



530117 Material fysik vt 2010

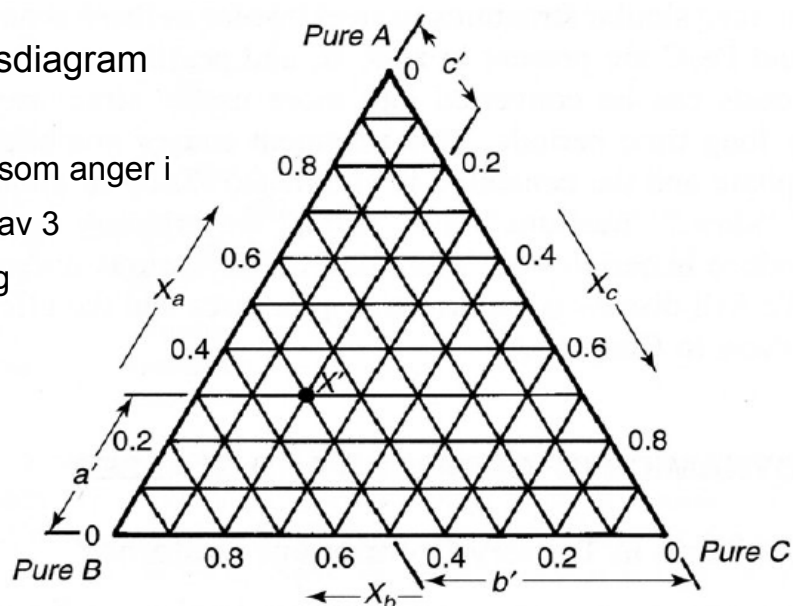
4. Fasta ämnens termodynamik 4.3 Ternära fasdiagram

[Mitchell 2.2; Callister 12.7, mm]



4.3.1. Allmänt om ternära fasdiagram

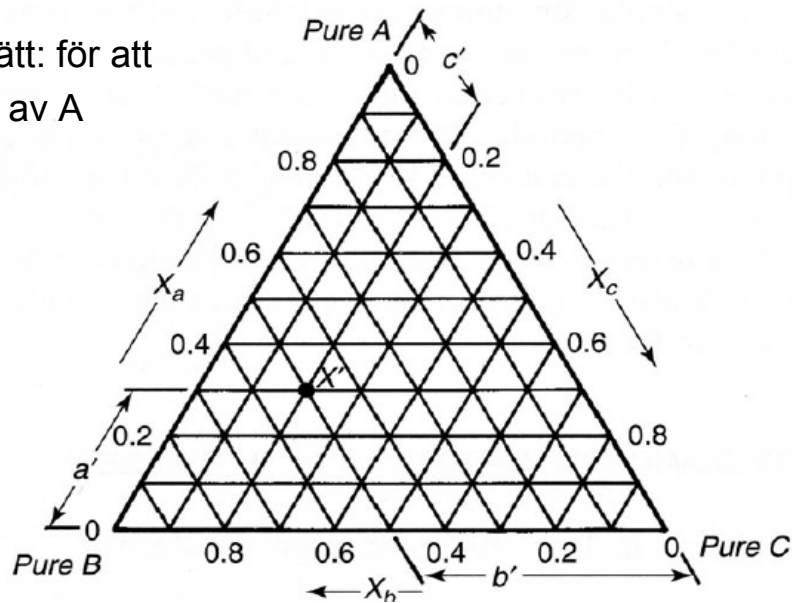
- En ytterligare klass av fasdiagram är de ternära
 - De är liksidiga trianglar som anger i vilken fas en blandning av 3 olika ämnen befinner sig vid en given temperatur och tryck





Att avläsa ternära fasdiagram, 1

- De avläses på följande sätt: för att veta vilken koncentration av A en punkt X motsvarar, rita en linje parallell mot linjen *mittemot* punkten för ren A, och avläs var denna linje skär A-axeln
 - T.ex. punkten X i bilden är 30% A, 50% B, 20% C



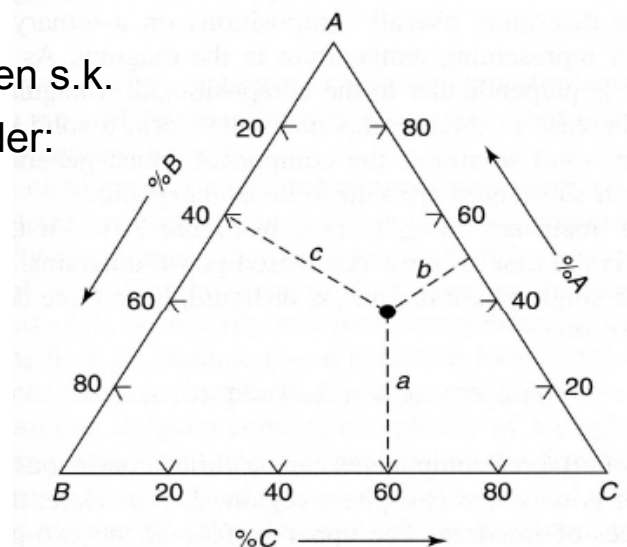
Att avläsa ternära fasdiagram, 2

- Ett alternativt sätt att avläsa diagrammet är att använda den s.k. masscentrum-regeln, som lyder:
 - Summan av de vinkelräta avstånden till sidorna är konstant och lika med triangelns höjd
- Kompositionen kan fås med

