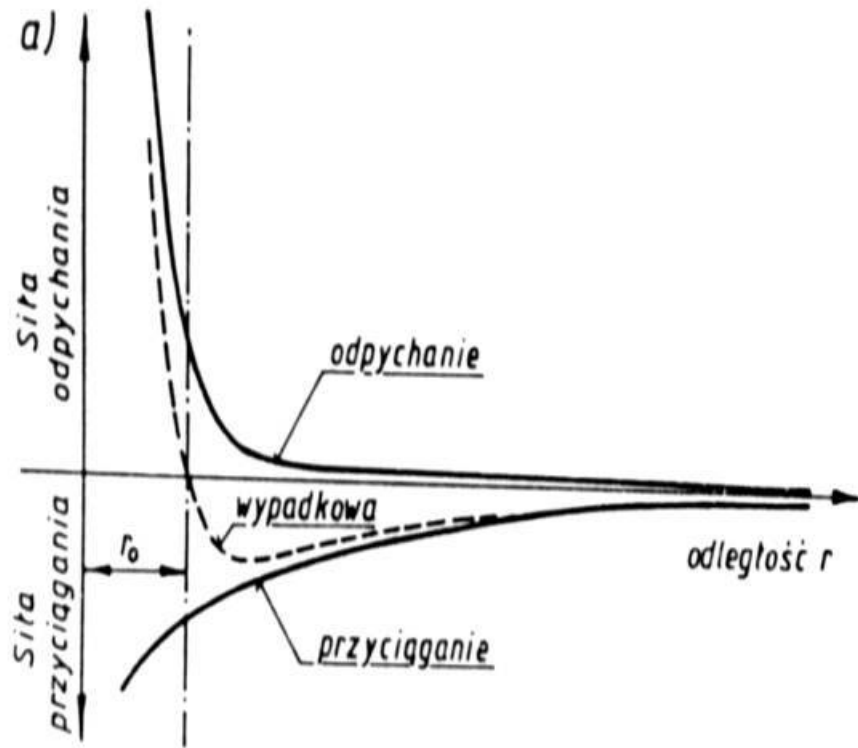


STRUKTURA MATERIAŁÓW

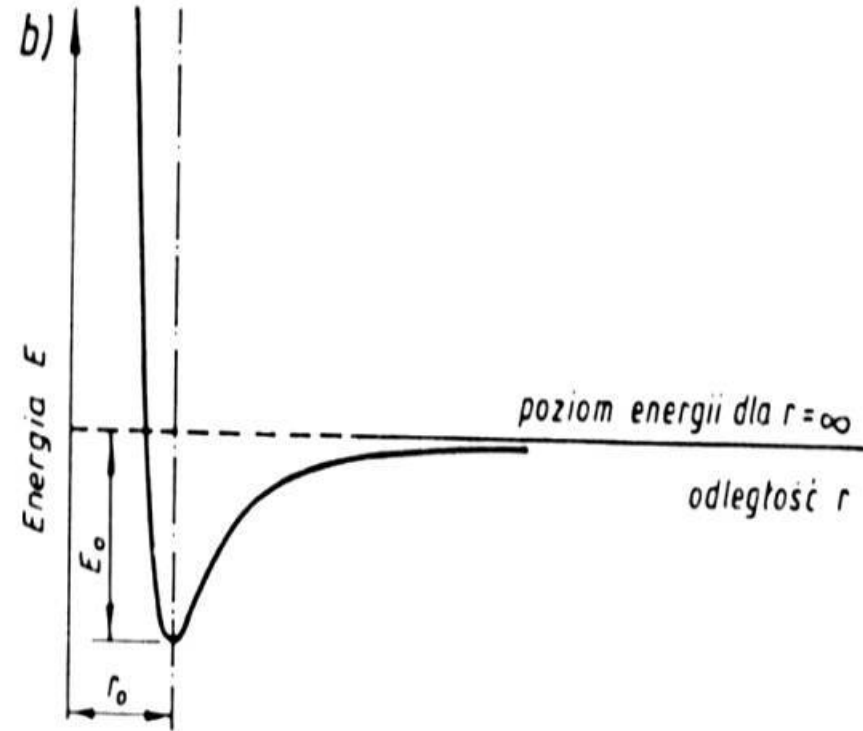
ELEMENTY STRUKTURY MATERIAŁÓW

1. Wiązania między atomami
2. Układ atomów w przestrzeni
3. Mikrostruktura
4. Makrostruktura

1. WIĄZANIA MIĘDZY ATOMAMI



Siły oddziaływania między atomami



Energia potencjalna pary atomów

2. UKŁAD ATOMÓW W PRZESTRZENI

Ciała krystaliczne (kryształy)

- Układ atomów/cząstek (a/cz) w przestrzeni jest statystycznie uporządkowany, symetryczny.
- Położenie a/cz wyznacza się przy pomocy metod rentgenowskich.
- Położenie a/cz odwzorowuje model geometryczny – sieć przestrzenna.

Ciała bezpostaciowe (amorficzne)

- Układ atomów w przestrzeni jest nieuporządkowany, chaotyczny.

