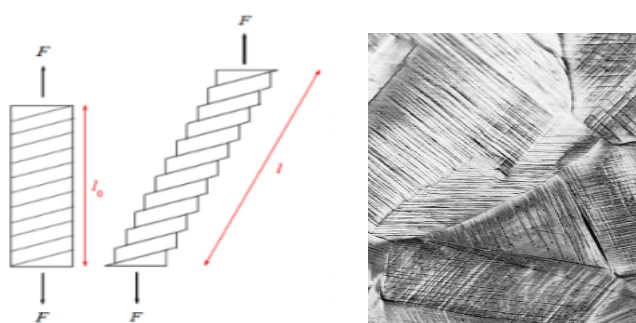
Tabulka 13.1 Hodnoty Poissonova čísla a Youngova modulu pružnosti

| Kov, slitina kovů                   | Hodnota Youngova modulu pružnosti E [MPa] | Poissonovo číslo $\mu$ [1] | Poznámka                                |
|-------------------------------------|-------------------------------------------|----------------------------|-----------------------------------------|
| <b>Železo</b>                       | 200 000                                   | 0,29                       |                                         |
| <b>Hliník</b>                       | 70 000                                    | 0,34                       |                                         |
| <b>Hořčík</b>                       | 45 000                                    | 0,28                       |                                         |
| <b>Mangan</b>                       | 202 000                                   | 0,24                       |                                         |
| <b>Cín</b>                          | 55 400                                    | 0,33                       |                                         |
| <b>Zinek</b>                        | 90 000                                    | 0,29                       |                                         |
| <b>Měď</b>                          | 125 000                                   | 0,35                       |                                         |
| <b>Olovo</b>                        | 16 000                                    | 0,44                       |                                         |
| <b>Nikl</b>                         | 196 000                                   | 0,32                       |                                         |
| <b>Kobalt</b>                       | 208 000                                   | 0,31                       |                                         |
| <b>Chrom</b>                        | 240 000                                   |                            |                                         |
| <b>Vanad</b>                        | 149 000                                   |                            |                                         |
| <b>Platina</b>                      | 171 000                                   | 0,39                       |                                         |
| <b>Zirkonium</b>                    | 68 000                                    |                            |                                         |
| <b>Křemík</b>                       | 115 000                                   | 0,44                       |                                         |
| <b>Niob</b>                         | 106 000                                   |                            |                                         |
| <b>Wolfram</b>                      | 396 000                                   | 0,29                       |                                         |
| <b>Titan</b>                        | 108 300                                   | 0,34                       |                                         |
| <b>Molybden</b>                     | 326 000                                   | 0,31                       |                                         |
| <b>Stříbro</b>                      | 80 500                                    | 0,38                       |                                         |
| <b>Zlato</b>                        | 80 200                                    | 0,42                       |                                         |
| <b>Ocel</b>                         | 210 000                                   | 0,30                       | odpovídá téměř všem konstrukčním ocelím |
| <b>Litina s lupínkovým grafitem</b> | 96 500                                    | 0,18                       | ČSN 422415                              |
| <b>Litina s lupínkovým grafitem</b> | 130 000                                   | 0,21 až 0,26               | ČSN 422425                              |
| <b>Litina s červíkovým grafitem</b> | 160 000                                   | 0,21 až 0,26               | s perlitickou maticí                    |
| <b>Litina s kuličkovým</b>          | 180 000                                   | 0,21 až 0,26               | s perlitickou maticí                    |

|                 |                 |              |                                               |
|-----------------|-----------------|--------------|-----------------------------------------------|
| grafitem        |                 |              |                                               |
| Slitiny hliníku | 72 000 až 75000 | 0,31 až 0,33 | čísla jsou orientační, závisí na typu slitiny |
| Mosaz           | 105 000         | 0,33         | čísla jsou orientační, závisí na typu slitiny |
| Bronz           | 117 000         | 0,31         | čísla jsou orientační, závisí na typu slitiny |
| Beton           |                 | 0,20         |                                               |
| Sklo            |                 | 0,24         |                                               |
| Jíly            |                 | 0,30 až 0,45 |                                               |
| Korek           |                 | 0            |                                               |
| Přýž            |                 | 0,50         |                                               |
| Molitan         |                 | 0,10 až 0,40 |                                               |
| Písek           |                 | 0,20 až 0,45 |                                               |

### 13.2 Plastická deformace kovů

Působením dostatečně *velké síly* na kov, dochází k jeho plastické *trvalé deformaci*. Při studiu kovů a jejich slitin rozlišujeme plastickou deformaci *monokrystalu* a *polykrystalu*. V technické praxi se plastická deformace kovů využívá při výrobě kovových *dílů tvářením*. Plastická deformace kovů se vyznačuje *makroskopickou* změnou tvaru. Při plastické deformaci se *nemění* krystalová struktura materiálu. Mění se postupně orientace jednotlivých zrn v polykrystalu. Na původně hladkém povrchu kovu se po deformaci objevují *kluzové čáry*. Kluzové čáry jsou stopy rovin, na kterých dochází k posuvu dvou částí krystalu. Na obr. 13-4 je uveden důsledek plastické deformace kovů.



Obr. 13-4 Vliv plastické deformace na strukturu kovů

Plastická (trvalá) deformace kovů se uskutečňuje *pohybem dislokací*, jejíž hustota se neustále zvětšuje. Dislokace se pohybují tak dlouho, až narazí na překážku (nečistota, hranice zrna, dislokace apod.). Na překážce se dislokace nahromadí a následkem vzrůstu jejich koncentrace se zvýší vnitřní napětí a tím dojde ke zvětšení pevnosti a tvrdosti a zároveň ke zmenšení houževnatosti, nastává zpevnění materiálu.

Nejčastější mechanismus plastické deformace je *skluz* a doplňující mechanismus je *dvojčatní*. Za *zvýšené teploty* se navíc uplatňují *podkluzu* po hranicích zrn, *difúzní tečení* a *dislokační tečení*.

K plastické deformaci kovů přispívají i některé fázové přeměny.

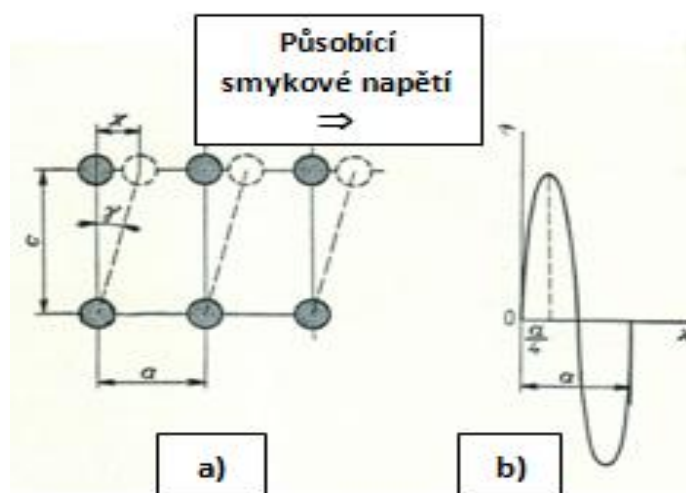
### Vztah krystalické mřížky k trvalé deformaci

Smykové napětí potřebné k přesunu části krystalu, viz schéma na obr. 13-5, resp. atomu lze stanovit pomocí periodické funkce:

$$\tau = A \sin \frac{2 \cdot \pi}{a} \cdot x \quad (13.5)$$

pro malé výchylky pomocí funkce:

$$\tau = A \frac{2 \cdot \pi}{a} \cdot x \quad (13.6)$$



Obr. 13-5 Schéma působení smykového napětí potřebného k přesunu atomu krystalické mřížky

Hookeův zákon ve smyku:  $\tau = G \cdot \gamma$ , pro malé výchylky  $\gamma = x/c$ .

$$A = \frac{\tau \cdot a}{2 \cdot \pi \cdot x} = \frac{G \cdot x \cdot a}{c \cdot 2 \cdot \pi \cdot x} = \frac{G \cdot a}{c \cdot 2 \cdot \pi} \quad (13.7)$$

Dosazení rovnice (13.7) do rovnice:

$$\tau = A \sin \frac{2 \cdot \pi}{a} \cdot x \quad (13.8)$$

Získáme rovnici:

$$\tau = \frac{G \cdot a}{2 \cdot \pi \cdot c} \cdot \sin \frac{2 \cdot \pi}{a} \cdot x \quad (13.9)$$

Pro  $x = a/4$ :

$$\tau = \frac{a}{c} \cdot \frac{G}{2 \cdot \pi} \quad (13.10)$$

Pro kubickou mřížku  $a = c$ :

$$\tau = \frac{G}{2 \cdot \pi} \quad (13.11)$$

Přesnějším výpočtem:

$$\tau = \frac{G}{30} \quad (13.12)$$

Hodnoty kritického skutečného a vypočítaného napětí pro různé kovy jsou uvedeny v tabulce 13.2.

Tabulka 13.2 Hodnoty kritického napětí - skutečného a vypočítaného

| Kov            | Modul pružnosti<br>ve smyku<br>G [MPa] | Skutečná hodnota<br>kritického<br>skluzového napětí<br>$\tau_{KRIT}$ [MPa] | Teoretická hodnota kritického<br>skluzového napětí $\tau_{KR}$ [MPa] |                      |
|----------------|----------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|----------------------|
|                |                                        |                                                                            | $\tau_{KRIT} = G/2\pi$                                               | $\tau_{KRIT} = G/30$ |
| <b>Železo</b>  | 69 000 až 82 000                       | 29                                                                         | 21 000                                                               | 2 300                |
| <b>Měď</b>     | 46 200 až 48 000                       | 1,0                                                                        | 7 350                                                                | 1 540                |
| <b>Zinek</b>   | 37 800 až 43 000                       | 0,9                                                                        | 6 000                                                                | 1 290                |
| <b>Hliník</b>  | 26 000                                 | 1,2 až 2,4                                                                 | 4 300                                                                | 900                  |
| <b>Nikl</b>    | 76 000                                 | 5,8                                                                        | 12 400                                                               | 2 600                |
| <b>Hořčík</b>  | 17 000                                 | 0,8                                                                        | 2 800                                                                | 590                  |
| <b>Stříbro</b> | 30 000                                 | 0,6                                                                        | 4 500                                                                | 970                  |

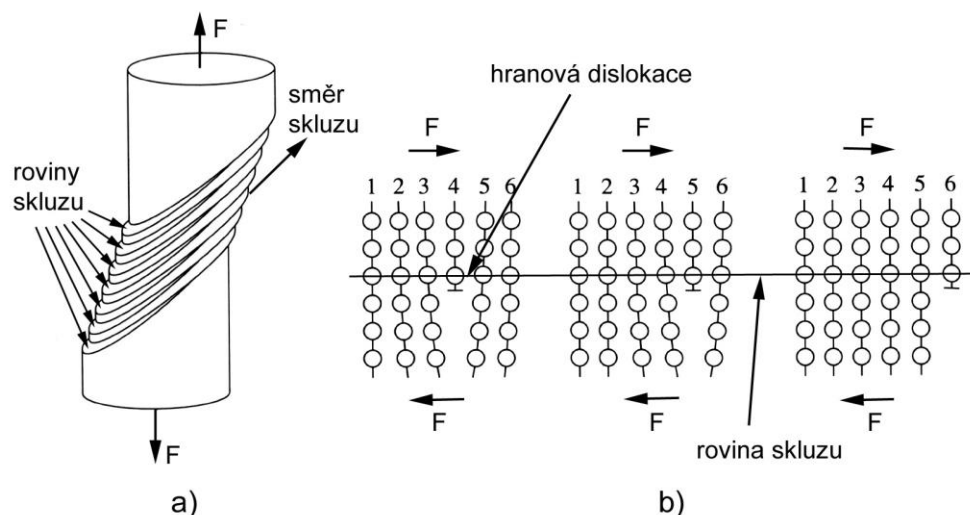
### 13.2.1 Plastická deformace skluzem – translací

Plastická deformace kluzem (translací) je nejčastějším mechanismem trvalé deformace kovů. Plastická deformace se neuskutečňuje současným přesunem všech atomů v aktivní skluzové rovině. *Plastická deformace* probíhá tak, že se části krystalu *se posunují* vůči sobě podél určitých krystalografických rovin tak, že se posunou atomy o celý počet meziatomových vzdáleností.

Přesun všech atomů v aktivní skluzové rovině by vyžadovalo vysokou hodnotu smykového napětí (tj. pro monokrystal čistého Fe  $21 \cdot 10^3$  MPa, ale ve skutečnosti byla zjištěna hodnota pouze 29 MPa). Vysvětlení je v tom, že struktura kovů obsahuje velké množství mřížkových poruch, především *dislokací*. V případě plastické deformace se jedná o posuv jednotlivých dislokací skluzem ve skluzových rovinách. Na obr. 13-6 je schéma plastické deformace skluzem.

Dislokace přítomné uvnitř krystalu, vznikají již během tuhnutí roztaveného kovu. Dislokace jsou vlivem vnějšího napětí uvedeny do skluzového pohybu a dosáhnou-li povrchu krystalu, projeví se to jako stupínek.

Makroskopická deformace je spojena s výstupem velkého počtu dislokací na povrch krystalu. Posunutí částí krystalu průchodem dislokací je energeticky mnohem méně náročné než hromadné porušování všech vazeb podél skluzové roviny. Při skluzu dislokace totiž dochází k porušování vazeb jen mezi atomy v těsném okolí dislokace a vazby ve větší vzdálenosti zůstávají nezměněny, viz obr. 13-6.



a) - vzájemné posunutí dvou částí krystalu, b) - znázornění pohybu dislokací, který způsobuje skluz

Obr. 13-6 Schéma plastické deformace skluzem

Stanovení napětí skluzem, vycházíme z normálového a smykového napětí, odvození je patrné na základě obr. 13-7.

*Normálové napětí se stanoví:*

$$\sigma = \frac{F}{S} \quad (13.13)$$

kde značí: F – normálovou sílu; S – normálovou plochu.

*Smykové napětí:*

$$\sigma_K = \frac{F}{S_K} = \sigma \cdot \cos \varphi \quad (13.14)$$

*Vztah mezi smykovým a normálovým napětím:*

$$\tau = \sigma_K \cdot \cos \lambda \quad (13.15)$$

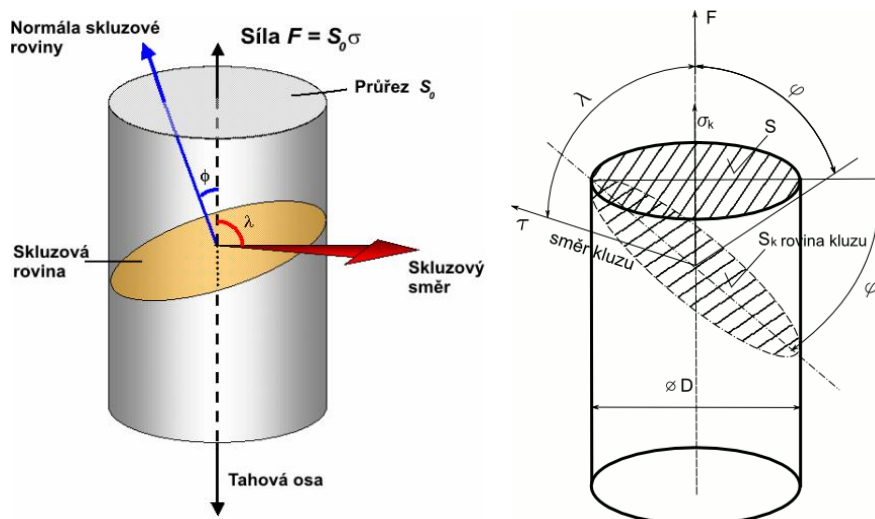
*Smykové napětí  $\tau$ , resp.*

$$\tau_{SKLUZU} = \sigma \cdot \cos \varphi \cdot \cos \lambda$$

(13.16)

Platí *Schmidtův zákon* – skluz nastane, pokud platí:

$$\tau_{KRIT} = m \cdot \sigma \quad (13.17)$$



Obr. 13-7 Schéma pro odvození smykového napětí skluzem

### Fyzikální zákony kluzu (skluzem)

Kluz obvykle *nastává v rovinách*, které jsou nejhustěji obsazeny atomy, to znamená, že *směr kluzu* je vždy totožný se *směrem, který je nejhustěji obsazen* atomy.

Z dané skupiny možných *skluzových rovin* a směrů je činný jen ten systém, v němž smykové napětí  $\tau_{SKLUZU}$  dosahuje hodnotu  $\tau_{KR}$  *kritické skluzové napětí*. Toto napětí je pro daný kov, pro krystalickou mřížku, teplotu a rychlost deformace definován konstantou plasticity.

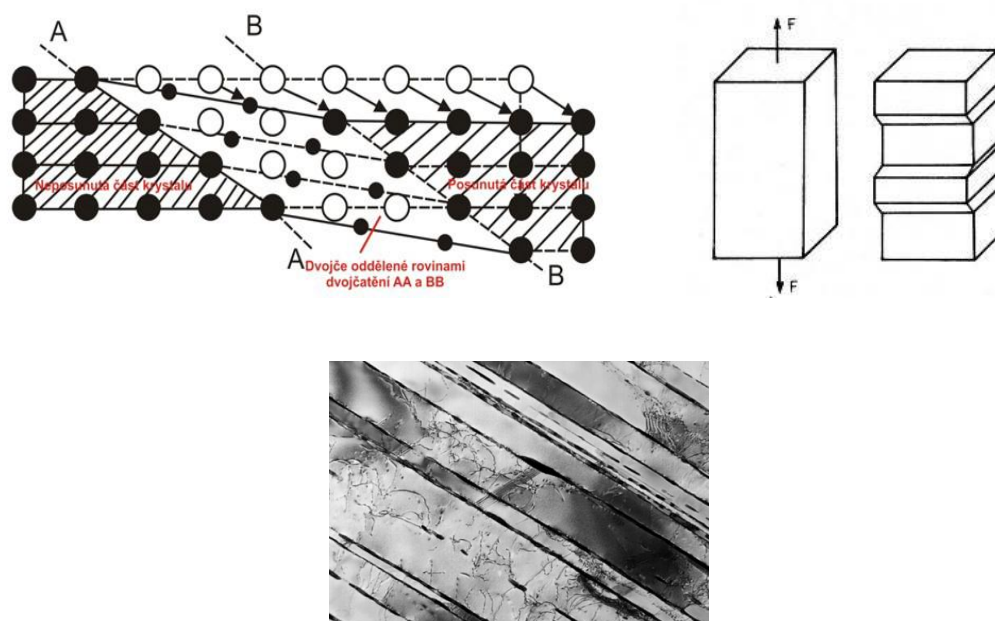
Smykové napětí dosahují maximální hodnoty v rovinách skloněných pod úhlem  $45^\circ$  k tzv. hlavní rovině (hlavní rovina je rovina, kde působí pouze normálové napětí  $\sigma$ ).

Pokud napětí  $\tau$ , resp.  $\tau_{SKLUZU}$  dosáhne kritickou hodnotu tzv. *kritické skluzové napětí*  $\tau_{KR}$ , pak dochází ke skluzu dislokací v rovinách, které jsou nejhustěji obsazeny atomy. Této hodnoty je nejdříve dosaženo v rovinách, které svírají úhel  $45^\circ$ .