$$\%A = \frac{100a}{(a + b + c)}$$

$$\%B = \frac{100b}{(a + b + c)}$$

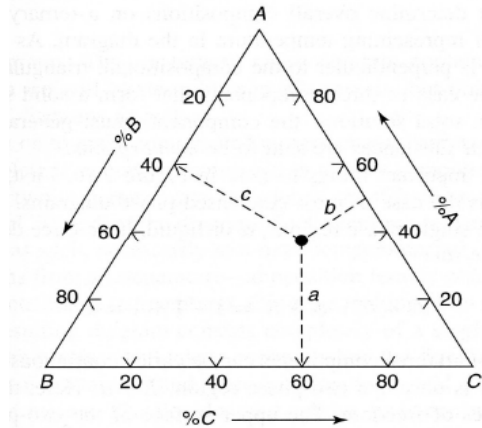
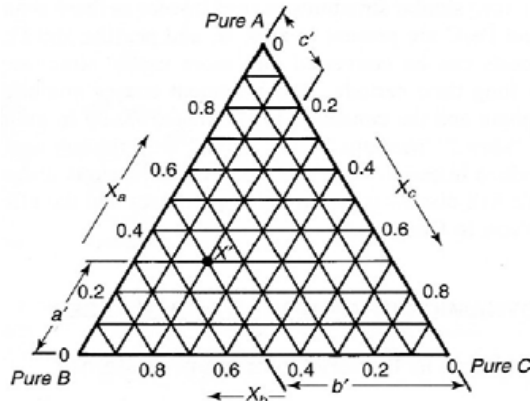
$$\%C = \frac{100c}{(a + b + c)}$$





Spegelsymmetri

- Notera att de två diagrammen ovan har omvänd rotationsordning (A, B, och C-axlar):

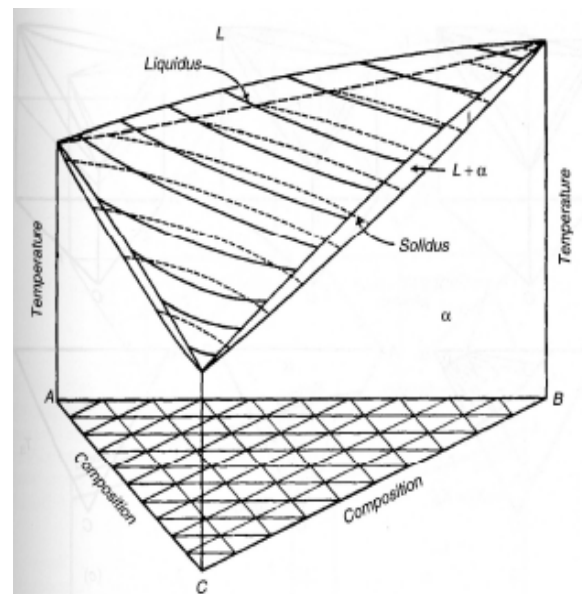


- Vilka kendera man använder är en konvention: båda ger samma komposition för samma punkt med båda metoderna!
 - Masscentrum-metoden är uppenbart identisk
 - Den förra metoden är också p.g.a. spegelsymmetri!