STRUKTURA MATERIAŁÓW

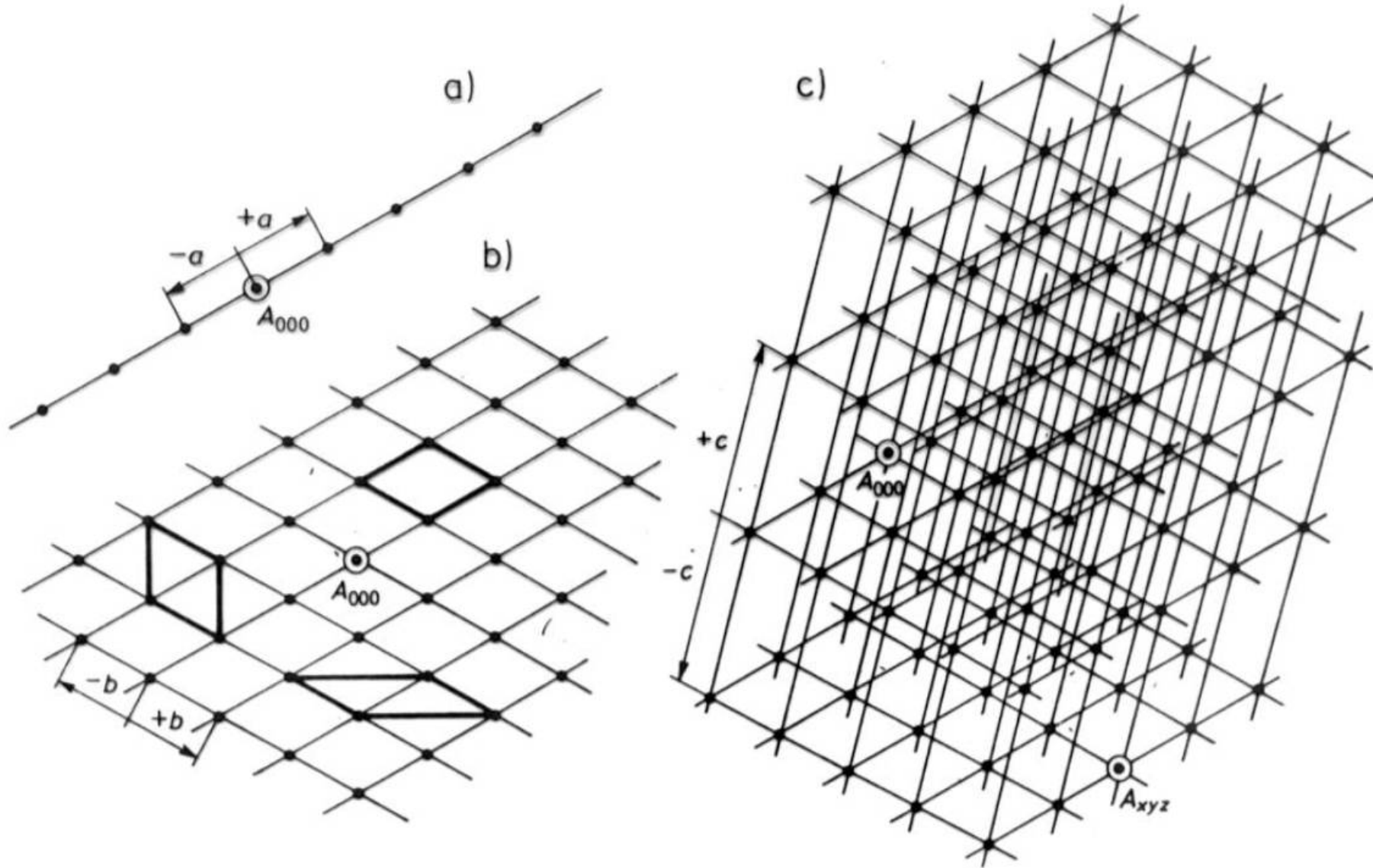
Elementy krystalografii

Elementy krystalografii

- Elementy sieci przestrzennej:
 - Węzeł sieci
 - Prosta sieciowa: prosta łącząca środki dwóch dowolnych atomów
 - Płaszczyzna sieciowa: powstała przez przesunięcie prostej sieciowej o parametr sieciowy w innym kierunku
- Parametr sieci: najbliższa odległość dwóch atomów na prostej sieciowej w komórce prymitywnej
- Liczba koordynacyjna: liczba najbliższych i równo oddalonych atomów od jednego dowolnie wybranego
- Stopień wypełnienia przestrzeni: stosunek objętości przestrzeni zajętej przez sfery atomów do objętości zajmowanej przez komórkę

Elementy sieci przestrzennej

- Sieć przestrzenna: przesunięcie płaszczyzny sieciowej w kierunku do niej nierównoległym
- Węzły sieci: punkty przecięcia prostych sieciowych
- Elementy sieci przestrzennej: płaszczyzny sieciowe, proste sieciowe, węzły sieci



