

متالورژی فیزیکی

جلسه چهارم : قوانین هیوم روتری

علی اشرفی

دانشکده مهندسی مواد

دانشگاه صنعتی اصفهان

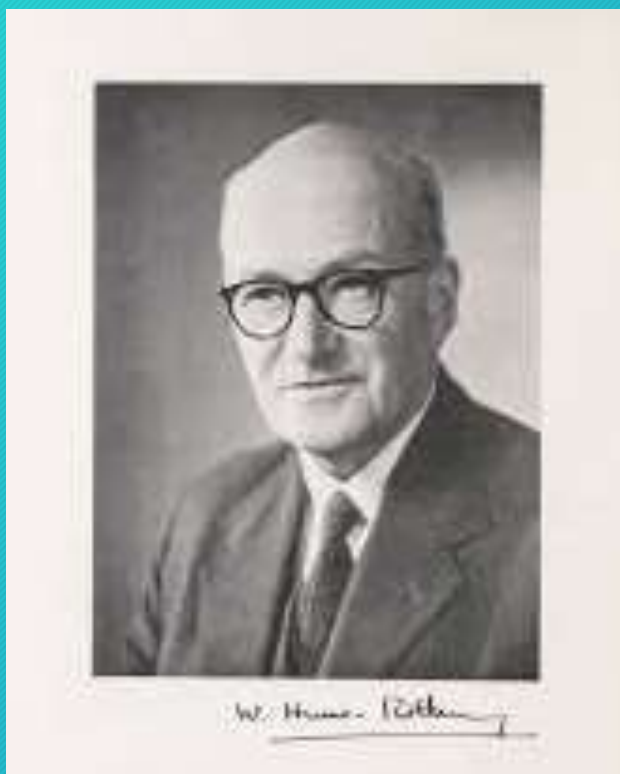


دانشگاه صنعتی اصفهان
Isfahan University
of Technology

William Hume-Rothery



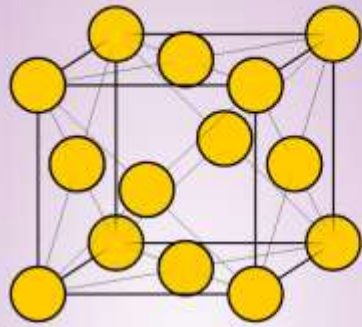
دانشگاه صنعتی اصفهان
Shahrood University
of Technology



15 May 1899 – 27 September 1968 •

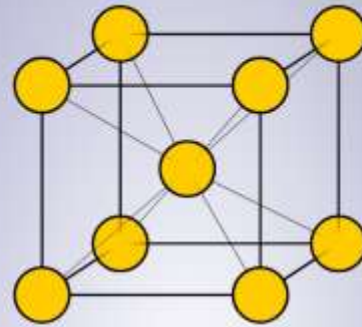
• پایه گذار دپارتمان متالورژی دانشگاه آکسفورد

شبکه بلوری عناصر مختلف



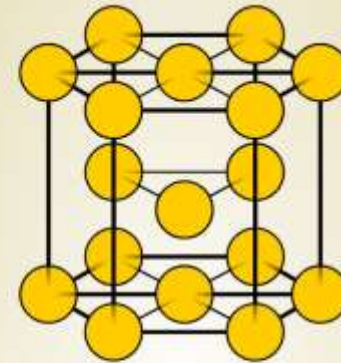
Examples of **FCC**
elements at room
temperature:

Al, Ca, Ni, Cu, Sr, Rh,
Pd, Ag, Yb, Th, Ir, Pt,
Au, Pb



Examples of **BCC**
elements at room
temperature:

Li, Na, K, V, Cr, Mn, Fe,
Rb, Nb, Mo, Cs, Ba, Eu,
Ta, W, Ra

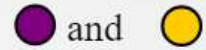


Examples of **HCP**
elements at room
temperature:

Be, Mg, Sc, Ti, Co, Zn,
Y, Zr, Tc, Ru, Cd, Gd,
Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Lu,
Hf, Re, Os, Tl

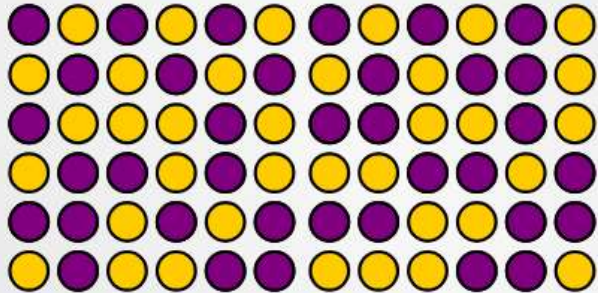
Substitutional Alloy

(solid solution)



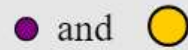
like each other equally.