Tredimensionella ternära diagram

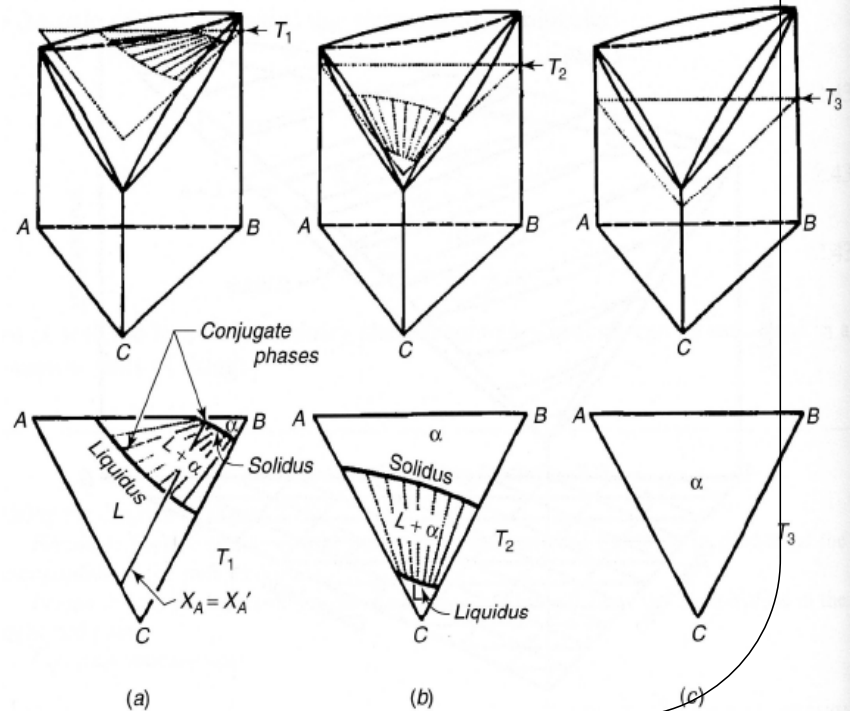
- Om man vill också ange temperaturberoendet, krävs 3-dimensionella ternära diagram
- Ett enkelt exempel ges till höger: fasdiagrammet för ett fullt lösligt isomorft ABC-system
 - Liquidus och solidus illustreras nu som två ytor
- Varje sida av diagrammet är ett fullständigt binärt fasdiagram!



Tredimensionella ternära diagram

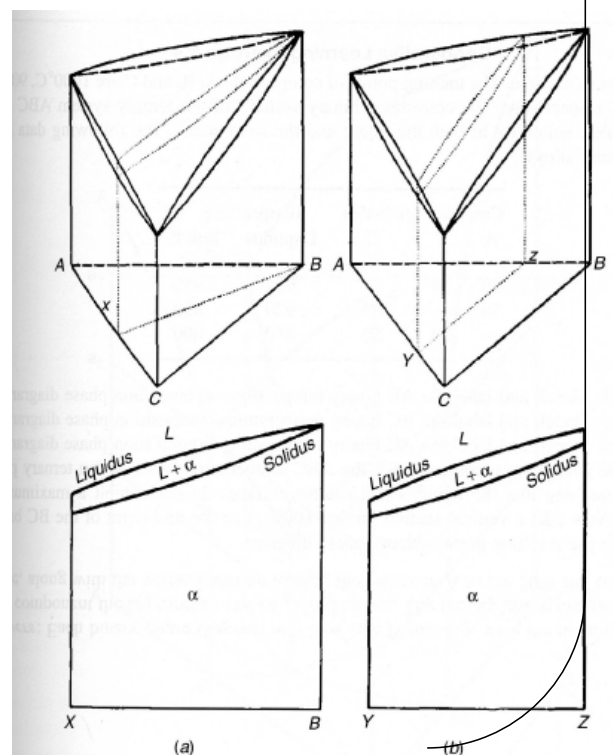
- Om man å andra sidan skär dessa diagram horisontellt, får man ett fullständig ternärt diagram för en viss temperatur
- Notera att **konoden** ("tie line" på svenska) inte kan konstrueras på basen av bilden, utan måste bestämmas experimentellt

- konoder är utritade i bilden



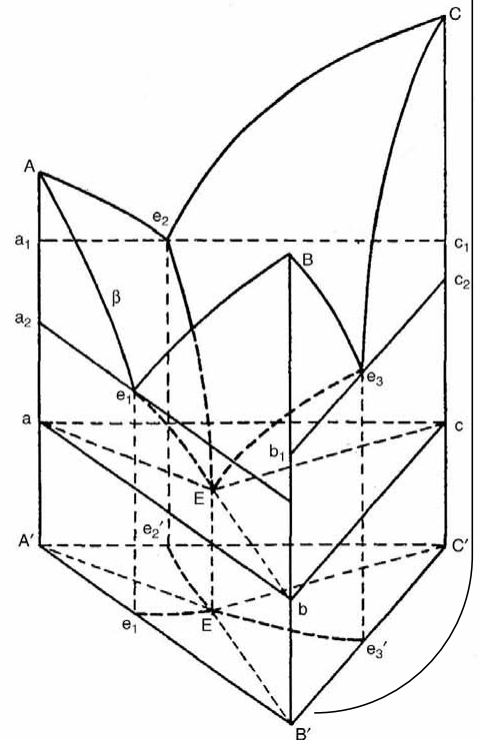
Isoplether

- Om man skär ett vertikalt plan inuti det ternära 3D-diagrammet, får man ett **pseudobinärt fasdiagram**
 - Kallas även **isopleth**
- Dessa är inte som vanliga binära, för t.ex. **likvidus** (svenska för liquidus) och solidus möts inte i ändpunkterna
- I princip kan dessa formas hur som helst, men oftast tas de för t.ex. (a) samma andel A och C, eller (b) konstant andel A