### 13.2.2 Plastická deformace dvojčatěním

Plastická deformace dvojčatěním, resp. mechanickým dvojčatěním nedochází ke kluzu dislokací. Dvě části krystalu se *posunou* tak, že jsou vůči sobě podél určité roviny v zrcadlové symetrii. Tato rovina se nazývá *rovina dvojčatění* a při takové deformaci se atomy v každé jednotlivé rovině přemístí o stejnou vzdálenost vůči atomům v sousedních rovinách, viz obr. 13-8. Toto posunutí je vždy menší, než vzdálenost atomů v krystalické mřížce.



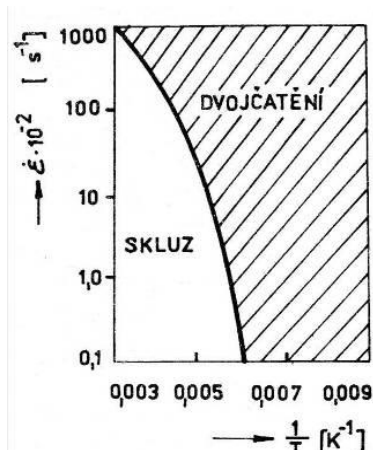
Obr. 13-8 Schéma vzniku plastické deformace dvojčatěním

Plastická deformace dvojčatěním je druhým nejvýznamnějším mechanismem plastické deformace. Uplatňuje se zvláště u kovů s mřížkou *kubickou plošně středěnou* a mřížkou *hexagonální těsně uspořádanou*. Plastická deformace *dvojčatěním* je podporována zejména vysokou rychlostí deformace a nízkou teplotou.

V tabulce 13.3 jsou hodnoty teplot při které dochází ke dvojčatění. Na obr. 13-9 jsou podmínky, při kterých dochází k plastické deformaci skluzem a dvojčatěním.

Tabulka 13.3 Teploty, které podporují vznik plastické deformace dvojčatěním

| 1/T [°C] | 0,003 | 0,005 | 0,007 | 0,009 |
|----------|-------|-------|-------|-------|
| T [°C]   | 60    | -73   | -130  | -162  |



Obr. 13-9 Hodnoty deformace a teplot při kterých dochází k plastické deformaci kluzem a dvojčatěním

### 13.3 Úlohy k procvičení

#### Úloha č. 1

Stanovte poměrné prodloužení ocelové tyče délky  $l = 800$  mm, je-li namáhána osovou silou, která vyvolá tahové napětí 60 MPa. Modul pružnosti použité oceli  $E = 2,1 \cdot 10^5$  [MPa].

#### Úloha č. 2

Stanovte modul pružnosti ve smyku pro hliník a měď. Je-li Youngův modul pružnosti hliníku 72 200 [MPa] a Poissonovo číslo je 0,34. Youngův modul pružnosti mědi je 131 300 [MPa] a Poissonovo číslo je 0,35.

#### Úloha č. 3

Skutečná hodnota kritického skluzového napětí  $\tau_{KRIT}$  pro čisté železo byla naměřena 29 MPa. Hodnotu  $\tau_{KRIT}$  lze vypočítat na základě teoreticky odvozenému vztahu  $\tau_{KRIT} = G/30$  [MPa]. Modul pružnosti ve smyku  $G$  lze pro železo stanovit dle rovnice (13.4). Co je příčinou značného rozdílu mezi naměřenou hodnotou a vypočítanou na základě uvedené rovnice.

#### Úloha č. 4

Stanovte Youngův modul pružnosti v tahu hořčíku, je-li jeho modul pružnosti ve smyku 17 500 [MPa]. Poissonovo číslo hořčíku je 0,28. Pro výpočet využijte vztah (13.4).

#### Úloha č. 5.

Stanovte deformaci  $\epsilon$  tyče z hliníkové slitiny  $\varnothing 10$  mm. Působení tahové síly v ose tyče vyvolalo zúžení tyče  $\Delta d = 2,5 \cdot 10^{-3}$  [mm].

## 14. METODY SLEDOVÁNÍ KOVŮ A JEJICH SLITIN

### 14.1 Mikroskopická pozorování struktury kovů

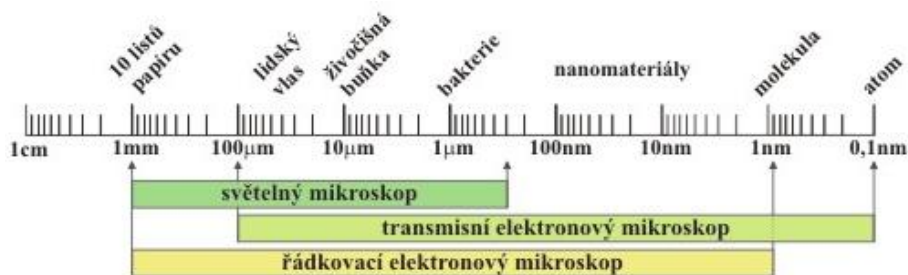
Jak je obecně známo, struktura kovů je nositelkou vlastností kovů a jejich slitin. Sledováním struktury se zabývá metalografie s pomocí metalografických mikroskopů, jak světelných, tak elektronových.

Účelem metalografického sledování kovů a slitin je obvykle zjistit, které strukturní fáze materiál obsahuje, v jakém množství, rozložení a tvarech. Kromě toho praktická metalografie zjišťuje vady materiálu a přítomnost nekovových vměstků. Často se podaří na základě metalografického rozboru v souvislosti se znalostmi chemického složení a hodnot mechanických nachází se u svařovaných ocelí vlastností materiálu určit příčinu porušení součástí. Běžně se také metalografickými metodami kontroluje jakost tepelného zpracování.

V metalografii kovů, se používají dva druhy mikroskopů:

*Světelný mikroskop* – pracuje se světelným paprskem - sleduje makrostrukturu kovu, cca do 50 násobného zvětšení), a mikrostrukturu, nejčastěji od 100 násobného zvětšení a výše.

*Elektronový mikroskop* - pracuje se svazkem elektronů, podle konstrukce a schopnosti pozorování objektů, resp. kovů se dělí na rastrovací a skenovací. Na obr. 14-1 je ilustrativně naznačeno dosažení možného zvětšení mikroskopů.



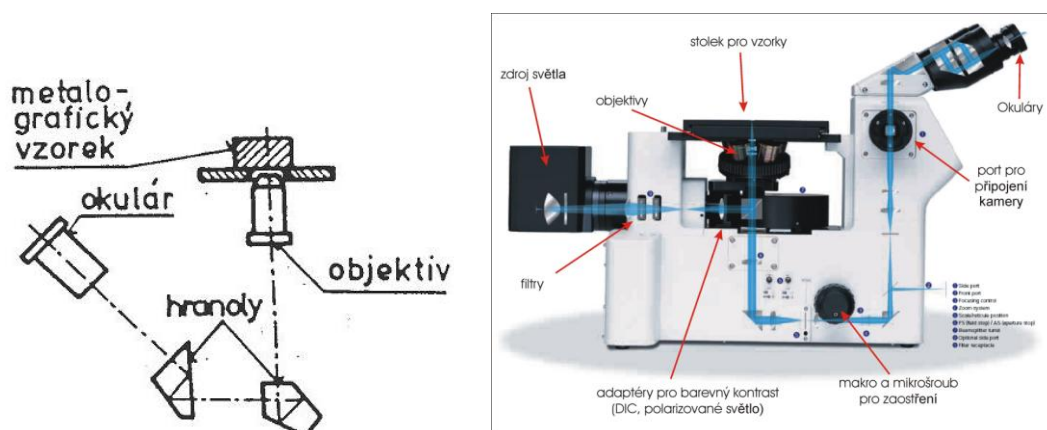
Obr. 14 - 1 Schéma rozlišovací schopnosti světelného, elektronového transmisního a elektronového řádkového mikroskopu [42]

*Rozdíl mezi světelným a elektronovým mikroskopem*, stále je to optický přístroj, ale fotony jsou v tomto případě elektronového mikroskopu nahrazeny elektrony a místo klasických čoček se využívá elektromagnetických čoček.

### 14.1.1 Světelný mikroskop

**Světelný mikroskop** (*světelná mikroskopie*) patří k nejrozšířenějším metodám přímého pozorování vnitřní stavby kovů a jejich slitin. Za předpokladu znalosti rovnovážných a nerovnovážných stavů pozorovaného materiálu a znalosti vzhledu jednotlivých strukturních součástí je možno provádět metalografický rozbor, usuzovat na složení materiálu, způsob zpracování, pravděpodobnost příčiny vad a porušení materiálu, atd.

Podle velikosti zvětšení se struktura na světelném mikroskopu dělí na makrostrukturu (makro) a mikrostrukturu (mikro). Do 50 násobného zvětšení se jedná o makrostrukturu, nad 50 násobné zvětšení do 1000 násobného zvětšení to je mikrostruktura. Oba druhy pozorování se provádí na předem vybraných a připravených metalografických vzorcích „výbrusech“, které svým charakterem a strukturou musí reprezentovat strukturu zkoušené součásti. Na obr. 14-2 je uveden světelný mikroskop.



Obr. 14 - 2 Schéma podstaty činnosti světelného mikroskopu a mikroskop

Metalografický vzorek se pokládá na *stůl mikroskopu*, na vzorek dopadá světlo odražené světlo od sledované plochy vzorku je snímáno objektivem. Přes systém hranolů se přenáší odražené světlo do *okuláru*, který sleduje lidské oko.

#### **Příprava vzorků pro pozorování na světelném mikroskopu**

Příprava vzorků pro metalografické pozorování se skládá z těchto operací:

- 1) odebrání kovového vzorku (mechanické řezání pilou);
- 2) preparace vzorku - příprava metalografického vzorku, pro jeho následné přípravné operace (broušení, leštění a pro mikroskopické pozorování);
- 3) broušení a leštění vzorku, tj. příprava rovinného a vyleštěného povrchu

vzorku;

- 4) zviditelnění struktury na vyleštěné ploše – leptání vzorku;
- 5) vyhodnocení vhodně zvětšené struktury buď přímo z pozorování v mikroskopu, nebo z fotografie struktury.

Metalografická pozorování se zcela výjimečně, nejčastěji jako makro, provádí na povrchu součásti, která je dodaná k metalografickému pozorování.

**Odebírání vzorků** - nejčastěji se z této součásti odděluje část, která slouží jako vzorek pro pozorování.

Tyto vzorky se musí odebírat z míst součásti, které nejlépe vystihují charakter struktury zkoušené součásti. Při odběru vzorků nesmí dojít k ovlivnění jejich struktury, proto vyhovuje řezání, popř. frézování, vrtání atd. Vzorky křehkých materiálů (litina s lupínkovým grafitem) se získají naříznutím a uražením. Tvrdé materiály se rozbrušují tenkým brusným kotoučem. Řezání elektrickým obloukem a plamenem se používá jen tehdy, jestliže nelze použít předchozích způsobů získání vzorků a neovlivní to vlastnosti zkoumaných vzorků. U odlitků se vzorky odebírají ze slabých a silných stěn, neboť struktura je zde ovlivněna rychlostí chladnutí v průběhu krystalizace. Vzorky se odebírají i z míst, kde se předpokládá zvýšený výskyt slévárenských vad.

U svařovaných dílů se vzorky odebírají z oblasti svaru, tepelně ovlivněného pásma a základního materiálu. U součástí získaných tvářením se odebírají vzorky tak, aby pozorovaná plocha vzorku byla orientována s ohledem na průběh vláken v podélném a příčném směru tváření.

U poškozených a mechanicky narušených výrobků se vzorky vybírají z místa, kde vada vznikla, nebo z jejího blízkého okolí. Často se pozorují i vzorky z lomových ploch. Při výběru a zpracování vzorku z lomové plochy se musí přísně dbát na nepoškození lomové plochy.

Pro mikroskopická pozorování jsou velmi výhodné plochy vzorků cca 1 cm<sup>2</sup>. Větší rozměry vzorků, jsou náročné na ruční broušení a leštění, proto se doporučují vzorky o maximálním průměru cca 20 mm, hranoly o hraně 25 mm. Příliš velké vzorky se připravují obtížně, neboť v průběhu broušení a leštění není snadné získat zcela rovinný povrch vzorku. Velikost vzorků není pro makroskopické pozorování omezena. Běžně se připravují „výbrusy“ na řezech celých odlitků, výkovků a svarových spojů. Výjimečně se připravují výbrusy i na řezech z velkých ingotů.

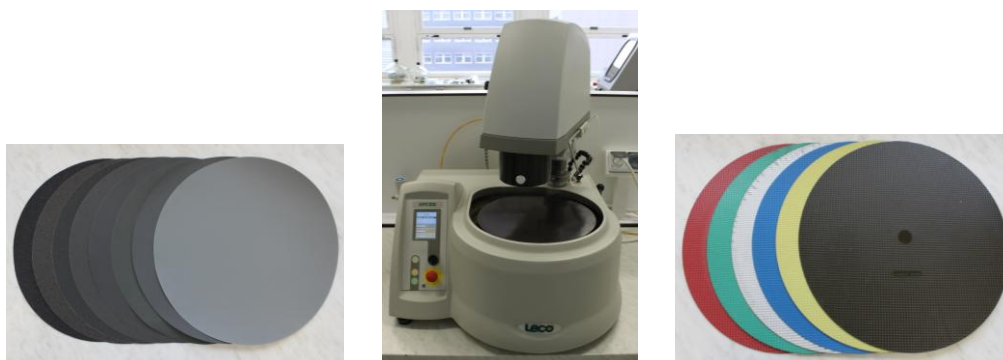
**Preparace vzorků** se rozumí úprava rozměru vzorku, tak aby se nechal držet při ručním broušení a leštění nebo se nechal upnout do brousícího a leštícího stroje. Preparace se provádí s použitím hmoty Dentakryl, kterým se zalévá vzorek do PVC kroužku nebo se používá speciálních přístrojů, které vytváří

pomocí natavených plastů vzorky zalité do válečků potřebných průměrů a výšek, viz obr. 14-3.



Obr. 14 – 3 Schéma přípravy vzorků pro mikroskopické pozorování

**Broušení vzorků** je následnou operací, k tomu se používá sada metalografických papírů o různé zrnitosti např. 120, 220, 320, 400, 600, 800, 1000, 1200. Tyto papíry mohou mít brusivo na bázi  $\text{SiC}$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{B}_4\text{C}$  nebo C (diamant). Brusné papíry s částicemi **SiC**, viz obr. 14-4, jsou nejpoužívanější pro broušení kovových materiálů, resp. ocelí za mokra. Nejčastěji se tyto brusné papíry ustavují na metalografickou brusku, viz obr. 14-4.



Obr. 14 – 4 Pohled na brusné papíry se zrna  $\text{SiC}$  a diamantové o různé velikosti zrn a na metalografickou brusku

**Leštění vzorku** je dalším krokem při přípravě metalografického vzorku. Na rozdíl od broušení materiál z povrchu vzorku neubývá, ale dochází pouze k deformaci vrcholů povrchové drsnosti, příp. jen minimálním úbytkům. V metalografii se leštění provádí mechanicky nebo elektrolyticky. Princip mechanického leštění je obdobný jako při broušení. Provádí se přítlakem vzorku na rotující leštící kotouč za pomoci leštícího média. Potahovým materiálem leštícího kotouče může být samet, satén, flanel, kord nebo jiná textilie. V současné době jsou na trhu speciální leštící podložky určené pro konkrétní typ a velikost brusiva. Brusivo může mít podobu prášku, pasty nebo suspenze, která již obsahuje další pomocné látky jako je smáčedlo či chladicí médium. K leštění se obvykle používají  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MgO}$  nebo diamantové pasty. Při mechanickém leštění vzorkem pohybujeme proti směru otáčení kotouče dokud nedosáhneme zrcadlového lesku. Vzorek pak opláchneme lihem, destilovanou vodou a řádně se osuší. Takto připravený vzorek je možné použít k pozorování a hodnocení nečistot, případně vměstků v materiálu,



rozložení grafitu v litinách, atd. Často struktura kovového materiálu je po mechanickém broušení a leštění zakryta Beilbyho vrstvou (tvářenou B-vrstvou), abychom mohli strukturu pozorovat, je třeba tuto vrstvu chemicky odstranit.

Na obr. 14 – 5 je schéma broušení, broušení a schéma leštění. Pomůcky pro leštění metalografických vzorků jsou uvedeny na obr. 14 – 6.

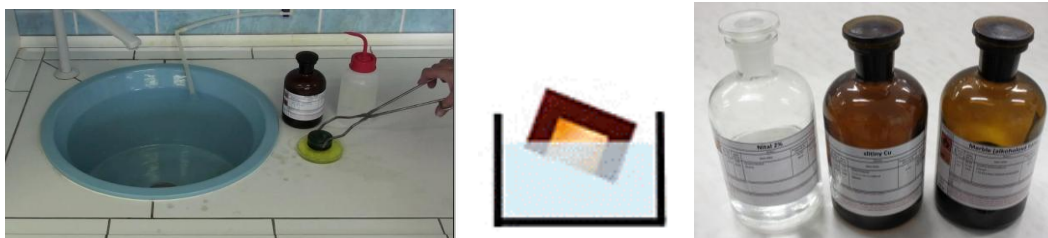


Obr. 14 – 5 Schéma broušení a leštění, brusné a lešticí zařízení



Obr. 14 – 6 Leštění vzorků, různé materiály povlaků lešticích kotoučů, lešticí suspenze a lešticí pasty

**Lepání vzorku** – je zvýraznění struktury pro mikroskopické pozorování. K tomuto účelu se používají vhodná leptadla, jejichž složení a délka leptání závisí na sledovaném kovu nebo jejich slitinách. V příloze č. 18 je uveden přehled nejpoužívanějších leptadel. Pro leptání ocelí a litin se používá leptadlo Nital. Na obr. 14-7 je leptání metalografických vzorků. Leptadla se uchovávají ve skleněných lahvích se zabroušenými zátkami.



Obr. 14 – 7 Leptání metalografických vzorků, leptadla se uchovávají ve skleněných lahvích se zabroušenými zátkami

### 14.1.2 Elektronový mikroskop

**Elektronový mikroskop** (*elektronová mikroskopie*) slouží pro větší zvětšení a pro jemnější pozorování. Zde je nutné mít na paměti, zda-li chceme sledovat strukturu kov nebo např. povrch (lomovou plochu, atd.) nebo strukturu kovů. Příprava vzorků pro pozorování na elektronovém mikroskopu je specifická, závisí, zda-li se jedná o vzorek pro rastrovací (řádovací) mikroskop nebo pro transmisní (prozařovací) mikroskop.

Transmisní (prozařovací) elektronový mikroskop (TEM – Transmission Electron Microscope – svazek elektronů prochází vzorkem) se používá pro sledování vnitřní struktury kovů. Pracuje na principu „prosvícení“, proto je nutnost tenkého vzorku 10 do 500 nm, aby jim prošel svazek elektronů.

Řádkovací (rastrovací) elektronový mikroskop (REM, SEM – Scanning Electron Microscope - využívá pohyblivého svazku elektronů), se používá pro analýzu povrchů kovů.

Na obr. 14-8 jsou oba typy mikroskopů.