They can randomly replace each other.



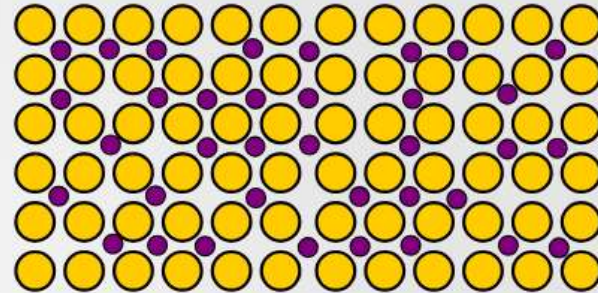
Interstitial Alloy

(solid solution)

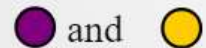


like each other equally.

Small atoms randomly squeeze between big atoms.

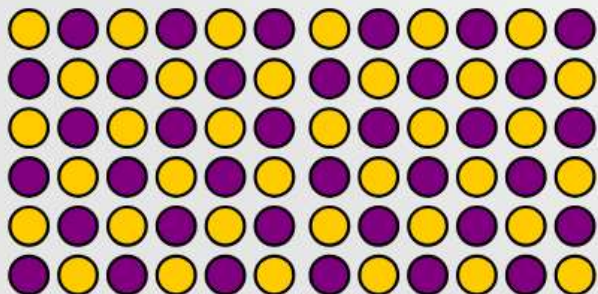


Intermetallic Compound

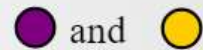


like each other more than themselves

They must be arranged in a specific order to maximize contact.