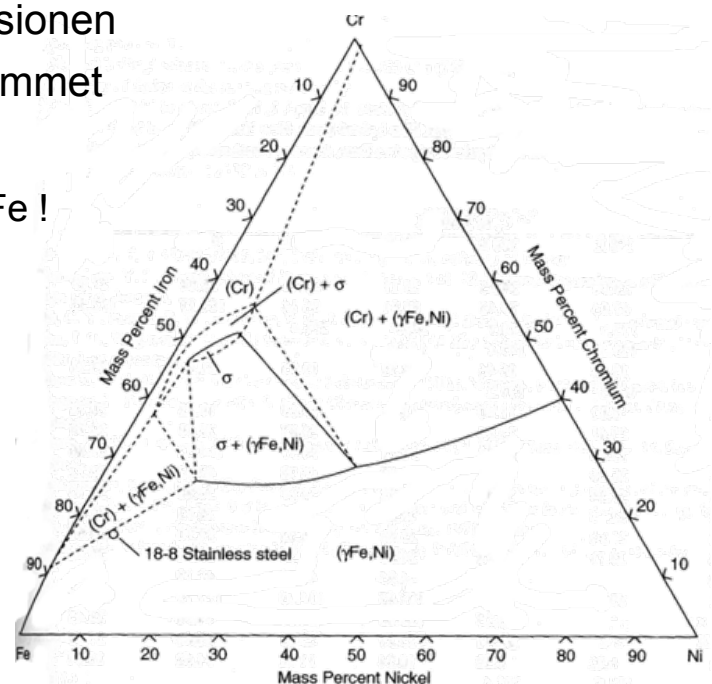
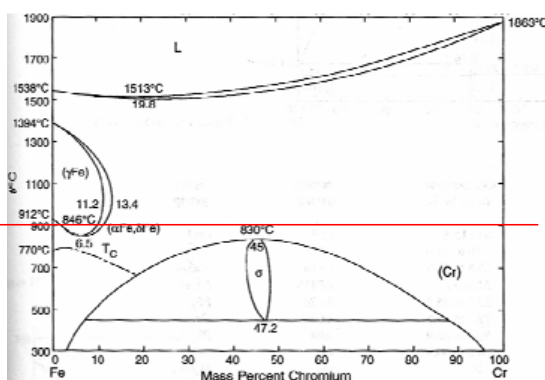
Tredimensionellt eutektiskt diagram

- Ifall en ternär blandning är olöslig, kan den illustreras med ett tredimensionellt eutektiskt diagram
- Hela det ternära systemets eutektiska punkt E är nedanför alla binära delsystemens eutektiska punkter
 - De eutektiska linjerna har nu olika höjd i olika delar
- De lösliga områdena har inte ritat ut för klarhets skull



Viktiga ternära fasdiagram: FeCrNi

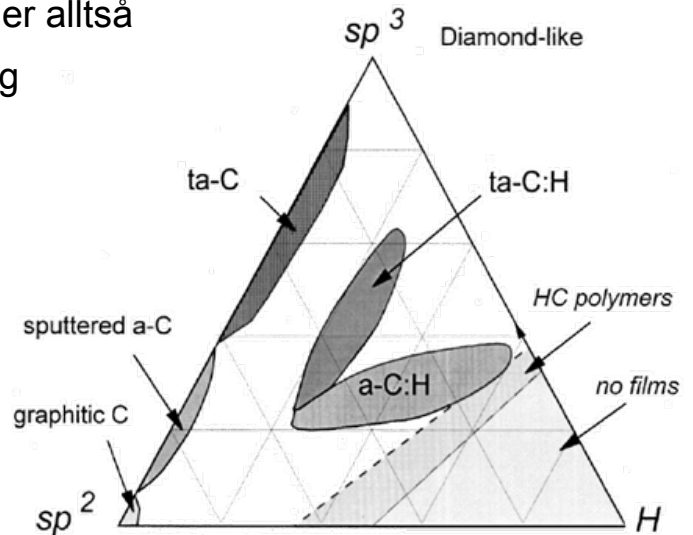
- Som fortsättning på diskussionen om stål visas här fasdiagrammet för FeCrNi vid 900 °C
 - Ni stabiliserar γ -Fe, Cr α -Fe !
 - Jämför detta med FeCr-diagrammet vid samma T nedan





Viktiga ternära fasdiagram: CH med bindningstyp

- En intressant variant av ternära diagram är den som illustrerar systemet CH med diamant och grafit som ändpunkter
 - Två ändpunkter och de motsvarande sidorna anger alltså andel sp^3 - vs. sp^2 -bindning

