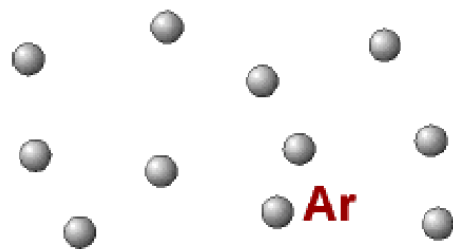


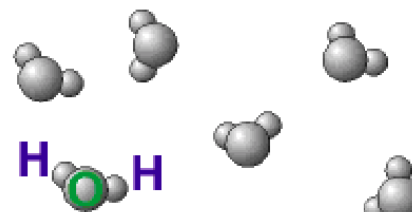
Št. leto 2012/2013

**MATERIALI IN  
TEHNOLOGIJE  
(2)**

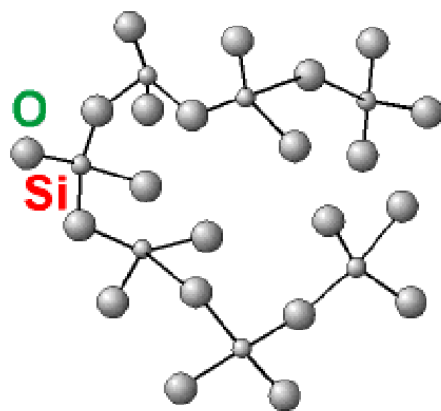
## Urejenost gradnikov v snovi



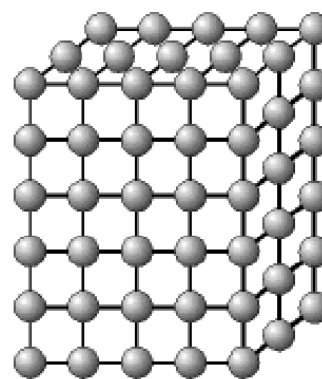
(a)



(b)



(c)



(d)

# KRISTALI IN KRISTALITI

*V kristalu so atomi, ioni ali molekule geometrijsko urejeni po povsem določeni zakonitosti.*

**Kristalografija se ukvarja zlasti s proučevanjem notranje zgradbe kristalov, in sicer:**

- **z določevanjem kristalnih struktur,**
- **z razvijanjem metod strukturne analize,**
- **in s proučevanjem raznih fizikalnih lastnosti kristalov.**

Simetrijski element opredeljuje način ponavljanja objekta v prostoru, to je **simetrijsko operacijo**.

Osnovne štiri simetrijske operacije so:

- **translacija** – vzporedno premikanje v določeni smeri, v ravnini ali trodimenzionalno.
- **refleksija** – zrcaljenje skozi ravnino,
- **rotacija** – vrtenje za določen kot okrog osi,
- **inverzija** – preslikava skozi točko,

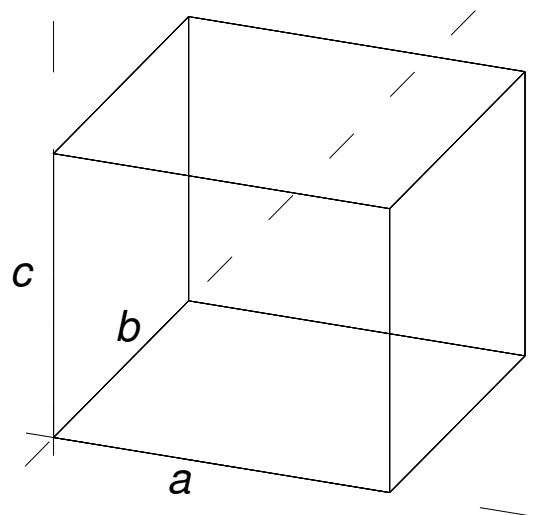
Z različnimi kombinacijami simetrijskih operacij dobimo

**32 kristalnih razredov.**

Namesto opisovanja 32 razredov v enem koordinatnem sistemu izberemo

**7 različnih koordinatnih sistemov.**

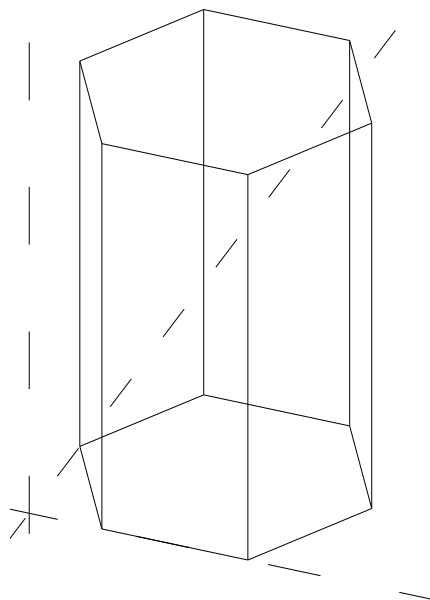
## 1. Kubični ali regularni koordinatni sistem



$$a = b = c \text{ in } \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

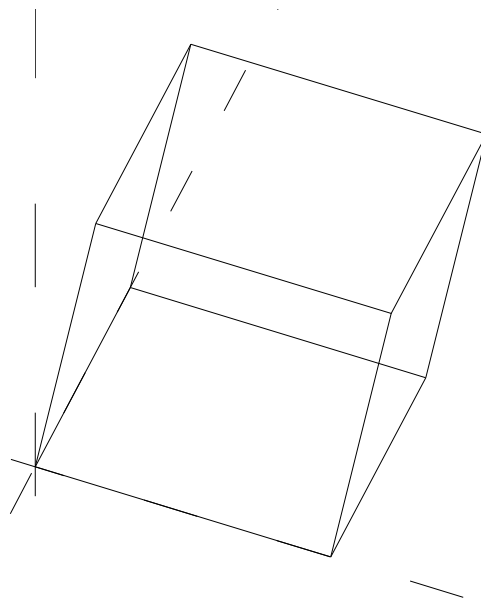
$$\angle ab = \alpha, \angle ac = \beta, \angle bc = \gamma$$

## 2. Heksagonalni koordinatni sistem



$$a = b \neq c \text{ in } \beta = \gamma = 90^\circ; \alpha = 120^\circ$$

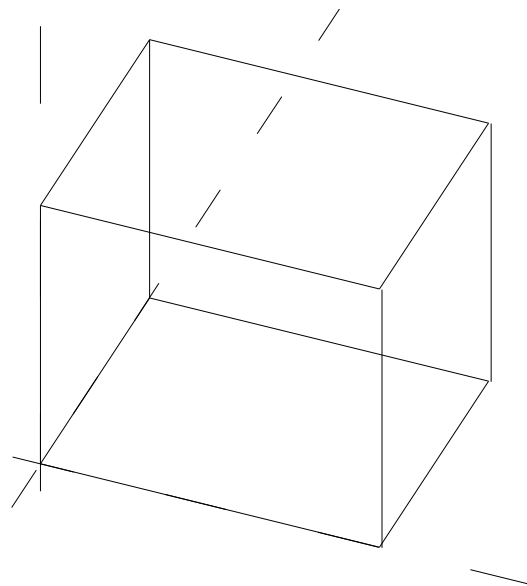
### 3. Monoklinski koordinatni sistem



$$a \neq b \neq c \text{ in } \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma \neq 90^\circ$$