Obr. 14-8 Transmisní elektronový mikroskop (vlevo) a řádkovací elektronový mikroskop (vpravo)

**Elektronový mikroskop**, podobně jako světelný mikroskop, je optický přístroj, který pracuje na principu elektronů (světelný mikroskop pracuje na



základě fotonů) a skleněné optické čočky jsou v elektronové mikroskopu nahrazeny elektromagnetickými čočkami. Elektromagnetická čočka je v podstatě cívka, která vytváří vhodně tvarované magnetické pole. Jedním ze základních parametrů všech mikroskopů je jejich *mezní rozlišovací schopnost*. Z důvodu, že mezní rozlišovací schopnost je úměrná vlnové délce použitého záření a elektrony mají podstatně kratší vlnovou délku (viz vlnové vlastnosti elektronu), než má viditelné světlo, proto má elektronový mikroskop mnohem vyšší rozlišovací schopnost a tím může dosáhnout i mnohem vyššího *efektivního zvětšení* (až 1 000 000 násobného) než světelný mikroskop.

**Transmisní elektronový mikroskop (TEM)**, slouží pro zobrazení vnitřní struktury vzorku, které je realizováno pomocí prošlých elektronů (TE). Urychlovací napětí elektronů musí být velké, 100 až 400 kV. TEM byl první komerčně vyráběný typ elektronového mikroskopu. Tento typ mikroskopu je známý pod názvem prozařovací elektronový mikroskop. Slovo "transmisní" v názvu je odvozeno z toho, že elektrony procházejí skrz vzorek a až pak jsou detekovány. Z toho plyne, že urychlovací napětí musí být dostatečně vysoké (proti SEM). Současně, aby elektrony měly dostatečnou energii projít vzorkem je nutné používat velmi tenké vzorky (10 až 500 nm).

**Poznámka:** První TEM vynalezl a zkonstruoval Ernst Ruska v roce 1931 a v roce 1986 získal za svůj objev Nobelovu cenu.

**Rastrovací elektronový mikroskop (REM, SEM)**, slouží pro zobrazení povrchu vzorku, které je nejčastěji realizováno pomocí sekundárních (SE) a nebo pomocí zpětně odražených elektronů (BSE). Urychlovací napětí elektronů je menší než u TEM, nejčastěji 0,1 až 30 kV. První SEM byl navržen a zkonstruován V. K. Zworykinem a spol. v roce 1942. Tento typ mikroskopu je známý i pod názvy řádkovací nebo skenovací elektronový mikroskop. Slovo "rastrovací" v názvu je odvozeno z toho, že svazek elektronů se pohybuje po vzorku řádek po řádku v jakémsi neviditelném rastru a výsledný obraz se vytváří postupným skenováním. Jednodušší příprava vzorků a snadná interpretace obrazu než je tomu u TEM, přispívá k tomu, rastrovací elektronový mikroskop je velmi populární a rozšířený.

Výše uvedené rozdělení na dva základní typy je sice názorné, představuje ale v jistém smyslu zjednodušení. Celkem běžně se lze setkat např. s rastrovacím TEM (tzv. STEM) nebo detektorem prošlých elektronů instalovaným na SEM.

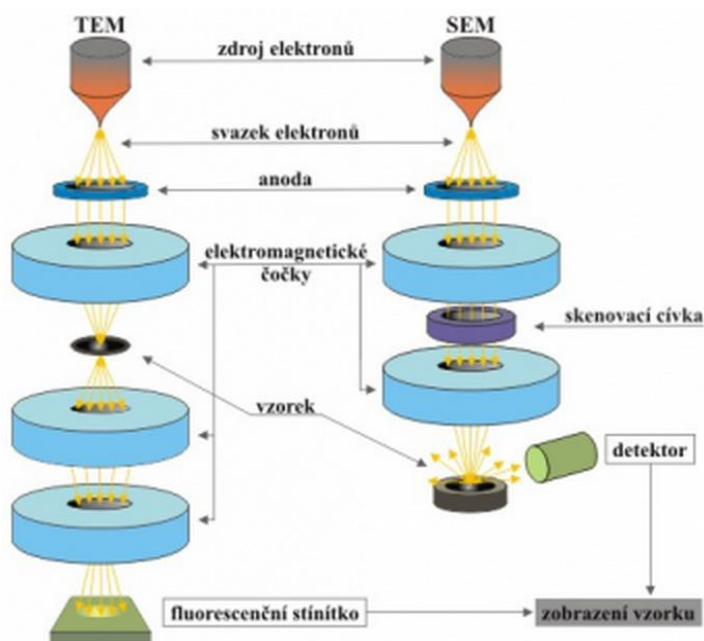
Na obr. 14-9 je schéma obou typů elektronových mikroskopů.

### **Příprava vzorků pro transmisní elektronové mikroskopy**

Z důvodu, že transmisní elektronový mikroskop je založen na prozařování vzorku, je nutné aby tloušťka vzorku byla odpovídající pro energii procházejícího svazku elektronů. Proto vzorky pro práci na transmisním elektronovém mikroskopu jsou speciálně zpracovány do podoby „tenkých blan“. V podstatě se pracuje s tenkými blanami organických laků, z nichž se vytváří negativní otisk všech detailů povrchu sledovaného kovu. Nebo se

zhotovují i pozitivní otisky, nejčastěji uhlíkové. Teprve tyto otisky (repliky) se pozorují na elektronovém mikroskopu.

Vzorky pro elektronovou mikroskopii se nazývají fólie a repliky [43].



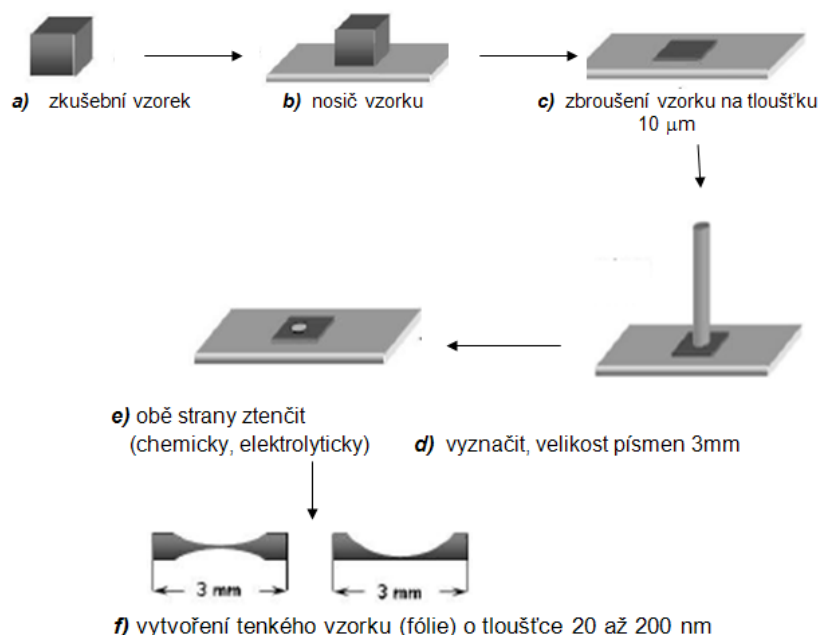
Obr. 14-9 Schématické znázornění principu transmisního (vlevo) a řádkovacího (vpravo) elektronového mikroskopu

**Fólie** jsou tenké transparentní vzorky, připravují se ztenčováním materiálu broušením a leštěním. Konečné ztenčení elektrochemicky nebo iontovým bombardováním.

Na obr. 14-10 je schéma vytváření fólie ze zkušební vzorku tvaru krychle o hraně 10 mm.

**Repliky** jsou otisky pro detailní studium povrchu materiálů. Jsou vytvořeny na základě kopírování povrchu (uhlíkové). Podle postupu výroby repliky jednostupňové, dvoustupňové nebo extrakční, viz obr. 14-11. Replika má podle reliéfu povrchu metalografického vzorku v různých místech různou tloušťku, která různě rozptyluje elektrony.

Místa o větší tloušťce se jeví na obraze tmavší, naopak tenká místa propustí více elektronů a jeví se světlejší. Pro zvýšení kontrastu se obvykle otisky zesilují (stínují) napařením vrstvičky kovu ve vakuu (chromem nebo zlatem) a tím se stanou místa pokrytá vrstvou těchto kovů neprůhledná pro elektrony a tím „neprůhledná“.



Obr. 14-10 Schéma tvorby fólie pro elektronový mikroskop

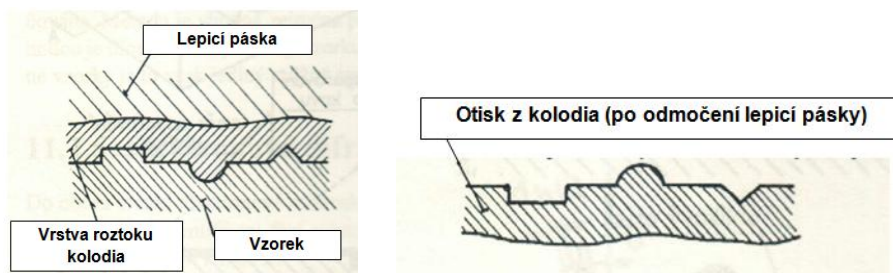
Na obr. 14-11 je uvedeno schéma tvorby repliky pro elektronovou mikroskopii. Na původní, naleptaný vzorek (pro sledování na světelném mikroskopu tzv. „výbrus“) se nanese vrstva organického laku. Rozlišujeme negativní a pozitivní otisk.

*Negativní otisk* je tvořen tenkým filmem laku, který otiskuje reliéf povrchu naleptaného „výbrusu“ (prohlubně a výčnělky jsou opačné proti původnímu výbrusu).

*Pozitivní otisk* na kontaktní straně prvního (negativního) otisku se vytváří tenký film, který představuje tenký reliéf povrchu a oddělí se rozpouštěním negativní šablony.

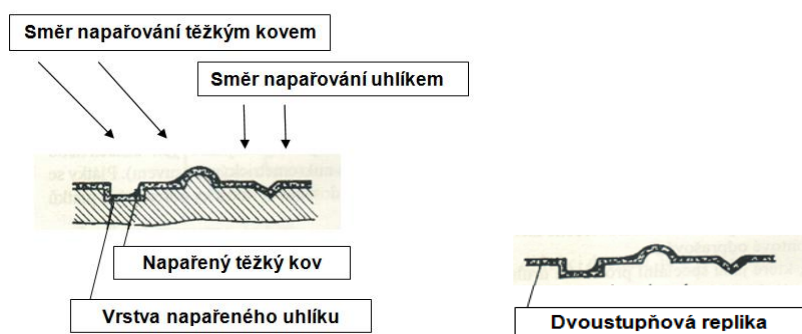
Jak je z výše uvedeného zřejmé, repliky jsou připravovány jako vrstvy snímané z povrchu naleptaného vzorku a mají všechny detaily jeho povrchu.

Příprava jednostupňové repliky je velmi jednoduchá. Na běžný metalografický naleptaný vzorek se nanese kapka 0,1 až 1 % roztok kolodia (roztok nitrocelulozy v octanu amylnatém nebo éteru). Po odpaření rozpouštědla zůstává na povrchu velmi tenká vrstva elastická vrstva kolodia, která dobře kopíruje povrchový reliéf vzorku, viz obr. 14-11a). Tato vrstva se sejme pomocí lepicí pásky. Snímek této jednostupňové repliky je málo kontrastní a je třeba ho hodnotit jako negativ (výstupky jsou zobrazeny jako prohlubně a prohlubně jako výstupky). Proto se používá i metoda přípravy dvoustupňových replik [3].



Obr.14 -11a) Schéma přípravy jednostupňového negativního otisku (repliky) [3]

Dvoustupňová replika, zde se jako základ používá jednostupňová replika. Na tuto repliku se napaří vrstva amorfního uhlíku, viz obr. 14-11b). Pro zvýšení kontrastu se dále na uhlíkovou vrstvu napařuje pod šikmým úhlem vrstva těžkého kovu (zlato, slitina zlata a paladia, chrom). Tyto kovy ulpí na vhodně orientovaných ploškách a přispívají ke zvýšení kontrastu. Pak se kolodiová vrstva rozpustí a získá se velmi kvalitní pozitivní otisk.



Obr. 14 - 11b) Schéma přípravy dvoustupňové repliky [3]

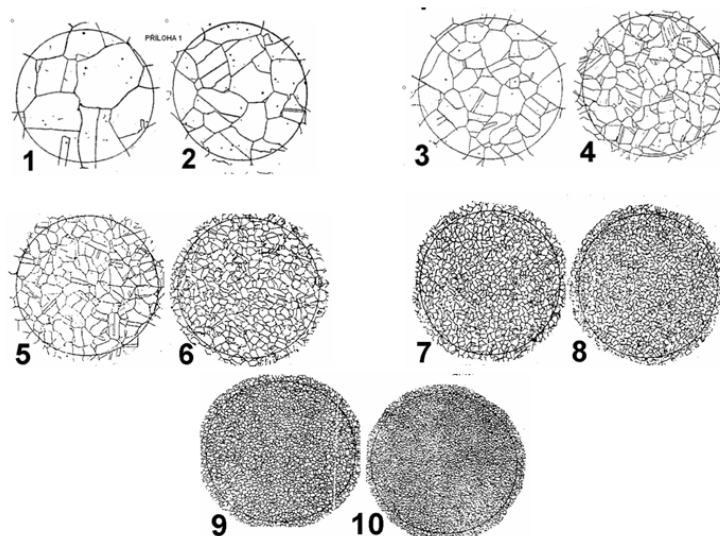
## 14.2 Využití světelného mikroskopu pro pozorování kovů

Světelný mikroskop je možno využít při metalografickém hodnocení struktur kovů a jejich slitin, ale také např. při hodnocení velikosti zrn slitin kovů. Hodnocení velikosti zrn se provádí u tvářených materiálů, především u ocelí. Pro hodnocení se používá metalografický vzorek, který je vyleštěn a naleptán. Pro sledování např. feritického zrna ocelí se pro leptání používá Nital. Velikost zrna se vyjadřuje dvěma způsoby, vyjádření číslem podle etalonové řady a pomocí průsečkové metody. Pro hodnocení velikosti zrn oceli se v současné době používá ČSN EN ISO 643.

### 14.2.1 Hodnocení velikosti zrn podle etalonové řady (dle ČSN.....)

Hodnocení velikosti zrn na základě srovnání s normalizovaným zobrazením velikosti zrn. Normalizované hodnocení se provádí při 100 násobném

zvětšení, odpovídají stupni 1 až 10, viz obr. 14-12. Číslo velikosti zrna  $G = (\log m / 0,301)^{-3}$ ;  $m$  – střední počet zrna na  $1\text{mm}^2$ .



Obr. 14 -12 Etalonová řada pro hodnocení velikosti zrn

### ***Hodnocení velikosti zrn planimetrickou metodou (využití kružnice)***

Používá se kružnice o průměru 79,8 mm, hodnotí se počet zrn připadající na plochu  $1\text{mm}^2$  při 100 násobném zvětšení světelného mikroskopu.

$$m_{100} = 2 \cdot (n_1 + n_2/2) \quad (14.1)$$

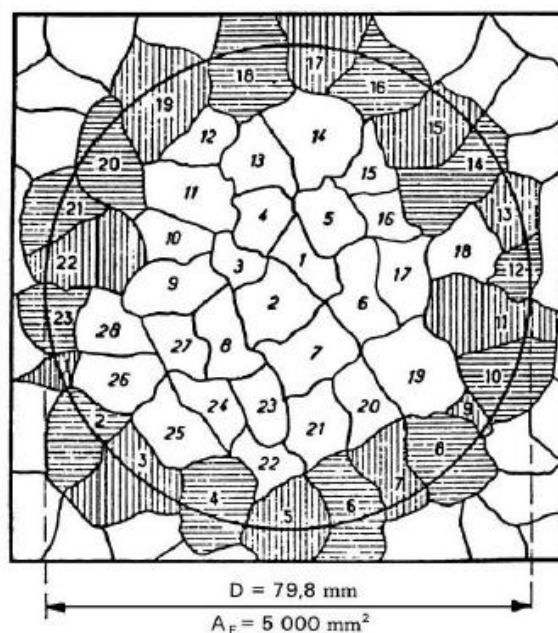
kde značí:  $n_1$  – počet zrn ležících uvnitř kružnice;  $n_2$  – počet zrn, která protla kružnici.

Pro libovolné měřítko lze stanovit velikost zrn:

$$m = (g^2 / A_F) \cdot n_g \quad (14.2)$$

kde značí:  $g$  – zvětšení;  $n_g$  – počet ekvivalentních zrn při  $g$  násobném zvětšení;  $A_F$  – plochu zkušebního kruhu  $5000\text{mm}^2$ .

Ukázka vyhodnocení počtu zrn v kružnici o průměru 79,8 mm je uvedeno na obr. 14-13.



Obr. 14 - 13 Hodnocení počtu zrn na ploše vymezené kružnicí o průměru 79,8 mm

#### 14.2.2 Hodnocení struktury grafitických litin

Hodnocení struktury grafitických litin se provádí na světelném mikroskopu, dle ČSN EN ISO 945-1 (dříve se používala norma ČSN 42 0461). Hodnotí se grafit a charakter základní kovové hmoty (matrice).

##### A) Hodnocení grafitu

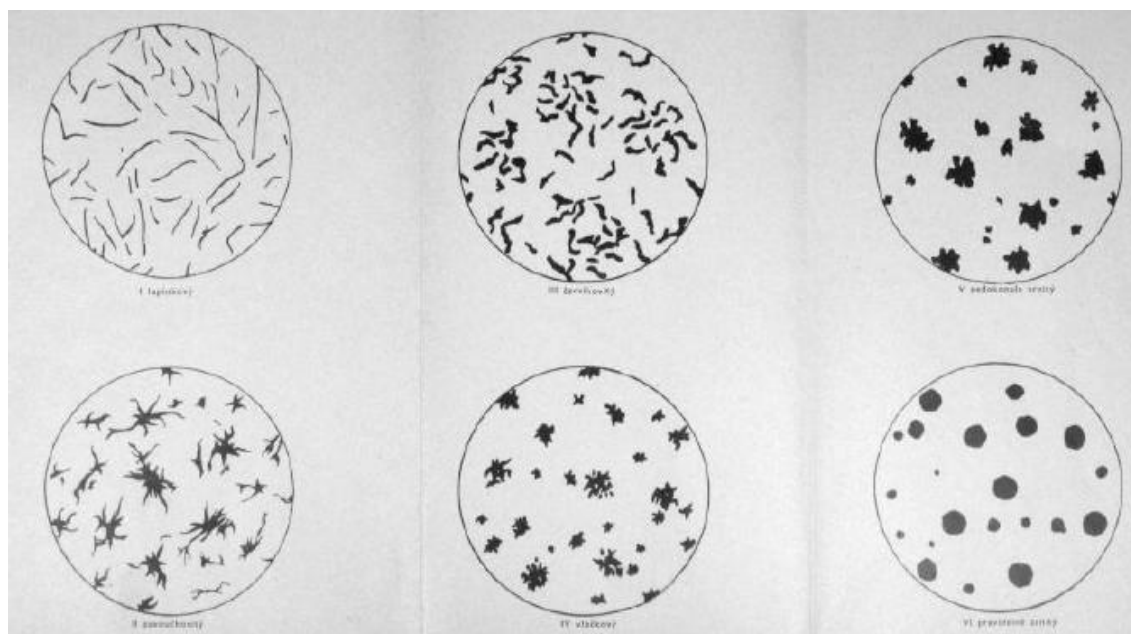
Hodnocení grafitu – se provádí při 100 násobném zvětšení. Hodnotí se tvar, velikost a rozložení grafitu.