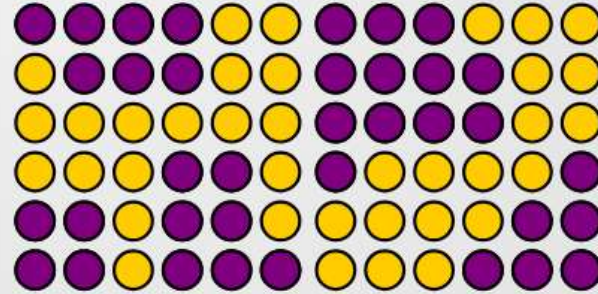


Two-Phase Alloy



like each other less than themselves

They stay in distinct phases to minimize contact

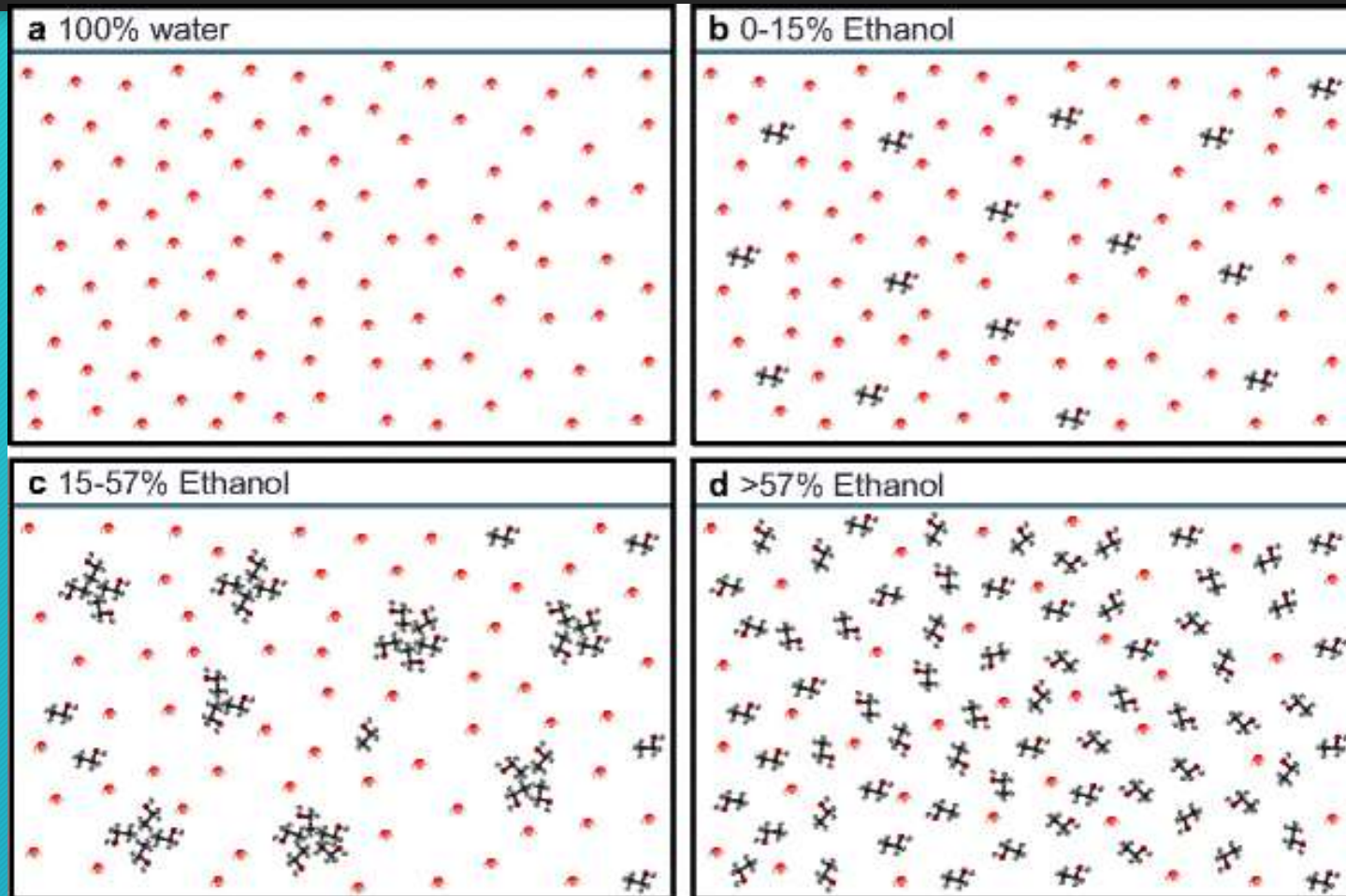


محلول جامد یا ترکیب بین فلزی



دانشگاه صنعتی اصفهان
Shahrood University
of Technology

محلول مایع آب و الکل



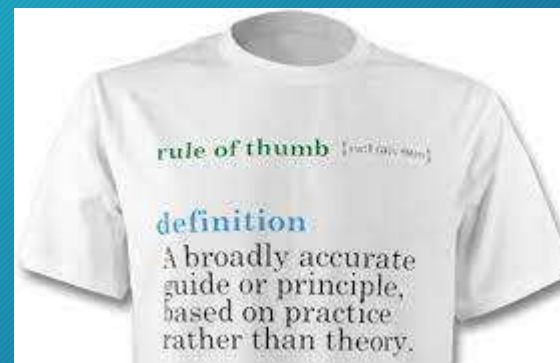
قوانین هیوم روتری



- *The Hume-Rothery rules are a set of guidelines that can help you determine whether two elements will form a substitutional solid solution.*

• مجموعه ای از رهنمودها برای کمک به تعیین امکان تشکیل محلول جامد از نوع جانشینی

- *these are just rules of thumb*



قانون اول: شعاع یونی یکسان

• اختلاف شعاع اتمی دو عنصر بیش از ۱۵ درصد نباشد.

$$\text{Percentage Difference} = \frac{R_{\text{solute}} - R_{\text{solvent}}}{R_{\text{solvent}}} \times 100\%$$

$$\text{Percentage Difference} \leq 15\%$$

• دلیل اول:

