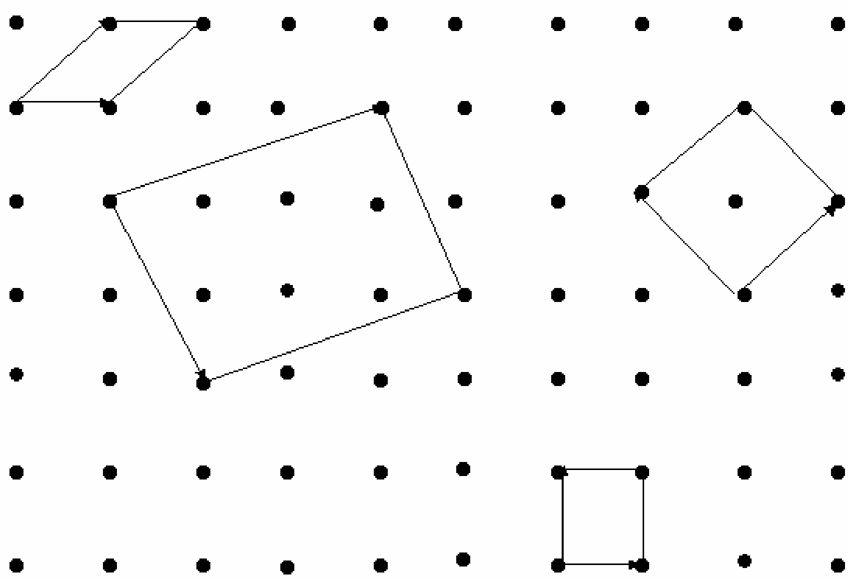
Ideális kristályszerkezet 2003. február 27.

Térrács fogalma:

Kiterjedés nélküli pontok szabályos rendje a térben.



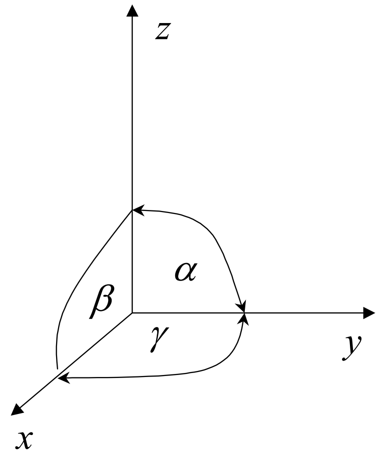
Elemi cella: a térrács azon legkisebb egysége, amely az adott szerkezet valamennyi geometriai törvényszerűségét magán hordozza.

Primitív cella: csak a sarokpontjain tartalmaz rácspontot.

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + n_i\mathbf{a}_1 + n_j\mathbf{a}_2 + n_k\mathbf{a}_3$$

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ -primitív transzlációs vektorok, $\mathbf{r}_0$ – a térrács egy adott pontja, $\mathbf{r}$ – a térrács tetszőleges pontja.

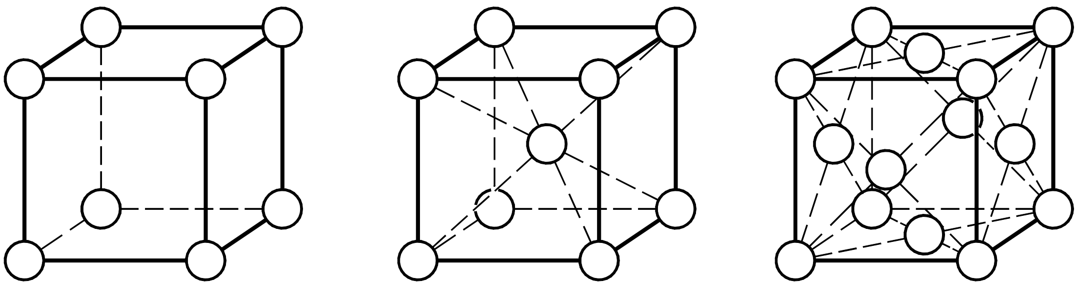
7-féle térrács, 7-féle kristályrendszer létezik.



Kristályrendszer megnevezése	A tengelyeken mért távolságok a_1, a_2, a_3	A tengelyek által bezárt szögek α, β, γ
Köbös	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonális	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonális	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$
Ortorombos	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Romboéderes	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Monoklin	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Triklin	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

A változatokkal együtt 14 féle Bravais rács van.