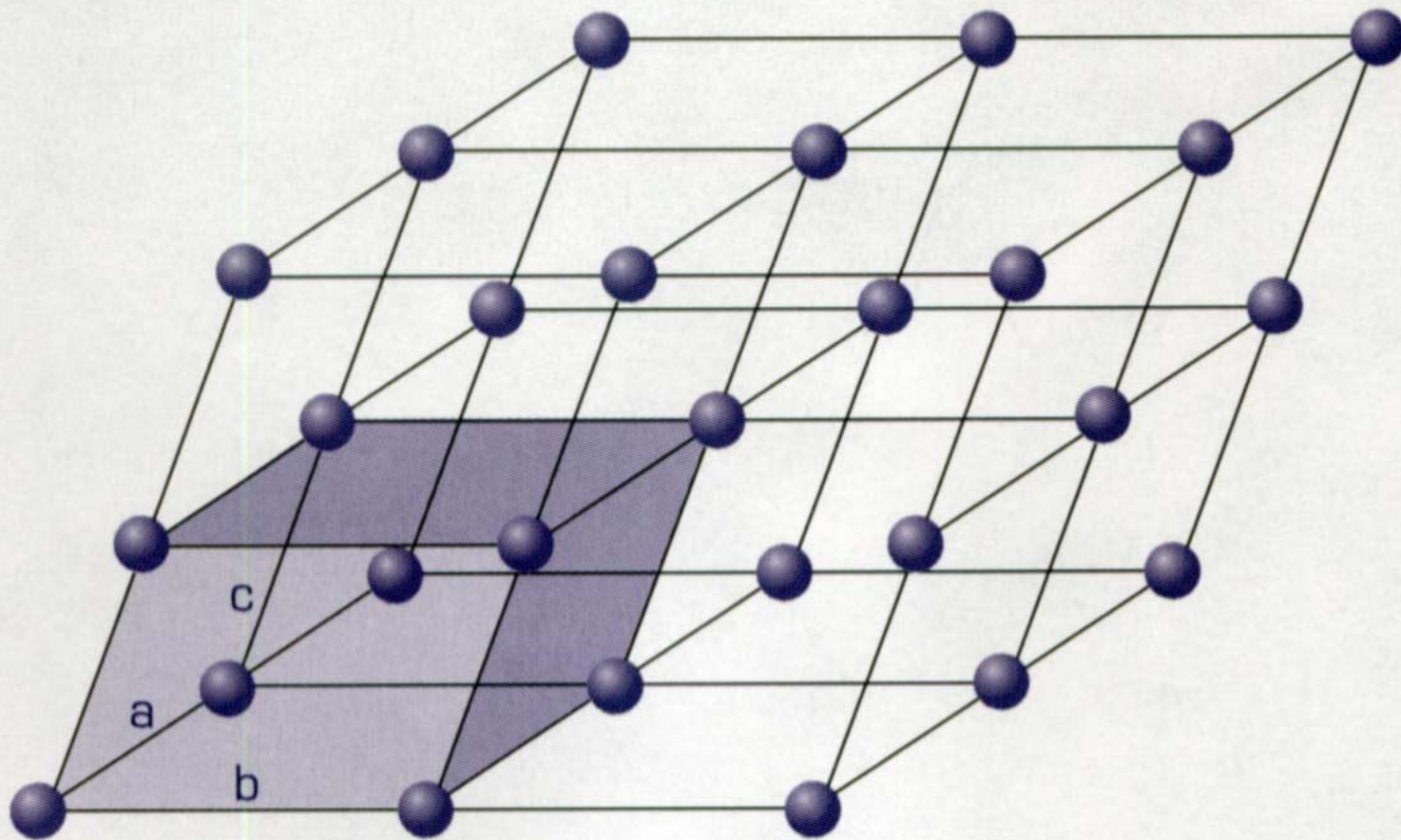
Sieć przestrzenna utworzona przez translację: a) punktu, b) prostej, c) płaszczyzny

Układ krystalograficzny

- Jest to układ współrzędnych opisujących sieć przestrzenną o osiach x, y, z . Wzajemną orientację osi charakteryzują kąty międzyosiowe α, β, γ . Okresy identyczności prostych przyjętych za osie współrzędnych wyznaczają odcinki jednostkowe a, b, c .
- Kąty międzyosiowe i odcinki jednostkowe stanowią parametry sieci. Określają one kształt i wymiar komórki elementarnej.
- Istnieje 7 układów krystalograficznych
- W ramach 7 układów krystalograficznych wyodrębnić można 14 typów sieci przestrzennych (Bravais'e'a) – uwzględniając możliwości centrowania przestrzennego i ściennego komórek.
- Komórka prymitywna: atomy wyłącznie w węzłach sieci.

Rysunek 3.1

*Schemat sieci przestrzennej
kryształu; a, b i c - podsta-
wowe periody identyczności*