**Tvar grafitu** se označuje římskými číslicemi (I až VI), I – lupínkový, II – vločkovitý, III- červíkovitý, IV – vločkový, V – nedokonale zrnitý, VI – pravidelně zrnitý, viz obr. 14-14.

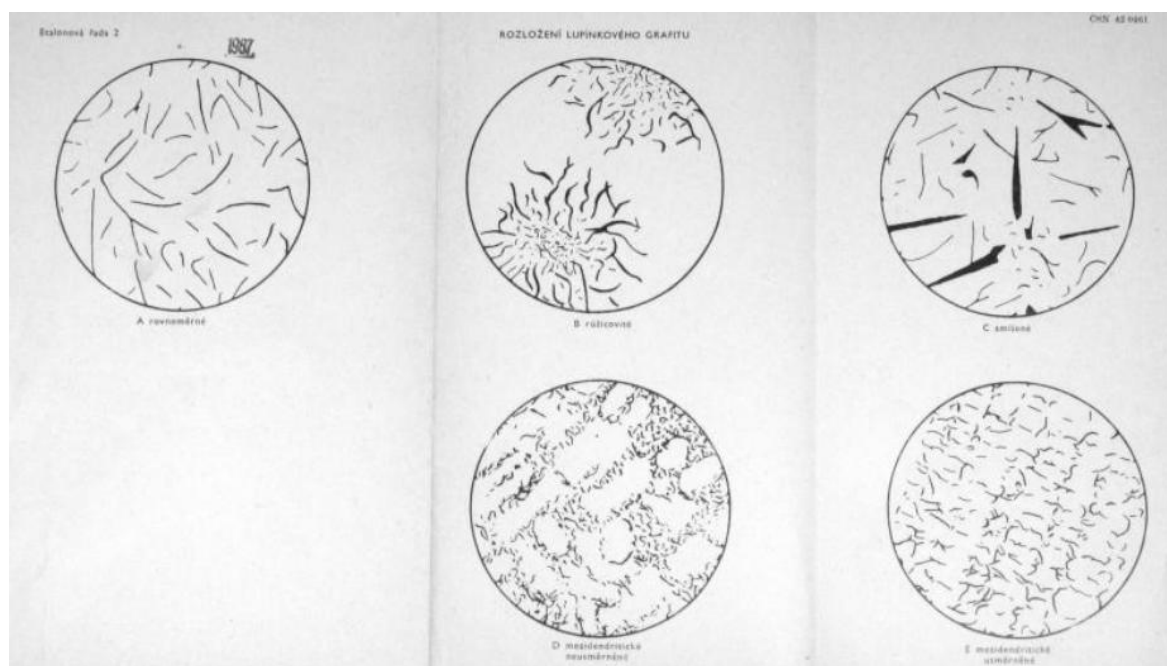
**Rozložení grafitu** se rozděluje do 6 skupin, je označováno písmeny, A až E. A – rovnoměrný, B – růžicové, C – smíšené, D – mezidendriticky neusměrněné, E – mezidendriticky usměrněné, viz obr. 14 - 15.

**Velikost grafitu** se hodnotí arabskými číslicemi 1 až 8. Lupínkový grafit odpovídá číselnému označení 1 až 8, vločkový a zrnitý grafit 3 až 8, červíkovitý grafit 3 až 7, viz obr. 14-16 až 14-18. Z tabulky 14.1 je zřejmé přiřazení velikosti grafitu k příslušné číslici.





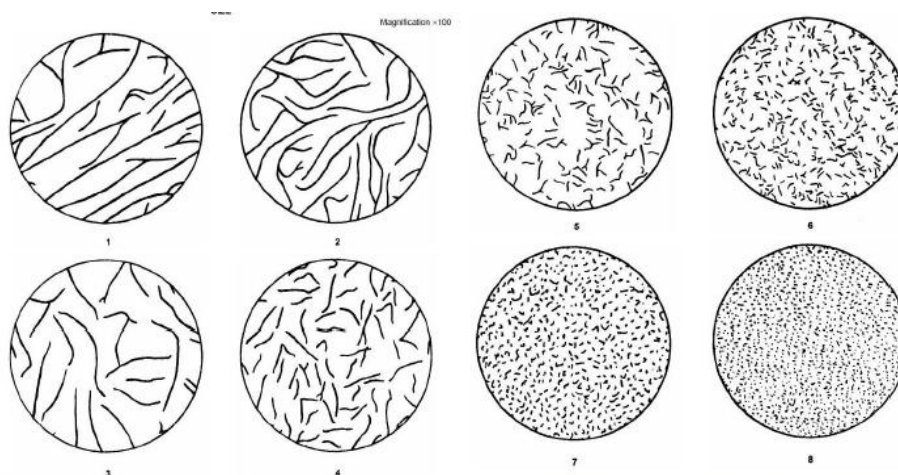
Obr. 14-14 Hodnocení tvaru grafitu (etalonová řada 1, dle ČSN 420461)



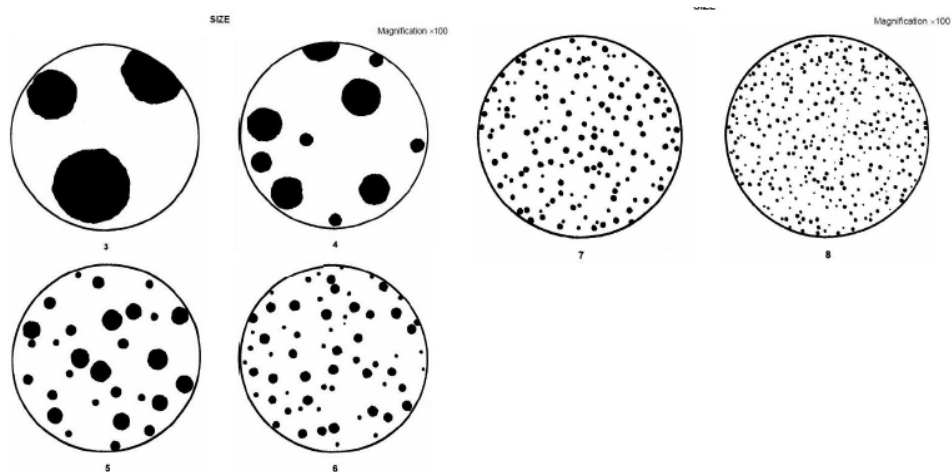
Obr. 14 - 15 Rozložení grafitu (etalonová řada 2, dle ČSN 42 0461)

Tabulka 14.1 Označení třídy velikosti grafitu a jí odpovídající velikost grafitu

| Označení třídy velikosti grafitu | Velikost grafitu [ $\mu\text{m}$ ] |
|----------------------------------|------------------------------------|
| 1                                | nad 1000                           |
| 2                                | nad 500 do 1000                    |
| 3                                | nad 250 do 500                     |
| 4                                | nad 120 do 250                     |
| 5                                | nad 60 do 120                      |
| 6                                | nad 30 do 60                       |
| 7                                | nad 15 do 30                       |
| 8                                | do 15                              |

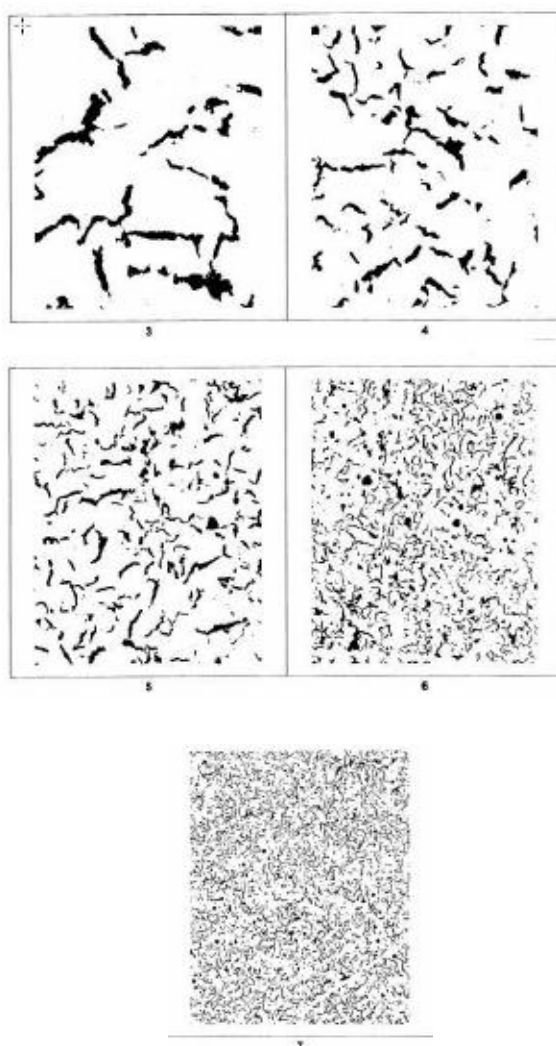


Obr. 14-16 Hodnocení velikosti lupínkového grafitu (etalonová řada, dle ČSN EN ISO 945)



Obr. 14-17 Hodnocení velikosti vločkového a zrnitého grafitu (etalonová řada, dle ČSN EN ISO 945)





Obr. 14-18 Etalony pro hodnocení velikosti červíkovitého grafitu

## B) Hodnocení základní kovové hmoty (matrice) litiny

Základní kovová hmota litiny může být feritická, feriticko-perlitické, a naopak, perlitická, popř. bainitická a martenzitická. Struktura litiny také může obsahovat volný cementit a fosfidické eutektikum.

### **Hodnocení perlitu**

*Hodnocení tvaru perlitu* P1 - lamelární perlit, P2 – zrnitý perlit.

*Hodnocení obsahu perlitu a feritu* se provádí dle příslušné etalonové řady (etalonová řada 5, dle ČSN 42 0461). Obsah těchto strukturních složek se uvádí v procentech, stanovuje se na základě hodnocení třech míst metalografického vzorku grafitické litiny. V tabulce 14.2 jsou uvedeny obsahy perlitu, resp. feritu a tomu odpovídající značení.

Tabulka 14.2 Obsah perlitu a feritu v hodnocené grafitické litině

| Označení výsledku | Obsah perlitu [%] | Označení výsledku | Obsah feritu [%] |
|-------------------|-------------------|-------------------|------------------|
| P                 | nad 98            | Fe 0              | do 2             |
| P96               | 94 - 98           | Fe 4              | 2 – 6            |
| P92               | 90 - 94           | Fe 8              | 6 – 10           |
| P85               | 80 - 90           | Fe 15             | 10 – 20          |
| P70               | 60 - 80           | Fe 30             | 20 – 40          |
| P45               | 30 - 60           | Fe 55             | 40 – 70          |
| P20               | 10 - 30           | Fe 80             | 70 – 90          |
| P6                | 2 - 19            | Fe 94             | 90 – 98          |
| P0                | do 2              | Fe                | nad 98           |

*Disperzita perlitu* se hodnotí při 1000 násobném zvětšení, stanovuje se průměrná hodnota vzdálenosti cementitu, podle etalonové řady 6. Hodnocení se provádí na třech místech metalografického vzorku litiny. V tabulce 14.3 jsou hodnoty disperzity perlitu a tomu odpovídající značení.

Tabulka 11.3 Hodnoty disperzity perlitu litiny

| Označení disperzity | Disperzita perlitu [ $\mu\text{m}$ ] |
|---------------------|--------------------------------------|
| Pd 0,3              | do 0,3                               |
| Pd 0,5              | 0,3 - 0,8                            |
| Pd 1,0              | 0,8 - 1,3                            |
| Pd 1,4              | 1,3 – 1,6                            |
| Pd 1,6              | nad 1,6                              |

**Hodnocení volného cementitu** se provádí při 100 násobném zvětšení, podle etalonové řady 7. Provádí se na třech místech metalografického vzorku litiny. Hodnotí se obsah a velikost útvarů cementitu.

**Hodnocení fosfidického eutektika** (ternární fosfidické eutektikum, tj. Fe - Fe<sub>3</sub>P - Fe<sub>3</sub>C), se provádí za účelem zjištění typu, rozložení a velikosti fosfidického eutektika.

*Typ fosfidického eutektika* se hodnotí při 500 násobném zvětšení dle etalonové řady 9.

*Rozložení fosfidického eutektika* se hodnotí při 20 násobném zvětšení, podle etalonové řady 10.

Velikost útvarů fosfidického eutektika se provádí při 100 násobném zvětšení, podle etalonové řady 12. Průměrná velikost útvarů se získává na základě hodnocení třech míst metalografického vzorku litiny.

Pro vlastní hodnocení litiny je nutné mít k dispozici obě normy ČSN EN ISO 945-1 a ČSN 42 0461.

### 14.3 Využití elektronových mikroskopů pro analýzu kovů a jejich slitin

Mezi nejpoužívanější elektronové mikroskopy patří *transmisní elektronový mikroskop (TEM)*. Hlavní výhoda TEM je proti *skenovacímu elektronovému mikroskopu (SEM)* především velká rozlišovací schopnost. Nevýhodou TEM je velmi náročná příprava preparátů a také jeho velká pořizovací cena. Ostatní vlastnosti obou typů mikroskopů jsou téměř srovnatelné.

*Transmisní elektronová mikroskopie* je vhodná pro sledování krystalické struktury kovů, pozorování struktury krystalických vrstev, sledování strukturních defektů kovů. Transmisní elektronový mikroskop ve spojení s elektronovou difrakcí umožňuje lepší prozkoumání mikrokrytalické struktury kovů a její charakteristiku (polohu, velikost, atd.).

Pro sledování a mikroskopickou analýzu lomových ploch se používá v současné době řádkovací elektronová mikroskopie, která umožňuje dosáhnout odpovídající rozlišovací schopnosti a zároveň vysokou hloubku ostrosti. To umožňuje sledovat i velmi členité povrchy lomů bez jakékoliv úpravy lomové plochy. Pokud bychom chtěli sledovat lomovou plochu pomocí prozařovací elektronové mikroskopie (transmisní elektronová mikroskopie), pak je nutné z lomové plochy sejmut otisk. To je metoda velmi náročná. Proto se pro sledování povrchů a povrchů lomových ploch používá skenovací elektronová mikroskopie (řádovací elektronová mikroskopie).

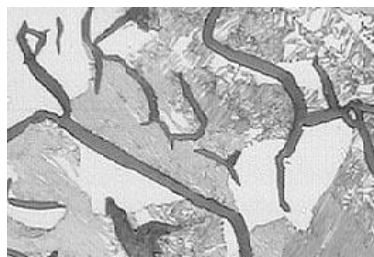
### 14.4 Úlohy k procvičení

#### Úloha č. 1

Popište postup přípravy metalografického vzorku pro pozorování jeho mikrostruktury na světelném mikroskopu.

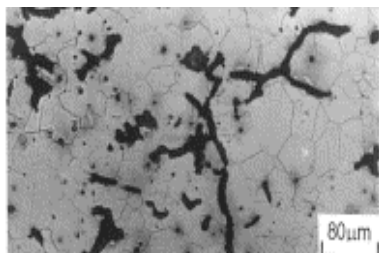
#### Úloha č. 2

Stanovte strukturu na metalografickém snímku. Odhadněte na jakém typu mikroskopu byl snímek pořízen.



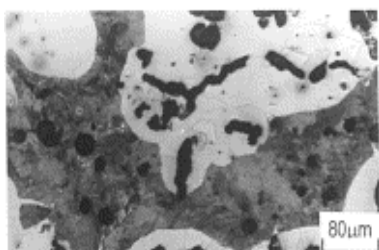
#### Úloha č. 3

Stanovte strukturu na metalografickém snímku. Odhadněte na jakém typu mikroskopu byl snímek pořízen.



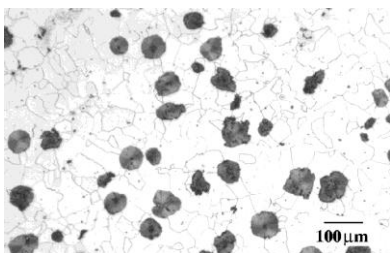
#### Úloha č. 4

Stanovte strukturu na metalografickém snímku. Odhadněte na jakém typu mikroskopu byl snímek pořízen.



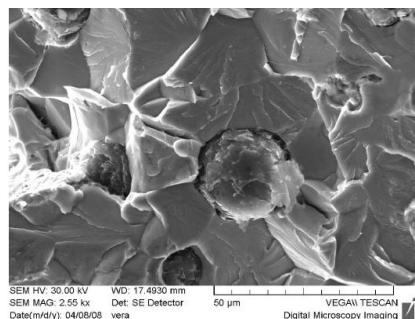
#### Úloha č. 5

Stanovte strukturu na metalografickém snímku. Odhadněte na jakém typu mikroskopu byl snímek pořízen.



#### Úloha č. 6

Stanovte strukturu materiálu na metalografickém snímku [47]. Odhadněte na jakém typu mikroskopu byl snímek pořízen.



#### Úloha č. 7

Stanovte nejjednodušší způsob metalografického posuzování struktury kovů (slitin kovů), chceme-li posoudit zda-li se jedná o ocel nebo jiný typ materiálů.

**Úloha č. 8**

Jaký typ mikroskopu byste doporučili pro sledování povrchových vrstev kovu?

**Úloha č. 9**

Jaký typ mikroskopu byste doporučili pro sledování lomové plochy materiálu?

## Literatura

- [1] LAPČÍK, Vladimír výrobní a environmentální technologie. VŠB – TU Ostrava 2008.
- [2] PTÁČEK, L., USTOHAL, V.: Slitiny zinku pro odlitky. Slévárství č. 4, 2001. s. ISSN 0037-6825.
- [3] PTÁČEK, L. a kol.: *Nauka o materiálu I.* (2. opravené a doplněné vydání 2003) Akademické nakladatelství CERM, Brno, 2001.
- [4] <http://ebook.veda-hrou.cz/cms/10-kapitola-1-co-je-ocel.html> (24.11.2014)
- [5] [www.google.cz/search?q=grafit+v+litinách](http://www.google.cz/search?q=grafit+v+litinách) (24.11.2014).
- [6] Cotton F.A., Wilkinson J.: Anorganická chemie, souborné zpracování pro pokročilé, ACADEMIA, Praha 1973.
- [7] HOLZBECHER, Z.: Analytická chemie, SNTL, Praha 1974
- [8] <http://cs.wikipedia.org/wiki/Nikl> (24.11.2014).
- [9] <http://geologie.vsb.cz/loziska/loziska/rudy/ilmenit.html> (24.11.2014).
- [10] ČÁMEK, L.: Slévárství ocelových odlitků. [Studijní opora]. VŠB –TU Ostrava 2013.
- [11] GRÍGEROVÁ, Taťána, KOŘENÝ, Rudolf., LUKÁČ, Ivan.: *Zlívárství neželezných kovů.* 1. vyd. Bratislava/Praha 1988.
- [12] HAVLÍČEK František: *Kapitoly z teplofyziky odlitku a formy.* [Skripty], VŠB Ostrava, 1970.
- [13] CAMPBELL John: Casting. Second edition. *Butterworth Heinemann.*
- [14] MICHNA Štefan et al.: *Encyklopedie hliníku.* 1. vyd. Prešov 2007.
- [15] KALOUSEK, J., KALOUSKOVÁ, G., HOLUBEC, Z.: Fyzikální metalurgie. [Skripty]. FS - VŠST Liberec, 1990.
- [16] PLUHAŘ Jaroslav a kol.: *Fyzikální metalurgie a mezní stavy materiálu.* 1. vyd. Praha 1987.
- [17] ALAXIN, Jan.: *Fyzikální metalurgie I a II.* [Skripty]. VŠST Liberec 1987.
- [18] VALVODA, V., POLCAROVÁ, M., LUKÁČ, Pavel.: *Základy strukturní analýzy.* Univerzita Karlova Praha, 1992.
- [19] PÍŠEK František, JENÍČEK, Ladislav, RYŠ, Přemysl: *Nauka o materiálu I - Nauka o kovech 1 svazek, Obecná nauka o kovech.* druhé rozšířené vydání, Praha 1966.
- [20] PÍŠEK František, JENÍČEK, Ladislav, RYŠ, Přemysl: *Nauka o materiálu I - Nauka o kovech 2. svazek, Vlastnosti kovů.* druhé rozšířené vydání, Praha 1968.
- [21] LEJČEK, Pavel, NOVÁK, Pavel.: *Fyzika kovů.* [Skripty]. VŠCHT – FCHT, Praha 2008.
- [22] PLUHAŘ, Jaroslav, KORRITA Josef.: *Strojírenské materiály.* 2. vyd. Praha 1977.
- [23] VLACHOVÁ Magda, KÁŽA Jindřich: *Krystalické soustavy.* Edutorium Technica science center, ZČU Plzeň, duben 2012.