Szabályos (köbös) rendszer



a) egyszerű köbös

b) térben középpontos köbös (t.k.k)

c) felületen középpontos köbös (f.k.k)

Egyszerű köbös kristályra (az atomok az oldalél közepén érintkeznek)

Atomsugár és az elemi cellához tartozó atomok száma:

$$a = 2r$$

$$N = \frac{8}{8} = 1$$

Térkitöltési tényező

$$T^V = \frac{V_a}{V_c} = \frac{\text{az elemi cellához tartozó atomok térfogata}}{\text{az elemi cella térfogata}}$$

$$V_a = N\frac{4r^3\pi}{3},\ V_c = a^3,\ r = \frac{a}{2}$$

$$T^V = \frac{1*4r^3\pi}{3\cdot 8r^3} = \frac{\pi}{6}$$

Síkkitöltési tényező:

$$T^s = \frac{A_a}{A} = \frac{\text{a síkelem atomok által elfoglalt területe}}{\text{az elemi cellához tartozó síkelem területe}}$$

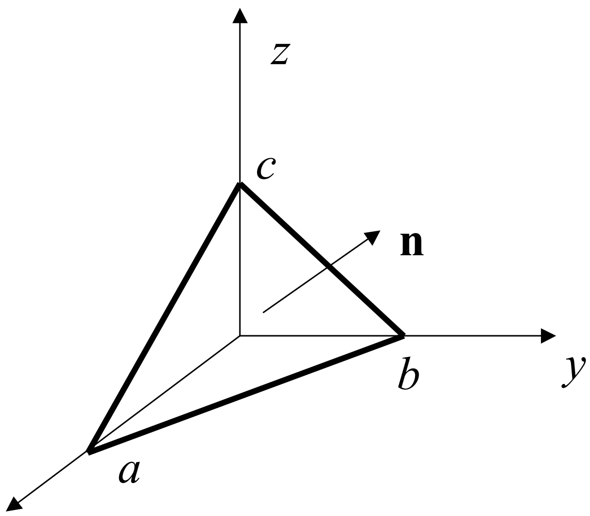
$$A_a = 4*r^2\pi/4 = r^2\pi$$
$$A = a^2$$
$$T^S = \frac{r^2\pi}{4r^2} = \frac{\pi}{4}$$

Vonalkitöltési tényező:

$$T^L = \frac{L_a}{L} = \frac{\textit{az atomok által elfoglalt vonalhossz}}{\textit{vonalszakasz hossza}}$$

Koordinációs szám (K): tetszőleges atomtól egyenlő távolságra lévő legközelebbi szomszédok száma, adott esetben ez 6.

Síkok és irányok a rácsban



Sík megadása

$$(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\mathbf{n} = 0$$

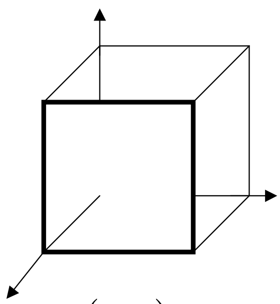
Tengelymetszékes formában felírva $\frac{x}{a}+\frac{y}{b}+\frac{z}{c}=1$

Ebből kiindulva William H. Miller 1839-ben javasolta a Miller-indexek alkalmazását:

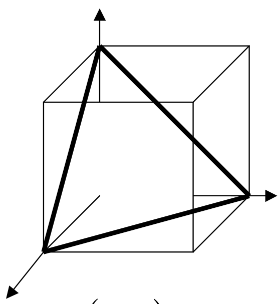
1. A síkot, ha kell párhuzamos eltolással, olyan helyzetbe hozzuk, hogy ne menjen át a koordináta rendszer origóján.
2. A síkok tengelymetszeteinek meghatározása, ezek rendre a, b, c
3. $h' = \frac{1}{a},\ k' = \frac{1}{b},\ l' = \frac{1}{c}$ kiszámítása, ezek a mennyiségek általában tört értékek
4. Megfelelően választott egész számmal szorozva, az indexekre tovább nem egyszerűsíthető egész számok adódnak: $h = qh', k = qk', l = ql'$, amiket Miller indexeknek nevezünk (h,k,l).

A Miller index nem egy síkra, hanem egymással párhuzamos síkseregre vonatkozik. A negatív jel megadása a szám fölött történik $(h\bar{k}l)$. Fontos: $(hkl) = -1*(hkl)$.