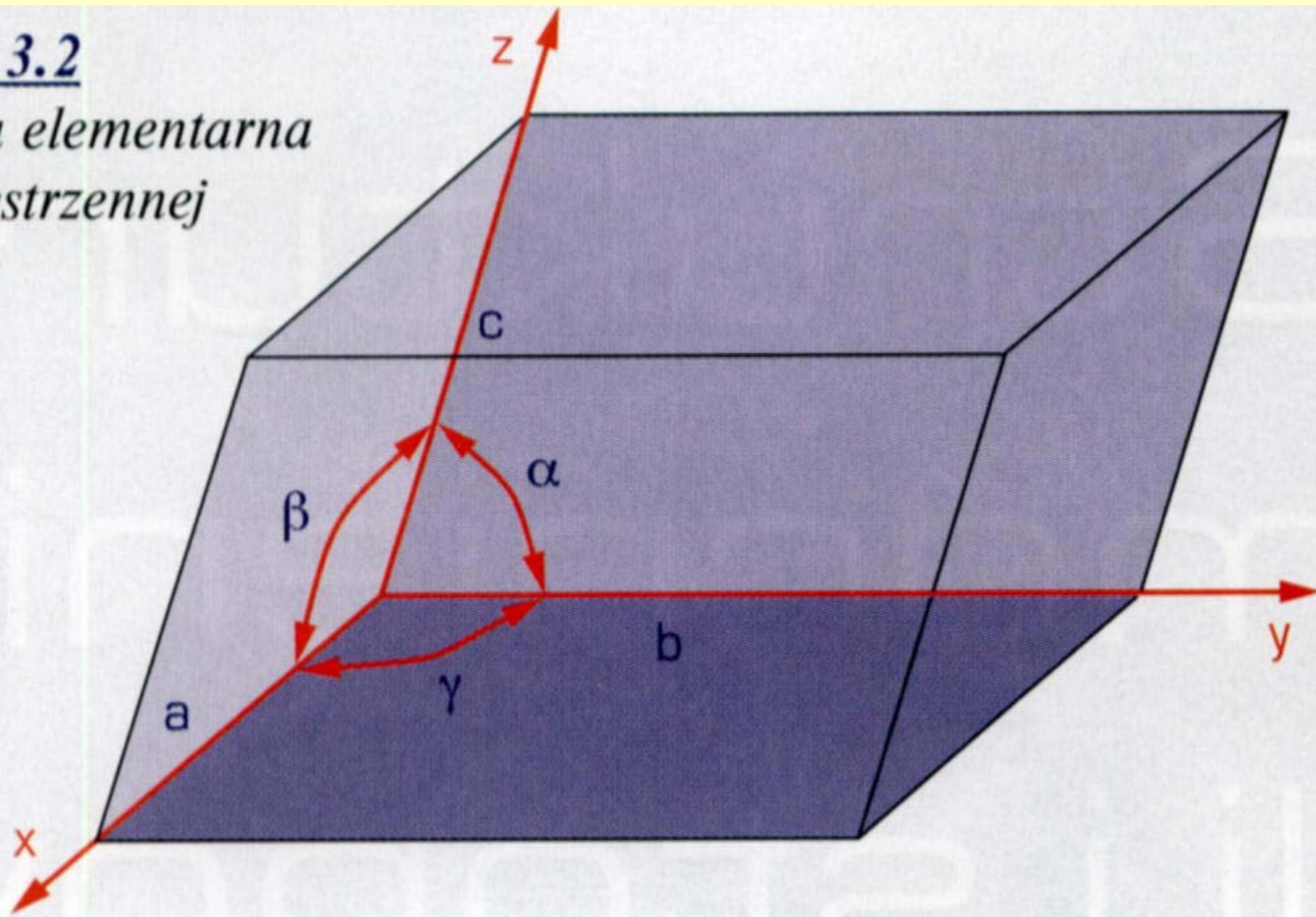


Komórka elementarna

- Komórka elementarna: równoległoscian o parametrach sieciowych a, b, c
- Opis komórki sieciowej przez parametry sieciowe a, b, c , oraz kąty α, β, χ

Rysunek 3.2

*Komórka elementarna
sieci przestrzennej
kryształu*



Symetria kryształu

- Proste elementy symetrii: środek, płaszczyzny, osi symetrii
- Rodzaj elementów symetrii decyduje o podziale kryształów o komórce prymitywnej na 7 układów krystalograficznych
- Komórka prymitywna: atomy wyłącznie w węzłach sieci