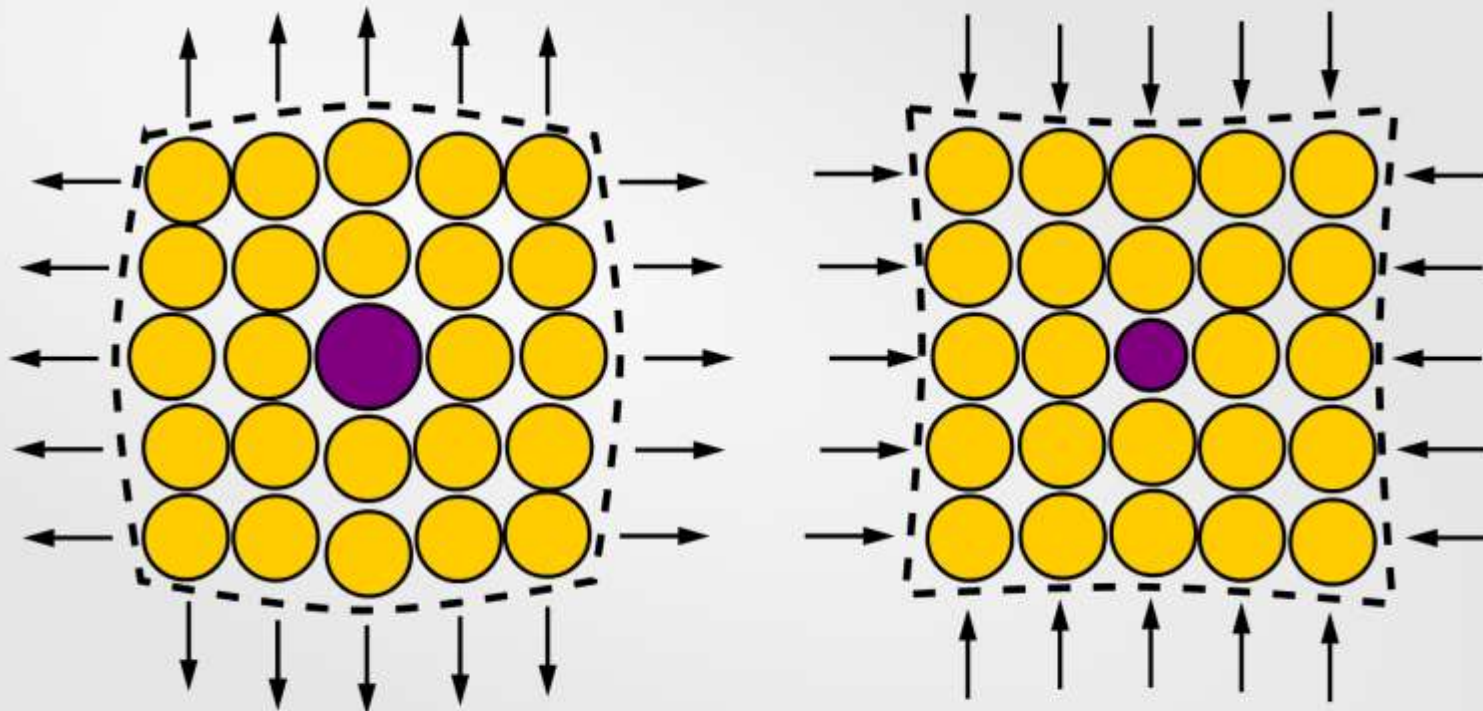
اختلاف بیش از این مقدار، به مفهوم ابعاد بسیار کوچک اتم حل شونده نسبت به اتم های حلال بوده و به مفهوم امکان تشکیل محلول جامد بین نشینی است.

دلیل دوم:

