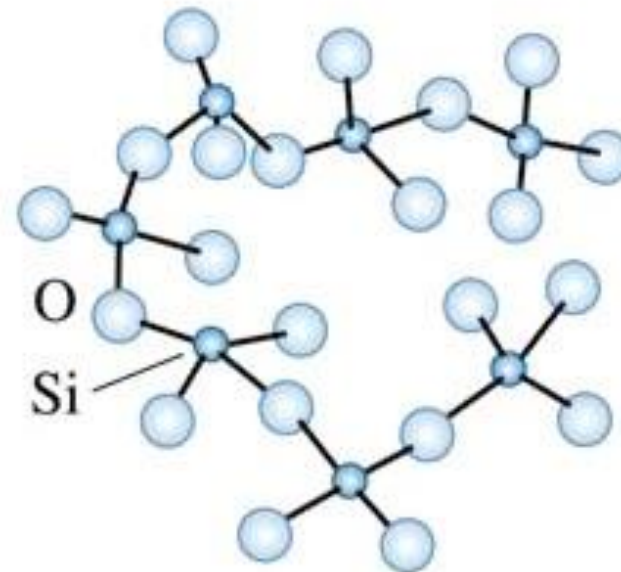
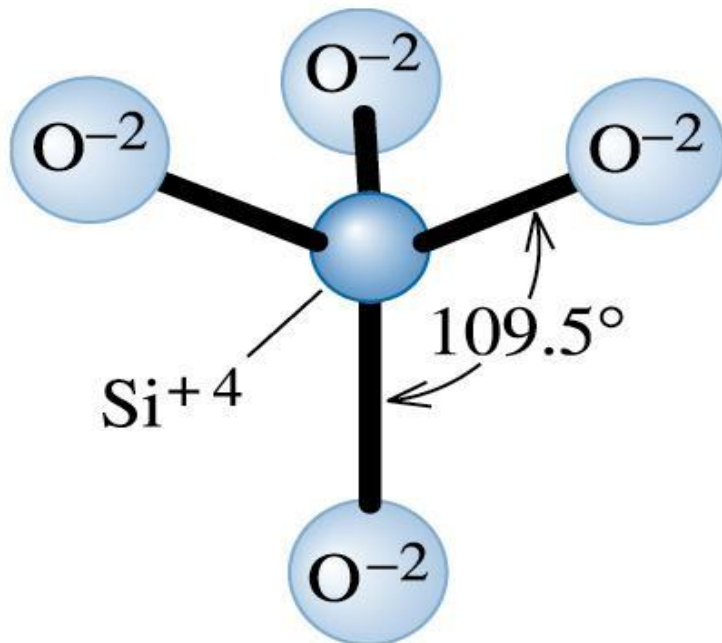


Kristálytan

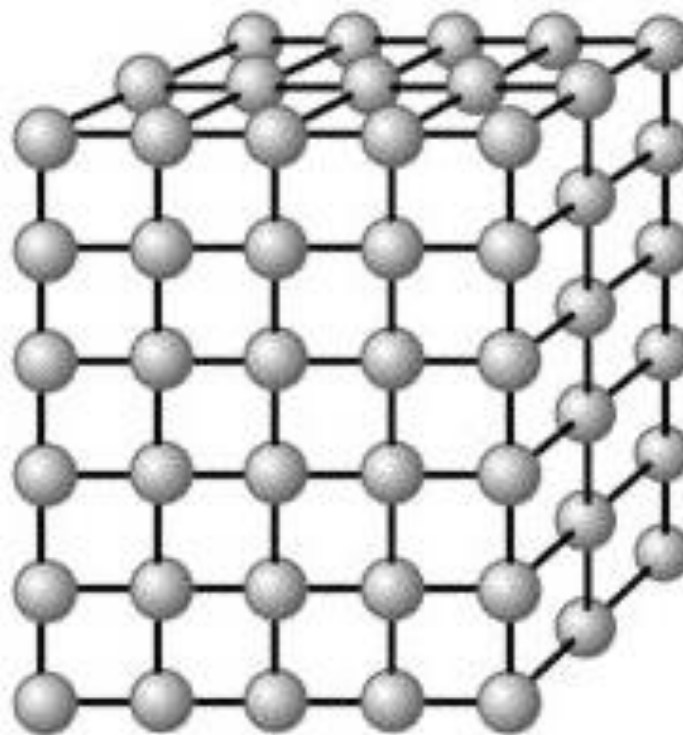
Dr. Szabó Péter János
szpj@eik.bme.hu

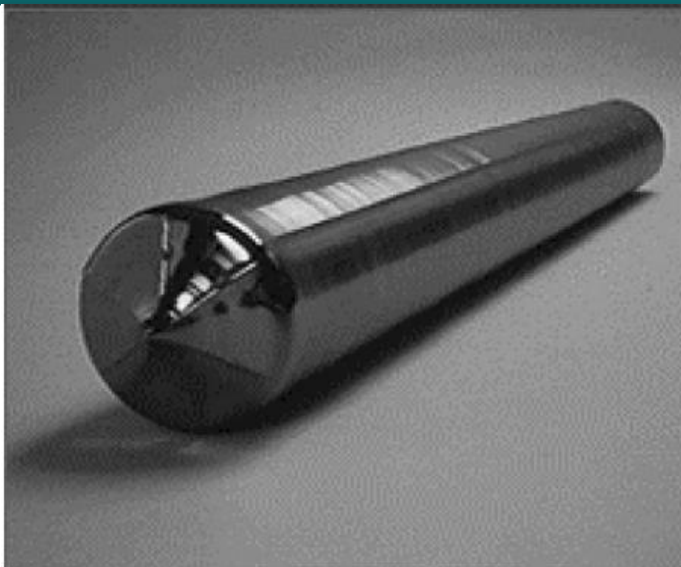
Anyagszerkezetten és anyagvizsgálat
BMEGEMTBGA1

- Rövid távú rend (amorf anyagok)

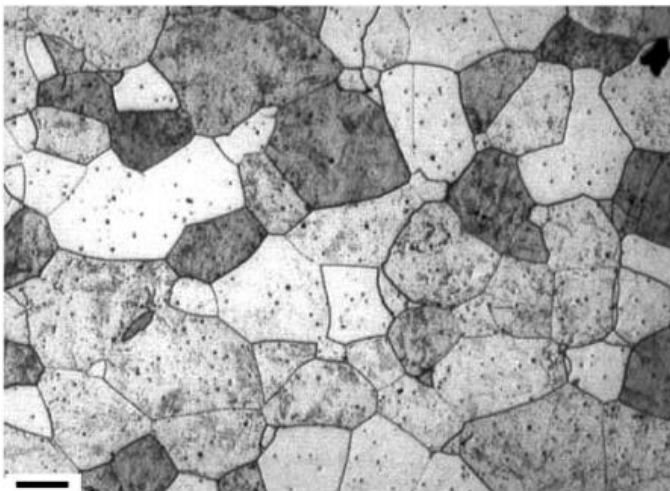


- Hosszú távú rend (kristályok)
- Az atomok elhelyezkedését jól definiált transzlációval írhatjuk le



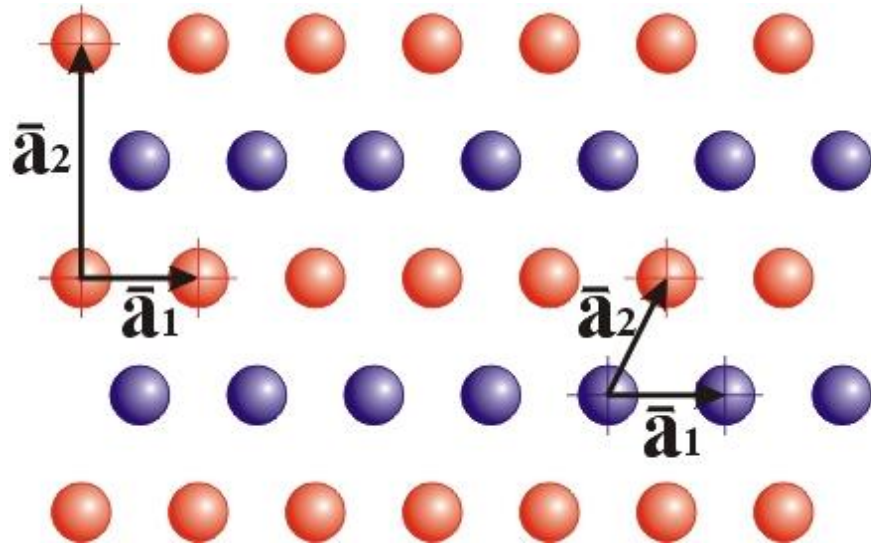


(a)



(b)





$$\bar{r} = m\bar{a}_1 + n\bar{a}_2$$

$m; n$: egész

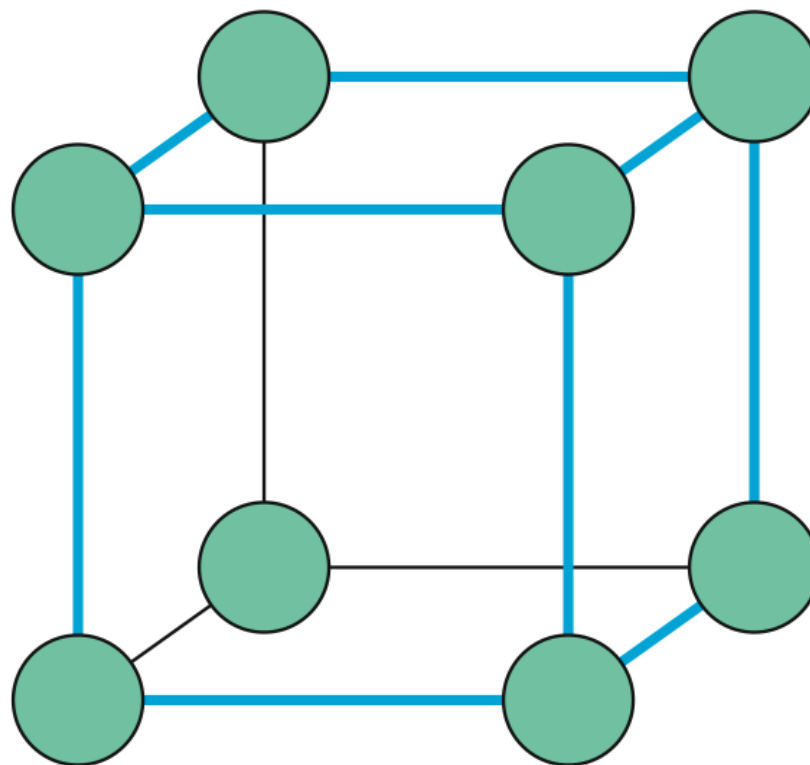
$\bar{r}$: transzlációs vektor

$\bar{a}_1; \bar{a}_2$: bázis vektorok

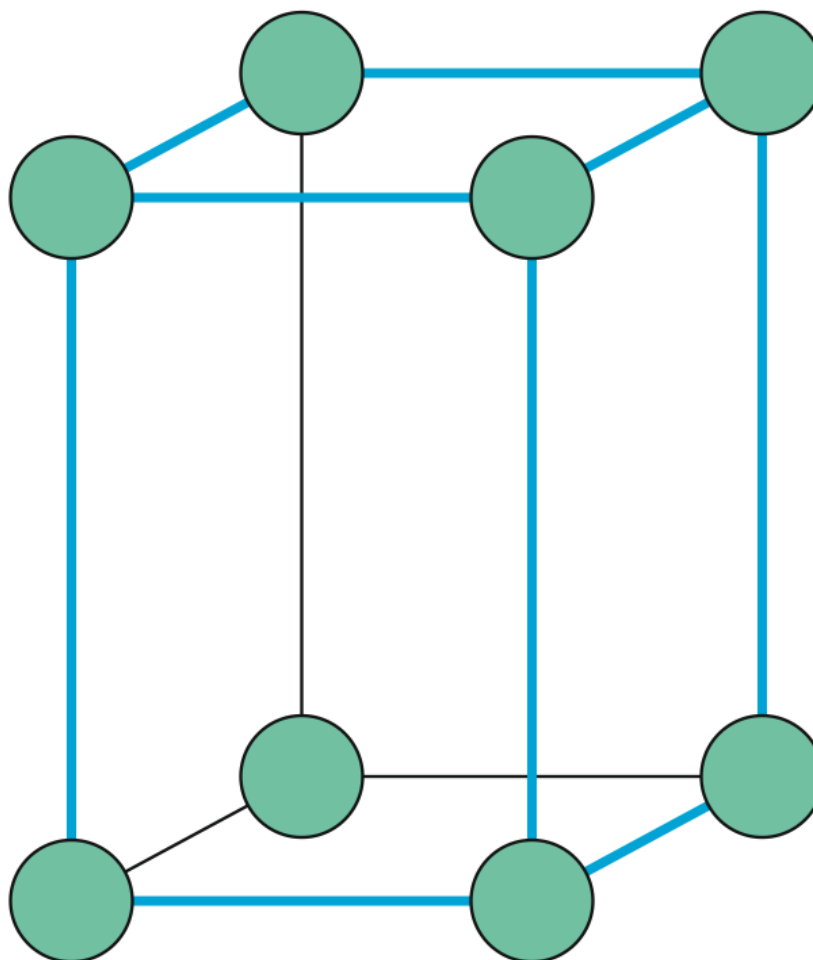
- Transzláció: $\bar{r} = m\bar{a}_1 + n\bar{a}_2 + p\bar{a}_3$
- Primitív cella: a bázisvektorok által kifeszített térfogatelem. Csak a sarkain tartalmaz atomot, összesen egy atom található benne.
- Összetett rács: egyszerűbb geometriai leírás, több atomot tartalmaz.