- [24] Pokladové materiály firmy TimeCompany-About.com.chemistry, www.Metall.com.cn, New York, duben 2012. [25] ŠVEC Pavol: *Konstrukčné materiály*. 1. vyd. STU v Bratislavě 2010. ISBN 978-80-277-3386 -1.
- [25] Thomson Learning Brooks / Cole Publishing 2003 (c).
- [26] PTÁČEK Luděk a kol.: *Nauka o materiálu II*. Akademické nakladatelství CERM, 2. opravené a doplněné vydání. Brno, 2003 ISBN 80 -7204-193-2.
- [27] VELES Pavel: *Mechanické vlastnosti a skúšanie kovov*, Alfa Bratislava, 1985.
- [28] ASM Metals Handbook: *Fractography*, Vol. 12, ASM International, 1987.
- [29] MICHEL Ján et al: *Microstructure and Mechanical properties Degradation of CrMo Creep Steel Operating Under Creep*. Materials Engineering - Materiálové inžinierstvo 18 (2011) p. 57-62.
- [30] BARTÁK Jiří, Řepová Jana: *Matematické, fyzikální a chemické tabulky*. 1. vyd. SPN Praha, 1976.
- [31] KITTEL CH.: *Úvod do fyziky pevných látek*. 6. vydanie, Academia, Praha, 1985.
- [32] KITTEL CH.: *Kvantová teória tuhých látok*. Alfa, Bratislava, 1977.
- [33] ČIČMANEC Peter.: *Všeobecná fyzika 2: Elektrina a magnetizmus*. Alfa, Bratislava, 1980.
- [34] COTTRELL A. H.: *Základy fyziky kovov*. Slov. vyd. technické literatury, Bratislava, 1961.
- [35] KUŽEL Rudolf.et al.: *Úvod do fyziky kovů II*. SNTL, Praha, 1985.
- [36] SOBOTKA, J.: Sbíрка řešených příkladů z fyziky kovů – I. díl. FS-TU v Liberci 2014. ISBN 978-80-7494-131-3.
- [37] SOBOTKA, J.: Sbíрка řešených příkladů z fyziky kovů – II. díl. FS-TU v Liberci 2014. ISBN 978-80-7494-132-0.
- [38] VÁVRA, V., LOSOS, Z.: Multimediální texty z mineralogie pro bakalářské studium. Ústav geologie věd , PřF-MU v Brně, 2013.
- [39] PÍŠEK František, JENÍČEK, Ladislav, RYŠ, Přemysl: *Nauka o materiálu I - Nauka o kovech 3. svazek, Neželezné kovy*. druhé rozšířené a zcela přepracované vydání, Praha 1973.
- [40] HOOK, J.R, HALL, H.E: Solid Manchester Physics Series, State Physics (2nd Edition), John Wiley & Sons, 2010,ISBN 978-0-471-92804-1.
- [41] CALLISTER, W.D.: Fundamentals of Materials Science and Engineering. 5<sup>th</sup> edition. JohnWiley&sons 2000. ISBN 0-471-39551-X.
- [42] Elektronový mikroskop do nitra materiálu, aneb jak vypadá jejich struktura Odborné podkladové materiály Fyzikálního ústavu QAV ČR v.v.i. (15.12. 2014).
- [43] VODÁREK, V.: Metody studia struktury [Studijní texty]. VŠB -TU Ostrava 2012, ISBN 978-80-248-2559-5.
- [44] Úvod do difúze kovů. [Studijní materiály]. ZUČ Plzeň, 2010, [home.zcu.cz/~bebrl/Fmm/](http://home.zcu.cz/~bebrl/Fmm/). (4.12.2014).
- [45] Studijní materiály Difúze v kovech. FSI - VUT Brno, 2009.

- [46] KOLEKTIV: Lomová mechanika a lomy. [Mechanické vlastnosti II]. [www.fsforum.cz/upload/soubory/databaze-predmetu/.../FM%2013.ppt](http://www.fsforum.cz/upload/soubory/databaze-predmetu/.../FM%2013.ppt) (20.03. 2014).
- [47] VODIČKOVÁ, V.: Makro a mikrofraktografie ocelí. [Zkoušení materiálových vlastností]. Studijní materiály, TECHNOMAT, cvičení č. 6. KMT-FS, TU v Liberci.
- [48] KŘÍŽ, A.: Zkoušky rázem (Nauka o materiálu I.) – studijní podklady.
- [49] STRNADEL, B., DLOUHÝ, I. : Proč se šíří trhliny. kritické vlastnosti materiálu. *VESMÍR* 86, říjen 2007.
- [50] MICHNA Štefan et al.: *Encyklopedie hliníku*. 1. vyd. Prešov 2007.
- [51] HULÍNSKÝ V., JUREK K. 1982: Zkoumání látek elektronovým paprskem. 1. vyd. SNTL Praha.
- [52] NEBESÁŘOVÁ Jana 2001: Elektronová mikroskopie pro biology. [Studijní podklady], Praha.
- [53] KOLEKTIV AUTORŮ: Ocelový svět. Projekt populár – investice do vzdělávání. COMTES HTF a.s.
- [54] [cz.wikipedia.org/Wiki/Ferit](http://cz.wikipedia.org/Wiki/Ferit)
- [55] [cz.wikipedia.org/Wiki/Perlit](http://cz.wikipedia.org/Wiki/Perlit)
- [56] [cz.wikipedia.org/Wiki/Bainit](http://cz.wikipedia.org/Wiki/Bainit)
- [57] [cz.wikipedia.org/Wiki/Martenzit](http://cz.wikipedia.org/Wiki/Martenzit)
- [58] Studijní materiály Difúze v kovech. FSI - VUT Brno, 2009.
- [59] ASKELAND, Donald R a Pradeep P PHULÉ. Science and engineering of materials. 4th ed. Pacific Grove: Books/Cole-Thomson Learning, 2003, 1003 s. ISBN 0534953735.
- [60] MÜNSTEROVÁ, Eva, Eva MOLLIKOVÁ. 3. Fázové přeměny při tepelném zpracování [online]. [cit. 2008-9-27]
- [61] CALLISTER, William D. Materials science and engineering: an introduction. 6th ed. New York: John Wiley and Sons, Inc., 2003, 820 s. ISBN 0-471-22471-5.
- [62] PAVLÍK Jakub: (2013) Difúze v kovech. [Bakalářská práce], FSI-VUT Brno.
- [63] ČSN 42 0461: Hodnocení metalografické struktury litin.
- [64] ČSN EN ISO 945 Litina: Určení mikrostruktury grafitu.
- [65] ČSN EN ISO 643: Ocel – Mikrografické stanovení velikosti zrn.
- [66] AUTHORS COLLECTIVE Fundamentals of Magnesium Alloy Metallurgy Edited by Kainer, GKSS, Germany. March 2013. ISBN 978-0-85709-088-1.
- [67] [cz.wikipedia.org/Wiki/austenit](http://cz.wikipedia.org/Wiki/austenit).
- [68] CALLISTER, William: *Fundamentals of Materials Science and Engineering*. 5<sup>th</sup> edition. Department of Mechanical Engineering the University of Utah.
- [69] MAZANCOVÁ Eva: Technické materiály I – Kovové materiály. [Učební text]. FMMI, VŠB – TU Ostrava, 2012.



- [70] NOVÁK, Pavel: Příprava, vlastnosti a použití intermetalických sloučenin. Chemické listy 106, 2012, s. 884-889.
- [71] MICHNA, Štefan, LUKÁČ, Ivan: Praktická fraktografie. 1. vyd. UJEP Ústí nad Labem, 2012. ISBN 978-80-7414-496-7.
- [72] Hazlinger Marian, Moravčík Roman, ČAPLOVIČ Lubomír: Degradální procesy a predikci životnosti materiálů. 1. vyd. STU v Bratislavě 2010 ISBN 978-80-277-3334-2.

# PŘÍLOHA

## Příloha č. 1

Přehled železných rud s uvedením obsahu železa

| Železná ruda | Chemický vzorec                                                        | Chemická skupina | Maximální obsah Fe [%] | Průmyslový význam |
|--------------|------------------------------------------------------------------------|------------------|------------------------|-------------------|
| Magnetit     | $\text{Fe}_3\text{O}_4$                                                | oxidy            | 72                     | značný            |
| Hematit      | $\text{Fe}_2\text{O}_3$                                                | oxidy            | 70                     | značný            |
| Limonit      | $\text{FeO}(\text{OH}) \cdot n\text{H}_2\text{O}$                      | oxidy            | 50 až 69               | střední           |
| Siderit      | $\text{FeCO}_3$                                                        | uhličitan        | 48                     | střední           |
| Chamosit     | $(\text{Fe, Mg})_5\text{Al}[(\text{OH})_8 \text{AlSi}_3\text{O}_{10}]$ | křemičitany      | < 38                   | malý              |

**Poznámka:** Nejpoužívanější Limonit není samostatný minerál, ale je to směs hydratovaných oxidů železa s převahou goethitu a lepidokrokitu. Maximální obsahy železa v rudách jsou teoretické, v rudě jsou vždy přítomny i nerudní minerály (hlušina), které snižují obsah železa.

## Vybrané železné rudy



a)



b)



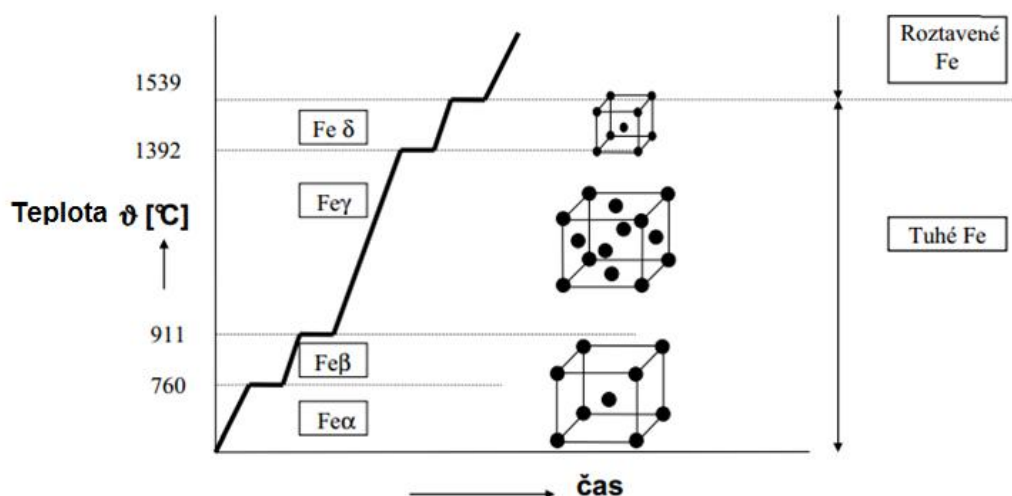
c)



d)

a) – krevel, b) – ocelek, c) hnědel, d) – magnetovec

## Křivka chladnutí čistého železa



## Slitiny železa s uhlíkem

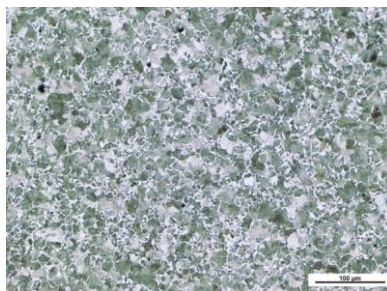
**Uhlík** ve slitinách železa se vyskytuje:

- *cementit* -  $\text{Fe}_3\text{C}$  (z hlediska fyzikální metalurgie to je intermediální fáze;
- *tuhý roztok* (ferit, austenit) – oceli, popř. litiny;
- *grafit* – vždy u grafitických litin.

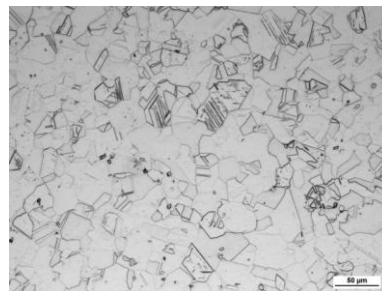
## Metalografické struktury [4]



*Ferit*



*Perlit*



*Austenit*



*Grafit v litině*

## Příloha č. 3

| Strukturní složka | Diagram Fe-C, tvoří | Označení v diagramu Fe-C   | Charakteristika                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-------------------|---------------------|----------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Cementit</b>   | fáze                | CEM, $\text{Fe}_3\text{C}$ | Karbid železa, $\text{Fe}_3\text{C}$ je intermediární fáze. V ocelích se vyskytuje jako sekundární, případně u měkkých ocelí jako terciární. Vytvoří-li síťoví kolem perlitických zrn, způsobuje křehkost oceli. Je velmi tvrdý ( $\text{HV} = 650$ ), neprodělavá alotropické přeměny. |
| <b>Ferit</b>      | fáze                | F                          | Tuhý intersticiální roztok uhlíku v železe $\alpha$ ( $\text{Fe}_\alpha$ ). Je hlavní strukturní součástí ocelí, popř. grafitických litin, je měkký ( $\text{HB} = 75$ ), málo pevný ( $R_m = 260 \text{ MPa}$ ), dobře tvárný, feromagnetický.                                         |
| <b>Austenit</b>   | fáze                | A                          | Tuhý intersticiální roztok uhlíku v železe $\gamma$ ( $\text{Fe}_\gamma$ ). Je dobře tvárný, plastický a nemagnetický. Austenitické oceli jsou dobře tvárné za studena, jsou však velmi houževnaté - obtížně obrobitelné.                                                               |
| <b>Perlit</b>     | směs fází           | P                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| <b>Ledeburit</b>  | směs fází           | L, $L_{\text{TR}}$         | Eutektikum metastabilní soustavy - L: směs austenitu a cementitu. Pod teplotou $A_1 - L_{\text{TR}}$ : směs perlitu a cementitu. Je tvrdý a křehký. Je součástí bílé litiny.                                                                                                            |
| <b>Grafit</b>     | fáze                | G, GR                      | Je to měkká forma uhlíku. V porovnání s čistým železem má malou tvárnost i pevnost ( $R_m = 10$ až $20 \text{ MPa}$ ).                                                                                                                                                                  |

**Technické slitiny železa**

Technické slitiny železa jsou slitiny železa, uhlíku a dalších prvků. Rozdělení je podle obsahu uhlíku do dvou skupin:

- a) do 2,11% C - železa kujná - ocele
- b) nad 2,11% C - železa nekujná – grafitická litina, surová železa.

Ocel je slitina železa, uhlíku (do 2,11%), doprovodných prvků a legur.

Grafitická litina je slitina železa, uhlíku (kolem 3%) a dalších prvků (zejména křemíku, manganu, fosforu a síry).

## Příloha č. 4

**Čisté železo** - je polymorfní kov, Vyskytuje se ve dvou alotropických modifikacích:

a) železo  $\alpha$  ( $\beta$ ,  $\delta$ ) – krystalizuje v kubické prostorově středěné mřížce.

b) železo  $\gamma$  - krystalizuje v kubické plošně středěné mřížce.

Hustota čistého železa je  $7874 \text{ kg.m}^{-3}$ , teplota tavení je  $1539^\circ\text{C}$ , součinitel teplotní roztažnosti je  $11,7 \cdot 10^{-6} [\text{K}^{-1}]$

**Suroviny pro výrobu hliníku** – hornina bauxitu (směs vodnatých oxidů hliníku)



**Surovina pro výrobu zinku** – sfalerit ( $\text{ZnS}$ ) [2]



**Suroviny - horniny (rudy) pro výrobu mědi**



a)



b)



c)

a - Kuprit –  $\text{Cu}_2\text{O}$ ; b - Azurit –  $2 \text{CuCO}_3 \cdot \text{Cu}(\text{OH})_2$ , c - Chalkopyrit –  $\text{CuFeS}_2$



## Příloha č. 5

## Suroviny pro výrobu hořčíku

| Rudy pro výrobu hořčíku | Chemický vzorec                                            | Předpokládaný obsah hořčíku [%] |
|-------------------------|------------------------------------------------------------|---------------------------------|
| Brucit                  | $\text{Mg}(\text{OH})_2$                                   | 41,6                            |
| Olivín                  | $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$                                  | 34,6                            |
| Magnezit                | $\text{MgCO}_3$                                            | 28,8                            |
| Dolomit                 | $\text{MgCO}_3 \cdot \text{CaCO}_3$                        | 13,2                            |
| Bischofit               | $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$                  | 12,0                            |
| Karnalit                | $\text{MgCl}_2 \cdot \text{KCl} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ | 8,8                             |



a)



b)

a) – dolomit -  $(\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2)$  b) – magnezit  $\text{MgCO}_3$