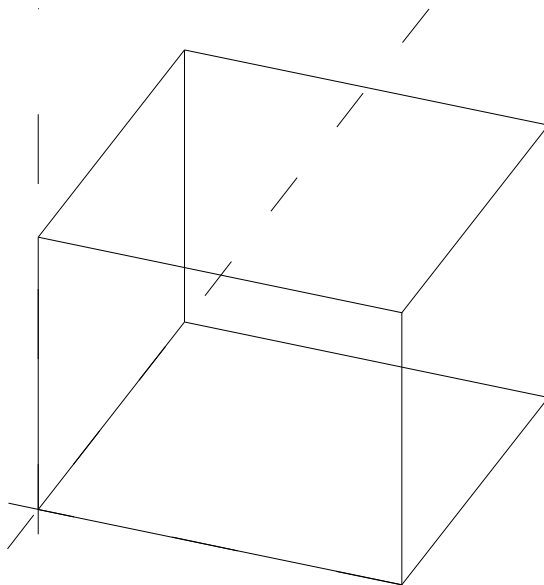


#### 4. Ortorombski koordinatni sistem



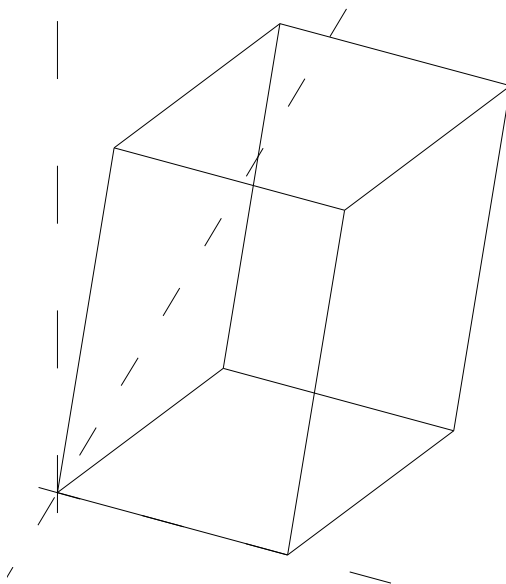
$$a \neq b \neq c \text{ in } \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

## 5. Tetragonalni koordinatni sistem



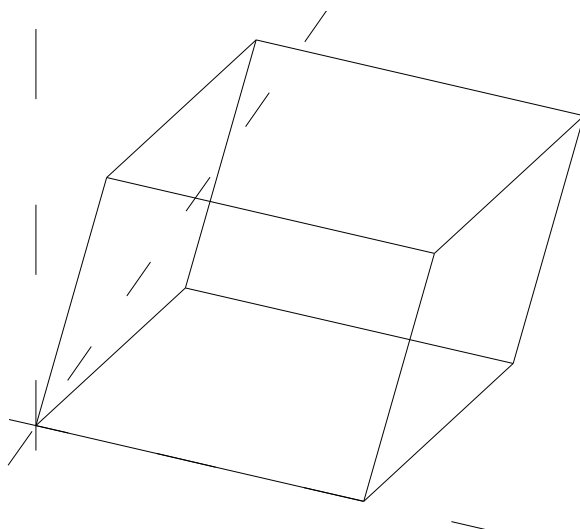
$$a = b \neq c \text{ in } \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

6. Trigonalni ali romboedrični koordinatni sistem



$$a = b = c \text{ in } \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

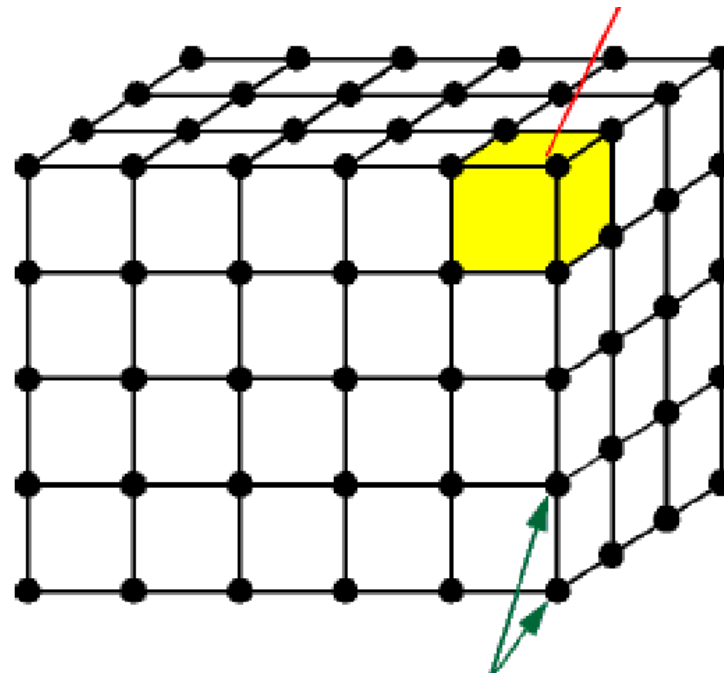
## 7. Triklinski koordinatni sistem



$$a \neq b \neq c \text{ in } \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