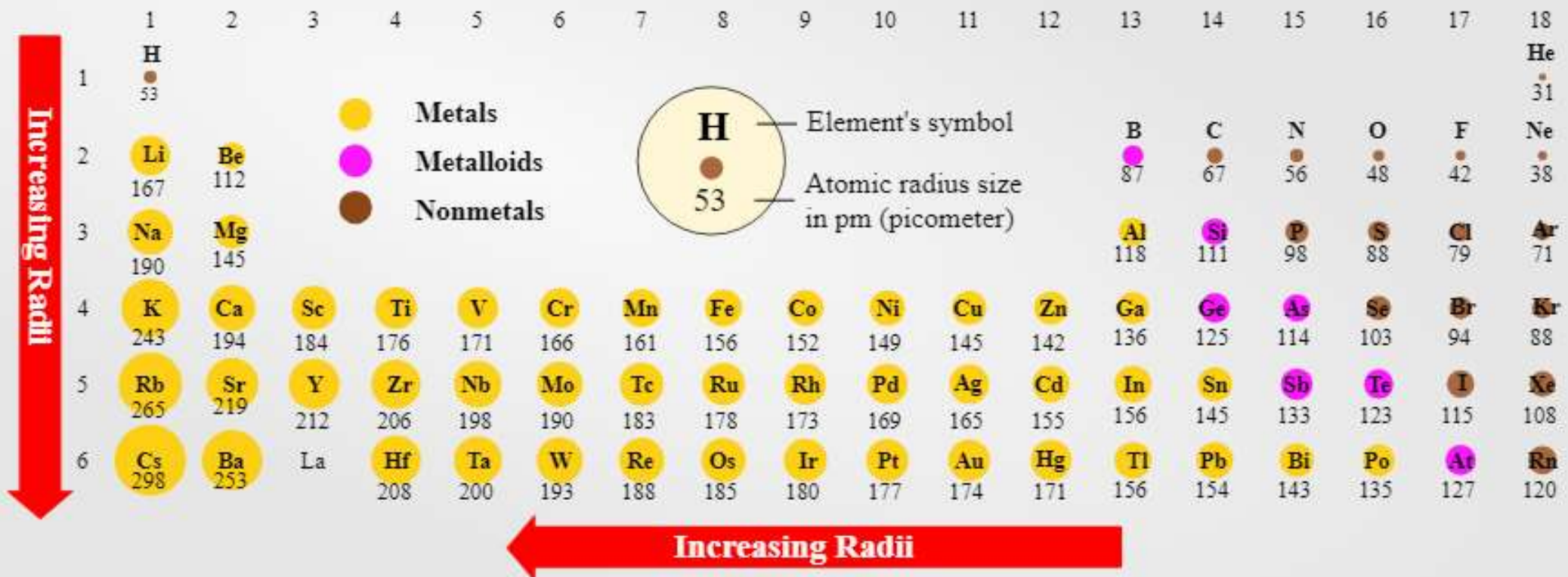
اختلاف بیش از این حد به مفهوم ایجاد تنش بیش از حد به ساختار اتم مادر و در نتیجه جلوگیری از تشکیل محلول جامد است.

ایجاد تنش در اثر حضور اتم جانشین

Local Stress in Substitutional Solid Solution



Atomic Radii Trends on the Periodic Table



قانون دوم: ساختار بلوری یکسان

Crystal Structures of Elements at STP

STP - Standard Temperature and Pressure

H HEX																	He HCP						
Li BCC	Be HCP	BCC - Body-centered Cubic FCC - Face-centered Cubic HEX - Simple Hexagonal HCP - Close-packed Hexagonal DHCP - Double Close-packed Hexagonal RHO - Rhombohedral										BCT - Body-centered Tetragonal ORTH - Orthorhombic DC - Diamond Cubic DT - Diamond Tetragonal SC - Simple Cubic * predicted crystal structure				B RHO	C HEX	N complex HCP	O P-cubic	F P-cubic	Ne FCC		
Na BCC	Mg HCP																	Al FCC	Si DC	P ORTH	S ORTH	Cl complex C-ORTH	Ar FCC
K BCC	Ca FCC	Sc HCP	Ti HCP	V BCC	Cr BCC	Mn <i>a</i> -Mn	Fe BCC	Co HCP	Ni FCC	Cu FCC	Zn HCP	Ga complex F-ORTH	Ge DC	As P-RHO	Se complex HEX	Br complex C-ORTH	Kr FCC						
Rb BCC	Sr FCC	Y HCP	Zr HCP	Nb BCC	Mo BCC	Tc HCP	Ru HCP	Rh FCC	Pd FCC	Ag FCC	Cd HCP	In BCT	Sn DT	Sb P-RHO	Te complex HEX	I complex C-ORTH	Xe FCC						
Cs BCC	Ba BCC	57-71	Hf HCP	Ta BCC	W BCC	Re HCP	Os HCP	Ir FCC	Pt FCC	Au FCC	Hg RHO	Tl HCP	Pb FCC	Bi RHO	Po SC	At FCC*	Rn FCC*						
Fr BCC*	Ra BCC	89-103	Rf HCP*	Db BCC*	Sg BCC*	Bh HCP*	Hs HCP*	Mt FCC*	Ds BCC*	Rg BCC*	Cn HCP*	Nh HCP*	Fl FCC*	Mc UNKNOWN	Lv UNKNOWN	Ts UNKNOWN	Og FCC*						