## Suroviny – rudy pro výrobu niklu [9]

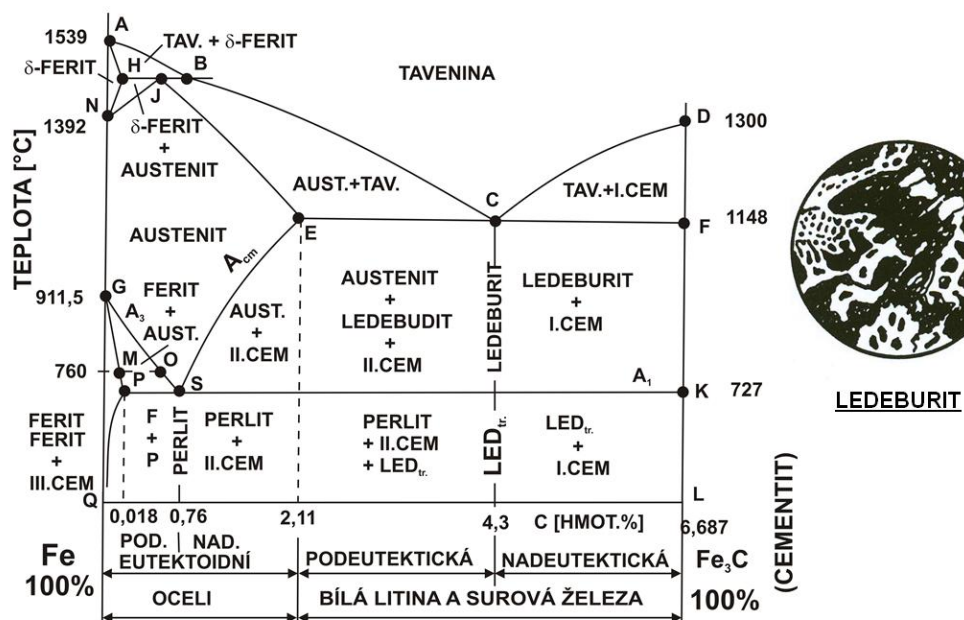
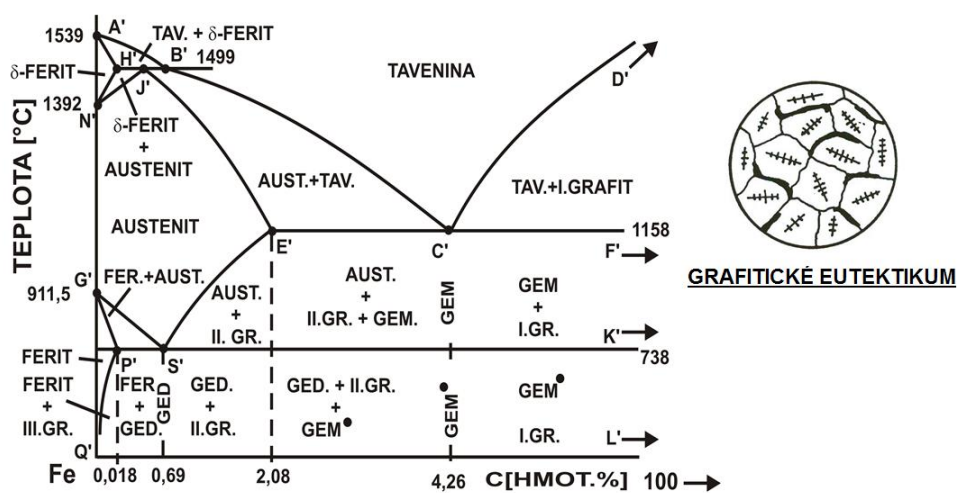


vlevo:  $\text{NiAs}$  – nikelin; uprostřed:  $(\text{Ni,Fe})_9\text{S}_8$  – pentlandit; pravo: Garnierit –  $(\text{Ni,Mg})_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})$

## Suroviny pro výrobu titanu

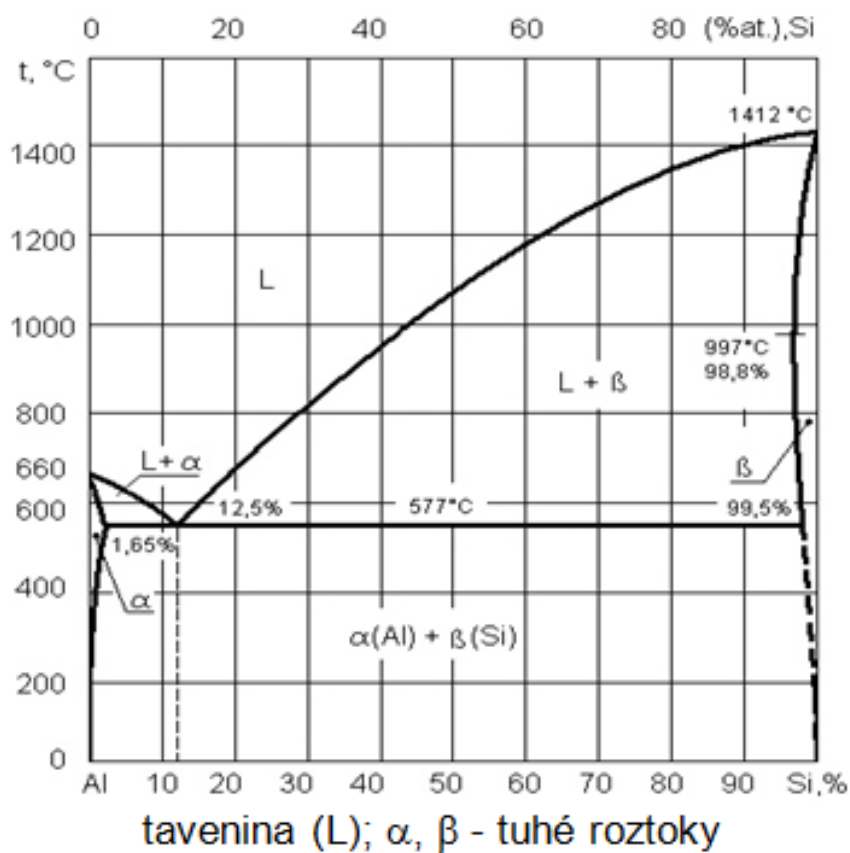
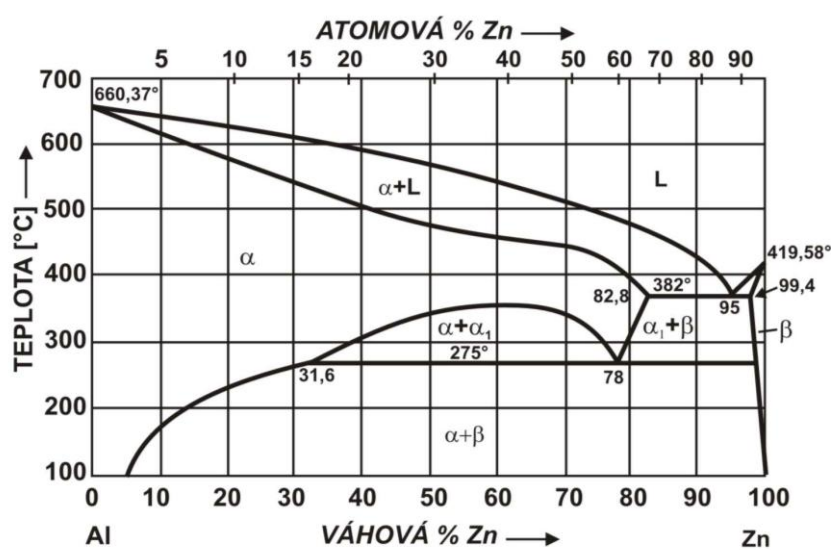
ilmenit –  $\text{FeTiO}_3$  (vlevo); rutil –  $\text{TiO}_2$  – vlevo [9]

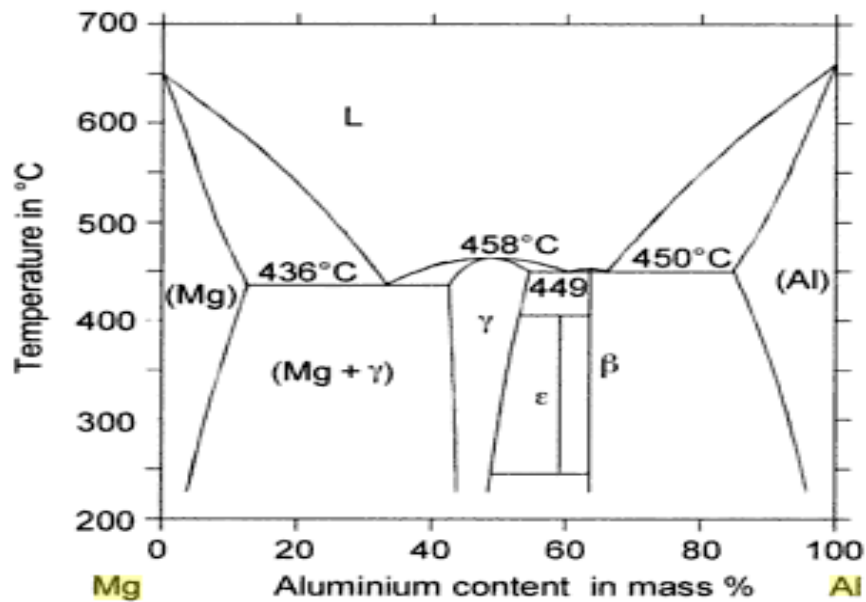
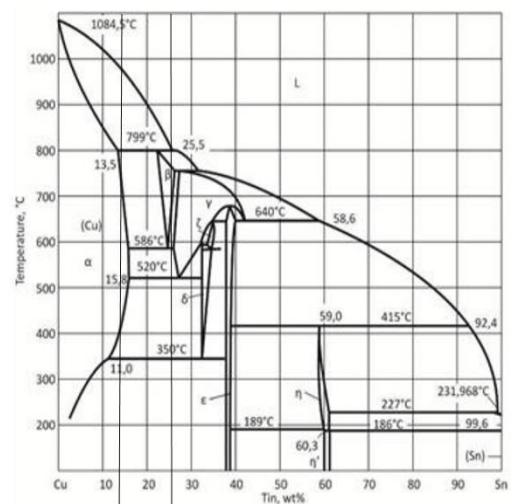
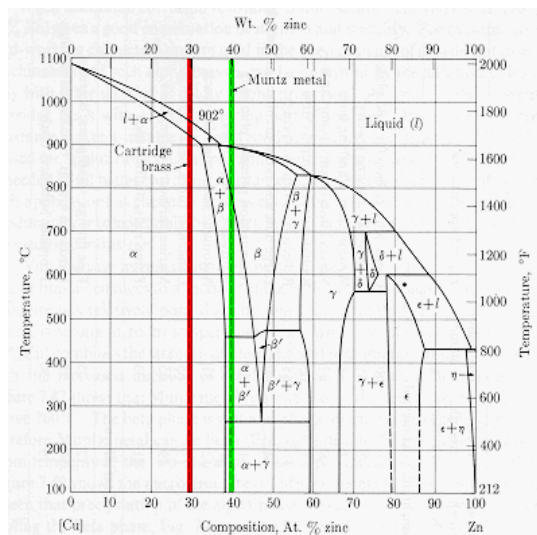


Rovnovážný diagram Fe – C metastabilníRovnovážný diagram Fe – C stabilní

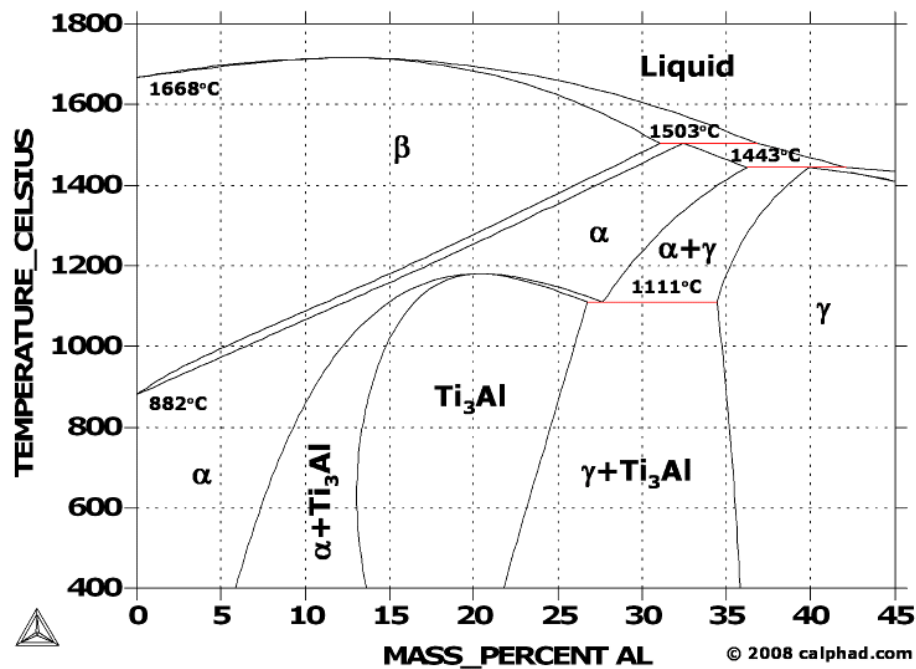


## Příloha č. 7

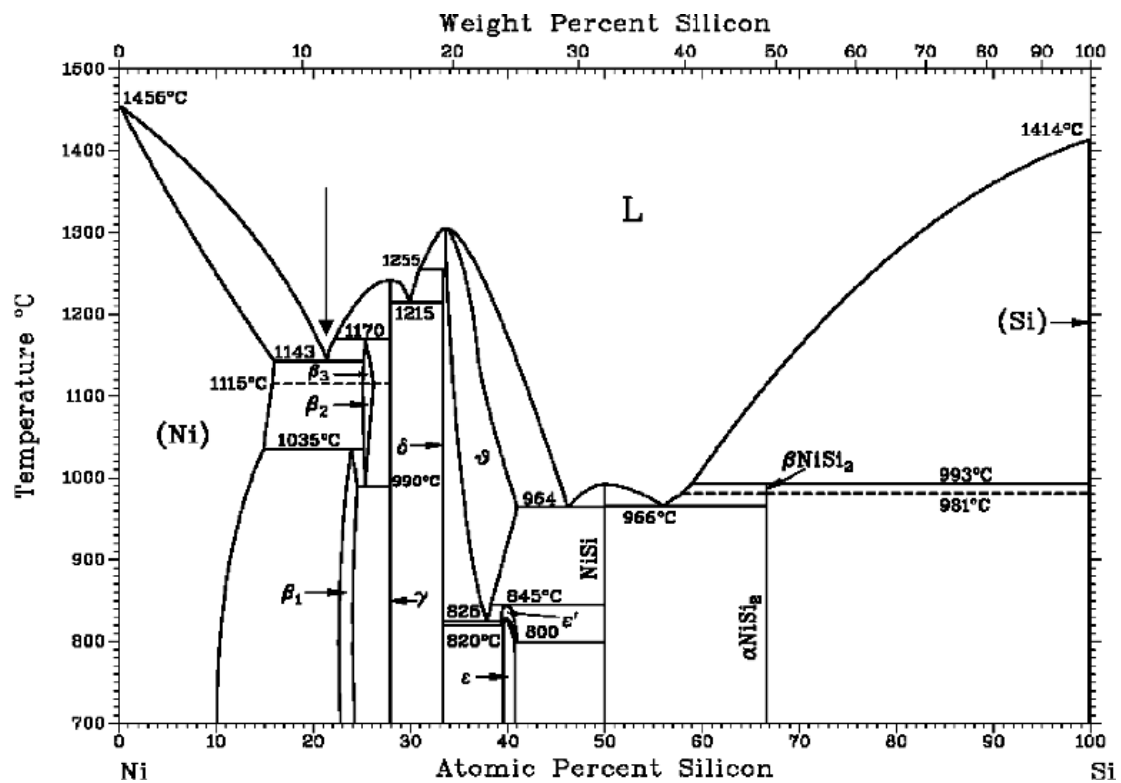
Rovnovážný diagram Al – SiRovnovážný diagram Zn - Al resp. Al – Zn

**Rovnovážný diagram Mg – Al****Rovnovážné diagram Cu – Zn a Cu – Sn**

## Rovnovážný diagram Ti - Al



## Rovnovážný diagram Ni - Si



## Stručný přehled nejpoužívanějších slitin kovů

### Slitiny železa (oceli, litiny)

oceli, viz předmět nauka o materiálu, rozdělení dle ČSN EN 10020, rozdělení podle chemického složení – nelegované a legované. *Rozdělení ocelí podle hlavních skupin jakosti*

- 1) skupiny nelegovaných ocelí: B – oceli obvyklých jakostí; Q – nelegované jakostní oceli; S – nelegované ušlechtilé oceli.
- 2) Skupiny legovaných ocelí: QS – legované jakostní oceli, SS – legované ušlechtilé oceli.
- 3) Skupiny ocelí na odlitky dle ČSN EN 10020 (nelegované, nízkolegované a oceli vysokolegované).

*Rozdělení litin:* ČSN EN1561 - GJL, ČSN EN 11563 - GJS a GJV, která není u nás normalizovaná.

### Slitiny hliníku

se dělí na slitiny hliníku pro tváření a slitiny hliníku pro odlévání.

| Označení slitin hliníku určených k tváření podle<br>ČSN EN 573-1 až 3 |                                  |
|-----------------------------------------------------------------------|----------------------------------|
| Skupina                                                               | Hlavní slitinové prvky           |
| 1000                                                                  | čistý Al minimálně 99,00% a více |
| 2000                                                                  | Al-Cu                            |
| 3000                                                                  | Al-Mn                            |
| 4000                                                                  | Al-Si                            |
| 5000                                                                  | Al-Mg                            |
| 6000                                                                  | Al-Mg-Si                         |
| 7000                                                                  | Al-Zn                            |
| 8000                                                                  | Al s různými prvky               |

| Označení slitin hliníku určených ke slévání<br>ČSN EN 1706 |                                          |
|------------------------------------------------------------|------------------------------------------|
| Skupina                                                    | Hlavní slitinové prvky                   |
| 10000                                                      | čistý Al minimálně 99,00% a více         |
| 20000                                                      | Al-Cu                                    |
| 30000                                                      | Al-Mn                                    |
| 40000                                                      | Al-Si (Siluminy)<br>Al-Si-Cu<br>Al-Si-Mg |
| 50000                                                      | Al-Mg (Hydronálie)                       |
| 60000                                                      | Al-Mg-Si                                 |
| 70000                                                      | Al-Zn                                    |

## Slitiny hořčíku

| Slitina | Chemické složení slitin hořčíku [hmot. %] |          |           |           |        |        |        |            |
|---------|-------------------------------------------|----------|-----------|-----------|--------|--------|--------|------------|
|         | Al                                        | Mn       | Zn        | Si        | Cu MAX | Ni MAX | Fe MAX | Ostat. MAX |
| AZ 91   | 8,3-9,7                                   | 0,15-0,5 | 0,35-1,0  | max. 0,10 | 0,01   | 0,002  | 0,005  | 0,02       |
| AM 60   | 5,5-6,5                                   | 0,24-0,6 | max. 0,22 | max. 0,10 | 0,01   | 0,002  | 0,005  | 0,02       |
| AM 50   | 4,4-5,4                                   | 0,26-0,6 | max. 0,22 | max. 0,10 | 0,01   | 0,002  | 0,004  | 0,02       |
| AM 20   | 1,6-2,6                                   | min. 0,1 | max. 0,20 | max. 0,10 | 0,01   | 0,002  | 0,005  | 0,02       |
| AS 41   | 3,5-5,0                                   | 0,35-0,7 | max. 0,12 | 0,5-1,5   | 0,02   | 0,002  | 0,0035 | 0,02       |
| AS 21   | 1,8-2,6                                   | min. 0,1 | max. 0,20 | 0,7-1,2   | 0,01   | 0,002  | 0,005  | 0,02       |
| AE 42   | 3,5-4,5                                   | min. 0,1 | max. 0,20 | max. 0,10 | 0,02   | 0,002  | 0,005  | 0,02       |