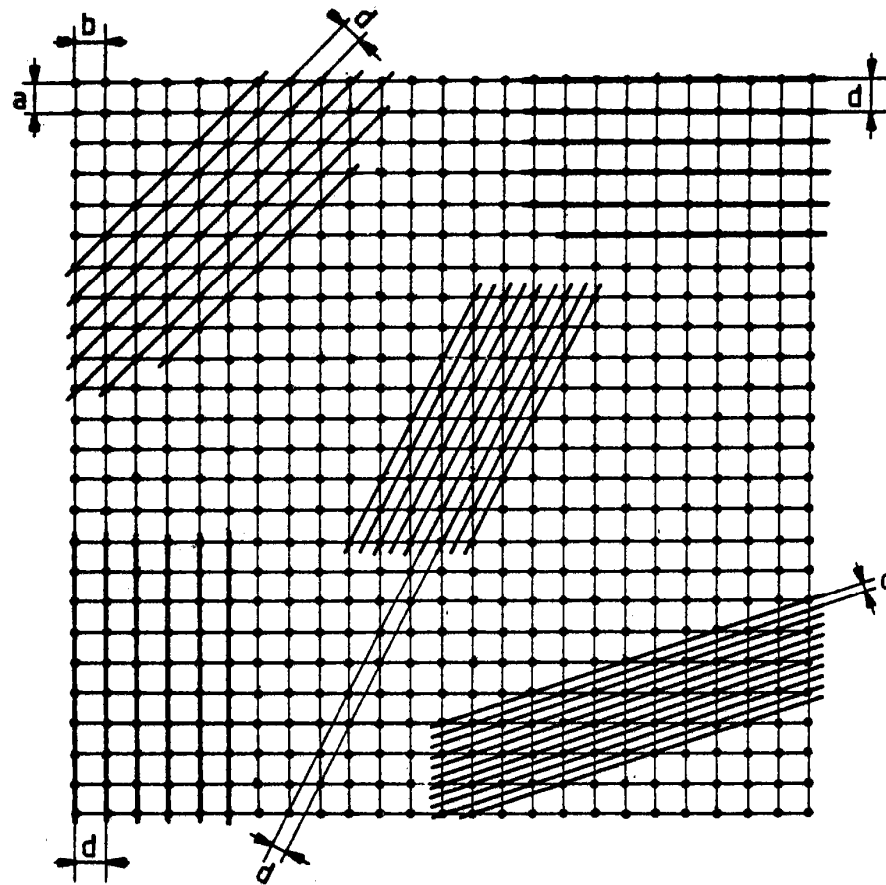
# Osnovna kristalna celica

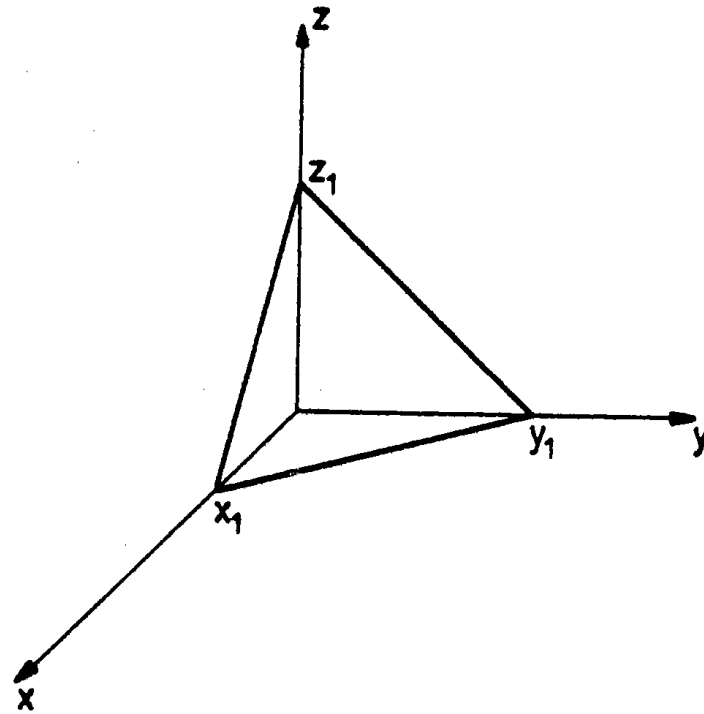
Osnovna kristalna celica



Gradniki osnovne kristalne celice

## 3.1 Kristalografske ravnine in smeri





$$h = \frac{s_1}{x_1}; \quad k = \frac{s_1}{y_1}; \quad l = \frac{s_1}{z_1}$$

$(h, k, l)$

$$(h, k, l)$$

Primer:

Če imamo posamezne odseke na oseh  $x_1 = 2$ ,  $y_1 = 4$ ,  $z_1 = 3$ , potem je  $s_1 = 12$  in Millerjevi indeksi so (6, 3, 4).

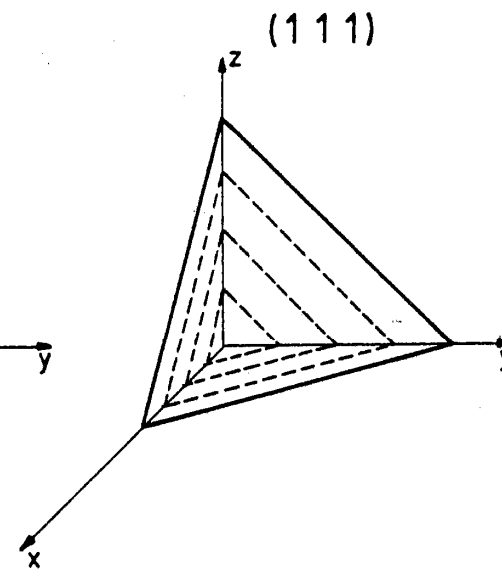
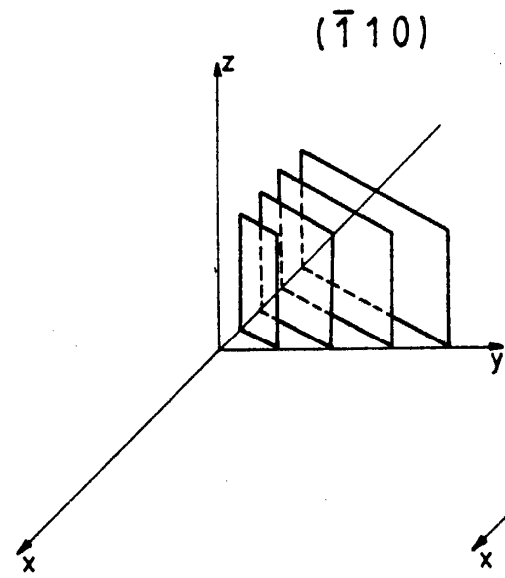
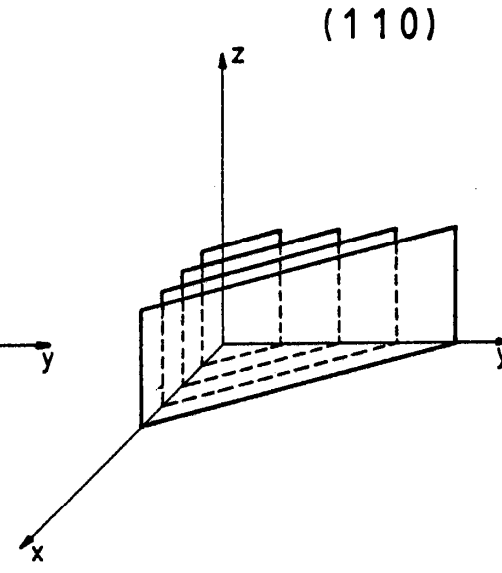
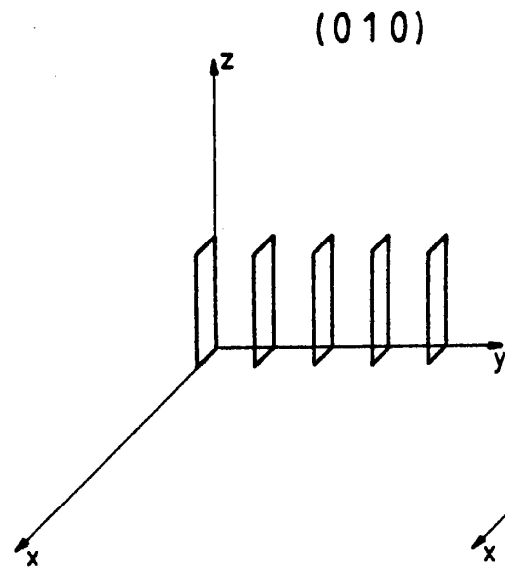
Večkrat dobimo tudi negativne vrednosti odsekov in s tem tudi negativne vrednosti indeksov. Te označujemo s prečno črto:

$$(\bar{h} \ k \ l)$$

V mnogih primerih (če permutiramo koordinatne osi) imajo ekvivalentne kristalne ravnine enake lastnosti. Te ravnine označujemo z indeksi v zavutih oklepajih:

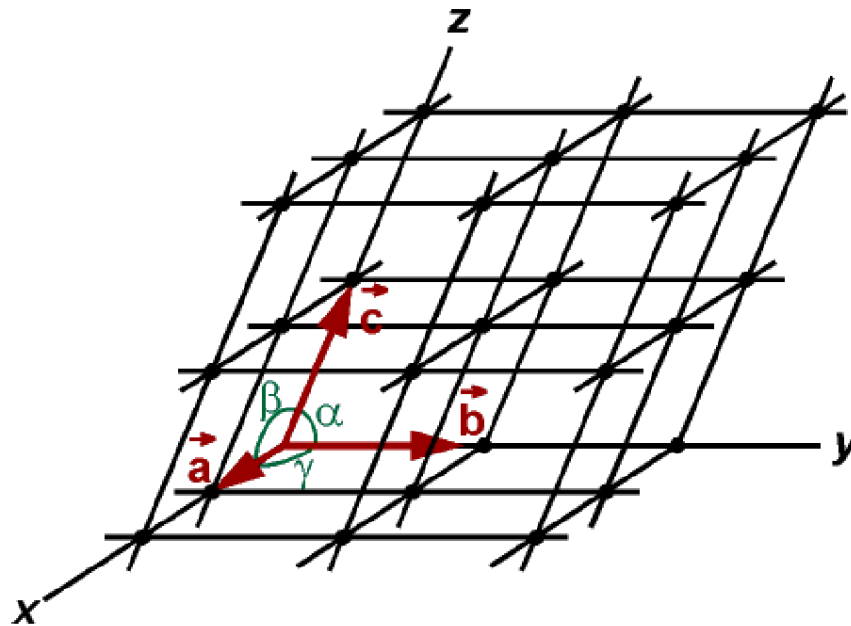
$$\{h, k, l\}$$





# Kristalografske smeri

Z njimi lahko opišemo anizotropne lastnosti npr. magnetne lastnosti železa, za katere je značilno, da niso v vseh smereh enake.