Az összes rács besorolható a hét primitív ráctípus egyikébe.

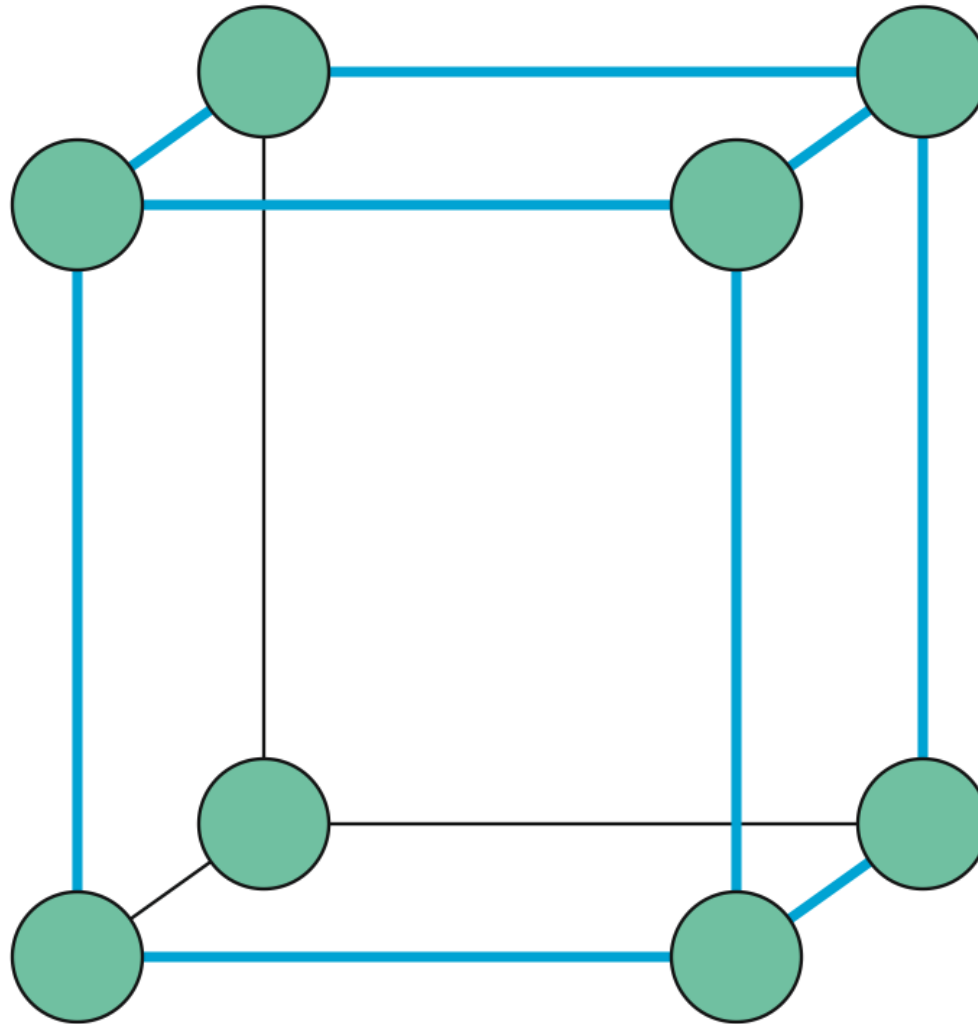
- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- P_o



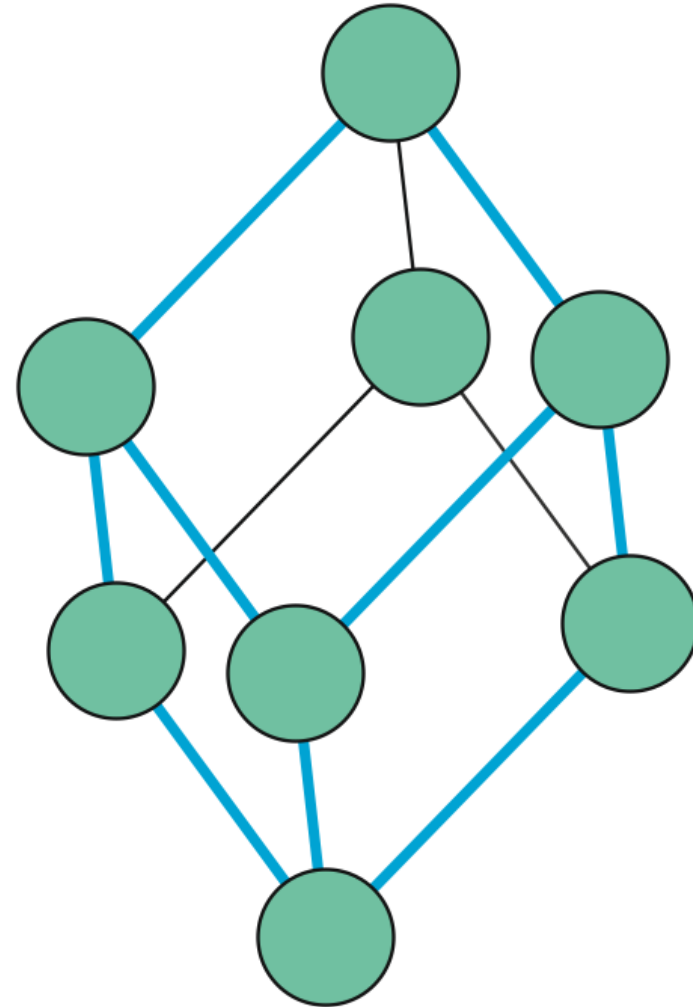
- $a_1 = a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- In, Sn (ha $T > 13^\circ$)



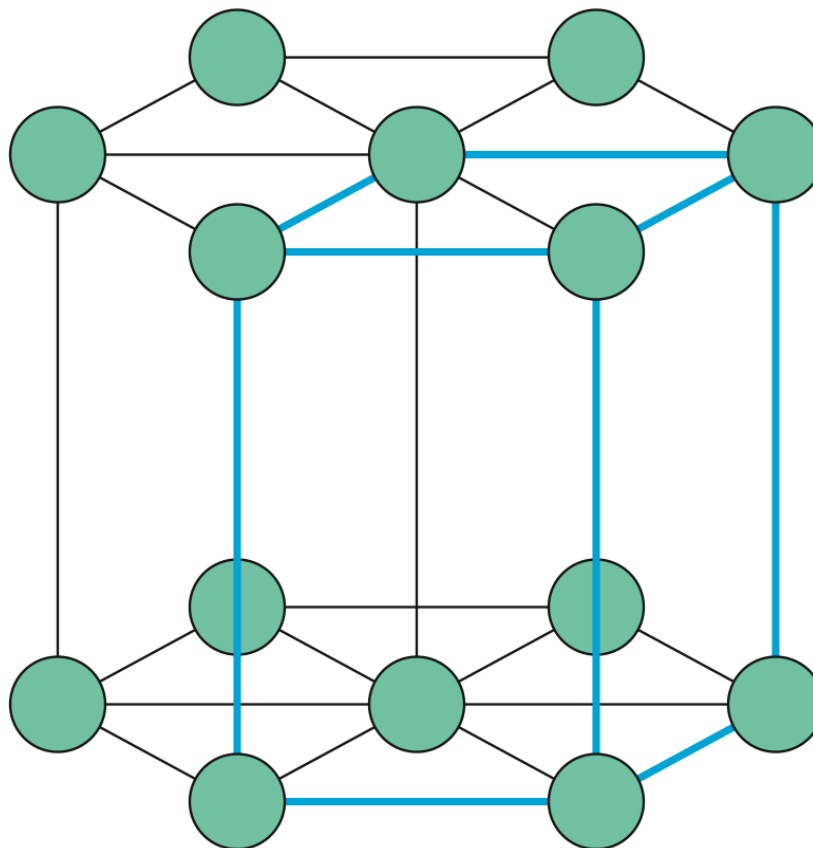
- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- Ga, U



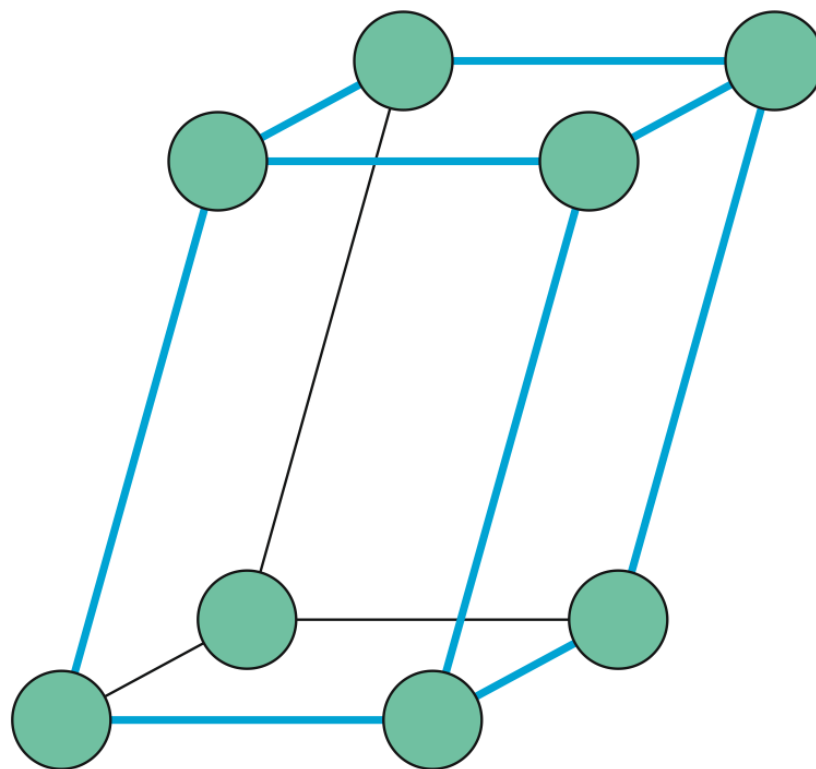
- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Hg, Bi, As



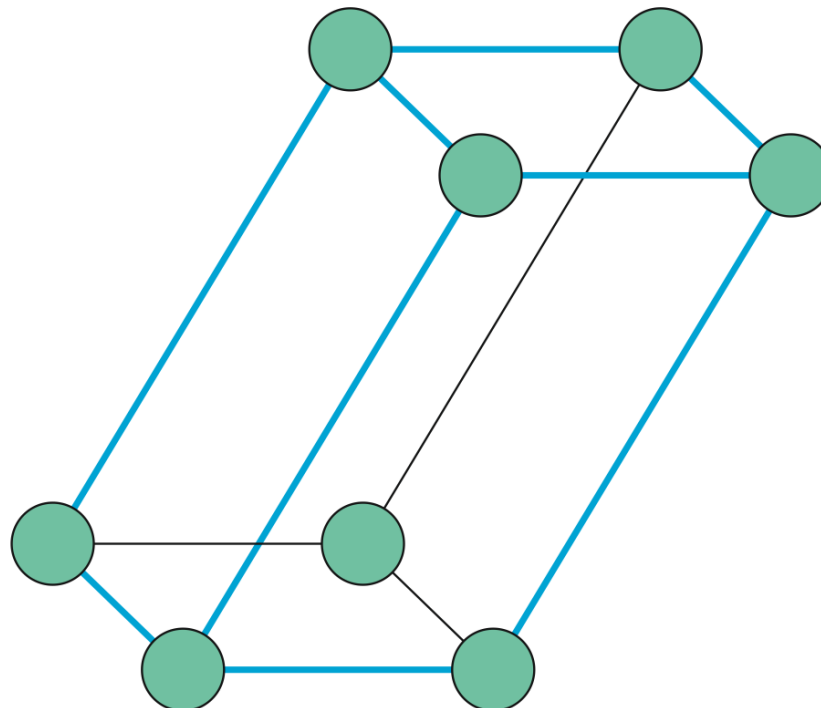
- $a_1 = a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- Cd, Mg, Zn, grafit



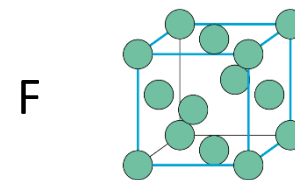
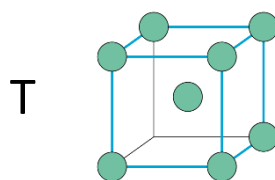
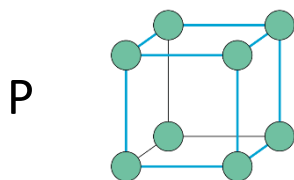
- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma = 90^\circ$
- kén



