Anyagtudomány és Technológia Tanszék

Kristálytan

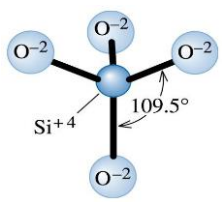
Dr. Szabó Péter János
szpj@eik.bme.hu

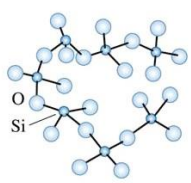
Anyagszerkezettan és anyagvizsgálat
BMEGEMTBGA1

1

Az atomok elrendeződése

- Rövid távú rend (amorf anyagok)

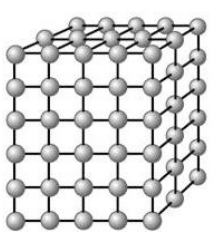




2

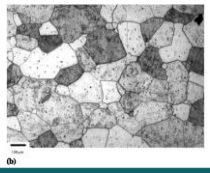
Az atomok elrendeződése

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



3

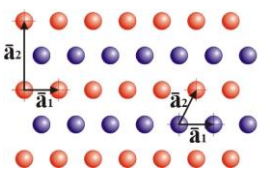
Kristályok



4

4

Transzláció



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

m; n: egész

$\bar{r}$: transzlációs vektor

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

5

5

Kristályrács

- 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.

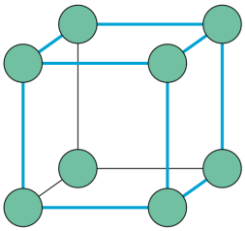
Az összes rács besorolható a hét primitív rácstípus egyikébe.

6

6

Köbös rács

- $a_1=a_2=a_3$
- $\alpha=\beta=\gamma=90°$
- Po

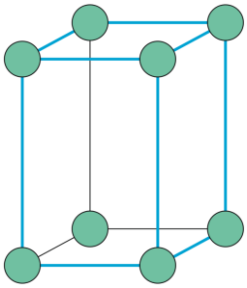


7

7

Tetragonális rács

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

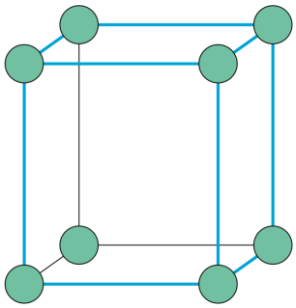


8

8

Ortorombos rács

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

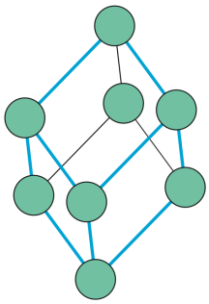


9

9

Romboéderes rács

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

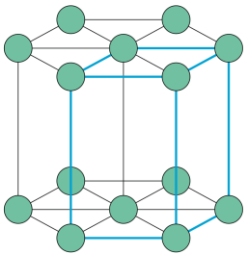


10

10

Hexagonális rács

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

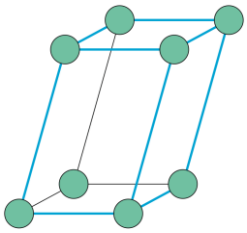


11

11

Monoklin rács

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

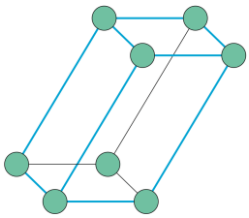


12

12

Triklin rács

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



13

13

Bravais-rácsok

Köbös	P		T		F		
Tetragonális	P		T				
Ortorombos	P		T		F		O
Hexagonális	P		**Romboéderes**	P			
Monoklin	P		O				
Triklin	P						

P – egyszerű
T – térben középpontos
F – felületen középpontos
O – oldallapon középpontos

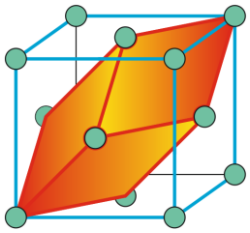
p.k., t.k.k., f.k.k.