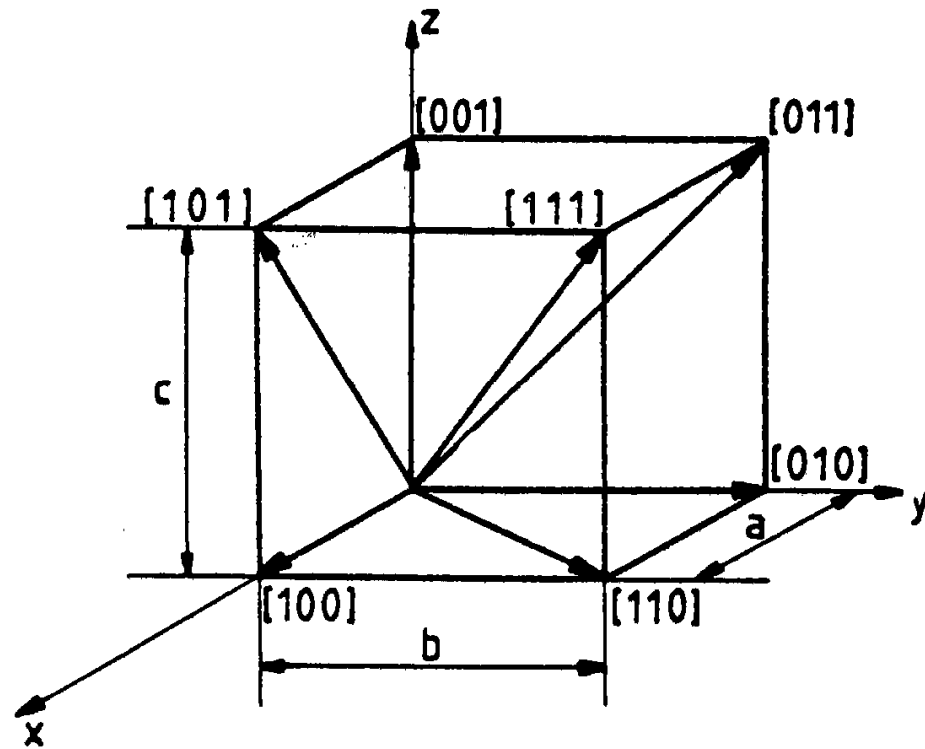
**Kristalografske smeri** določamo na podoben način kot ravnine.

Vektor izhaja iz koordinatnega izhodišča.

S pomočjo projekcij vektorja na osehi  $x_2$ ,  $y_2$  in  $z_2$ , ki so izražene z enotami za merjenje dolžin robov elementarne celice, dobimo:

$$u = \frac{x_2}{s_2}, v = \frac{y_2}{s_2}, w = \frac{z_2}{s_2}$$

$$[u, v, w]$$

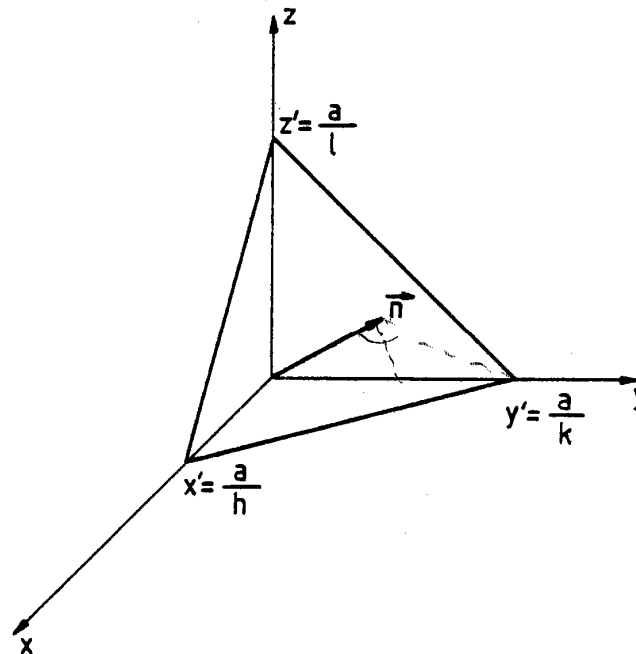


# Razdalje med ravninami

Razdalja med dvema ravninama je najkrajša tj. pravokotna razdalja z enakimi Millerjevimi indeksi.

Po definiciji označimo z Millerjevimi indeksi tisto ravnino, ki je izhodišču najbližja. Normala na to ravnino določa razdaljo med ravninami. Za to ravnino lahko podamo smerni vektor v normirani obliki:

$$\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \cdot \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}$$

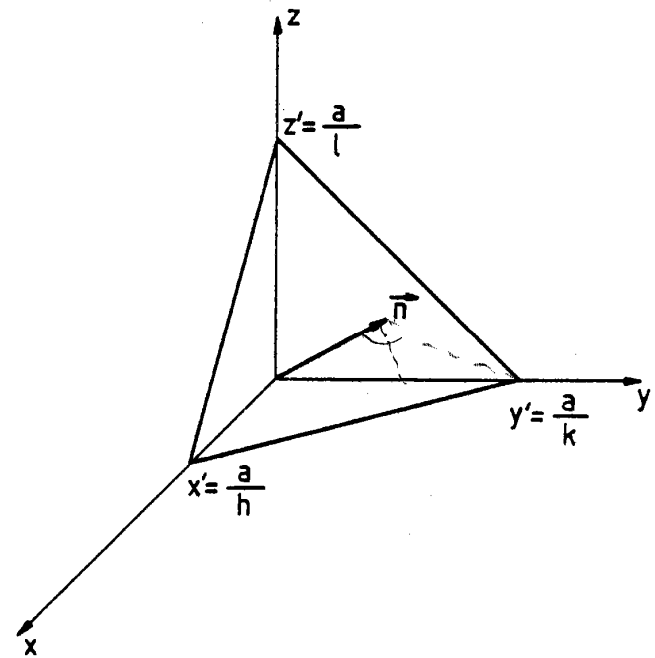


Če izberemo npr. odsek  $y'$ :

$$y' = \begin{pmatrix} 0 \\ a/k \\ 0 \end{pmatrix}$$

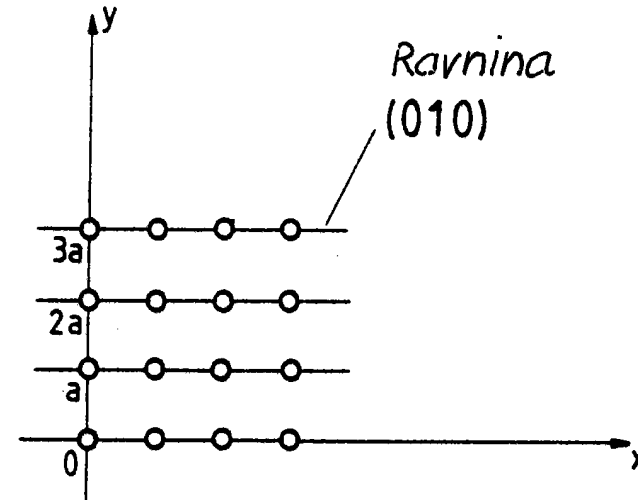
Razdaljo do ravnine dobimo z notranjim produktom:

$$d = \bar{y}' \cdot \bar{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ a/k \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$