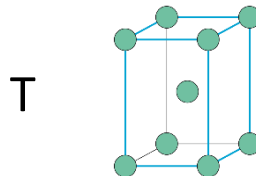
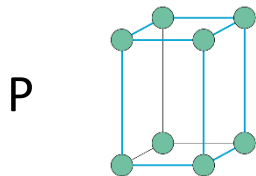
- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Se, Te



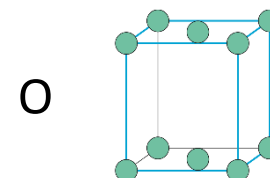
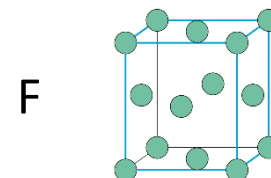
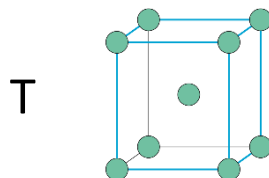
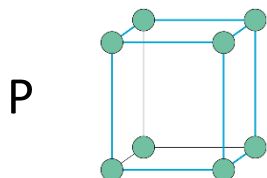
Köbös



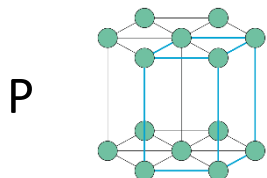
Tetragonális



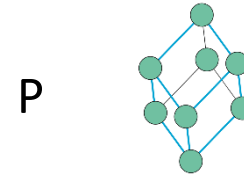
Ortorombos



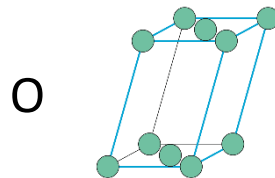
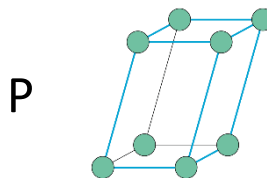
Hexagonális



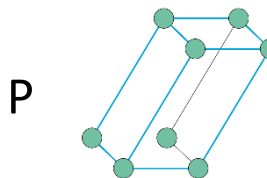
Romboédères



Monoklin

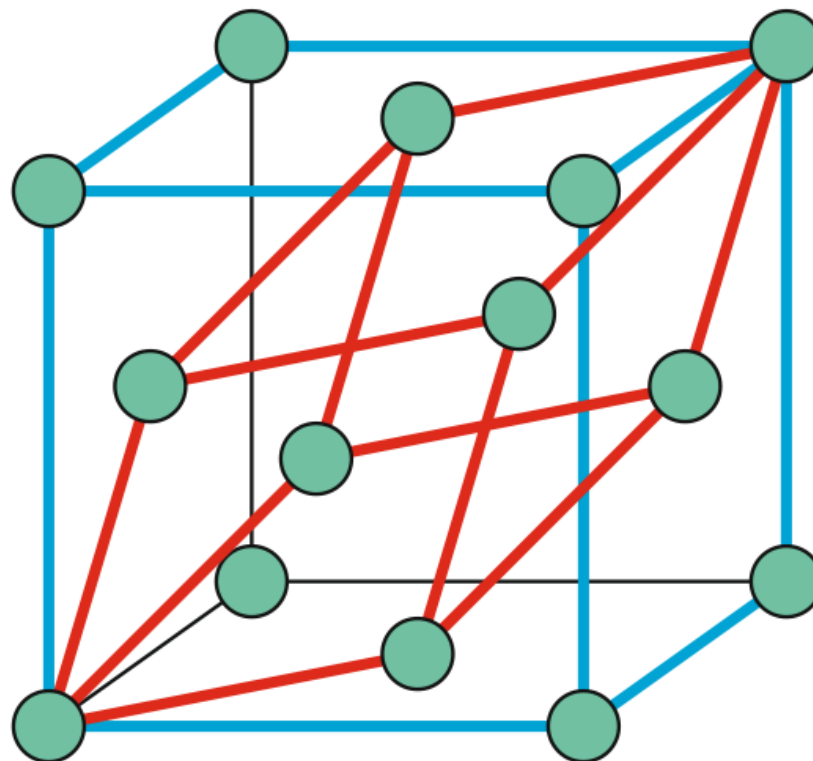
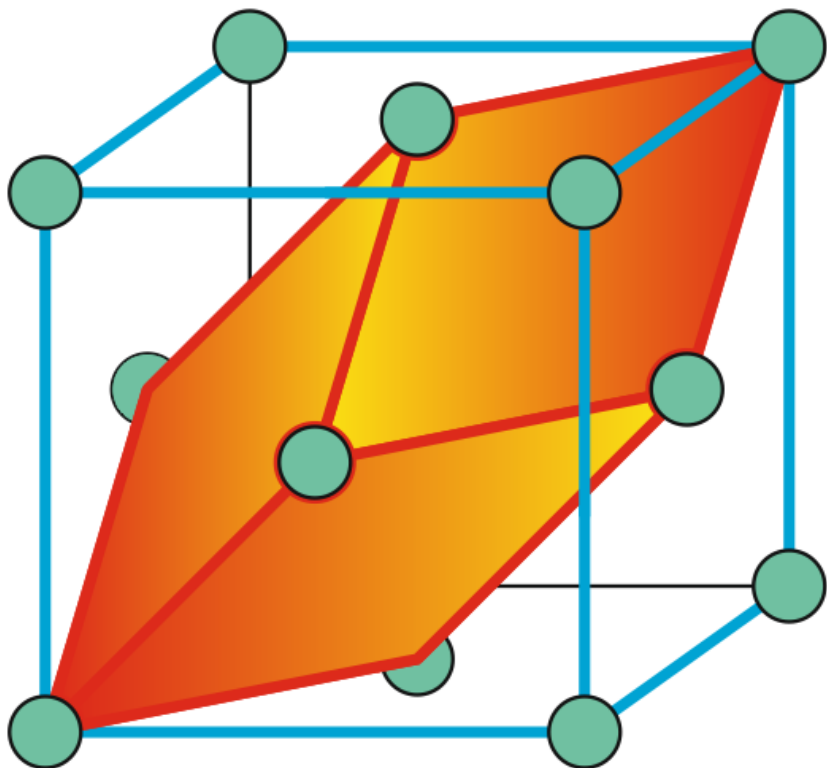


Triklin

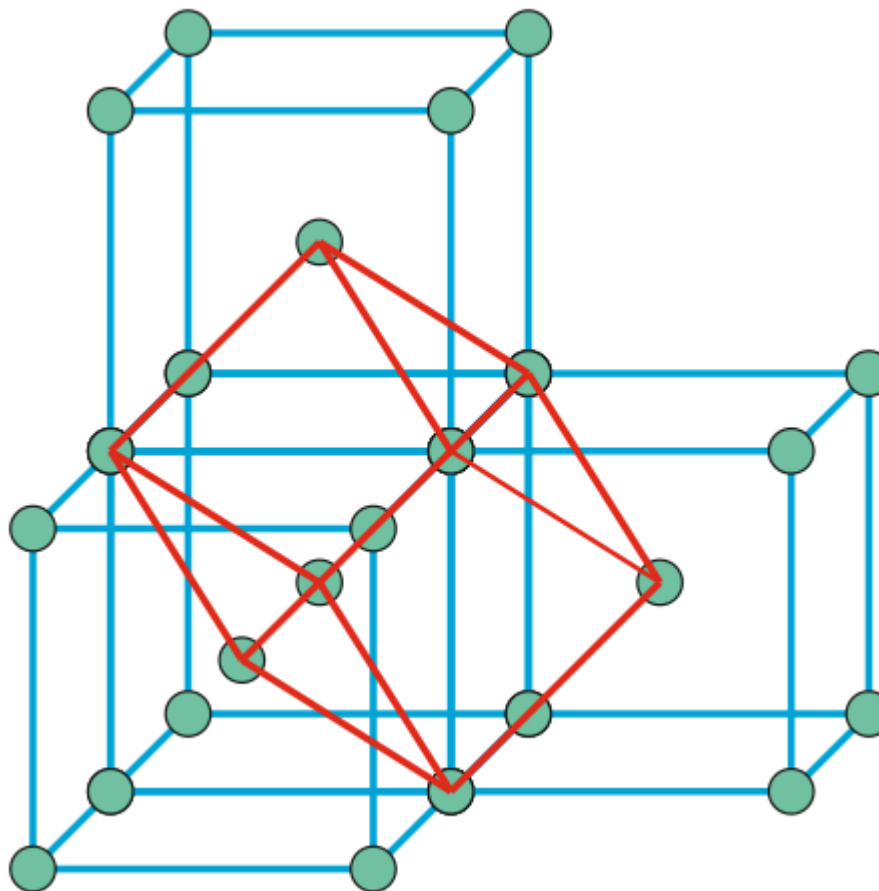
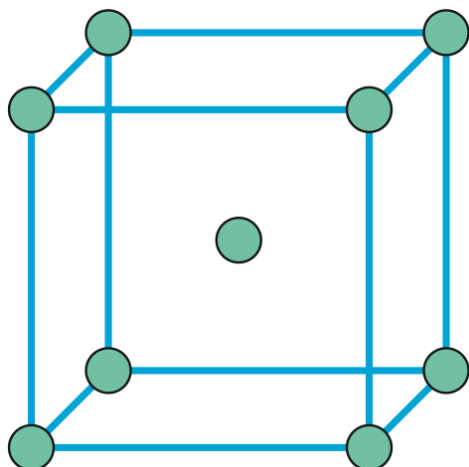


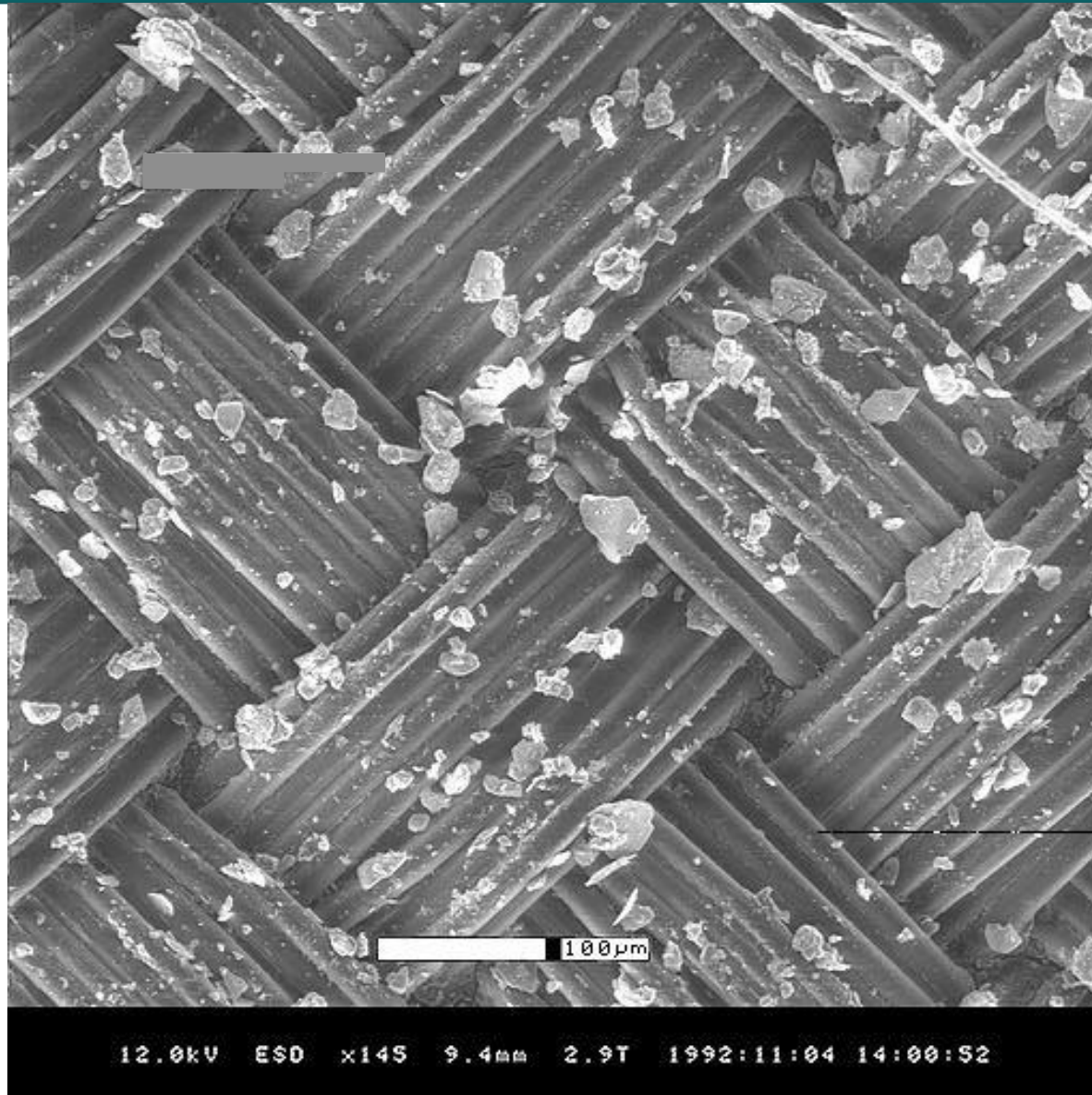
P – egyszerű
T – térben középpontos
F – felületen középpontos
O – oldallapon középpontos
p.k., t.k.k., f.k.k.