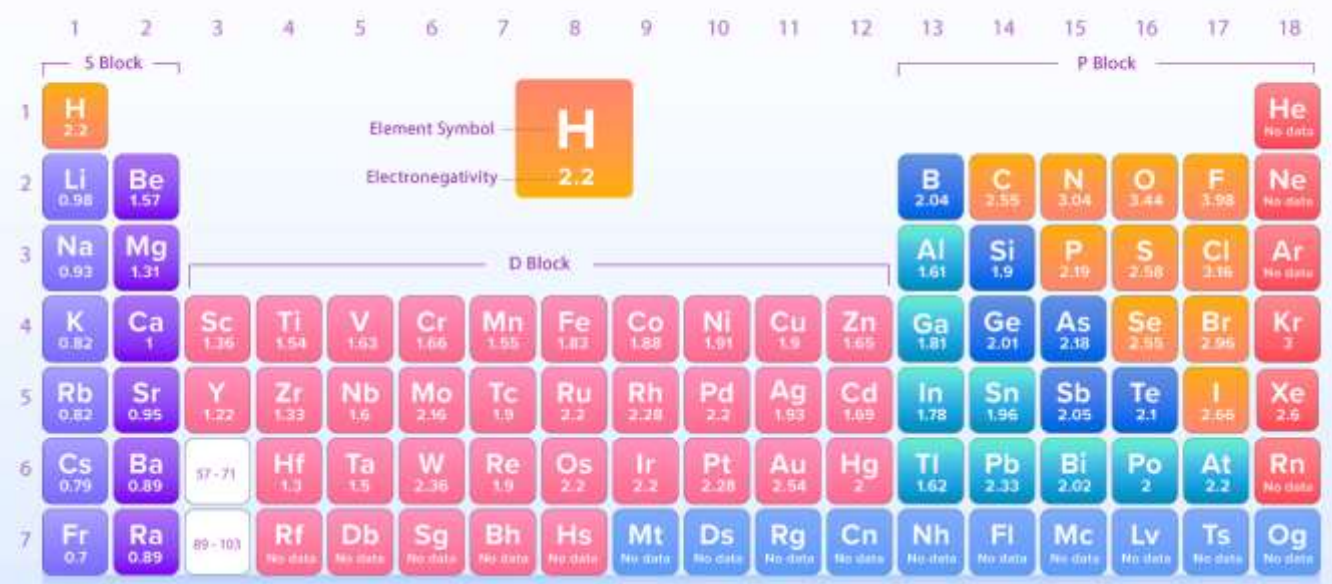
 Solid state at STP
 Liquid state at STP
 Gaseous state at STP

La DHCP	Ce DHCP	Pr DHCP	Nd DHCP	Pm DHCP	Sm complex RHO	Eu BCC	Gd HCP	Tb HCP	Dy HCP	Ho HCP	Er HCP	Tm HCP	Yb FCC	Lu HCP
Ac FCC	Th FCC	Pa BCT	U ORTH	Np ORTH	Pu MONO	Am DHCP	Cm DHCP	Bk DHCP	Cf DHCP	Es FCC	Fm FCC*	Md FCC*	No FCC*	Lr HCP*

• برای دستیابی به حلالیت کافی،
 لازم است شبکه بلوری حلال
 و حل شونده یکسان باشند.

قانون سوم: الکترونگاتیویته یکسان

ELECTRONEGATIVITY CHART



• اختلاف الکترونگاتیویته باعث ایجاد ترکیب می شود به جای این که باعث ایجاد محلول گردد.

$$\left| \frac{\chi_{\text{solvent}} - \chi_{\text{solute}}}{\chi_{\text{solvent}}} \right| \leq 0.3$$



قانون چهارم: ظرفیت یکسان



- بیشترین حلالیت در ظرفیت یکسان رخ می دهد.

- The lower-valence elements (left side of the periodic table) are more likely to dissolve higher valence elements (right side) than vice versa.