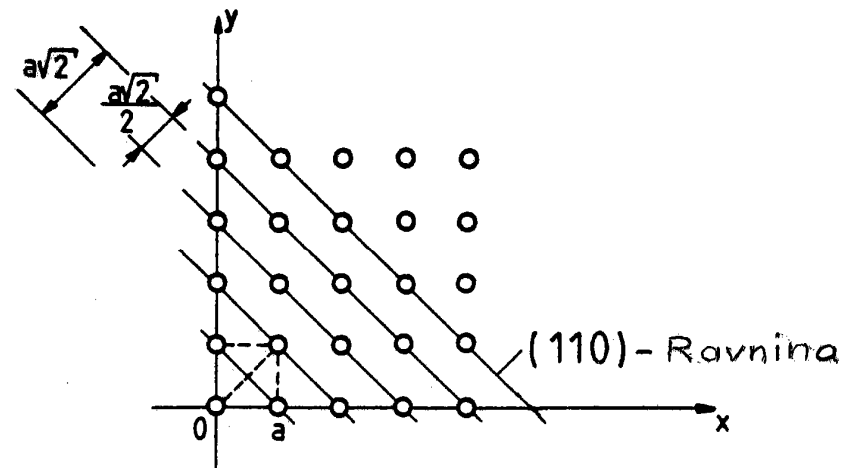
1. primer: ravnina (0,1,0)

$$d = \frac{a}{\sqrt{0^2 + 1^2 + 0^2}} = a$$



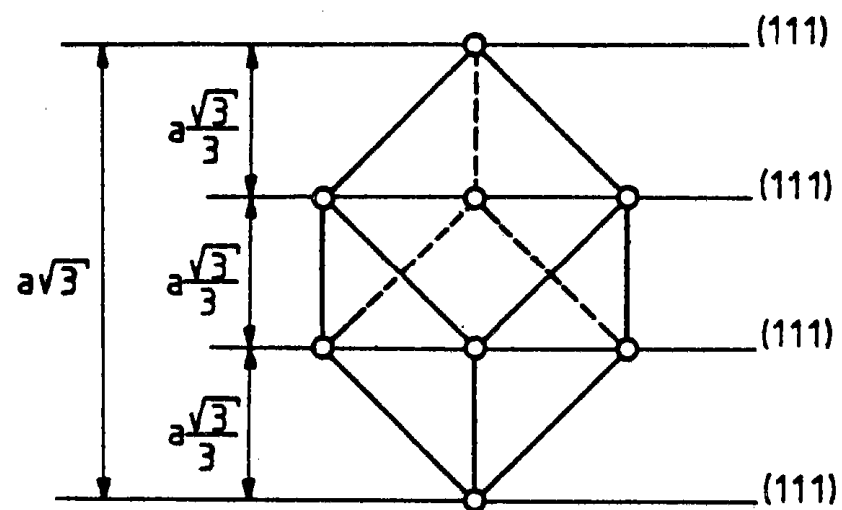
2. primer: ravnina (1,1,0)

$$d = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} a$$

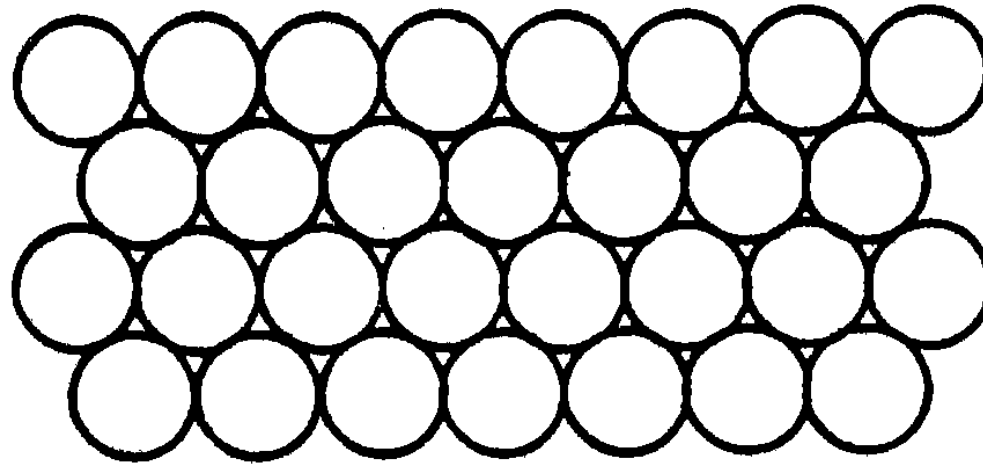


3. primer: ravnina (1,1,1)

$$d = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{\sqrt{3}}{3} a$$

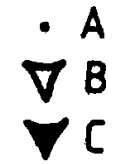
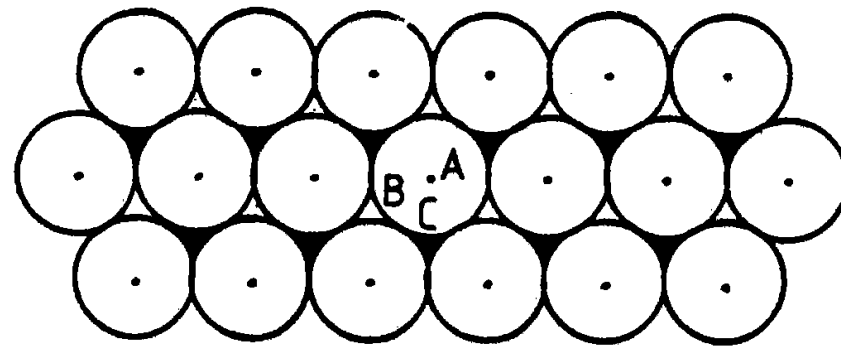


