

VÝPOČET VEĽKOSTI INTERSTICIÁLNYCH PRIESTOROV V KUBICKÝCH MRIEŽKACH

- vo všetkých typoch mriežok zostávajú medzi uzlovými bodmi mriežok, ktoré sú obsadené atómami, intersticiálne priestory.
- pri výpočte veľkosti intersticiálnych priestorov predpokladáme guľovitý tvar týchto priestorov.
- ich polohu označujeme zlomkovými súradnicami, ktorých jednotkami sú príslušajúce mriežkové konštanty.
- niektoré prvky majú rozmery atómov také malé, že sa v týchto medzipolohách usadzujú a tvoria so základným kovom intersticiálne tuhé roztoky.

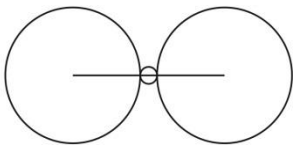
PRÍKLADY:

Vypočítajte maximálny polomer (r_{ip}) intersticiálneho priestoru v mriežke K12 so stredom so zlomkovými súradnicami $(1/2, 0, 0)$.

Nákres:

Výpočet:

Pomôcka:

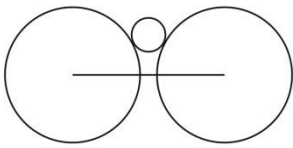


Vypočítajte maximálny polomer (r_{ip}) intersticiálneho priestoru v mriežke K8 so stredom so zlomkovými súradnicami $(1/2, 1/4, 0)$.

Nákres:

Výpočet:

Pomôcka:



Vypočítajte maximálny polomer (r_{ip}) intersticiálneho priestoru v mriežke K12 so stredom so zlomkovými súradnicami $(1/2, 1/2, 1/2)$.

Nákres:

Výpočet:

ROVNOVÁŽNA KONCENTRÁCIA VAKANCIÍ V KOVOCH

- vakencie sú neobsadené uzlové body mriežky, prázdne miesta a ich výskyt stúpa s teplotou.

- vzťahy:

$$c_{vT} = \frac{n_{vT}}{L} = e^{-\frac{U}{R \times T}}$$

$$v_T = n_f \times f \times e^{-\frac{U}{R \times T}}$$

c_{vT} – rovnovážna koncentrácia vakancií pri danej teplote

n_{vT} – počet vakancií pri danej teplote

L – Avogadrovo číslo ($6,023 \cdot 10^{26}$) [kmol^{-1}]

U – energia potrebná na vytvorenie jedného kilomólu vakancií

R – mólová plynová konštanta (8314) [$\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]

T – teplota [K]

v_T – rýchlosť reakcie pri danej teplote

$n_f \cdot f$ – frekvenčný faktor

PRÍKLADY:

Vypočítajte rovnovážnu koncentráciu vakancií v kovovom kryštáli pri teplote $T = 1000 \text{ K}$, ak viete, že aktivačná energia na vytvorenie jedného kilomólu vakancií je $U = 96 \text{ kJ} \cdot \text{kmol}^{-1}$.

Vypočítajte rovnovážnu koncentráciu vakancií pre Cu pri teplote $T = 1100 \text{ K}$, ak je aktivačná energia na vytvorenie jedného kilomólu vakancií $U = 152,3 \cdot 10^6 \text{ J.kmol}^{-1}$.

Vypočítajte prebytok vakancií oproti rovnovážnemu stavu v medi, ktorá bola zakalená z teploty $T_1 = 1100 \text{ K}$ na teplotu $T_2 = 400 \text{ K}$. Aktivačná energia tvorby vakancií je $U = 153,3 \cdot 10^6 \text{ J.kmol}^{-1}$.

Vypočítajte rovnovážnu koncentráciu vakancií pre Ag pri teplote $T = 900 \text{ K}$ ak vieme, že aktivačná energia na vytvorenie jedného kilomólu vakancií je $U = 95,4 \cdot 10^6 \text{ J.kmol}^{-1}$.

Koľko vakancií je v jednom móle pri teplote $T = 900 \text{ K}$?

O koľko sa zníži rovnovážna koncentrácia vakancií ak teplota klesne na 300 K ?

Koľko vakancií je v jednom móle pri teplote $T = 300 \text{ K}$?

Vypočítajte koľkokrát rýchlejšie prebehla reakcia pri 900 K oproti 300 K .