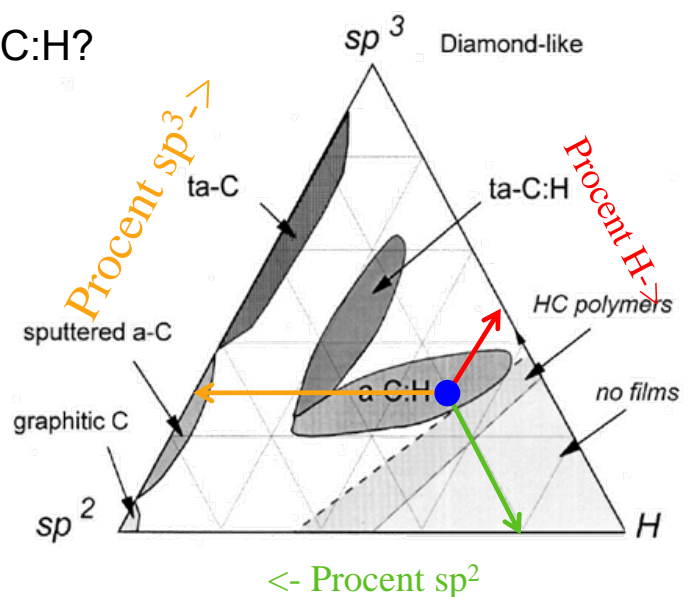


[Ferrari and Robertson, PRB 61 (2000) 14095]



Viktiga ternära fasdiagram: CH med bindningstyp

- Exempel: vad är den blå punkten i området a-C:H?
- Svar enligt linjerna:
 - Ungefär 30% sp^3
 - Ungefär 20% sp^2
 - Ungefär 50% H
- Alltså av C-atomerna är ungefär:
 - 60% sp^3
 - 40% sp^2
- Området ta-C avser **tetraedrisk amorft kol**, som har hög andel sp^3 och därmed diamantliknande egenskaper – ”Diamond-like carbon”, DLC





530117 Material fysik vt 2010

4. Fasta ämnens termodynamik 4.4 Fasdiagram för keramer



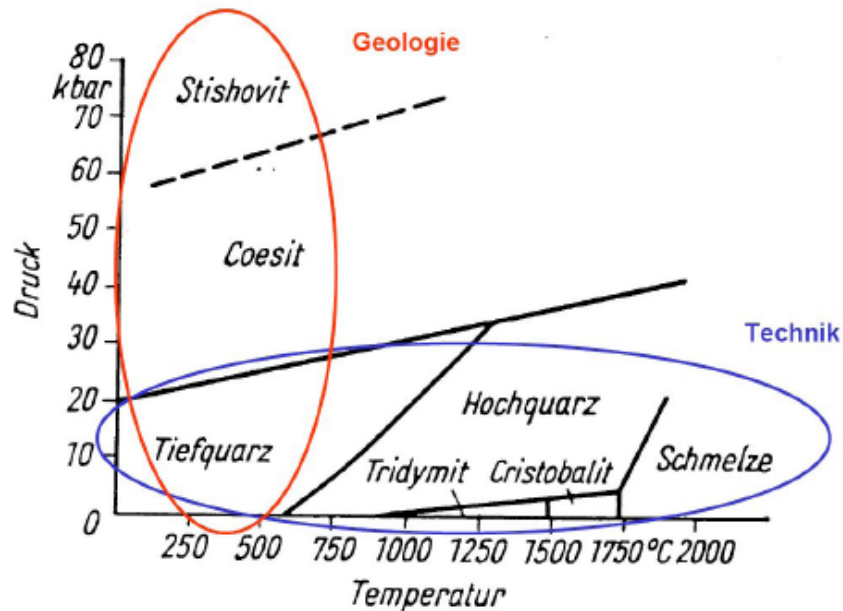
4.4 Fasdiagram för keramer

- Fasdiagram för keramer följer samma principer som de för metaller
- Men ofta anges de som diagram mellan vissa viktiga föreningar istället för diagram mellan rena grundämnen
 - Man kan i princip då tänka sig att de är **isoplether** av ternära eller mer komplicerade fasdiagram mellan grundämnena
- Vi går nu igenom några viktiga eller illustrativa exempel