# Nekatere izbrane geometrije kristalov



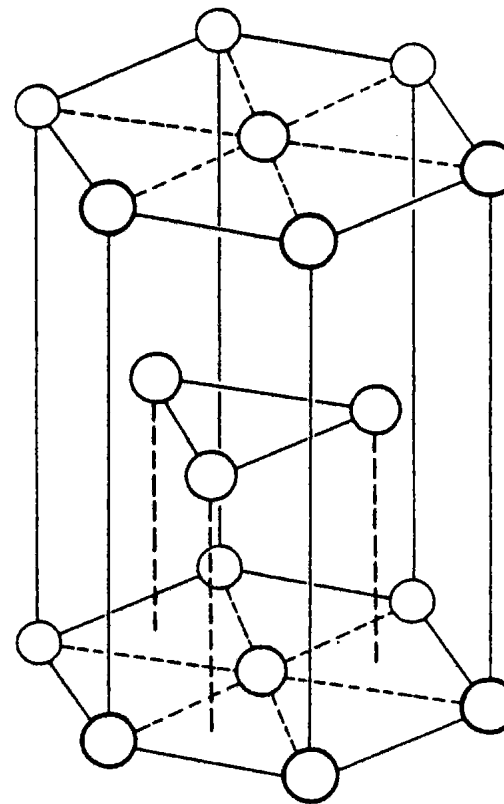
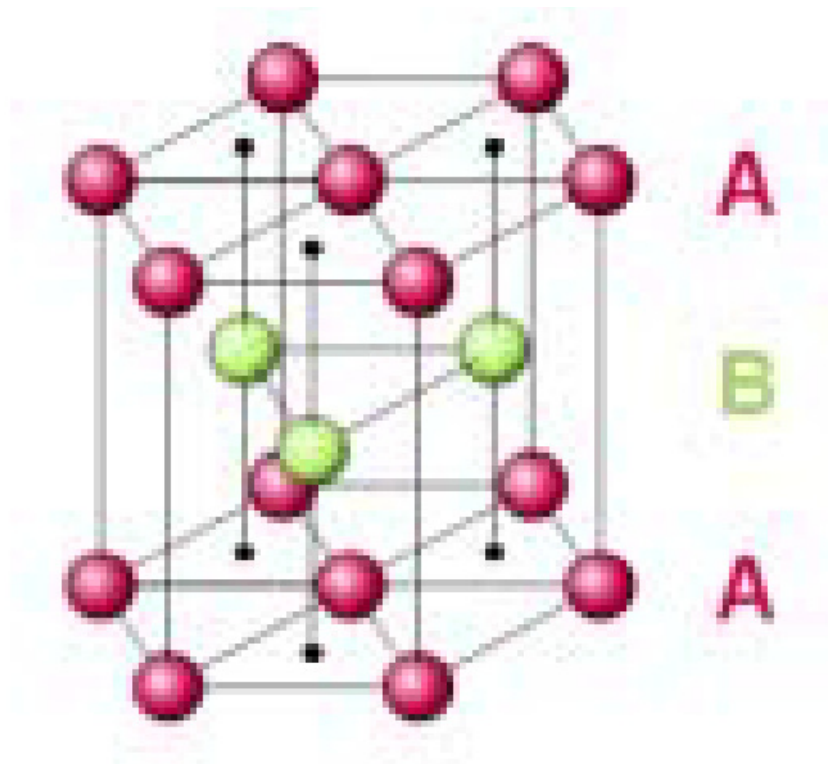
Razporeditev gradnikov v ravnini





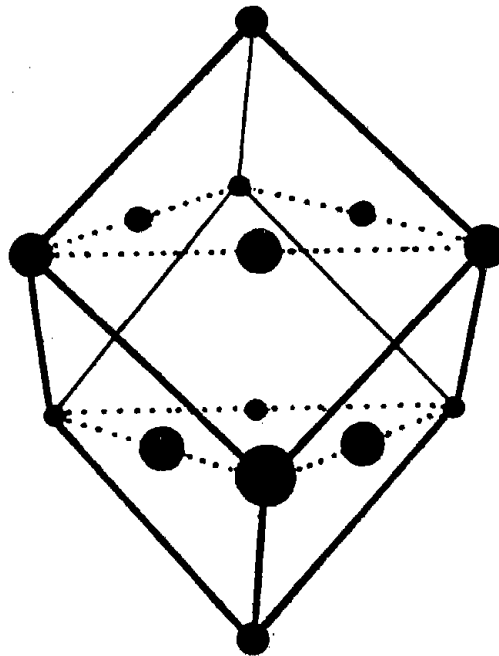
Najgostejša možna razporeditev gradnikov v treh ravninah

## Najgostejša heksagonalna struktura gradnikov



V najgostejšo oz. heksagonalno strukturo kristalizirajo snovi kjer delujejo kovinske ali Van der Waalsove vezi (Be, Cd, Co- $\alpha$ , Cr- $\beta$ , He, Mg, Ti, Ni- $\beta$ , Sn- $\gamma$ , Zn, itd.).

# Kubično-ploskovno centrirana kristalna celica



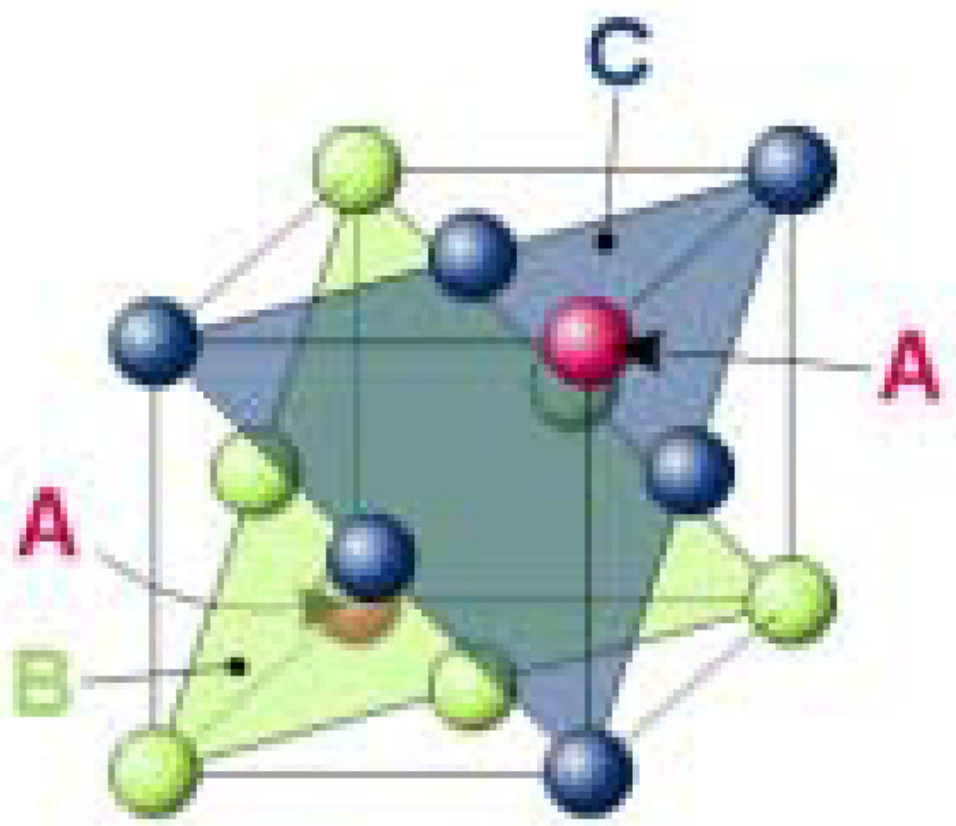
A-Ravnina

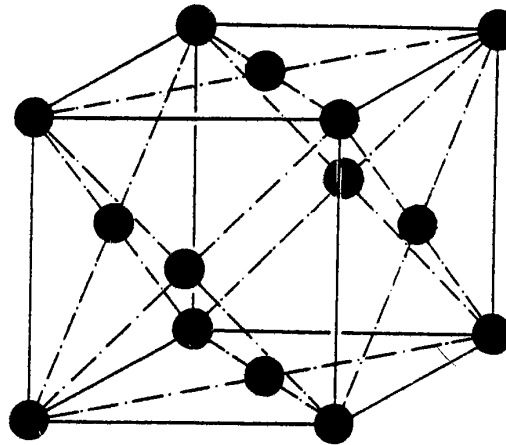
C-Ravnina

B-Ravnina

A-Ravnina

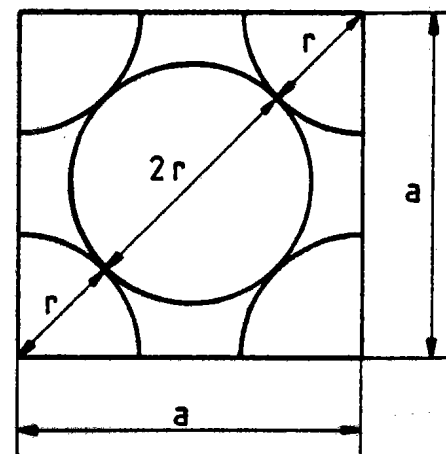
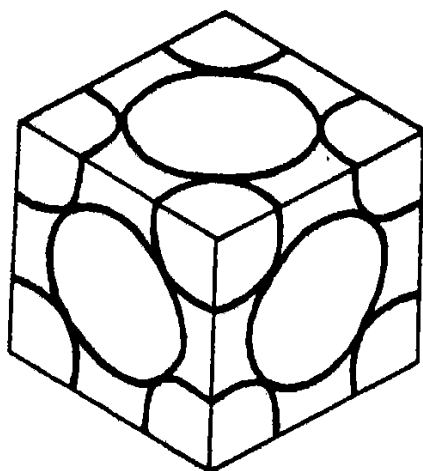
Ima enako gostoto kot heksagonalna kristalna celica