Darken-Gurry maps

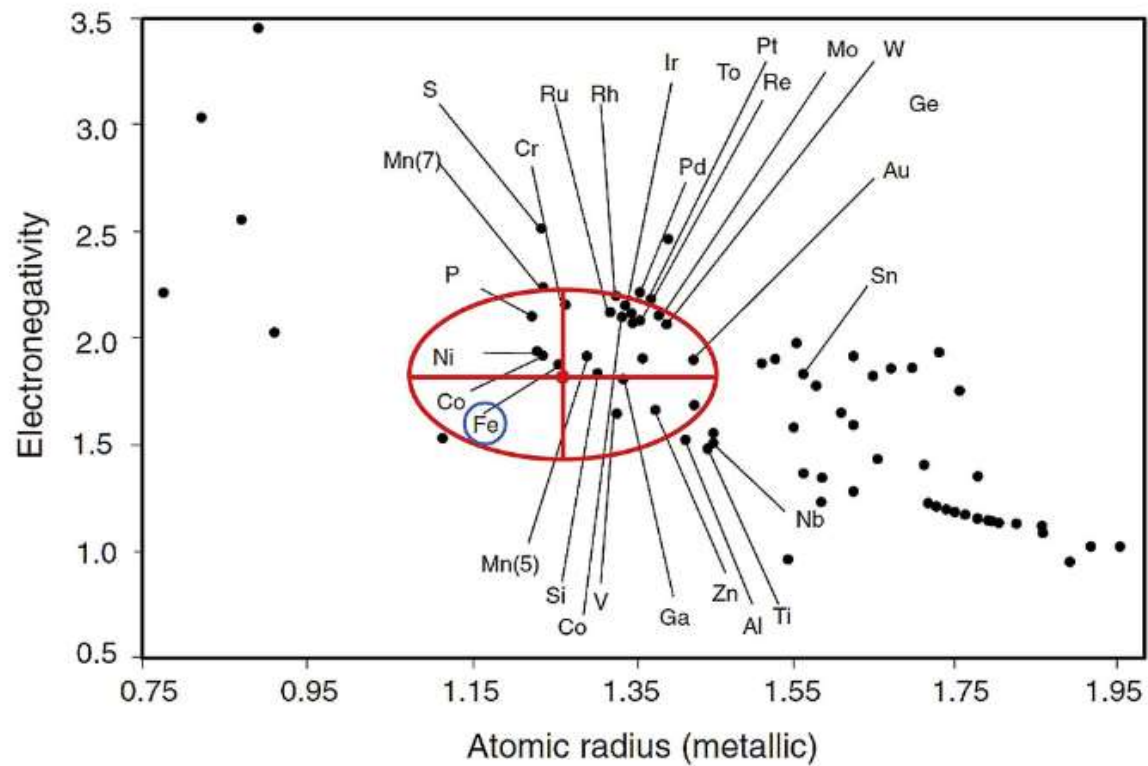


Fig. 7. A Darken–Gurry ellipse plot with Cu as the central atom, where the elements in the ellipse are exhibit high solid solubility in Cu (up to 5 at.%).

CALPHAD

CALPHAD Methodology

CALPHAD Methodology is a proven methodology for predicting thermodynamic, kinetic, and other properties of multicomponent material systems. At Thermo-Calc Software, we use CALPHAD methodology to develop our databases, which, when used together with our software, can predict the properties of multicomponent systems corresponding to real materials.



Figure 1. CALPHAD methodology consists of four main steps for developing databases of materials systems. We follow these steps rigorously.

دقت در پیش بینی مدل های مختلف



No. of alloy systems and the prediction accuracy

	<i>Total No.</i>	<i>Prediction accuracy %</i>
<i>Hume-Rothery's rule (size factor only)</i>	<i>1423</i>	<i>67.6</i>
<i>D-G Method</i>	<i>1455</i>	<i>76.6</i>
<i>Chelikowsky Method</i>	<i>192</i>	<i>82</i>
<i>Alonso Method</i>	<i>342</i>	<i>90</i>
<i>Zhang BW Method (parabola separation)</i>	<i>3864</i>	<i>87.2</i>
<i>Zhang BW Method (ellipse separation)</i>	<i>3864</i>	<i>90.3</i>