## Slitiny zinku

| Označení slitiny                      | Chemické složení v [%] |                    |                     |               | Mechanické vlastnosti                                                      |                                                                  |                                                            |
|---------------------------------------|------------------------|--------------------|---------------------|---------------|----------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------|
|                                       | Al                     | Cu                 | Mg                  | Fe            | Rm [MPa]                                                                   | A <sub>10</sub> [%]                                              | HB                                                         |
| ZnAl4<br>ZAMAK 400<br>(ČSN 423558)    | 3,9<br>až<br>4,3       | 0,10               | 0,02<br>až<br>0,05  | max.<br>0,075 | 160 - 180                                                                  | 1                                                                | 60                                                         |
| ZnAl4Cu1<br>ZAMAK 410<br>(ČSN 423560) | 3,9<br>Až 4,3          | 0,75<br>až<br>1,25 | 0,02<br>až<br>0,05  | max.<br>0,075 | 270-330 <sup>1)</sup><br>180-220 <sup>2)</sup>                             | 2-5 <sup>1)</sup><br>1,5 <sup>2)</sup>                           | 80-<br>100 <sup>1)</sup><br>70 <sup>2)</sup>               |
| ZnAl4Cu3<br>ZAMAK 430<br>(ČSN 423562) | 3,5<br>až<br>4,3       | 2,2<br>až<br>3,2   | 0,03<br>až<br>0,06  | max.<br>0,075 | 420-480 <sup>1)</sup><br>300 <sup>2)</sup>                                 | 2-3 <sup>1)</sup>                                                | 80-<br>120 <sup>1)</sup>                                   |
| ZnAl8                                 | 8,0<br>až<br>8,8       | 0,8<br>až<br>1,3   | 0,015<br>až<br>0,03 | max.<br>0,1   | 220až255 <sup>2)</sup><br>250až275 <sup>3)</sup><br>360až385 <sup>1)</sup> | 1-2 <sup>2)</sup><br>1-2 <sup>3)</sup><br>5-<br>10 <sup>1)</sup> | 85 <sup>2)</sup><br>90 <sup>3)</sup><br>105 <sup>1)</sup>  |
| ZnAl12                                | 11,0<br>až<br>11,5     | 0,5<br>až<br>1,25  | 0,015<br>až<br>0,03 | max.<br>0,075 | 275-310<br>310-345<br>390-415                                              | 1-3 <sup>2)</sup><br>2-5 <sup>3)</sup><br>4-7 <sup>1)</sup>      | 95 <sup>2)</sup><br>105 <sup>3)</sup><br>125 <sup>1)</sup> |
| ZnAl27                                | 25,0<br>žž<br>28,0     | 2,0<br>až<br>2,5   | 0,01<br>až<br>0,02  | max.<br>0,1   | 400 <sup>2)</sup><br>440 <sup>1)</sup>                                     | 3-<br>5 <sup>2)</sup><br>6 <sup>1)</sup>                         | 90 <sup>2)</sup><br>125 <sup>1)</sup>                      |

Poznámka: <sup>1)</sup> - pro odlitky lité pod tlakem; <sup>2)</sup> - pro odlitky lité do písku; <sup>3)</sup> - pro odlitky lité do kokily

## Slitiny mědi

### Přehled jednotlivých typů mosazí

- Slitiny typu** Cu-Zn – nad 55 % Cu, zbytek Zn, Al, Sn, Mn – odolnost proti oxidaci, korozi, kluzné vlastnosti – ložiska, armatury, těsnicí kroužky;
- Slitiny typu** Cu-Zn-Sn (2) – akustická mosaz, dechové nástroje, jazyčky hudebních nástrojů;

## Příloha č. 12

- c) **Slitiny typu** Cu-Zn-Mn (1 až 5) – bílá mosaz, vykazují vysokou pevnost a tažnost (zbraně, turbíny, ložiska);
- d) **Slitiny typu** Cu-Zn-Pb (2 až 3) – zlepšení obrobitelnosti;
- e) **Slitiny typu** Cu-Ni vykazují různé fyzikální vlastnosti, vysoká pevnost, tažnost, korozní odolnost, termočlánky, ozdobné předměty (alpaka Cu<sub>20</sub>Zn<sub>20</sub>Ni), pagfonk Cu-20Ni), Monely Ni-Cu(30) – korozní odolnost, R<sub>m</sub> až 1000 MPa, A<sub>5</sub> až 50%.

**Přehled jednotlivých bronzů**

Slitiny mědi a všech prvků mino zinku, nejčastěji Sn.

| Typ slitiny          | ČSN     | Způsob<br>lití | Pevnost<br>[MPa] | Použití                                                                                                         |
|----------------------|---------|----------------|------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Cínové bronzы</b> |         |                |                  |                                                                                                                 |
| <b>CuSn5</b>         | 42 3115 | P              | 180              | Těsnící kroužky, pouzdra                                                                                        |
| <b>CuSn10</b>        | 42 3119 | P              | 250              | Součásti namáhané rázy, oběžná kola                                                                             |
| <b>CuSn10P1</b>      | 42 3120 | P, K           | 200 - 250        | Ložiska, ozubená kola                                                                                           |
| <b>CuSn12</b>        | 42 3123 | P, K, O        | 240 - 260        | Součásti pro dynamická zatížení, matice, věnce ozubených a šroubových kol                                       |
| <b>CuSn10Pb5</b>     | 42 3121 | P              | 200              | Ložiska pro vyšší rychlosti                                                                                     |
| <b>CuSn10Pb10</b>    | 42 3122 | P, K           | 180              | Ložiska pro velké namáhání tlakem, součásti pracující v složitých podmínkách, pouzdra pro střední a velké tlaky |

**Slitiny titanu****Slitiny titanu α**

Ti-Al, obsah Al bývá většinou do 8 hm.%;

Ti-Al-Sn, kromě Al obsahují 2 až 13 hm.% Sn

- dobré mechanické vlastnosti do 300 °C;
- jsou odolné proti křehkému porušení;

## Příloha č. 13

- nízká měrná hmotnost a pevnost až 1000 MPa;
- používají se hlavně v **letectví a kosmonautice**

### **Slitiny titanu $\beta$**

- mají vysokou odolnost proti korozi a dobrou tvářitelnost za normální teploty;
- pevnost po vytvrzení dosahuje hodnot až 1600 MPa (slitina TiV13Cr11Al3, zpevňující fází jsou intermetalické sloučeniny Ti3Al, TiAl);
- nevýhodou je vyšší měrná hmotnost než u ostatních Ti slitin a vysoká cena (kvůli přísadám těžkých a obtížně zpracovatelných kovů).

### **Slitiny $\alpha+\beta$ (heterogenní)**

- vyznačují se širokou škálou vlastností podle přísad a zpracování;
- nejpoužívanější slitina TiAl6V4 dosahuje pevnosti 1125 MPa;
- heterogenní slitiny lze vytvrzovat tepelným zpracováním;
- používají se na lopatky turbín a kompresorů, součásti leteckých draků, podvozků, sportovní vybavení, atd.

### **Slitiny niklu**

- slitiny niklu jsou tvořeny přísadovými prvky Cr, Mn, V, Ti, Mo W, Co, Nb, Si, atd;
- jsou známy pod různým označením, např. Nikl 200, Nikl 201; Haynes 188, Monel 405, atd;
- nejznámější *slévárenské slitiny jsou typu Ni – Si a Ni – Mo* (cca 10 % Si, nebo až 35 % Mo);

**Nikl** je součástí velmi odolných slitin jako např. *Monelův kov* o složení 68 % Ni a 32 % Cu (někdy se také uvádí alternativní poměr 67:28 nebo 65:30) se stopami manganu a železa, používaný pro výrobu lodních šroubů, ale i kuchyňského vybavení. Slitiny Alnico se skládají z železa, kobaltu, niklu, hliníku a mědi a slouží pro výrobu velmi silných permanentních magnetů.

**Příloha č. 14**

Přehled a charakteristika kovů a ostatních prvků I. až VIII. Skupiny  
Mendělejevovy periodické soustavy

| <b>Podskupina I. A – alkalické kovy</b>    |           |                                  |                           |   |    |    |    |   |   |                                  |                         |                 |
|--------------------------------------------|-----------|----------------------------------|---------------------------|---|----|----|----|---|---|----------------------------------|-------------------------|-----------------|
| Protonové<br>Číslo                         | Značka    | Relativní<br>atomová<br>hmotnost | Počet elektronů ve vrstvě |   |    |    |    |   |   | Hustota<br>[kg.m <sup>-3</sup> ] | Teplota<br>tání<br>[°C] | Oxid.<br>stupeň |
|                                            |           |                                  | K                         | L | M  | N  | O  | P | Q |                                  |                         |                 |
| 3                                          | <b>Li</b> | 6,94                             | 2                         | 1 |    |    |    |   |   | 545                              | 179                     | I               |
| 11                                         | <b>Na</b> | 22,99                            | 2                         | 8 | 1  |    |    |   |   | 970                              | 98                      | I               |
| 19                                         | <b>K</b>  | 39,10                            | 2                         | 8 | 8  | 1  |    |   |   | 860                              | 64                      | I               |
| 37                                         | <b>Rb</b> | 85,47                            | 2                         | 8 | 18 | 8  | 1  |   |   | 1530                             | 39                      | I               |
| 55                                         | <b>Ca</b> | 132,91                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 8  | 1 |   | 1870                             | 29                      | I               |
| 87                                         | <b>Fr</b> | 223,00                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 8 | 1 |                                  |                         | I               |
| <b>Podskupina I. – B kovy skupiny mědi</b> |           |                                  |                           |   |    |    |    |   |   |                                  |                         |                 |
| 29                                         | <b>Cu</b> | 63,55                            | 2                         | 8 | 18 | 1  |    |   |   | 8 920                            | 1083                    | I,II            |
| 47                                         | <b>Ag</b> | 107,87                           | 2                         | 8 | 18 | 18 |    |   |   | 10<br>500                        | 961                     | I               |
| 79                                         | <b>Au</b> | 196,97                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 1 |   | 19<br>300                        | 1063                    | I, III          |

| <b>Podskupina II. A – Be, Mg, a kovy alkalických zemin</b> |           |                                  |                           |   |    |    |    |   |   |                                  |                         |                     |
|------------------------------------------------------------|-----------|----------------------------------|---------------------------|---|----|----|----|---|---|----------------------------------|-------------------------|---------------------|
| Protonové<br>Číslo                                         | Značka    | Relativní<br>atomová<br>hmotnost | Počet elektronů ve vrstvě |   |    |    |    |   |   | Hustota<br>[kg.m <sup>-3</sup> ] | Teplota<br>Tání<br>[°C] | Oxid.<br>stupe<br>ň |
|                                                            |           |                                  | K                         | L | M  | N  | O  | P | Q |                                  |                         |                     |
| 4                                                          | <b>Be</b> | 9,01                             | 2                         | 2 |    |    |    |   |   | 1860                             | 1285                    | II                  |
| 12                                                         | <b>Mg</b> | 24,31                            | 2                         | 8 | 2  |    |    |   |   | 1740                             | 651                     | II                  |
| 20                                                         | <b>Ca</b> | 40,08                            | 2                         | 8 | 8  | 2  |    |   |   | 1550                             | 851                     | II                  |
| 38                                                         | <b>Sr</b> | 87,62                            | 2                         | 8 | 18 | 8  | 2  |   |   | 2600                             | 752                     | II                  |
| 56                                                         | <b>Ba</b> | 137,34                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 8  | 2 |   | 3500                             | 710                     | II                  |
| 88                                                         | <b>Ra</b> | 226,00                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 8 | 2 | 5000                             | 700                     | II                  |
| <b>Podskupina II. B – kovy skupiny zinku</b>               |           |                                  |                           |   |    |    |    |   |   |                                  |                         |                     |
| 30                                                         | <b>Zn</b> | 65,38                            | 2                         | 8 | 18 | 2  |    |   |   | 7140                             | 419                     | II                  |
| 48                                                         | <b>Cd</b> | 112,40                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 2  |   |   | 8640                             | 320                     | II                  |
| 80                                                         | <b>Hg</b> | 200,00                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 2 |   | 13600                            | -39                     | I, II               |



## Příloha č. 15

| Podskupina III. A                      |                         |                                  |                           |   |    |    |    |   |   |                                  |                         |                 |
|----------------------------------------|-------------------------|----------------------------------|---------------------------|---|----|----|----|---|---|----------------------------------|-------------------------|-----------------|
| Protonové<br>Číslo                     | Značka                  | Relativní<br>atomová<br>hmotnost | Počet elektronů ve vrstvě |   |    |    |    |   |   | Hustota<br>[kg.m <sup>-3</sup> ] | Teplota<br>Tání<br>[°C] | Oxid.<br>Stupeň |
|                                        |                         |                                  | K                         | L | M  | N  | O  | P | Q |                                  |                         |                 |
| 5                                      | <b>B</b>                | 10,81                            | 2                         | 3 |    |    |    |   |   | 2340                             | 2 300                   | III             |
| 13                                     | <b>Al</b>               | 26,98                            | 2                         | 8 | 3  |    |    |   |   | 2700                             | 660                     | III             |
| 31                                     | <b>Ga</b>               | 69,72                            | 2                         | 8 | 18 | 3  |    |   |   | 5910                             | 30                      | I, III          |
| 49                                     | <b>In</b>               | 114,82                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 3  |   |   | 7300                             | 156                     | I, III          |
| 81                                     | <b>Tl</b>               | 204,37                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 3 |   | 11850                            | 303                     | I, III          |
| Podskupina III. B – podskupina skandia |                         |                                  |                           |   |    |    |    |   |   |                                  |                         |                 |
| 21                                     | <b>Sc</b>               | 44,96                            | 2                         | 8 | 9  | 2  |    |   |   | 2500                             | 1539                    | III             |
| 39                                     | <b>Y</b>                | 88,91                            | 2                         | 8 | 18 | 9  | 2  |   |   | 5510                             | 1509                    | III             |
| 57                                     | <b>La<sup>*)</sup></b>  | 138,91                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 9  | 2 |   | 6150                             | 920                     | III             |
| 89                                     | <b>Ac<sup>**)</sup></b> | 227,00                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 9 | 2 | 10060                            | 1050                    | III             |

Poznámka: <sup>\*)</sup> s lantanoidy (prvky vzácných zemin); <sup>\*\*) s aktinoidy</sup>

| Podskupina IV. A                     |           |                                  |                           |   |    |    |    |    |   |                                  |                         |                 |
|--------------------------------------|-----------|----------------------------------|---------------------------|---|----|----|----|----|---|----------------------------------|-------------------------|-----------------|
| Protonové<br>Číslo                   | Značka    | Relativní<br>atomová<br>hmotnost | Počet elektronů ve vrstvě |   |    |    |    |    |   | Hustota<br>[kg.m <sup>-3</sup> ] | Teplota<br>Tání<br>[°C] | Oxid.<br>Stupeň |
|                                      |           |                                  | K                         | L | M  | N  | O  | P  | Q |                                  |                         |                 |
| 6                                    | <b>G</b>  | 12,01                            | 2                         | 4 |    |    |    |    |   | 2255                             | 3540                    | IV              |
| 14                                   | <b>Si</b> | 28,09                            | 2                         | 8 | 4  |    |    |    |   | 2400                             | 1410                    | IV              |
| 32                                   | <b>Ce</b> | 72,59                            | 2                         | 8 | 18 | 4  |    |    |   | 5360                             | 437                     | II, IV          |
| 50                                   | <b>Sn</b> | 118,69                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 4  |    |   | 7280                             | 232                     | II, IV          |
| 82                                   | <b>Pb</b> | 207,20                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 4  |   | 11390                            | 327                     | II, IV          |
| Podskupina IV. B – podskupina titanu |           |                                  |                           |   |    |    |    |    |   |                                  |                         |                 |
| 22                                   | <b>Ti</b> | 47,90                            | 2                         | 8 | 10 | 2  |    |    |   | 4500                             | 1668                    | III, IV         |
| 40                                   | <b>Zr</b> | 91,22                            | 2                         | 8 | 18 | 10 | 2  |    |   | 6400                             | 1852                    | IV              |
| 72                                   | <b>Hf</b> | 178,49                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 10 | 2  |   | 13300                            | 2230                    | IV              |
| 104                                  | <b>Xu</b> | 265,00                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 10 | 2 |                                  | 2160                    |                 |

## Příloha č. 16

| Podskupina V. A                     |        |                                  |                           |   |    |    |    |    |   |                                  |                         |                 |
|-------------------------------------|--------|----------------------------------|---------------------------|---|----|----|----|----|---|----------------------------------|-------------------------|-----------------|
| Protonové<br>Číslo                  | Značka | Relativní<br>atomová<br>hmotnost | Počet elektronů ve vrstvě |   |    |    |    |    |   | Hustota<br>[kg.m <sup>-3</sup> ] | Teplota<br>tání<br>[°C] | Oxid.<br>Stupeň |
|                                     |        |                                  | K                         | L | M  | N  | O  | P  | Q |                                  |                         |                 |
| 7                                   | N      | 14,01                            | 2                         | 5 |    |    |    |    |   | 1,250 <sup>*)</sup>              | -210                    | I až V          |
| 15                                  | P      | 30,93                            | 2                         | 8 | 5  |    |    |    |   | 1828                             | 44                      | III, V          |
| 33                                  | As     | 74,92                            | 2                         | 8 | 18 | 5  |    |    |   | 5727                             | 810                     | III, V          |
| 51                                  | Sb     | 121,75                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 5  |    |   | 6684                             | 631                     | III, V          |
| 83                                  | Bi     | 208,98                           | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 5  |   | 9800                             | 271                     | III, V          |
| Podskupina V. B – podskupina vanadu |        |                                  |                           |   |    |    |    |    |   |                                  |                         |                 |
| 23                                  | V      | 50,94                            | 2                         | 8 | 11 | 2  |    |    |   | 6000                             | 1919                    | II až V         |
| 41                                  | Nb     | 92,91                            | 2                         | 8 | 18 | 12 | 2  |    |   | 8600                             | 2468                    | II až<br>V      |
| 73                                  | Ta     | 180,95                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 11 | 2  |   | 16600                            | 2296                    | V               |
| 105                                 | Ns     |                                  | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 11 | 2 |                                  |                         |                 |

**Poznámka:** <sup>\*)</sup>Hustota je g.l<sup>-1</sup> při 0 °C a při tlaku 101 325 [Pa], plyn

| Podskupina VI. A - chalkogeny        |        |                                  |                           |   |    |    |    |   |   |                                  |                         |                 |
|--------------------------------------|--------|----------------------------------|---------------------------|---|----|----|----|---|---|----------------------------------|-------------------------|-----------------|
| Protonové<br>Číslo                   | Značka | Relativní<br>atomová<br>hmotnost | Počet elektronů ve vrstvě |   |    |    |    |   |   | Hustota<br>[kg.m <sup>-3</sup> ] | Teplota<br>Tání<br>[°C] | Oxid.<br>Stupeň |
|                                      |        |                                  | K                         | L | M  | N  | O  | P | Q |                                  |                         |                 |
| 8                                    | O      | 15,999                           | 2                         | 6 |    |    |    |   |   | 1,429 <sup>*)</sup>              | -219                    | -II             |
| 16                                   | S      | 32,060                           | 2                         | 8 | 6  |    |    |   |   | 2060                             | 119                     | -II, II         |
| 34                                   | Se     | 78,060                           | 2                         | 8 | 18 | 6  |    |   |   | 4260                             | 220                     | IV, VI          |
| 52                                   | Te     | 127,600                          | 2                         | 8 | 18 | 18 | 6  |   |   | 6240                             | 450                     |                 |
| 84                                   | Po     | 209,000                          | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 6 |   | 6000                             | 252                     | -II, IV         |
| Podskupina VI. B – podskupina chromu |        |                                  |                           |   |    |    |    |   |   |                                  |                         |                 |
| 24                                   | Cr     | 51,990                           | 2                         | 8 | 13 | 1  |    |   |   | 7100                             | 1830                    | II až IV        |
| 42                                   | Mo     | 95,940                           | 2                         | 8 | 18 | 13 | 1  |   |   | 10200                            | 2630                    | VI              |
| 74                                   | W      | 83,850                           | 2                         | 8 | 18 | 18 | 12 | 2 |   | 19300                            | 3410                    | VI              |