F.K.K., mint romboéderes

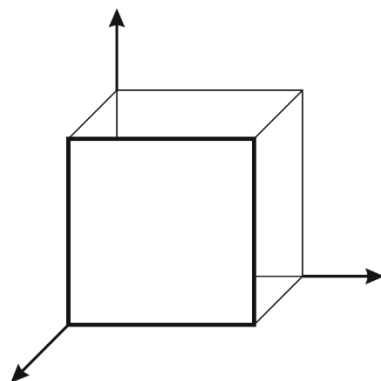


T.K.K., mint romboédes

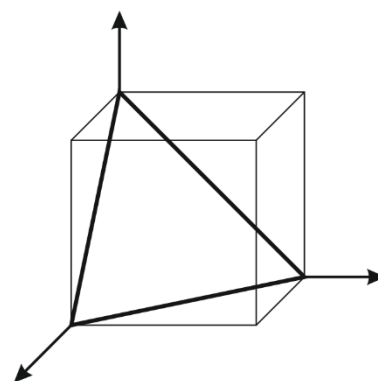




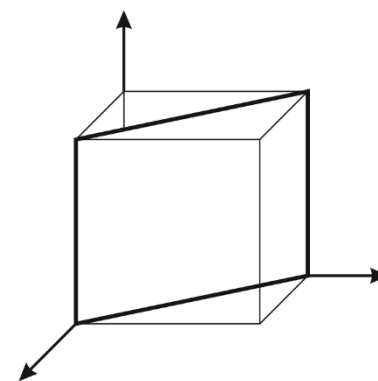
- Pontok
- Irányok
- Síkok



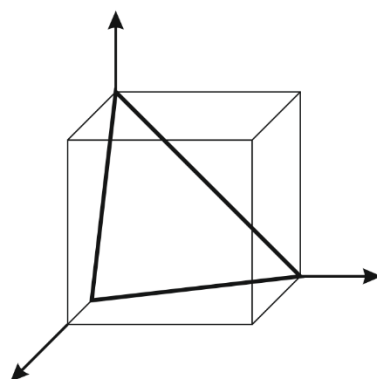
(100)



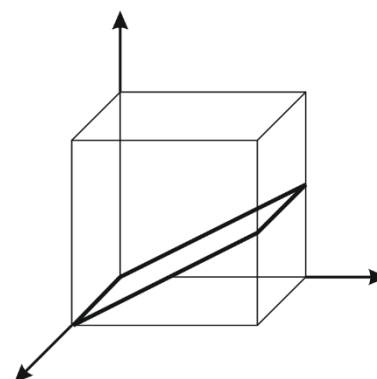
(111)



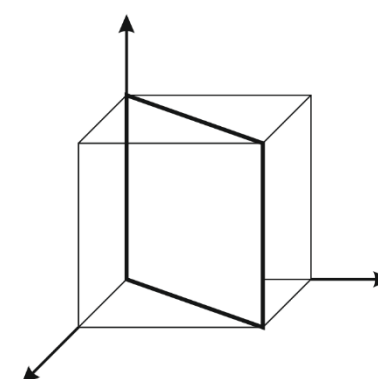
(110)



(211)

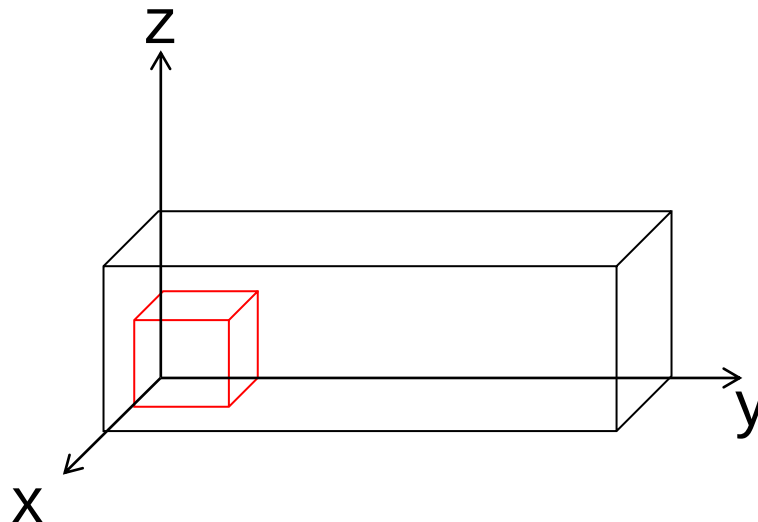


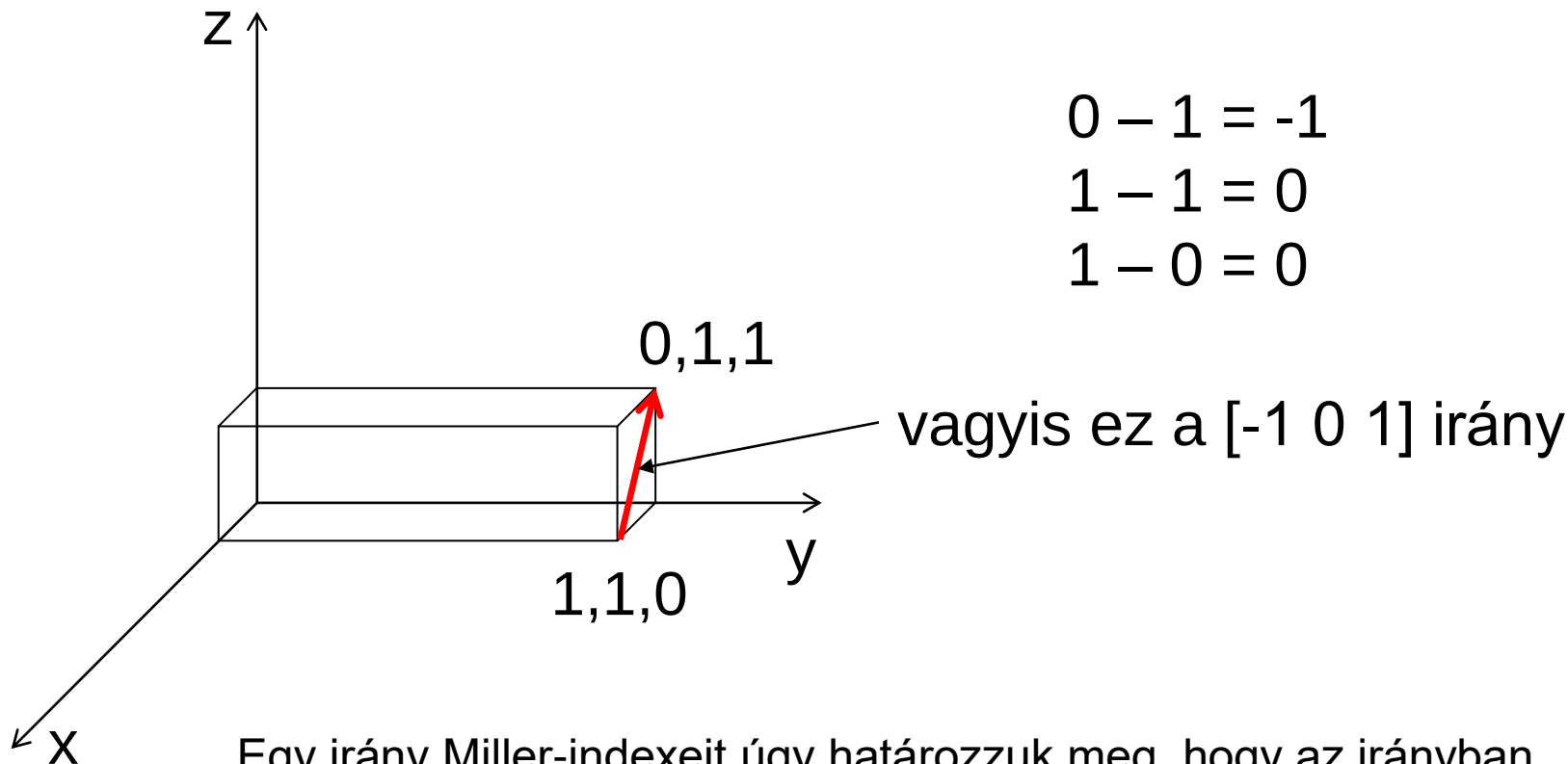
$(01\bar{2})$



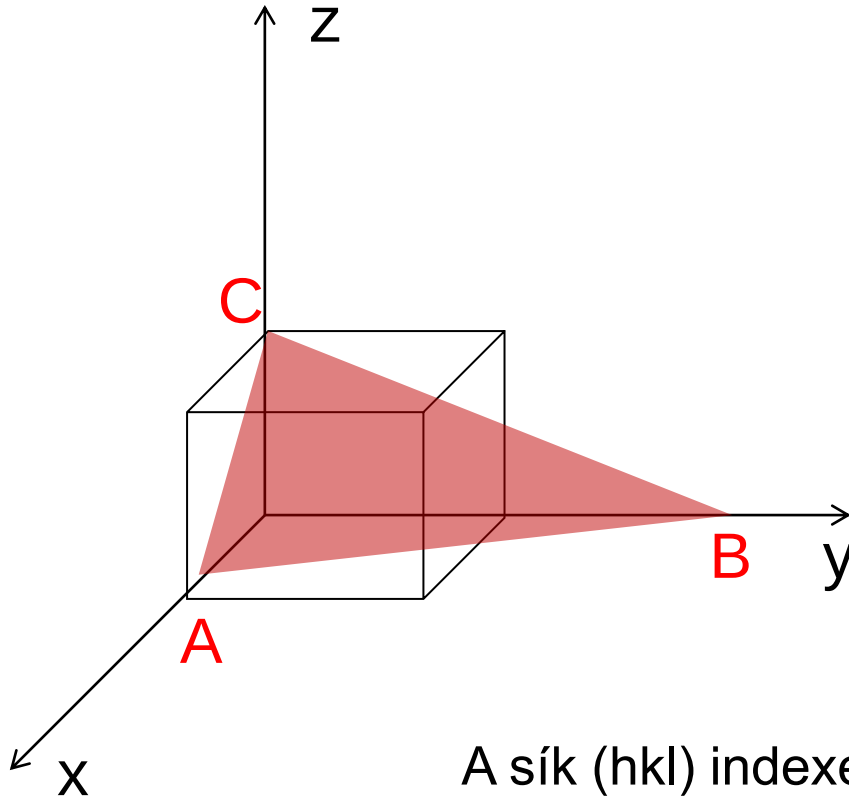
$(1\bar{1}0)$

A koordinátatengelyeket normalizáljuk, azaz minden rajtuk mért távolságot elosztjuk az adott koordinátatengelyt definiáló bázisvektor hosszával. Így dimenzió nélküli számokkal tudjuk megadni az egyes pontok koordinátáit a térben.





Egy irány Miller-indexeit úgy határozzuk meg, hogy az irányban definiálunk egy vektort, amelynek végpontjai koordinátáiból tagonként levonjuk a kiindulási pont koordinátáit.

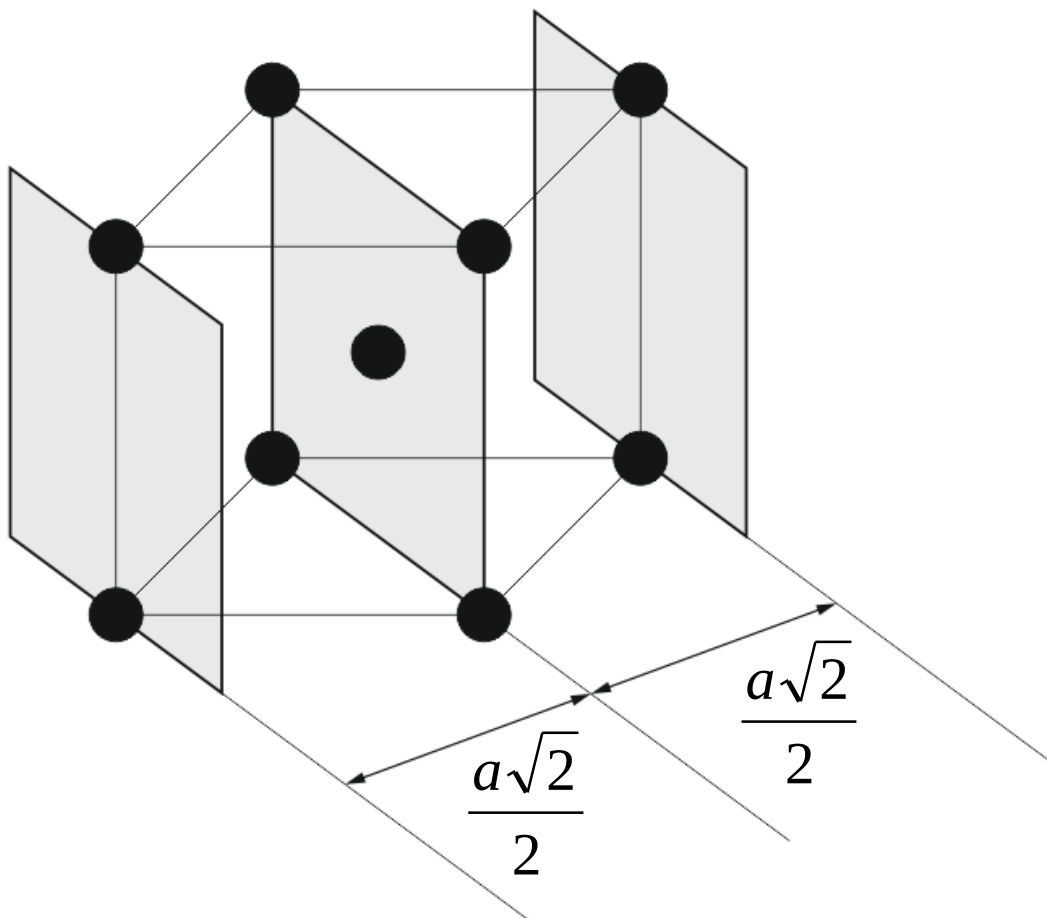


A sík tengelymetszetes egyenlete:

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

$$h' = \frac{1}{A}, k' = \frac{1}{B}, l' = \frac{1}{C}$$

A sík (hkl) indexeit úgy kapjuk meg, hogy a h', k' és l' számokat beszorozzuk egy alkalmas számmal úgy, hogy egész értéket vegyenek fel.