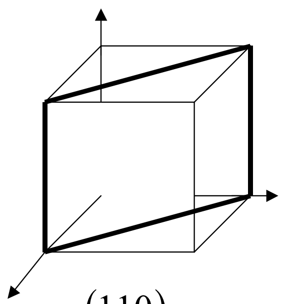
Néhány példa a Miller indexekre köbös rendszerben:



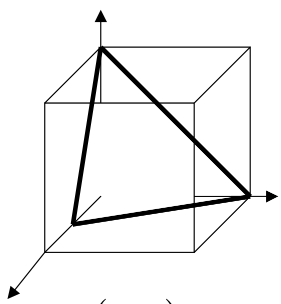
(100)



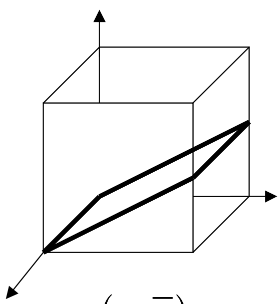
(111)



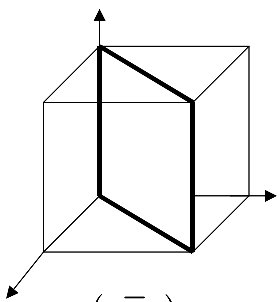
(110)



(211)



$(01\bar{2})$



$(1\bar{1}0)$

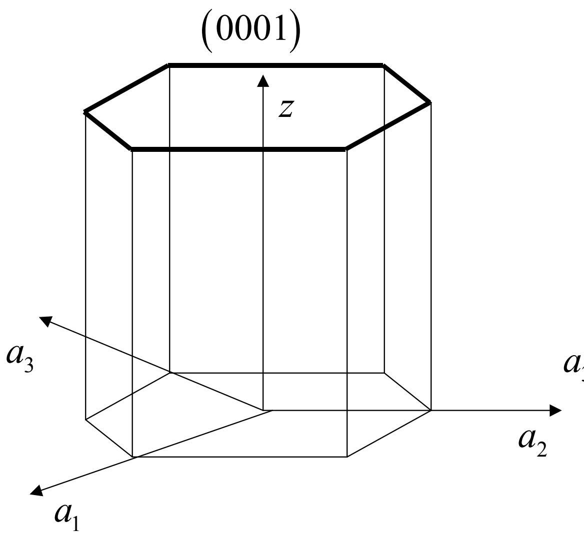
Kristálytanilag egyenértékű síksereg család jelölése: $\{hkl\}$

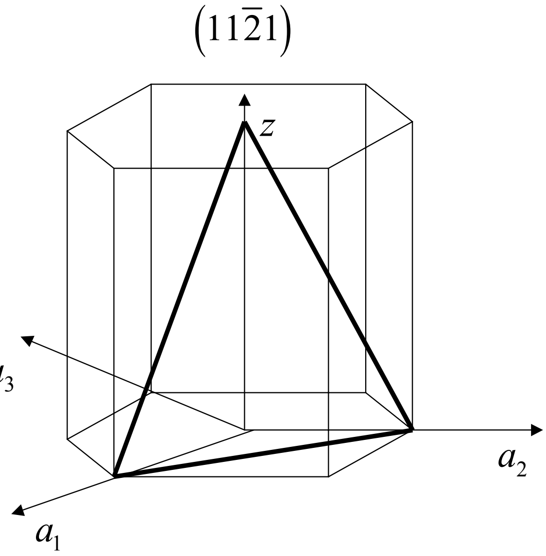
$$\{100\} = (100) + (010) + (001)$$

Miller indexek a hexagonális rácsban

Elegendő lenne három index, de általános a négy tengely használata, emiatt egy újabb index bevezetésére volt szükség, ami azonban nem független a többitől

$$h + k = -i$$





Kristálytani irányok jelölése

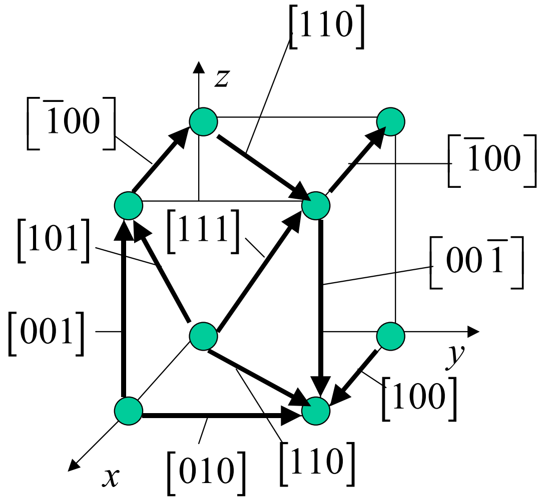
1. Az adott irányt jelölő vektort önmagával párhuzamosan úgy toljuk el, hogy végpontja a koordináta-rendszer origójába essen.
2. Az irányvektor komponenseit úgy állapítjuk meg, hogy a keletkezett számhármas a legkisebb egész számokból álljon.
3. Az irány Miller indexei ezek alapján $[uvw]$