**Poznámka:** <sup>\*)</sup>Hustota je g.l<sup>-1</sup> při 0 °C a při tlaku 101 325 [Pa], plyn

## Příloha č. 17

| Podskupina VII. A – halové prvky (halogeny) |        |                            |                           |   |    |    |    |   |   |                               |                   |              |
|---------------------------------------------|--------|----------------------------|---------------------------|---|----|----|----|---|---|-------------------------------|-------------------|--------------|
| Protonové číslo                             | Značka | Relativní atomová hmotnost | Počet elektronů ve vrstvě |   |    |    |    |   |   | Hustota [kg.m <sup>-3</sup> ] | Teplota Tání [°C] | Oxid. Stupeň |
|                                             |        |                            | K                         | L | M  | N  | O  | P | Q |                               |                   |              |
| 9                                           | F      | 18,999                     | 2                         | 7 |    |    |    |   |   | 1,696 <sup>*)</sup>           | -223              | -I           |
| 17                                          | Cl     | 35,453                     | 2                         | 8 | 7  |    |    |   |   | 3430                          | -102              | -I, I        |
| 35                                          | Br     | 79,904                     | 2                         | 8 | 18 | 7  |    |   |   | 3120                          | -7,3              | III          |
| 53                                          | I      | 126,904                    | 2                         | 8 | 18 | 18 | 7  |   |   |                               | 114               | V, VII       |
| 85                                          | At     | 210,000                    | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 7 |   |                               |                   |              |
| Podskupina VII. B – podskupina manganu      |        |                            |                           |   |    |    |    |   |   |                               |                   |              |
| 25                                          | Mn     | 54,940                     | 2                         | 8 | 13 | 2  |    |   |   | 7400                          | 1260              | II až VI     |
| 43                                          | Tc     | 98,900                     | 2                         | 8 | 18 | 14 | 1  |   |   |                               | 2140              | VII          |
| 75                                          | Re     | 186,20                     | 2                         | 8 | 18 | 32 | 13 | 2 |   | 20530                         | 3180              | VII          |

**Poznámka:** <sup>\*)</sup>Hustota je g.l<sup>-1</sup> při 0 °C a při tlaku 101 325 [Pa], plyn

| Podskupina VIII. A – vzácné plyny         |        |                            |                           |   |    |    |    |   |   |                               |                   |              |
|-------------------------------------------|--------|----------------------------|---------------------------|---|----|----|----|---|---|-------------------------------|-------------------|--------------|
| Protonové číslo                           | Značka | Relativní atomová hmotnost | Počet elektronů ve vrstvě |   |    |    |    |   |   | Hustota [kg.m <sup>-3</sup> ] | Teplota Tání [°C] | Oxid. Stupeň |
|                                           |        |                            | K                         | L | M  | N  | O  | P | Q |                               |                   |              |
| 2                                         | He     | 4,000                      | 2                         |   |    |    |    |   |   | 0,180 <sup>*)</sup>           | -271,4            |              |
| 10                                        | Ne     | 20,180                     | 2                         | 8 |    |    |    |   |   | 0,900 <sup>*)</sup>           | -248,6            |              |
| 18                                        | Ar     | 39,950                     | 2                         | 8 | 8  |    |    |   |   | 1,780 <sup>*)</sup>           | -189,4            |              |
| 36                                        | Kr     | 83,800                     | 2                         | 8 | 18 | 8  |    |   |   | 3,740 <sup>*)</sup>           | -157,2            |              |
| 54                                        | Xe     | 131,300                    | 2                         | 8 | 18 | 18 | 8  |   |   | 5,850 <sup>*)</sup>           | -111,9            |              |
| 86                                        | Rn     | 222,000                    | 2                         | 8 | 18 | 32 | 18 | 8 |   | 9,730 <sup>*)</sup>           | -71               |              |
| Podskupina VIII. B – třídy kovových prvků |        |                            |                           |   |    |    |    |   |   |                               |                   |              |
| 26                                        | Fe     | 55,850                     | 2                         | 8 | 14 | 2  |    |   |   | 7,860                         | 1539              | II, III      |
| 27                                        | Co     | 58,930                     | 2                         | 8 | 15 | 2  |    |   |   | 8,830                         | 1490              | II, III      |
| 28                                        | Ni     | 58,710                     | 2                         | 8 | 16 | 2  |    |   |   | 8,880                         | 1452              | II           |
| 44                                        | Ru     | 101,070                    | 2                         | 8 | 18 | 15 | 1  |   |   | 8,600                         | 2400              | IV,VII       |
| 45                                        | Rb     | 102,910                    | 2                         | 8 | 18 | 16 | 1  |   |   | 12500                         | 1966              | III,IV       |
| 46                                        | Pd     | 106,400                    | 2                         | 8 | 18 | 18 |    |   |   | 11970                         | 1557              | II,IV        |
| 76                                        | Os     | 190,200                    | 2                         | 8 | 18 | 32 | 14 | 2 |   | 22480                         | 2700              | IV,VIII      |
| 77                                        | Ir     | 192,220                    | 2                         | 8 | 18 | 32 | 15 | 2 |   | 22420                         | 2454              | III,IV       |
| 78                                        | Pt     | 195,090                    | 2                         | 8 | 18 | 32 | 17 | 1 |   | 21450                         | 1774              | II,IV        |

**Poznámka:** <sup>\*)</sup>Hustota je g.l<sup>-1</sup> při 0 °C a při tlaku 101 325 [Pa], plyn

## Příloha č. 18

## Přehled nejpoužívanějších leptadel

| Číslo | Kov, slitina                               | Složení leptadla                                                                                                                                                                                        | Způsob použití<br>Leptada                                                                                                  |
|-------|--------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1.    | Konstrukční<br>oceli,<br>litiny,<br>železo | 10 až 50 cm <sup>3</sup> HNO <sub>3</sub> (hustota 1,4)<br>v 1000 cm <sup>3</sup> etylalkoholu ( <b>Nital</b> )                                                                                         | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 10 až 60<br>s.                                                                       |
| 2.    |                                            | 24 g krystalické kyseliny pikrové,<br>300 g NaOH, 900 cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O<br>( <b>Groesbeck</b> )                                                                                          | leptání při teplotě 50 až<br>90 °C, doba 10 minut.                                                                         |
| 3.    |                                            | 0,5 g kyseliny pikrové,<br>3 cm <sup>3</sup> koncentrované HCL,<br>97 cm <sup>3</sup> etylalkoholu ( <b>Vilella – Bain</b> )                                                                            | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 5 minut.                                                                             |
| 4.    | Rychlořezné<br>oceli, slinuté<br>karbidy   | 10 g ferokyanidu draselného,<br>10 g hydroxidu sodného,<br>100 cm <sup>3</sup> destilované vody.<br>( <b>Murakami</b> )<br>vždy je nutno použít čerstvý roztok                                          | leptání při teplotě 50<br>až 90 °C, doba<br>2 až 15 s pro karbidy;<br>15 až 80 s pro<br>austenit;<br>15 až 60 s pro ferit. |
| 5.    | Korozivzdorné<br>oceli                     | 10 cm <sup>3</sup> HNO <sub>3</sub> (hustota 1,4),<br>100 cm <sup>3</sup> HCl (hustota 1,19),<br>100 cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O,<br>0,2 cm <sup>3</sup> inhibitoru.                               | leptání za teploty cca<br>20 °C                                                                                            |
|       |                                            | Elektrolytické leptání v 10 % kyseliny<br>šťavelové.                                                                                                                                                    | leptání za teploty cca<br>20 °C                                                                                            |
| 6.    | Měď a její<br>slitiny                      | 100 g persíranu amonného<br>(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> S <sub>2</sub> O <sub>6</sub> ,<br>1000 cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O.                                                                   | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 30 až 60<br>s.                                                                       |
|       |                                            | 72 g chloridu měďnato-amonného<br>CuCl <sub>2</sub> · 2NH <sub>4</sub> Cl · 2H <sub>2</sub> O,<br>1000 cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O.                                                                | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 15 až 30<br>s.                                                                       |
| 7.    | Nikl a jeho<br>slitiny                     | 650 cm <sup>3</sup> HNO <sub>3</sub> (hustota 1,4),<br>180 cm <sup>3</sup> ledové kyseliny octové,<br>680 cm <sup>3</sup> glycerinu;<br>vždy je nutno používat čerstvý roztok.                          | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 10 až 20<br>s.                                                                       |
| 8.    | Olovo a jeho<br>slitiny                    | 170 cm <sup>3</sup> kyseliny dusičné (hustota 1,4)<br>HNO <sub>3</sub> ,<br>170 cm <sup>3</sup> ledové kyseliny octové,<br>680 cm <sup>3</sup> glycerínu,<br>vždy čerstvý roztok.                       | leptání za teploty cca<br>80 °C; doba 10 až 20<br>s.                                                                       |
| 9.    | Titan a jeho<br>slitiny                    | 2 cm <sup>3</sup> kyseliny dusičné (hustota 1,4)<br>HNO <sub>3</sub> ,<br>2 cm <sup>3</sup> kyseliny fluorovodíkové (hustota<br>1,4) HF,<br>96 cm <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O,<br>vždy čerstvý roztok | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 15 až 30<br>s.                                                                       |
|       |                                            | 12 ml kyseliny chlorovodíkové (HCl),                                                                                                                                                                    | leptání za teploty cca                                                                                                     |

|     |                          |                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                          |
|-----|--------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------|
| 10. | Slitiny Al-Si            | 6 ml kyseliny dusičné ( $\text{HNO}_3$ ),<br>1 ml kyseliny fluorovodíkové ( $\text{HF}$ ),<br>1 ml $\text{H}_2\text{O}$<br>Slitiny Al-Si (makrostruktura)                                                                                                       | 20 °C; krátké ponoření<br>vzorku do leptadla             |
|     |                          | 1 ml kyseliny fluorovodíkové ( $\text{HF}$ ),<br>200 ml $\text{H}_2\text{O}$ ,<br>pro slitiny Al-Si (mikrostruktura)                                                                                                                                            | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 30 až 50<br>s.     |
| 11. | Hliník a jeho<br>slitiny | 50 cm <sup>3</sup> kyseliny fluorovodíkové (40%),<br>950 cm <sup>3</sup> $\text{H}_2\text{O}$ ,<br>Je určeno pro čistý hliník                                                                                                                                   | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 10 až 60<br>s.     |
|     |                          | 5 g fluoridu sodného ( $\text{NaF}$ )<br>20 cm <sup>3</sup> kyseliny chlorovodíkové (hustot<br>1,19) ( $\text{HCl}$ ),<br>10 cm <sup>3</sup> kyseliny dusičné (hustota 1,4)<br>$\text{HNO}_3$ ,<br>970 cm <sup>3</sup> $\text{H}_2\text{O}$ , pro slitiny Al-Zn | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 5 až 7 s.          |
| 12. | Hořčík a jeho<br>slitiny | 80 cm <sup>3</sup> kyseliny dusičné (hustota 1,4)<br>$\text{HNO}_3$ ,<br>920 cm <sup>3</sup> etylalkoholu,<br>nanáší se vatou.                                                                                                                                  | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 1 až 3 s.          |
| 13. | Zinek a jeho<br>slitiny  | 20 g oxidu chromového ( $\text{CrO}_3$ ),<br>5 g síranu sodného ( $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ),<br>100 ml $\text{H}_2\text{O}$                                                                                                                                    | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba několik<br>sekund. |
|     |                          | 1 až 5 ml kyselina chlorovodíková,<br>100 ml $\text{H}_2\text{O}$                                                                                                                                                                                               | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 7 minut.           |
|     |                          | 10 g chloridu sodného ( $\text{NaOH}$ );<br>100 ml $\text{H}_2\text{O}$                                                                                                                                                                                         | leptání za teploty cca<br>20 °C; doba 5 s.               |

## Příloha č. 19

## Vybrané fyzikální vlastnosti vybraných kovů

| Název kovu |    | Atomová hmotnost | Teplota tání [°C] | Teplota varu [°C] | Latentní teplo tání [J.kg <sup>-1</sup> ] | Měrná tepelná kapacita 0–100 °C [J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ] |
|------------|----|------------------|-------------------|-------------------|-------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
| Antimon    | Sb | 121,76           | 631               | 1590              | 101 700                                   | 209                                                                    |
| Arsen      | As | 74,93            |                   | 616               | -                                         | 331                                                                    |
| Barium     | Ba | 137,37           | 729               | 2130              | -                                         | 283                                                                    |
| Beryllium  | Be | 9,020            | 1287              | 2470              | 133 500                                   | 2 052                                                                  |
| Bismut     | Bi | 209,00           | 271               | 1564              | 54 400                                    | 125                                                                    |
| Cer        | Ce | 140,13           | 798               | 3430              | -                                         | 188                                                                    |
| Cín        | Sn | 118,7            | 232               | 2625              | 61 100                                    | 226                                                                    |
| Draslík    | K  | 39,10            | 63,20             | 759               | 67 000                                    | 754                                                                    |
| Galium     | Ga | 69,74            | 29,70             | 2205              | 80 200                                    | 377                                                                    |
| Hliník     | Al | 26,96            | 660               | 2520              | 386 800                                   | 387                                                                    |
| Hořčík     | Mg | 24,32            | 649               | 1090              | 194 700                                   | 1 038                                                                  |
| Chrom      | Cr | 52,01            | 1860              | 2680              | 132 700                                   | 461                                                                    |
| Indium     | In | 114,80           | 156               | 2070              | -                                         | 243                                                                    |
| Iridium    | Ir | 193,10           | 2447              | 4390              | -                                         | 131                                                                    |
| Kadmium    | Cd | 112,41           | 321               | 767               | 68 600                                    | 233                                                                    |
| Kobalt     | Co | 58,94            | 1494              | 2930              | 244 500                                   | 424                                                                    |
| Křemík     | Si | 28,30            | 1412              | 3270              | 502 400                                   | 729                                                                    |
| Lithium    | Li | 6,94             | 181               | 1342              | 137 400                                   | 3517                                                                   |
| Mangan     | Mn | 54,93            | 1244              | 2060              | 152 800                                   | 486                                                                    |
| Měď        | Cu | 63,57            | 1083              | 2560              | 180 000                                   | 386                                                                    |
| Molybden   | Mo | 96,00            | 2615              | 4610              | -                                         | 251                                                                    |
| Nikl       |    | 58,69            | 1455              | 2915              | 305 600                                   | 452                                                                    |
| Niob       | Nb | 92,91            | 2467              | 4740              | -                                         | 268                                                                    |
| Olovo      | Pb | 207,22           | 327               | 1750              | 20 900                                    | 130                                                                    |
| Osmium     | Os | 190,90           | 3030              | 5000              | -                                         | 130                                                                    |
| Paladium   | Pd | 106,70           | 1554              | 2960              | 150 700                                   | 249                                                                    |
| Platina    | Pt | 195,23           | 1770              | 3830              | 113 000                                   | 134                                                                    |
| Rhodium    | Rh | 102,91           | 1966              | 3700              | -                                         | 243                                                                    |
| Rtuť       | Hg | 200,61           | -38,9             | 357               | 12 600                                    | 138                                                                    |
| Sodík      | Na | 23,00            | 97,8              | 883               | 115 100                                   | 1227                                                                   |
| Stroncium  | Sr | 87,63            | 770               | 1375              | -                                         | 737                                                                    |
| Stříbro    | Ag | 107,88           | 962               | 2163              | 92 100                                    | 234                                                                    |
| Tantal     | Ta | 180,8            | 2980              | 5370              | 154 900                                   | 142                                                                    |
| Telur      | Te | 127,60           | 450               | 988               | 31 000                                    | 134                                                                    |
| Titan      | Ti | 47,90            | 1667              | 3285              | 367 800                                   | 528                                                                    |
| Uran       | U  | 238,2            | 1132              | 4400              |                                           | 117                                                                    |
| Vanad      | V  | 50,95            | 1902              | 3410              | 334 900                                   | 498                                                                    |
| Vápník     | Ca | 40,08            | 839               | 1484              | 328 600                                   | 624                                                                    |
| Wolfram    | W  | 184,00           | 3387              | 5555              | 167 500                                   | 138                                                                    |
| Zinek      | Zn | 65,38            | 420               | 911               | 110 100                                   | 394                                                                    |
| Zirkonium  | Zr | 90,60            | 1852              | 4400              | -                                         | 289                                                                    |
| Zlato      | Au | 197,20           | 1064              | 2860              | 67 400                                    | 130                                                                    |
| Železo     | Fe | 55,64            | 1539              | 2860              | 200 500                                   | 456                                                                    |



**Ing. Jiří MACHUTA, Ph.D.** – narozen v roce 1981 v Ústí nad Labem, Česká Republika. Vystudoval fakultu strojní na Technické univerzitě v Liberci se zaměřením na slévárenství a metalurgii kovů (2007). V roce 2010 obhájil svoji doktorskou práci v oboru strojírenská technologie zaměřenou na slévárenskou metalurgii a slévárenské materiály s názvem Sledování vlastností formovacích a jádrových směsí během jejich tepelného namáhání. V letech 2005-2007 vykonával průmyslovou praxi ve Škoda Auto a.s. Mladá Boleslav, kde řešil v

rámci útvaru sériového plánování projekty spojené s výrobou litinových odlitků v automobilovém průmyslu. V období 2008 a 2009 byl zaměstnán ve firmě Constellium Extrusions Děčín s.r.o (dříve Alcan Děčín Extrusions), kde působil jako technik v tavárně slitin hliníků a řešil odborné projekty spojené s metalurgickou přípravou tavenin. Od roku 2011 pracuje ve funkci odborného asistenta na Katedře strojírenské technologie, FS TU v Liberci a současně se podílí na projektech Ústavu pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovace v rámci programu konkurenceschopné strojírenství v laboratoři progresivních strojírenských technologií. E-mail : jiri.machuta@gmail.com



**Prof. Ing. Iva NOVÁ, CSc.** – narozena 1953 v Berouně. V letech 1972-1976 pracovala jako technik v podniku PAL Beroun. Vystudovala VŠST (dnes TU) v Liberci, obor strojírenská technologie, zaměřením na strojírenskou metalurgii a materiály. Od roku 1980 je zaměstnána na Technické univerzitě v Liberci, vyučovala na Katedře strojírenské metalurgie. V roce 1986 obhájila kandidátskou disertační práci v oboru strojírenská technologie, zaměřenou na slévárenství a výrobu přesných odlitků v sádrových formách. Absolvovala dvě průmyslové praxe, v roce 1983 ve Slévárně Liberec - Ostašov a v roce 1989 v n.p. LIAZ Jablonec nad Nisou v oddělení podnikové metalurgie, kde se zabývala problémy výroby odlitků z litiny. Od roku 1990 se zabývá tepelnými procesy ve slévárenských formách a výrobou odlitků z neželezných kovů. V roce 1995 se habilitovala a stala se docentkou v oboru strojírenská technologie. V roce 2003 byla jmenována profesorkou pro obor strojírenská technologie. Je autorkou monografie "Tepelné procesy ve slévárenských formách". Od roku 2005 je odborným garantem předmětů pro zaměření slévárenství. Je školitelkou v doktorském studiu. E-mail: iva.nova@tul.cz