$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

TKK ($\bar{1}10$)

$$d_{\bar{1}10} = \frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

$$[hkl] \perp (hkl) !!!$$

Két sík által bezárt szög:

mivel $(h_1k_1l_1) \perp [h_1k_1l_1]$ és $(h_2k_2l_2) \perp [h_2k_2l_2]$,

Valamint:

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = |\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2| \cos \varphi$$

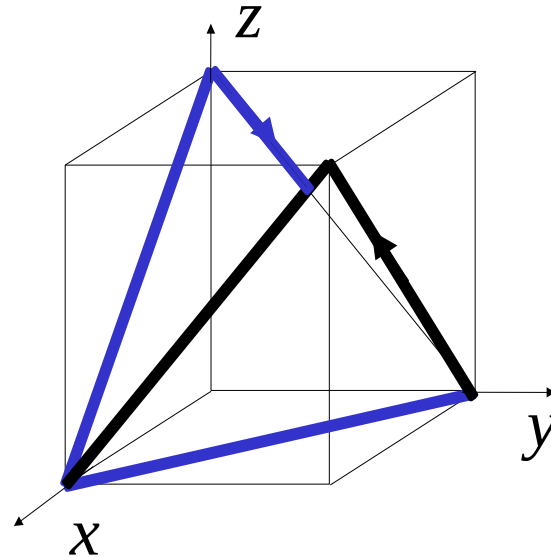
$$\cos \varphi = \frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{|\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2|} = \frac{h_1 \cdot h_2 + k_1 \cdot k_2 + l_1 \cdot l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

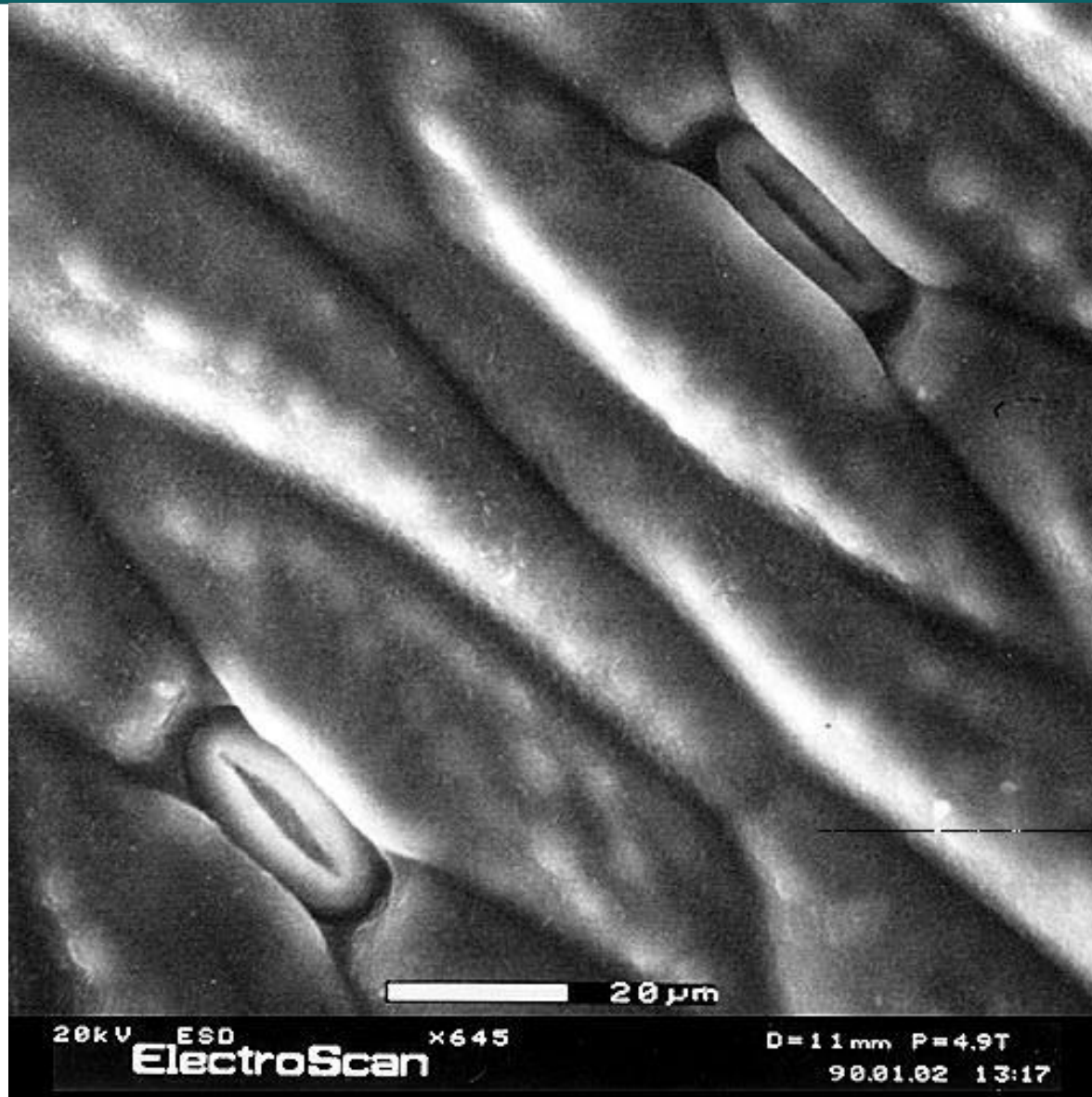
Benne fekszik-e egy FKK rácsban az $[1\ 4\ 8]$ irány a $(0\ -2\ 1)$ síkban?

Két sík metszésvonala a síkok normálisainak vektoriális szorzata:

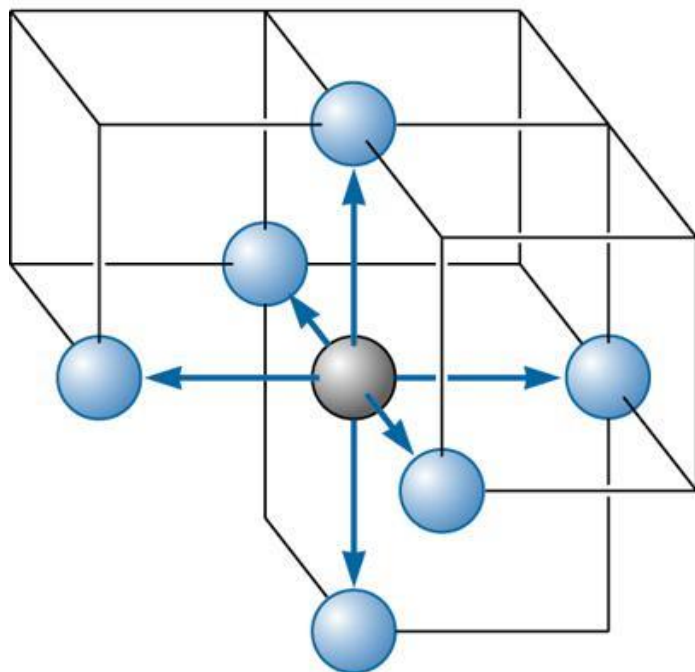
$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} = \vec{i}(k_1 l_2 - l_1 k_2) - \vec{j}(h_1 l_2 - l_1 h_2) + \vec{k}(h_1 k_2 - k_1 h_2)$$

Határozzuk meg az ábrán látható két sík metszésvonalát!



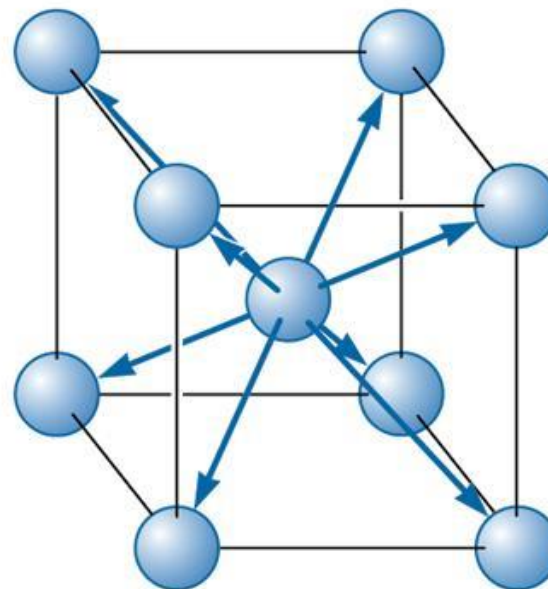


- koordinációs szám
- atomok száma az elemi cellában
- atomátmérő (rácsállandó)
- térkitöltési tényező (APF)
- legnagyobb rácshézag (nagyság, hely)
- legszorosabb illeszkedésű irány, sík
- síkbeli kitöltési tényező (PD)
- iránymenti kitöltési tényező (LD)



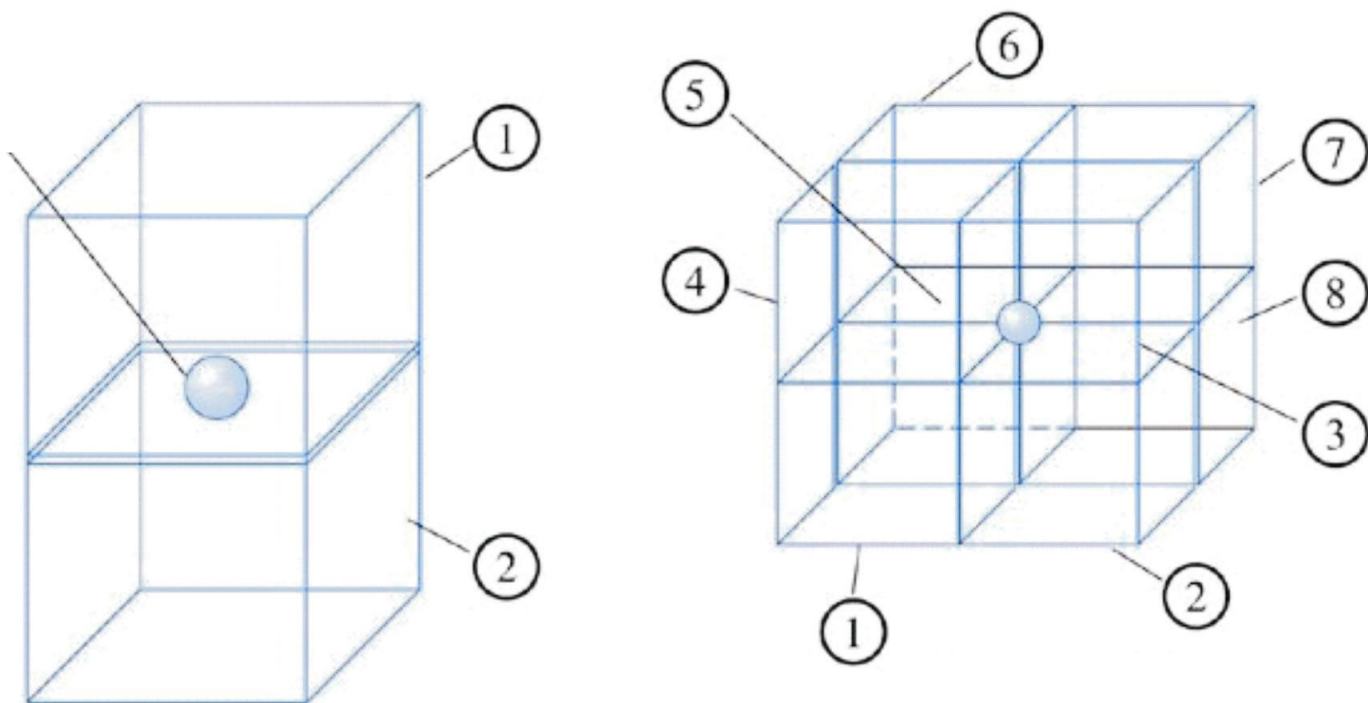
(a)