Tablica 3.1**Układy krystalograficzne i typy sieci przestrzennych**

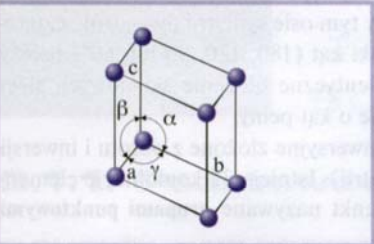
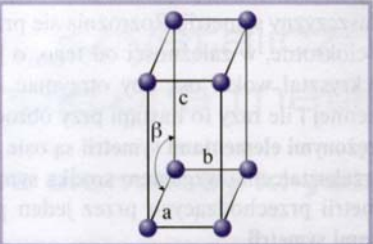
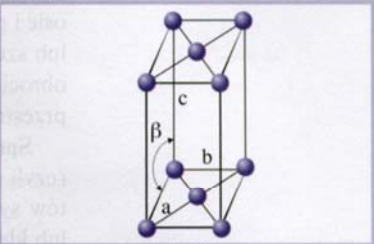
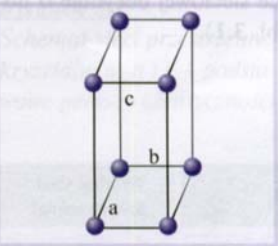
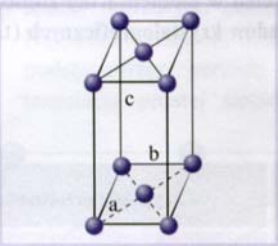
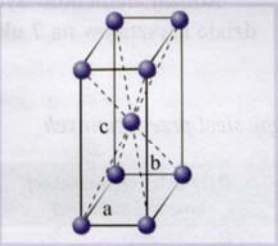
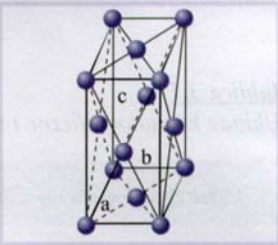
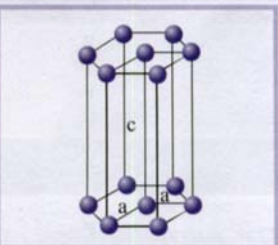
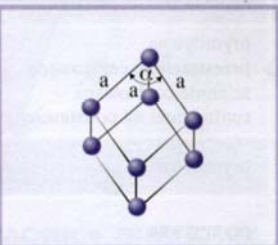
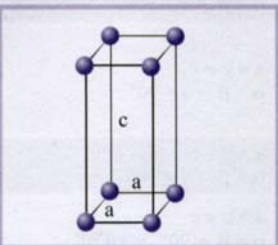
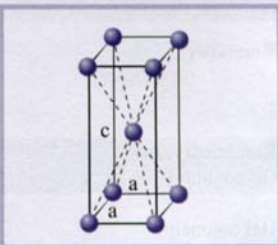
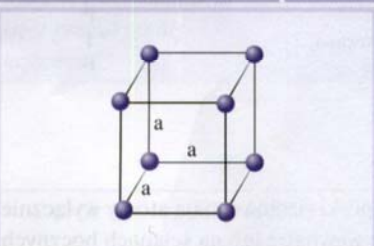
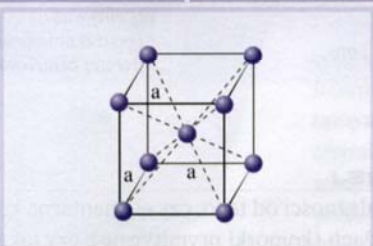
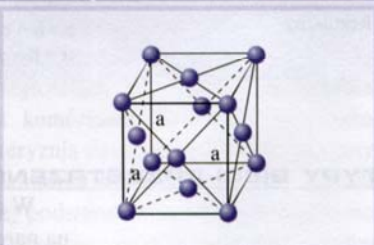
Układ krystalograficzny	Parametry elementarnej komórki sieciowej	Typ sieci przestrzennej	Symbol sieci przestrzennej
Trójskośny	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	prymitywna	P
Jednoskośny	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	prymitywna centrowana na podstawach	P C
Rombowy	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	prymitywna przestrzennie centrowana ściennie centrowana centrowana na podstawach	P I F C
Romboedryczny (trygonalny)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	prymitywna	P
Heksagonalny	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$	prymitywna	P
Tetragonalny	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	prymitywna przestrzennie centrowana	P I
Regularny	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	prymitywna przestrzennie centrowana ściennie centrowana	P I F