(P,T)-diagram for SiO_2

■ Faserna för silikat



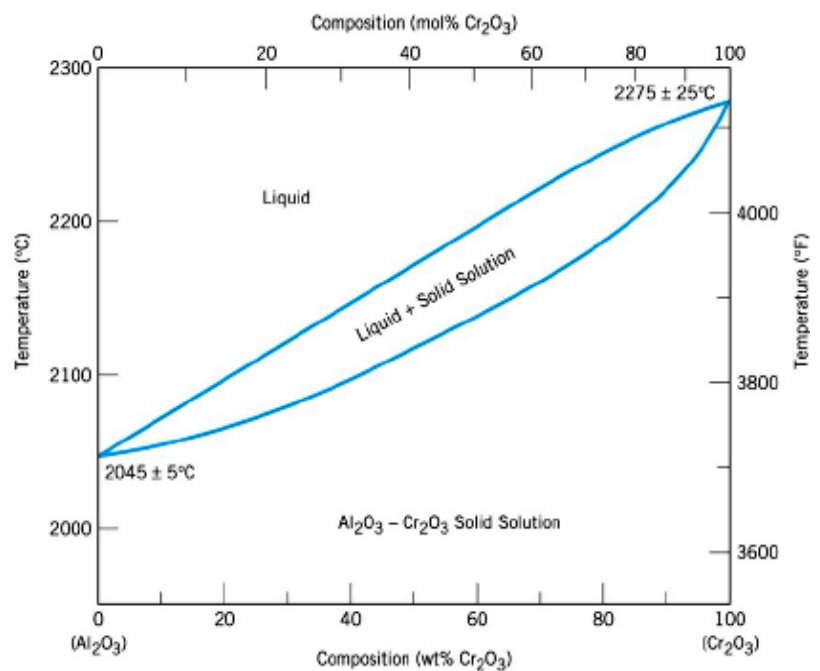
Lösligt binärt system: $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Cr}_2\text{O}_3$

■ Samma

kristallstruktur

- Al^{3+} ersätter Cr^{3+}
- Laddning samma och jonradie ungefär samma

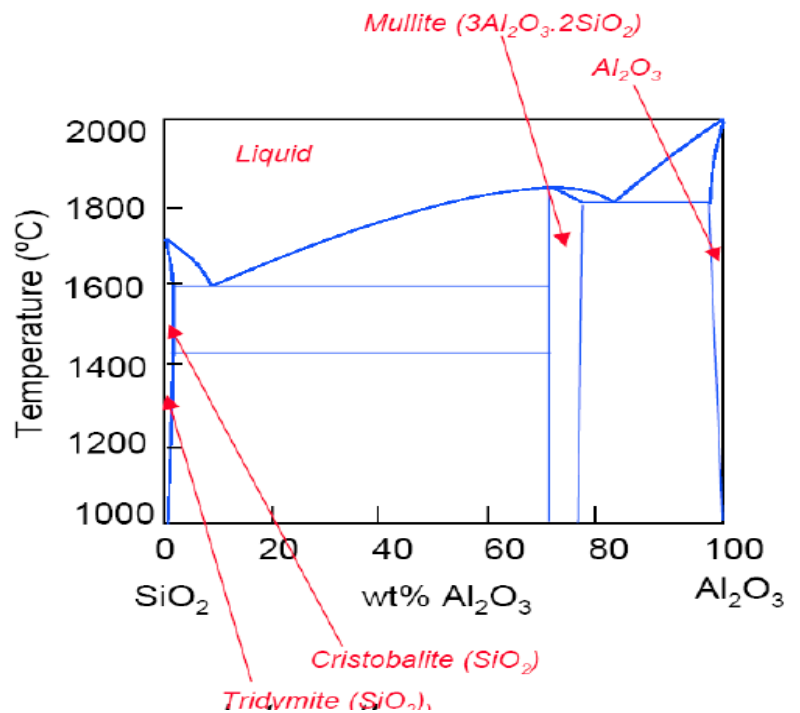
- Helt analogt med lösliga metaller, t.ex. Cu-Ni





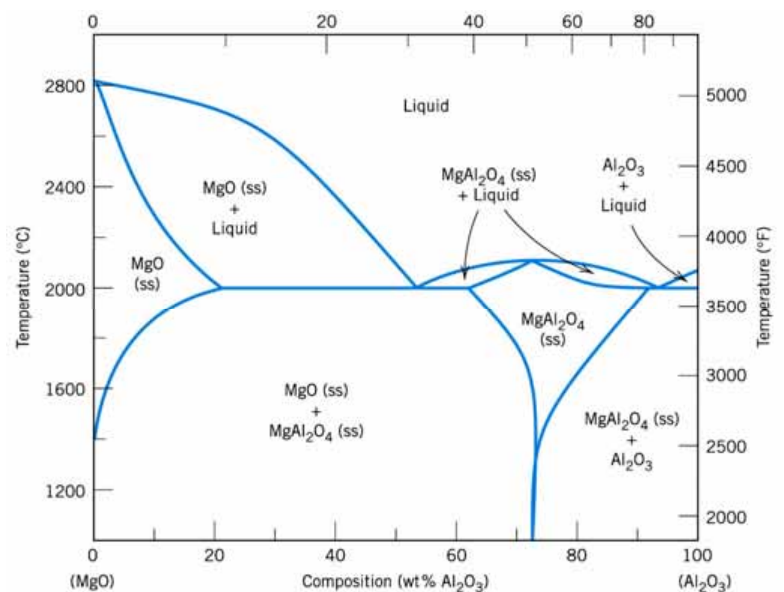
Olösligt binärt system: $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$