Az irányok meghatározásakor is használjuk a negatív számot, amelyet ezúttal is a szám fölé írunk: $[u\bar{v}w]$

Az irányok Miller indexei sem csak egy konkrét irányra, hanem egymással párhuzamos irányok összességére vonatkoznak, ezek kristálytanilag egyenértékűek. Az összes egyenértékű irány sereg megadására egyezményes jelként hegyes zárójeleket alkalmazunk: $\langle uvw \rangle$.

Például: $\langle 100 \rangle = [100] + [010] + [001] + [\bar{1}00] + [0\bar{1}0] + [00\bar{1}]$

Irányok a köbös rendszerben

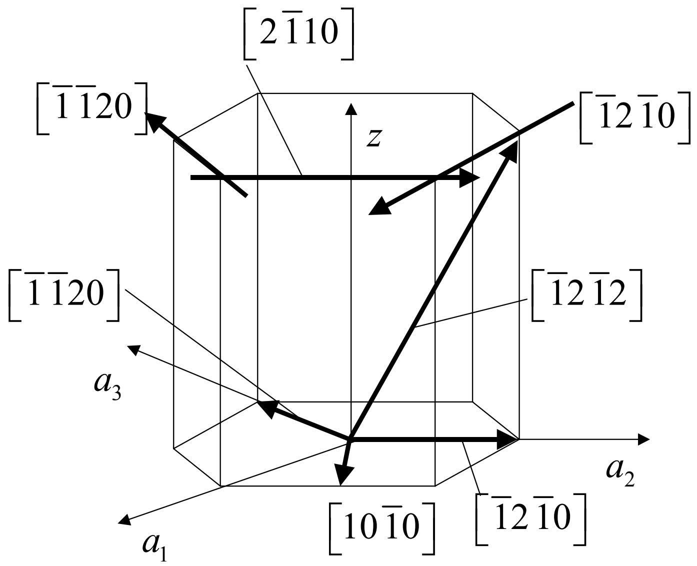


Irányok a hexagonális rendszerben

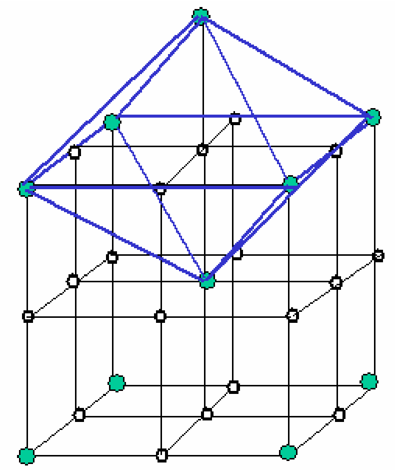
4 tengely használata esetében 4 indexes irányindex használható $[UVTW]$, $U+V=-T$, a kapcsolat a különböző megadási módok között:

$$u = U - T,\ v = V - T,\ w = W$$

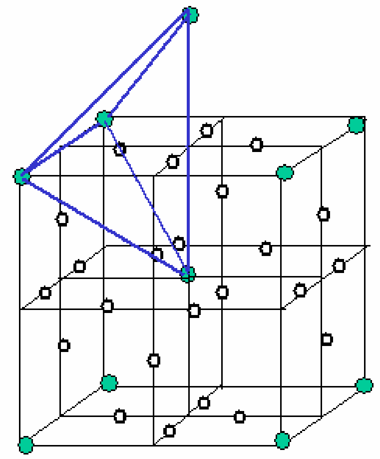
$$U = q\frac{2u - v}{3},\ V = q\frac{2v - u}{3}, W = qw$$