Primitív köbös

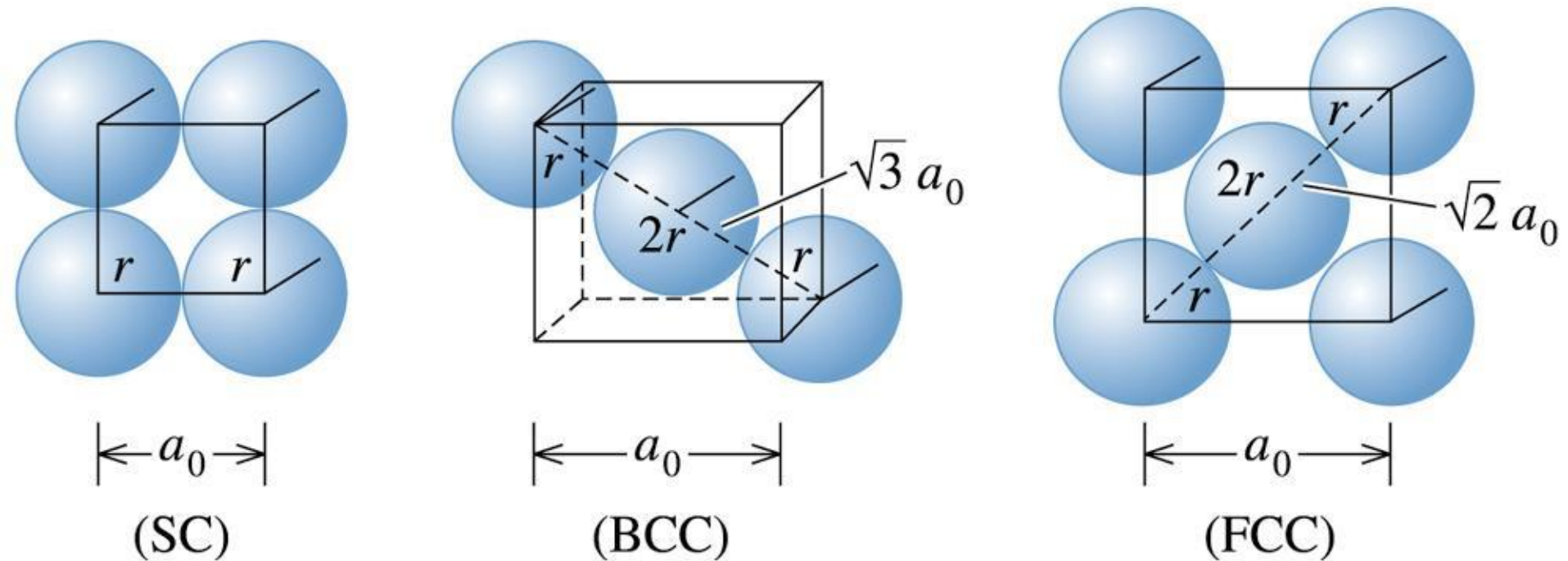


(b)

Térben középpontos köbös



- A vas (Fe) relatív atomtömege 55,847, rácsállandója szobahőmérsékleten $a=0,2866$ nm. Mennyi a sűrűsége?



(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

SC = Simple Cubic = primitív köbös

BCC = Body Centered Cubic = térben középpontos köbös

FCC = Face Centered Cubic = felületen középpontos köbös

- Egy tiszta fém T hőmérséklet alatt tkk, felette fkk szerkezetű. Mekkora az allotróp átalakulás okozta térfogatváltozás, ha a legközelebbi szomszédok távolsága állandónak tekinthető?

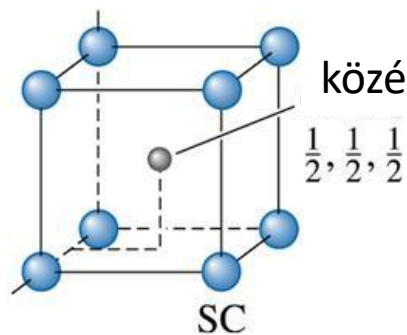
TT = atomok össztérfogata / cella térfogata

a = rácsállandó = elemi cella élhosszúsága

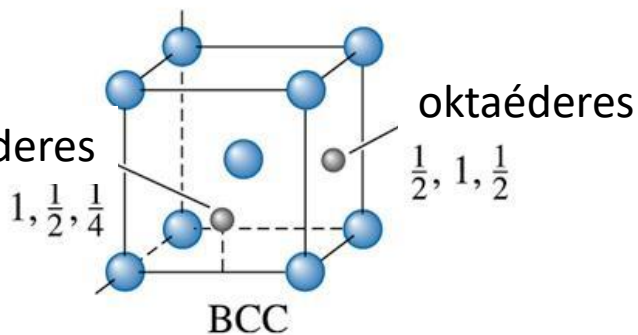
d = atomátmérő

Pl. TKK $\rightarrow$ 2 atom a cellában

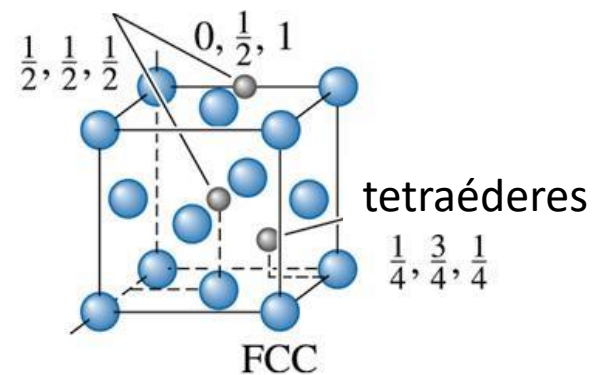
$$TT = \frac{2 \left(\frac{d^3 \pi}{6} \right)}{a^3} = \frac{\left(\frac{a\sqrt{3}}{2} \right)^3 \pi}{3a^3} = \frac{a^3 \pi \sqrt{3}}{8a^3} = \frac{\pi \sqrt{3}}{8} \approx 0.68$$



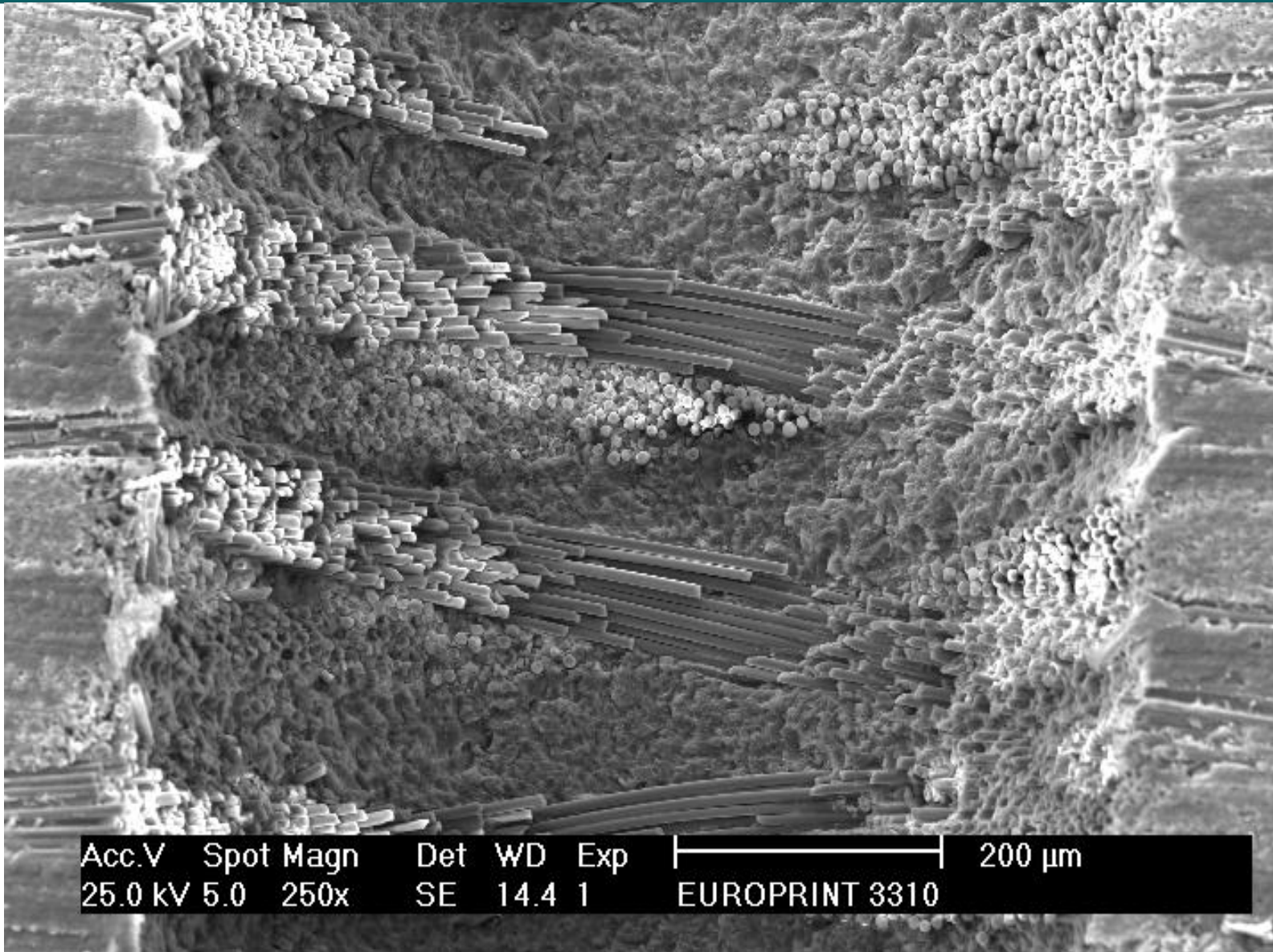
tetraéderes

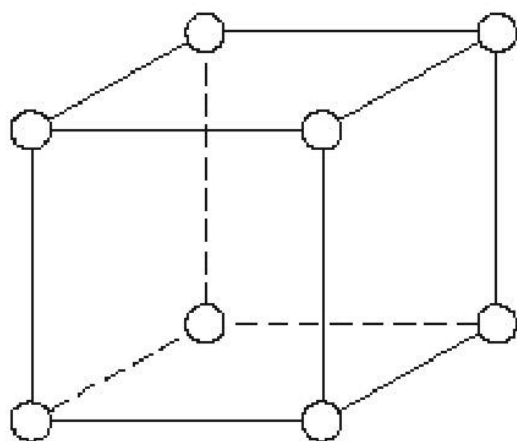
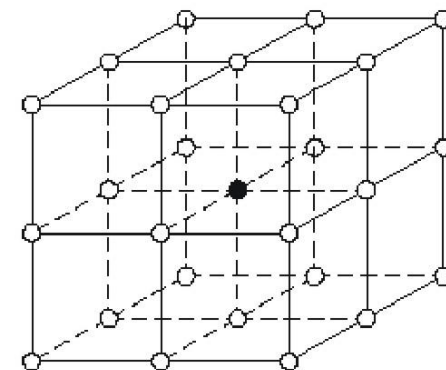


oktaéderes



(c) 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

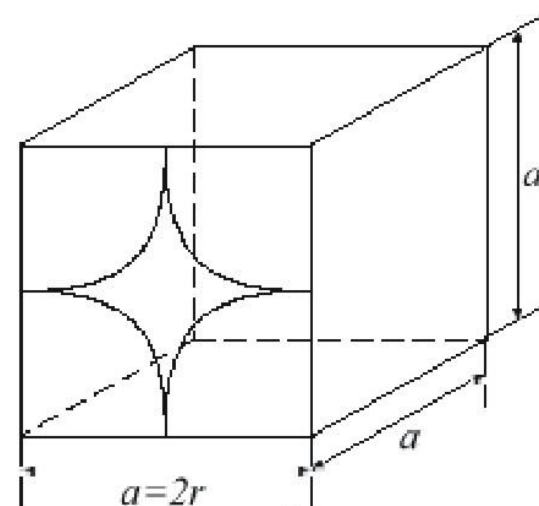




a)

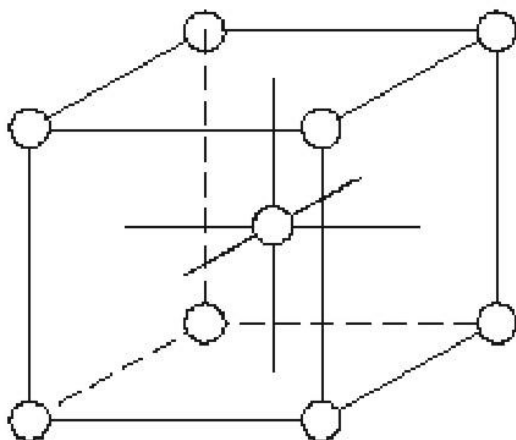


b)