- Eutektiskt system med en mellanfas, mullit



Olösligt binärt system: $\text{MgO} - \text{Al}_2\text{O}_3$

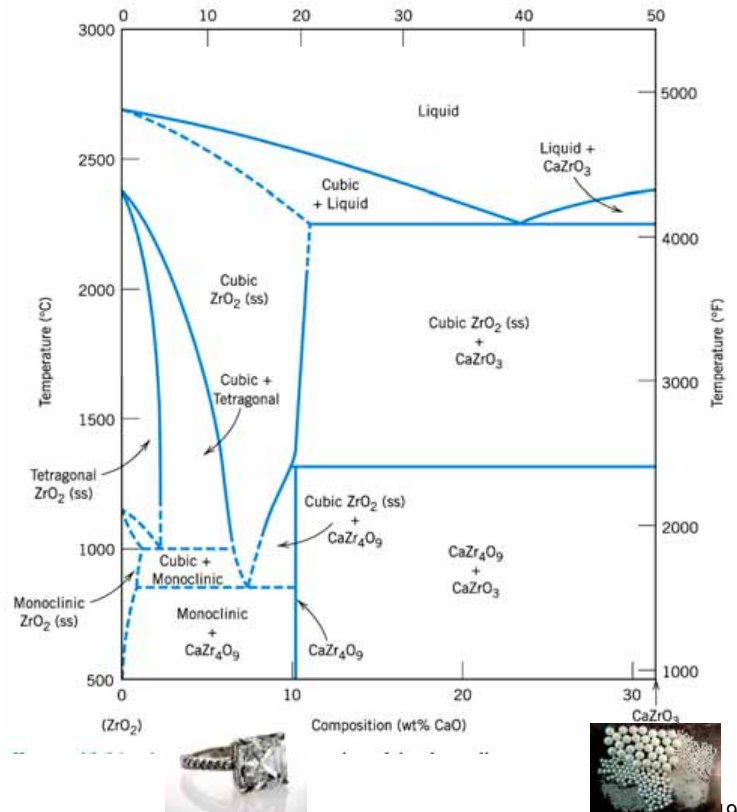
- Två tvåfasområden
- Mellan dem ett viktigt mellanområde: $\text{MgAl}_2\text{O}_4 = \textit{spinel}$
- Notera att vid högre T kan spinel ha varierande koncentration av Al, Mg, O !
- Två eutektiska punkter kring spinel





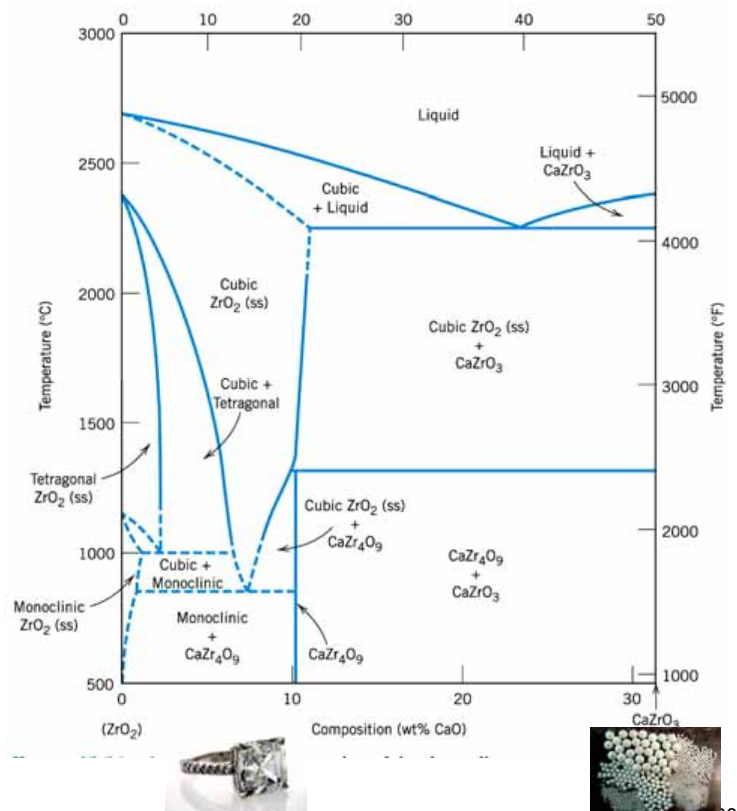
Systemet $ZrO_2 - CaO$

- Känt som zirconia – calcia
- Ren ZrO_2 har tre olika faser
 - Den monoklina har stor skillnad i volym => ZrO_2 -komponenter förstörs lätt
- Om man adderar 3-7 vikt-% CaO bildas inte den monoklina fasen i praktiken