Hézagok a kristályrácsban



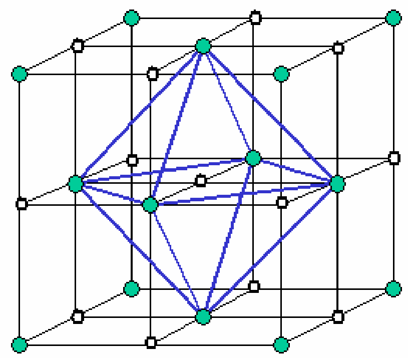
Oktaéderes rácshézagok *tkk* rácsban



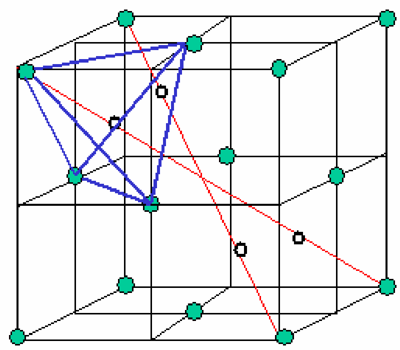
Tetraéderes rácshézagok *tkk* rácsban

Az oktaéderes rácshézagok a kocka oldallapjainak a közepén, valamint a kockaél közepén találhatók (6/2+12/4=6db)
az $\langle 100 \rangle$ irány mentén $2r + 2r_{ü} = a \rightarrow r_{ü} / r = 0.155$

Tetraéderes rácshézagok az $\{100\}$ síkokon az $1/4,\ 1/2,\ 0$ típusú pozíciókban találhatók (24/2=12 db). A $\langle 210 \rangle$ irány mentén $r_u / r = 0.291$



Oktaéderes rácshézagok *fkk* rácsban



Tetraéderes rácshézagok *fkk* rácsban

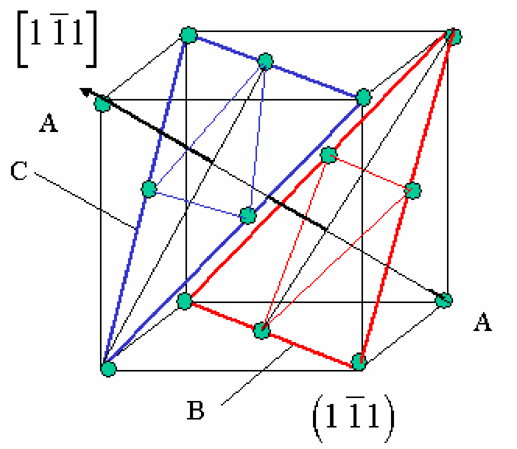
Az oktaéderes rácshézagok a kocka közepén, valamint a kockaél közepén találhatók (1+12/4=4db) az $\{100\}$ síkokban.

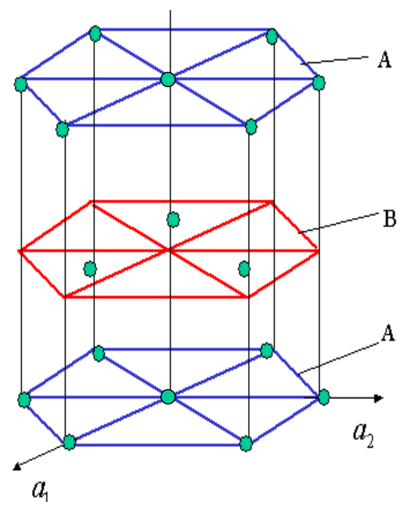
Az $\langle 100 \rangle$ irány mentén $2r + 2r_{ü} = a \rightarrow r_{ü} / r = 0.414$

Tetraéderes rácshézagok az $1/4,\ 1/4,\ 1/4$ típusú pozíciókban találhatók (8 db), $r_u / r = 0.225$

Az *atomokkal legsűrűbben rakott atomsíkok* elhelyezkedése:

Fkk rendszer esetében (ABC,ABC,ABC…)
Hexagonális rendszer esetében (AB,AB,AB…)





Egymással szomszédos kristálytani síkok távolsága:

Köbös rendszerben:

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

hexagonális rendszerben:

$$d = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}\left(h^2 + hk - k^2\right) + \left(\frac{a}{c}\right)^2 l^2}}$$

Két egymást metsző sík $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ *által bezárt szög (köbös rendszerben):*

Felhasználva azt a törvényszerűséget, hogy valamely sík normálvektorának Miller indexe megegyezik ugyanezen sík Miller indexével, a szög az alábbi összefüggéssel számítható ki:

$$\cos\varphi = \frac{\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2}{|\mathbf{n}_1||\mathbf{n}_2|} = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

Valamely kristálytani iránnyal párhuzamos síkok összességét zónának nevezzük. Legegyszerűbb a zónát nyitott könyvnek elképzelni, ahol a könyvlapok a síkok, a könyv gerince a zónatengely, ami a síkok közös metszésvonala. A zónatengely és a hozzátartozó síkok között egyszerű összefüggés áll fenn: Bármely $[uvw]$ kristálytani irány benne fekszik egy (hkl) síkban akkor, ha a zónatengely és a sík normálisának skaláris szorzata zérus.

$$hu + kv + lw = 0$$