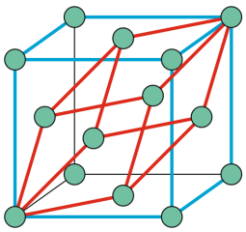
14

14

Egyszerű és összetett rács

F.K.K., mint romboéderes



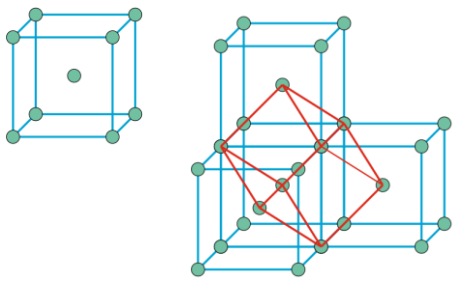


15

15

Egyszerű és összetett rács

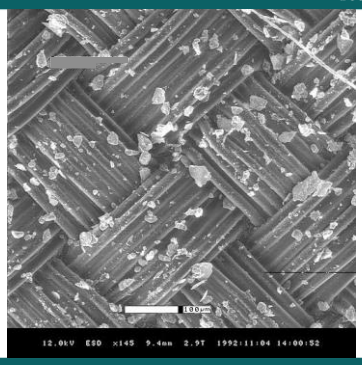
T.K.K., mint romboéderes



16

16

Kérdés

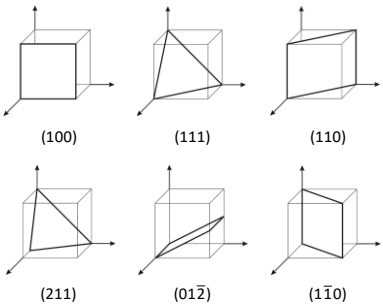


17

17

Miller-indexek

- Pontok
- Irányok
- Síkok

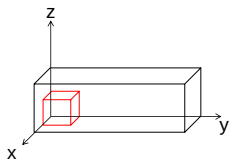


18

18

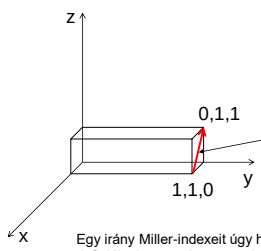
Miller-indexek

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.



19

Irányok Miller-indexei



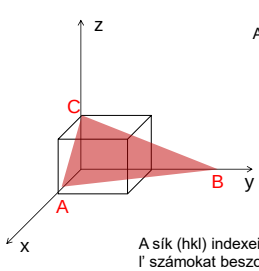
0 – 1 = -1
1 – 1 = 0
1 – 0 = 0

vagyis ez a [-1 0 1] irány

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

20

Síkok Miller-indexei



A sík tengelymetszetes egyenlete:

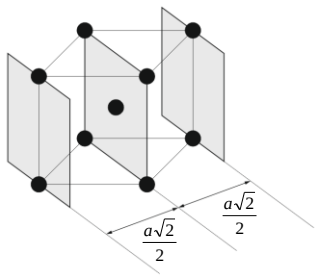
$$\frac{x}{A}+\frac{y}{B}+\frac{z}{C}=1$$

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

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

21

Rácssíkok közötti távolság



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

$$TKK\ (\bar{1}10)$$

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

22

22

Köbös rácsokra

[hkl] ⊥ (hkl) !!!

23

23

Síkok szöge köbös rendszerben

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:

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

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

24

24

Példa

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

25

25

Síkok metszésvonala köbös rendszerben

Két sík metszésvonala a síkok normálisainak vektoriális szorzata:

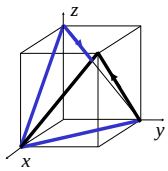
$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} = \vec{i}\,(k_1 l_2 - l_1 k_2) - \vec{j}\,(h_1 l_2 - l_1 h_2) + \vec{k}\,(h_1 k_2 - k_1 h_2)$$

26

26

Példa

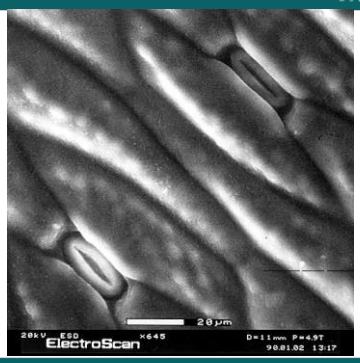
Határozzuk meg az ábrán látható két sík metszésvonalát!