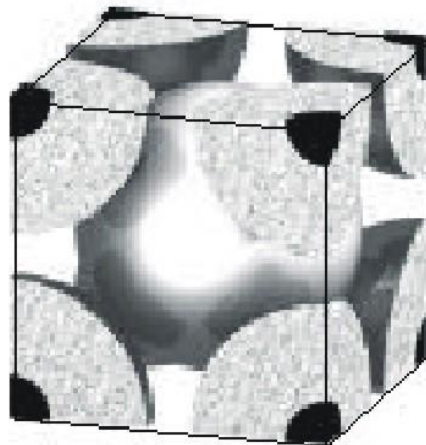


c)

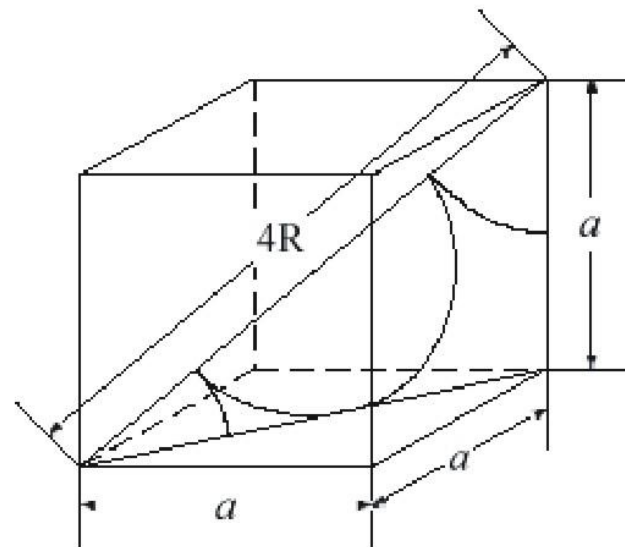
Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
PK	Po	6	a	1	0,52	$0,73 a$ középen	$\{100\}$ $\langle 100 \rangle$



a)



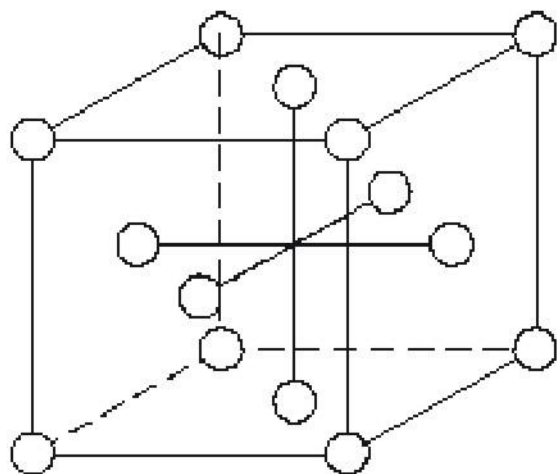
b)



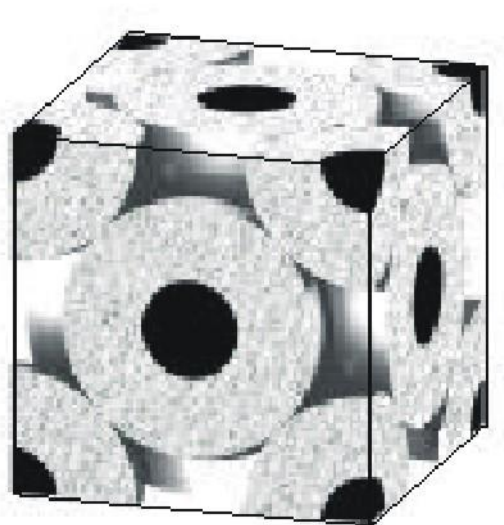
c)

Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
TKK	Na, K, Cr, Mo, W, β Ti, α Fe	8	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	2	0,68	0,252 a $\frac{1}{2} \frac{1}{4} 0$	{ 1 1 0 } < 1 1 1 >

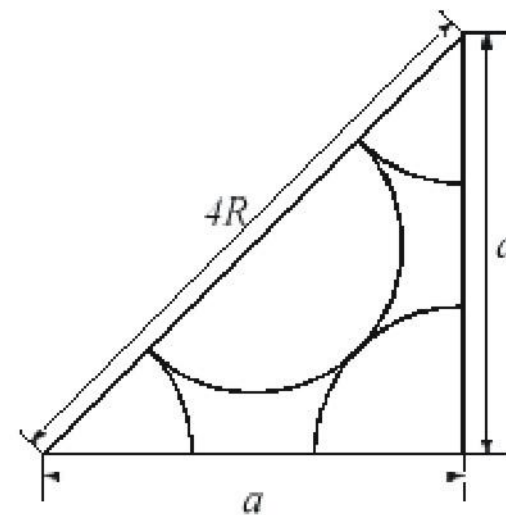
Kismértékű alakíthatóság, oxidációs hajlam,
gyenge vezetőképeség, rideg-képlékeny átmenet



a)



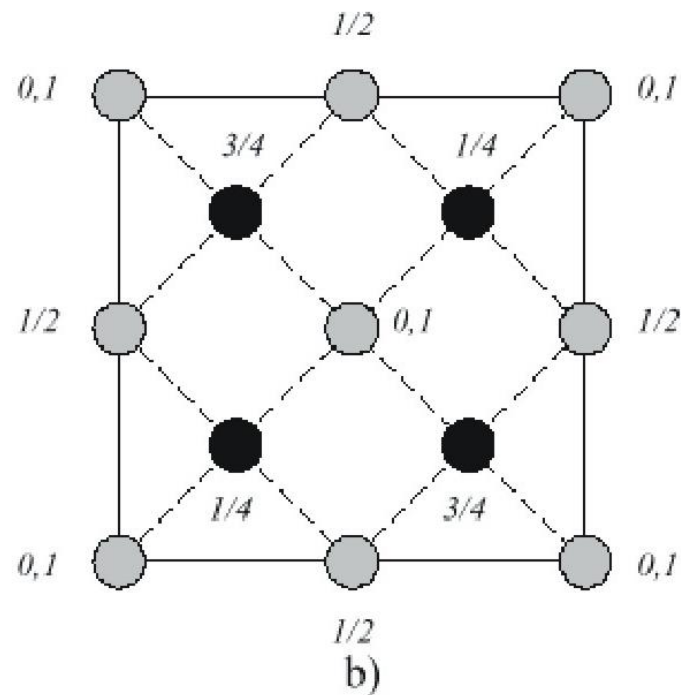
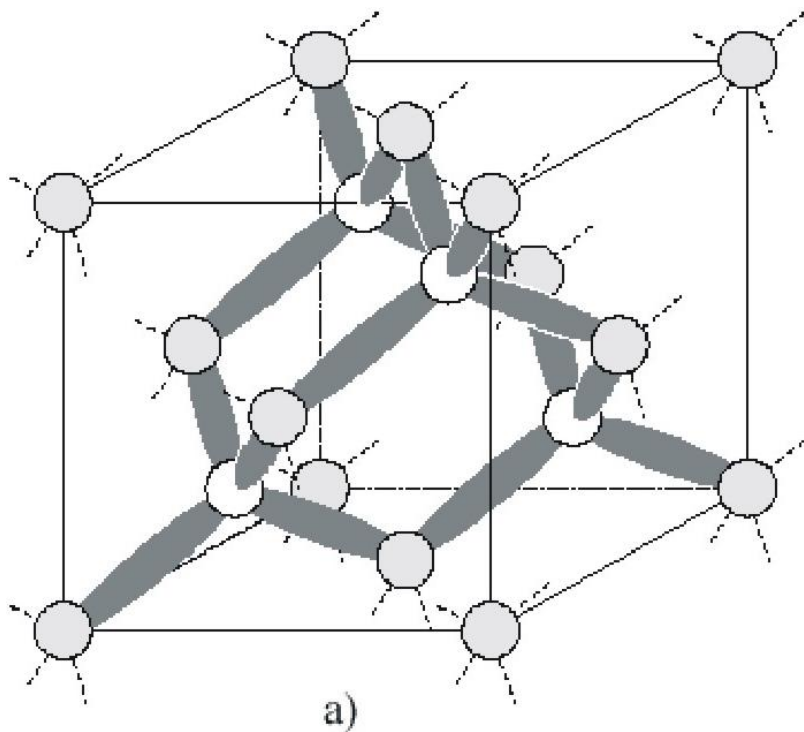
b)



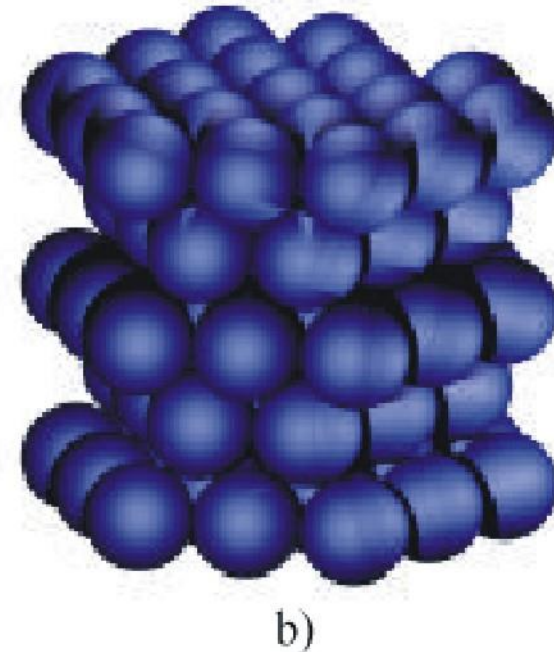
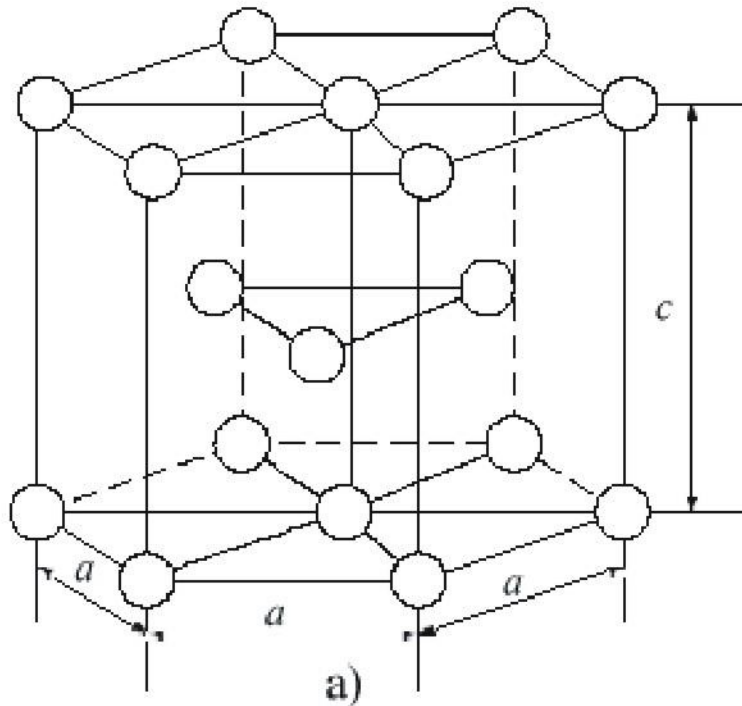
c)

Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
FKK	Cu, Au, Ag, Pb, Ni, Pt, γ Fe	12	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$	4	0,74 Maximális!	0,293 a $\frac{1}{2} 0 0$ % % %	{ 1 1 1 } < 1 1 0 >

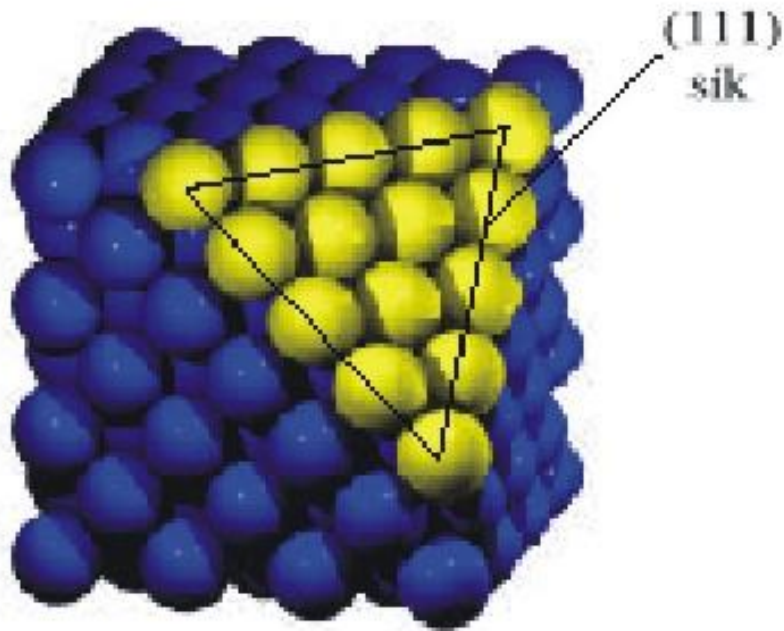
Jól alakítható, kémiaailag stabil, jó hő- és elektromos vezető



Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legszorosabb illeszkedések
Gyémánt	C, Si, Ge, α Sn	4	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	8	0,34	{111} <110> Nem érintik egymást!