Systemet $ZrO_2 - CaO$

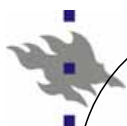
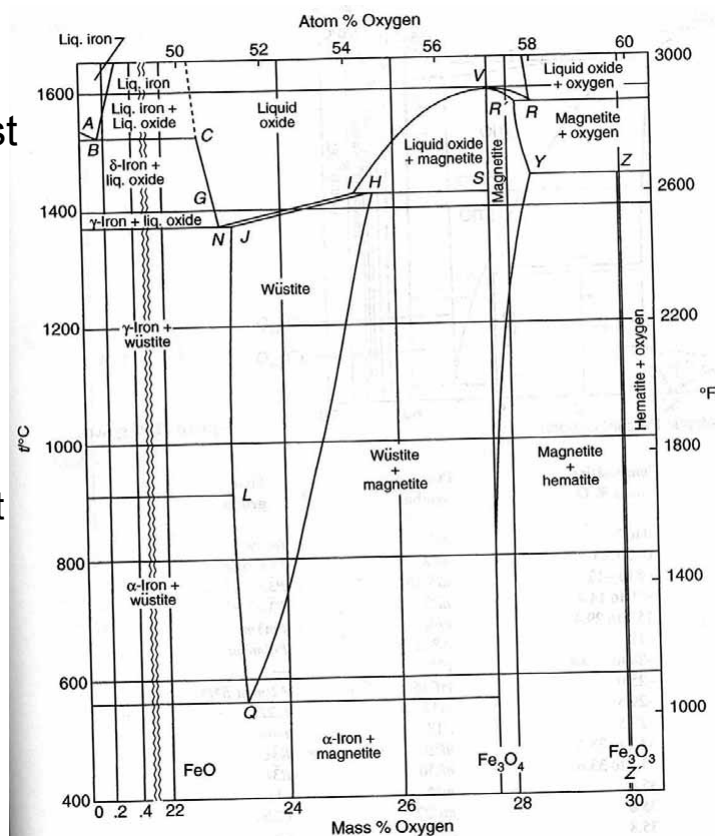
- Alltså kan ZrO_2 stabiliseras med CaO
- Känt som "partiellt stabiliserad zirkonia", PSZ
- För andelar CaO > 7.9 vikt-% eller andra stabiliserare hålls materialet helt i kubisk fas => "Fully stabilized zirkonia", FSZ





Rost: systemet FeO

- Järnoxider är givetvis grundbeståndsdelen i rost
- Vid låga andelar O, upp till ungefär 23 vikt%, är rost i jämvikt en tvåfasblandning av rent Fe och:
 - Under ~ 580 °C magnetit Fe_3O_4
 - I praktiken också ofta hematit Fe_2O_3
 - Över det wüstit FeO



Systemet Fe-Cu-O

- Systemet Fe-Cu-O kan beskrivas med ett ternärt fasdiagram som binder de olika Fe-O-faserna med Cu
- Linjerna som binder de väldefinierade intermediära binära komponenterna med den tredje kallas **alkemader**
 - Dessa kan användas till att dela in diagrammet i mindre delar
 - T.ex. magnetit-alkemaden till det ternära systemet Fe-Cu- Fe_3O_4

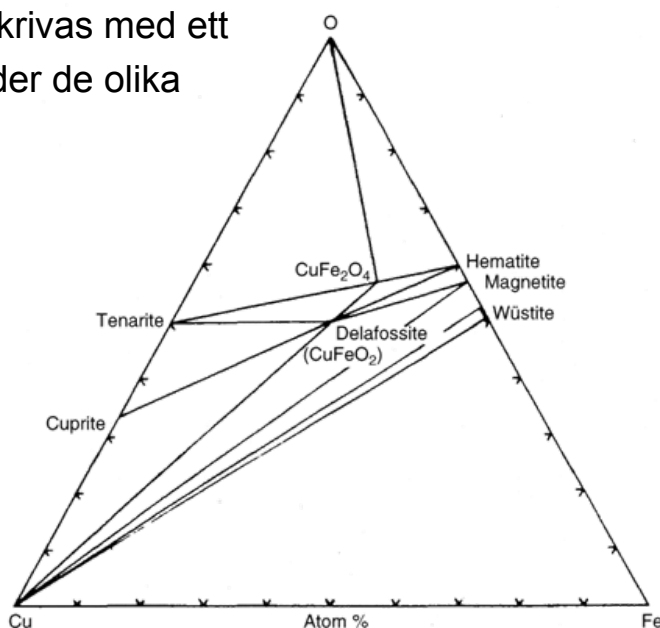


Figure 2.20 Stable assemblages above 675°C for the system Cu–Fe–O. Reprinted, by permission, from *Phase Diagrams for Ceramists*, p. 30, Fig. 2136, 1969 Supplement. Copyright © 1969, The American Ceramic Society.



Systemet MgO-SiO₂-Al₂O₃

- Ett ternärt diagram för en del av ett kvaternärt system (4 grundämnen)!
- Behöver inte kunnas i detalj