27

27

Kérdés



28

28

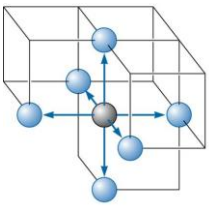
Kristálytani adatok

- 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)

29

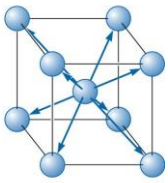
29

Koordinációs szám, PK, TKK



(a)

Primitív köbös



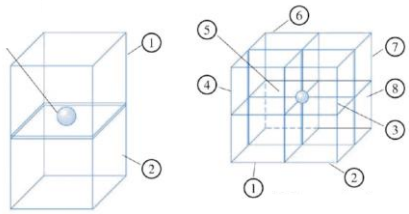
(b)

Térben középpontos köbös

30

30

Atomok száma az elemi cellában



31

31

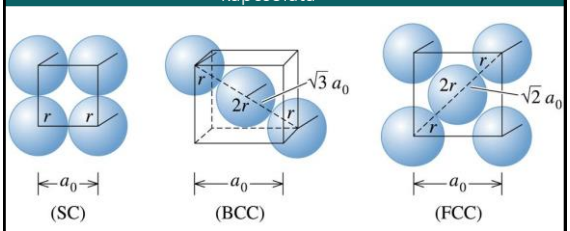
Példa

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

32

32

Atomátmérő és rácsállandó kapcsolata



(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

33

33

Példa

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

34

34

Térkitöltési tényező

TT = atomok össztérfogata / cella térfogata
a = rácsállandó = elemi cella élhosszúsága
d = atomátmérő

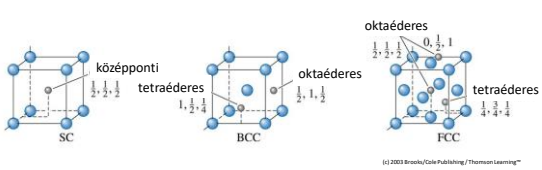
Pl. TKK → 2 atom a cellában

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

35

35

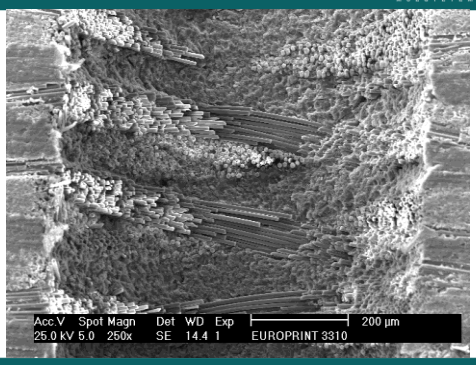
Legnagyobb rácshézag



36

36

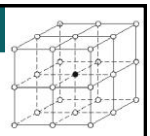
Kérdés

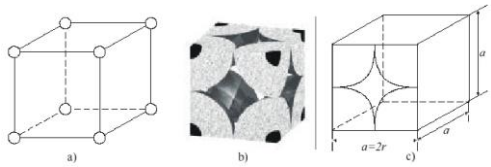


37

37

Primitív köbös



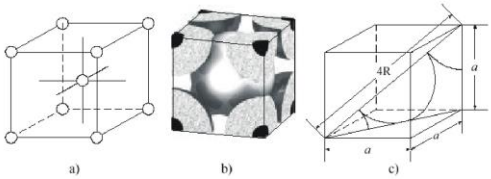


Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
PK	Po	6	a	1	0,52	0,73 a középen	{100} <100>

38

38

Térben középpontos köbös



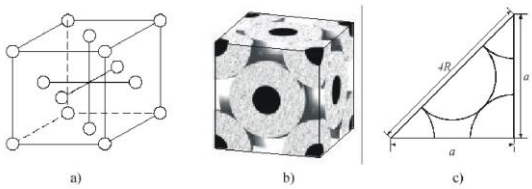
Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
TKK	Na, K, Cr, Mo, W, βTi, αFe	8	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	2	0,68	0,252 a ½ ¼ 0	, , , , , , , , , , , ,