Gostota kristalne celice:

$$P = \frac{\textit{Volumen gradnikov}}{\textit{Volumen osnovne celice}}$$



$$a = 2 \cdot \sqrt{2} \cdot r$$

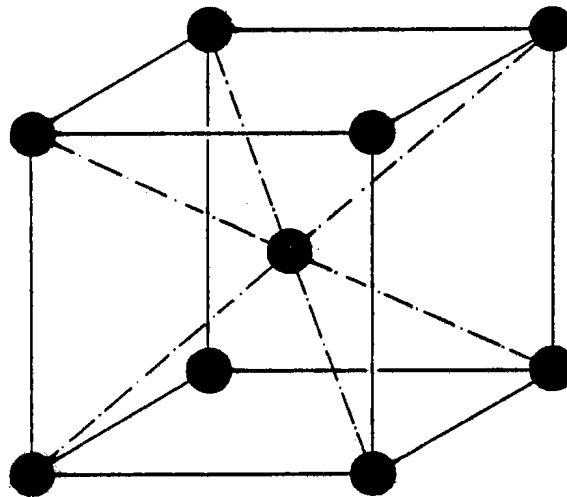
$$P = \frac{4 \text{ Atomi} \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot r^3}{3}}{a^3} = \frac{4 \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot r^3}{3}}{8 \cdot 2 \cdot \sqrt{2} \cdot r^3} = \frac{\pi}{3 \cdot \sqrt{2}} = 0,74 = 74 \%$$

V to obliko kristalizira več kovin:

Ag, Al, Au, Co, Cu, Fe- $\gamma$ , In, Ni, Pa, Pb, Pt Sn- $\alpha$ ,

Med žlahtnimi plini, kjer med njimi delujejo v glavnem Van der Waalsove sile, kristalizirajo v tej obliki tudi Ne, Ar, Kr, Xe in Rn.

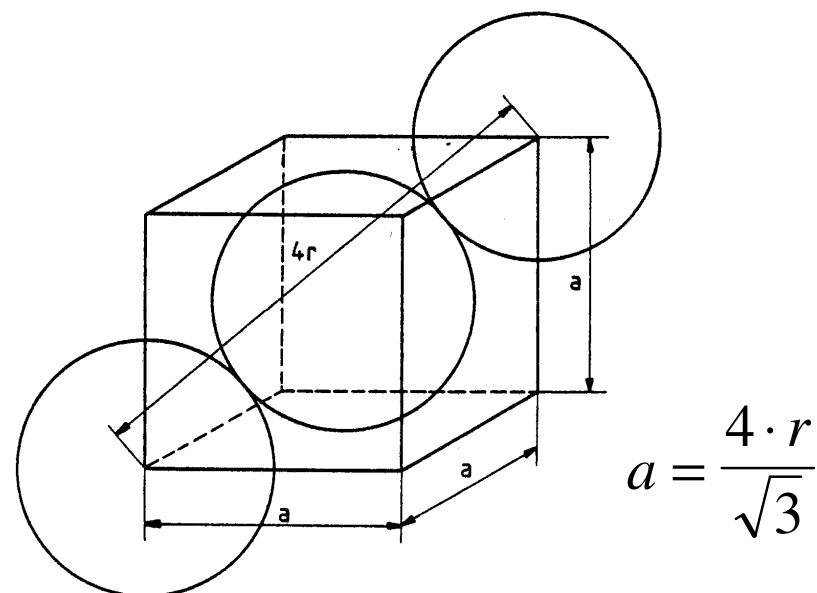
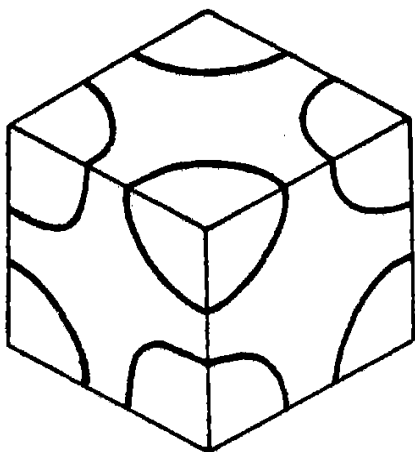
## Kubično-prostorsko centrirana kristalna celica



V teh primerih ne tvorijo vezi ioni ampak ***nevtralni atomi***.

**Vezi tvorijo elektronski pari, ki pripadajo obema atomoma v molekuli.**

## Gostota kubično-prostorsko centrirane kristalne celice



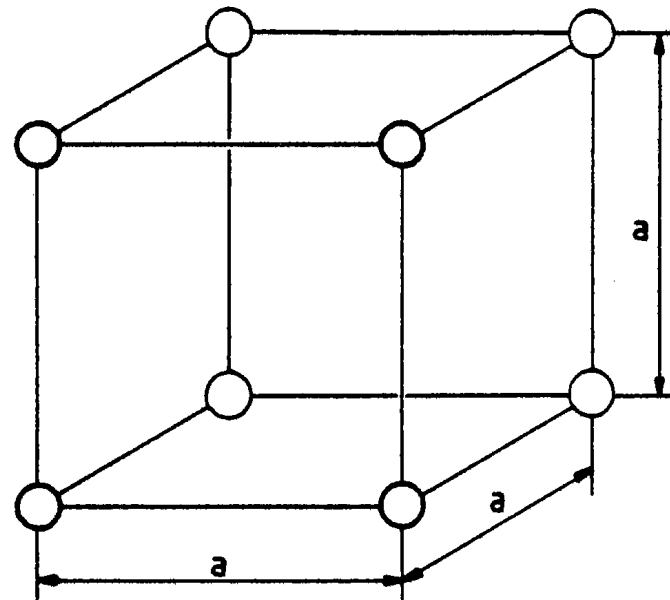
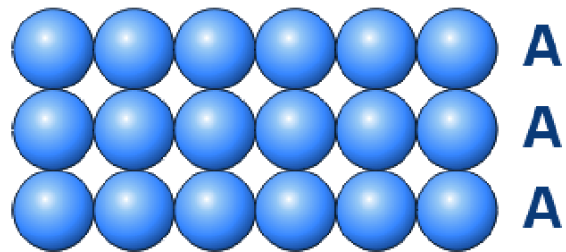
Gostota kubično-prostorsko centrirane mreže je torej enaka:

$$P = \frac{2 \text{ Atoma} \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot r^3}{3}}{a^3} = \frac{2 \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot r^3}{3}}{\frac{64 \cdot r^3}{3 \cdot \sqrt{3}}} = 0,68 = 68 \%$$

Na ta način kristalizirajo: Cs, K, W itd.