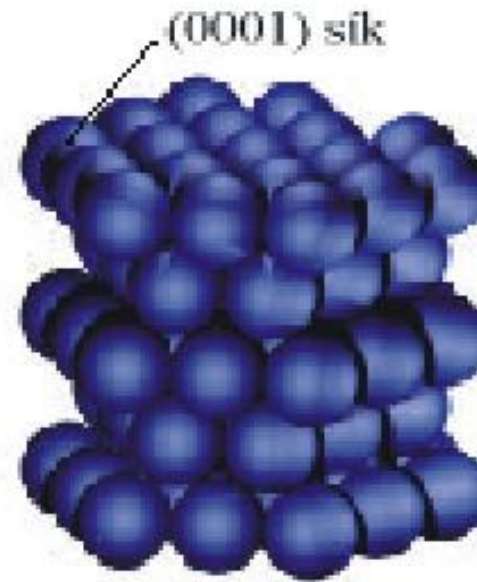


Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő				
LIH	Be, Mg, Zn, Cd, α Ti	12	$c/a=1,63$	6	0,74 Maximális!	0,235 a	{0001} <1120>



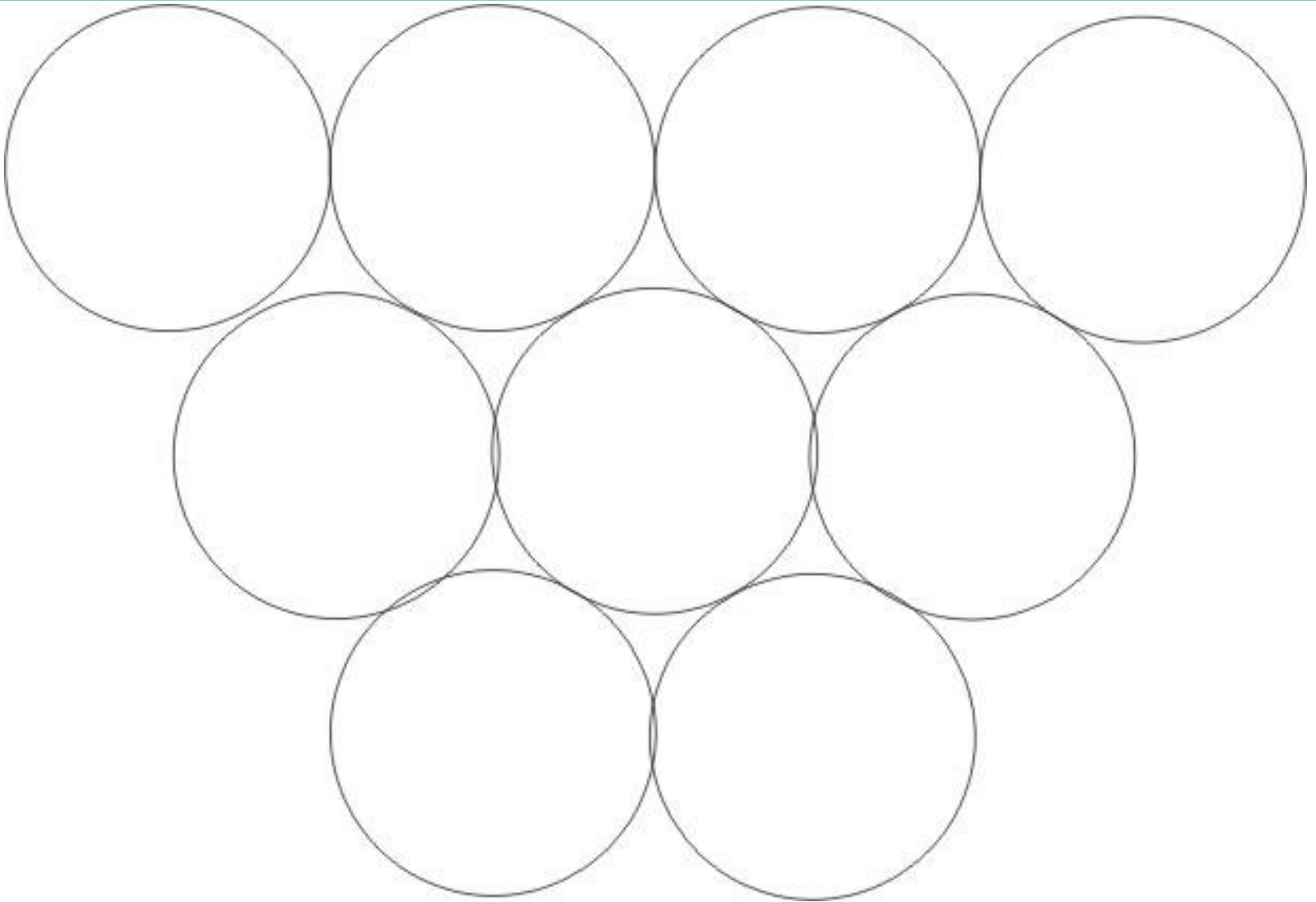
(a)

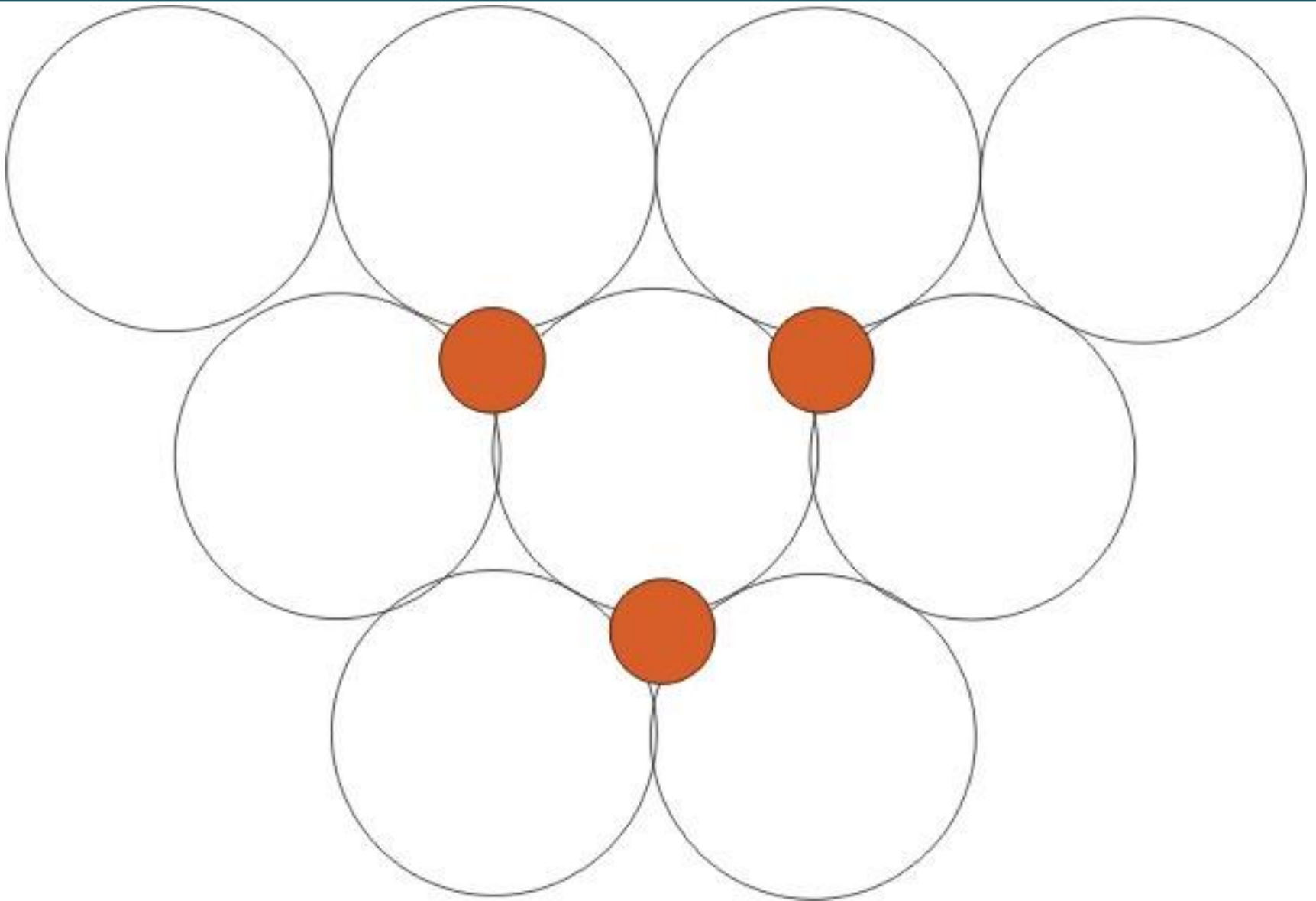
ABCABC

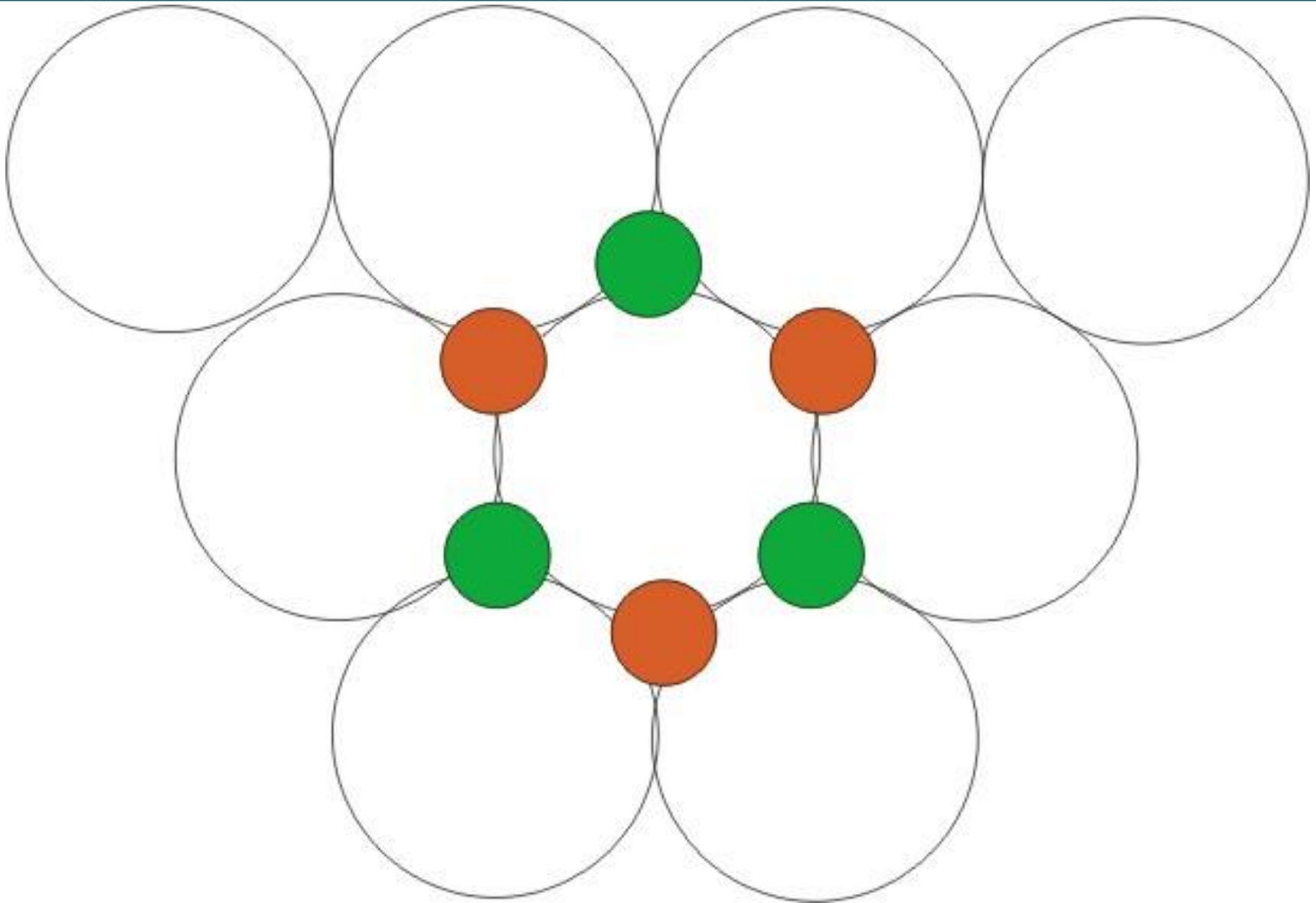


(b)

ABABAB







William D. Callister, Jr.

Materials Science and Engineering

An Introduction, 7th edition, 2006

Chapter 3

The Structure of Crystalline Solids

38-61 pp.