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

39

39

Felületen középpontos köbös



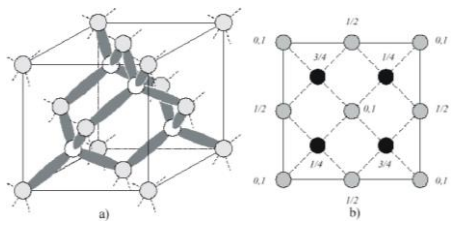
Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legnagyobb üres rácshely	Legszorosabb illeszkedések
FKK	Cu, Au, Ag, Pb, Ni, Pt, γFe	12	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$	4	0,74 Maximális!	0,293 a ½ 0 0	{111} <110>

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

40

40

Gyémántrács (szfalerit, wurzit)

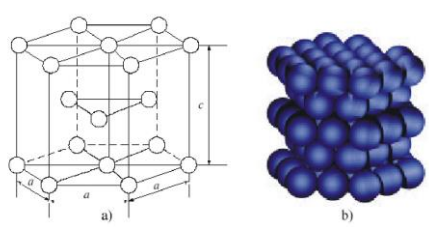


Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő	Atomok száma	Térkitöltés	Legszorosabb illeszkedések
Gyémánt	C, Si, Ge, αSn	4	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	8	0,34	{111} <110> Nem érintik egymást!

41

41

Legsúrűbb illeszkedésű hexagonális rács

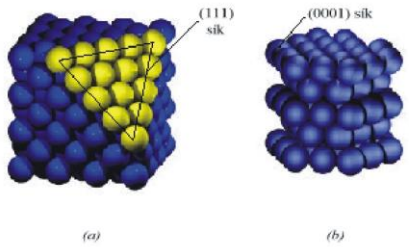


Rácstípus	Fémek	Koord. szám	Atomátmérő				
LIH	Be, Mg, Zn, Cd, αTi	12	c/a=1,63	6	0,74 Maximális!	0,235 a	{0001} <11$\bar{2}$0>

42

42

FKK és legsűrűbb illeszkedésű hexagonális rács összehasonlítása

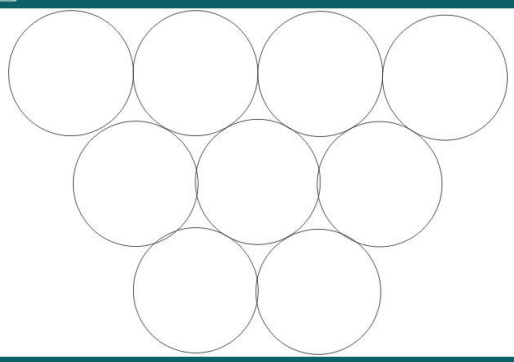


ABCABC ABABAB

43

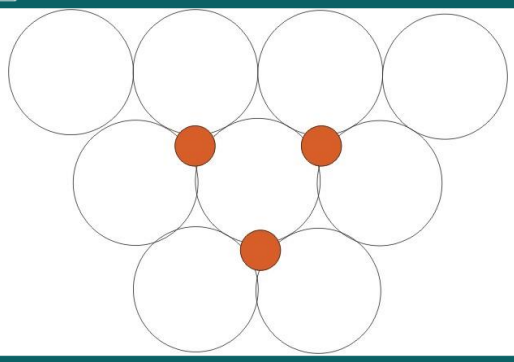
43

Rétegződés



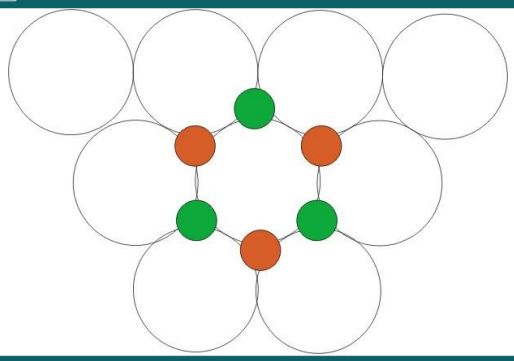
44

Rétegződés



45

Rétegződés



46

Angol nyelvű irodalom

William D. Callister, Jr.

Materials Science and Engineering
An Introduction, 7th edition, 2006

Chapter 3
The Structure of Crystalline Solids
38-61 pp.

47

47