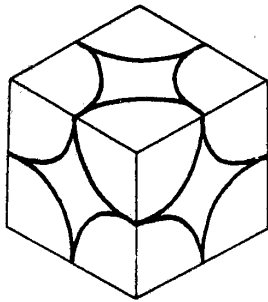


# Enostavna kubična kristalna celica



Izraženost ionske vezi pri različnih snoveh

Gostota enostavne kubične kristalne celice:

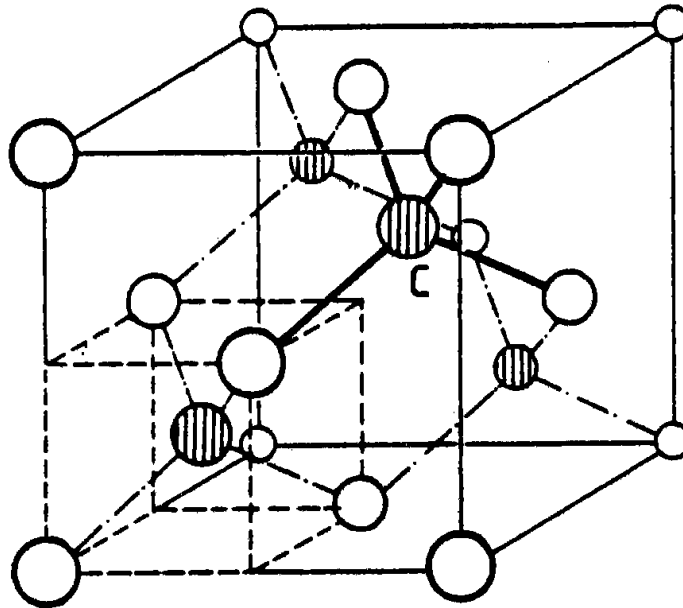


$$P = \frac{1 \text{ Atom} \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot r^3}{3}}{a^3} = \frac{4 \cdot \pi \cdot r^3}{(2 \cdot r)^3} = 0,52 = 52 \%$$

Ta struktura ima le manjši praktični pomen.

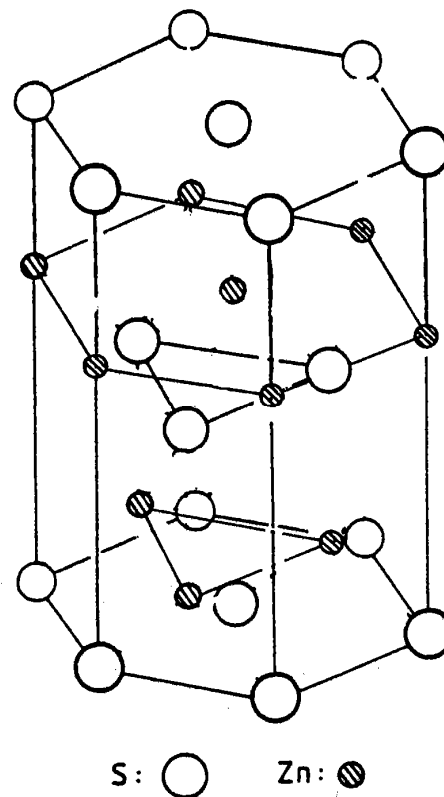
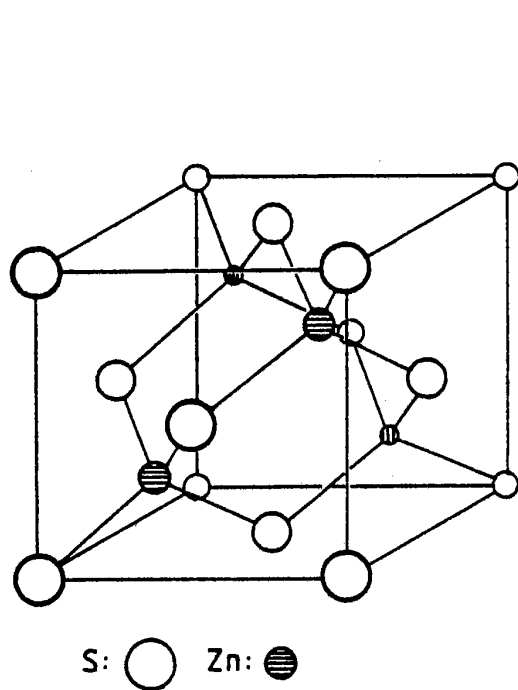
Le Polonij (Po) kristalizira v eni modifikaciji tudi v enostavno kubično strukturo.

## Zgradba diamanta



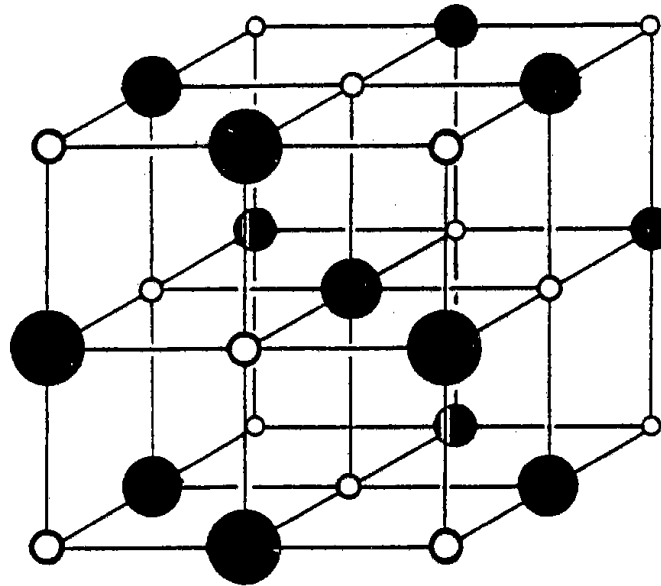
**Poleg ogljika kristalizirajo v to obliko še Si, Ge, snovi torej, ki imajo posebno vlogo v polprevodniški tehniki.**

# Kristalna zgradba ZnS



Dve kristalni modifikaciji ZnS

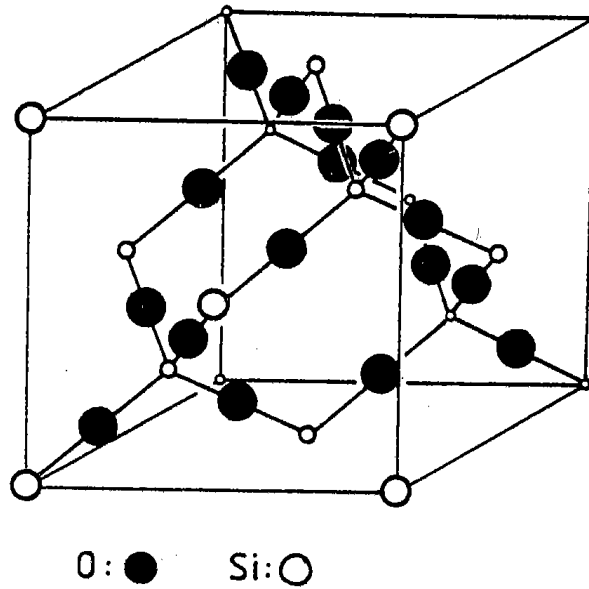
# Kristalna zgradba NaCl



Na: ○

Cl: ●

# Kristalna zgradba $\text{SiO}_2$



V osnovni kristalni celici je 8 silicijevih in 16 kisikovih atomov.