Typy sieci przestrzennej

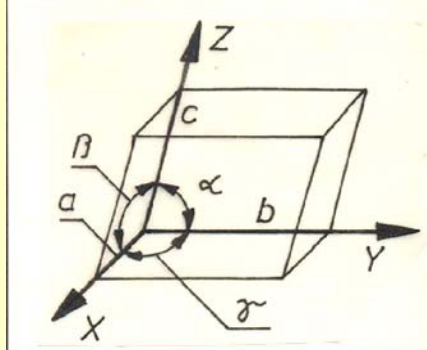
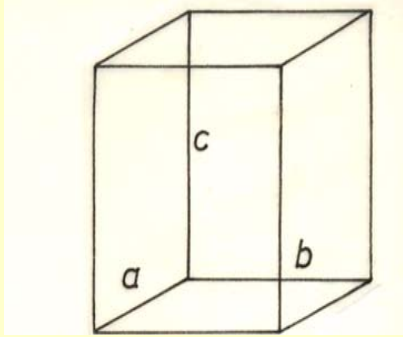
- Sieci przestrzenne: układy z komórkami prostymi lub złożonymi; 14 sieci przestrzennych Bravaisa
- Liczba koordynacyjna: liczba najbliższych i równo oddalonych atomów od jednego dowolnie wybranego
- Stopień wypełnienia przestrzeni: stosunek objętości przestrzeni zajętej przez sfery atomów do zajmowanej przez komórkę

Tablica 3.2

Schematy rodzajów sieci przestrzennych (według A. Bravais'go)

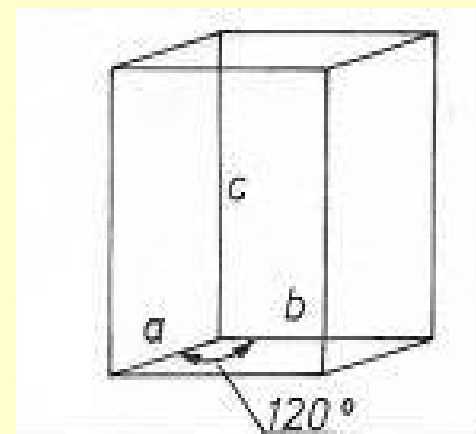
			
Trójskośna prymitywna	Jednoskośne		
	prymitywna	centrowana na podstawach	
			
Rombowe			
prymitywna	centrowana na podstawach	przestrzennie centrowana	ściennie centrowana
			
Heksagonalna	Romboedryczna	Tetragonalne	
		prymitywna	przestrzennie centrowana
			
Regularne			
prymitywna	przestrzennie centrowana	ściennie centrowana	

Przykłady układów krystalograficznych

L.p.	Układ	Parametry sieci	Sieć przestrzenna	Szkic komórki prymitywnej
1.	trójskośny	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$ $a \neq b \neq c$	prymitywna	
2.	tetragonalny	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b \neq c$	prymitywna	
			przestrzen- nie centro- wana	

3. heksagonalny
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma = 120^\circ$
 $a = b \neq c$

prymitywna

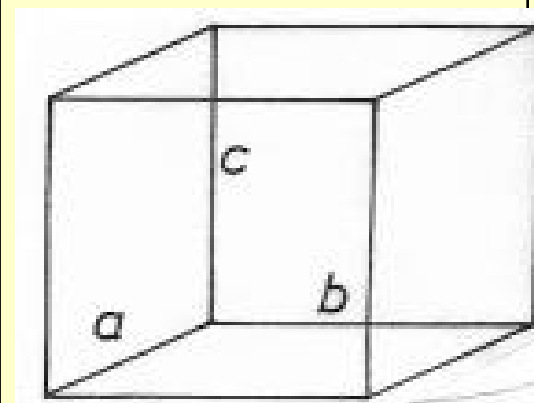


4. regularny
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
 $a = b = c$

prymitywna

przestrzen-
nie centro-
wana

ściennie
centrowana

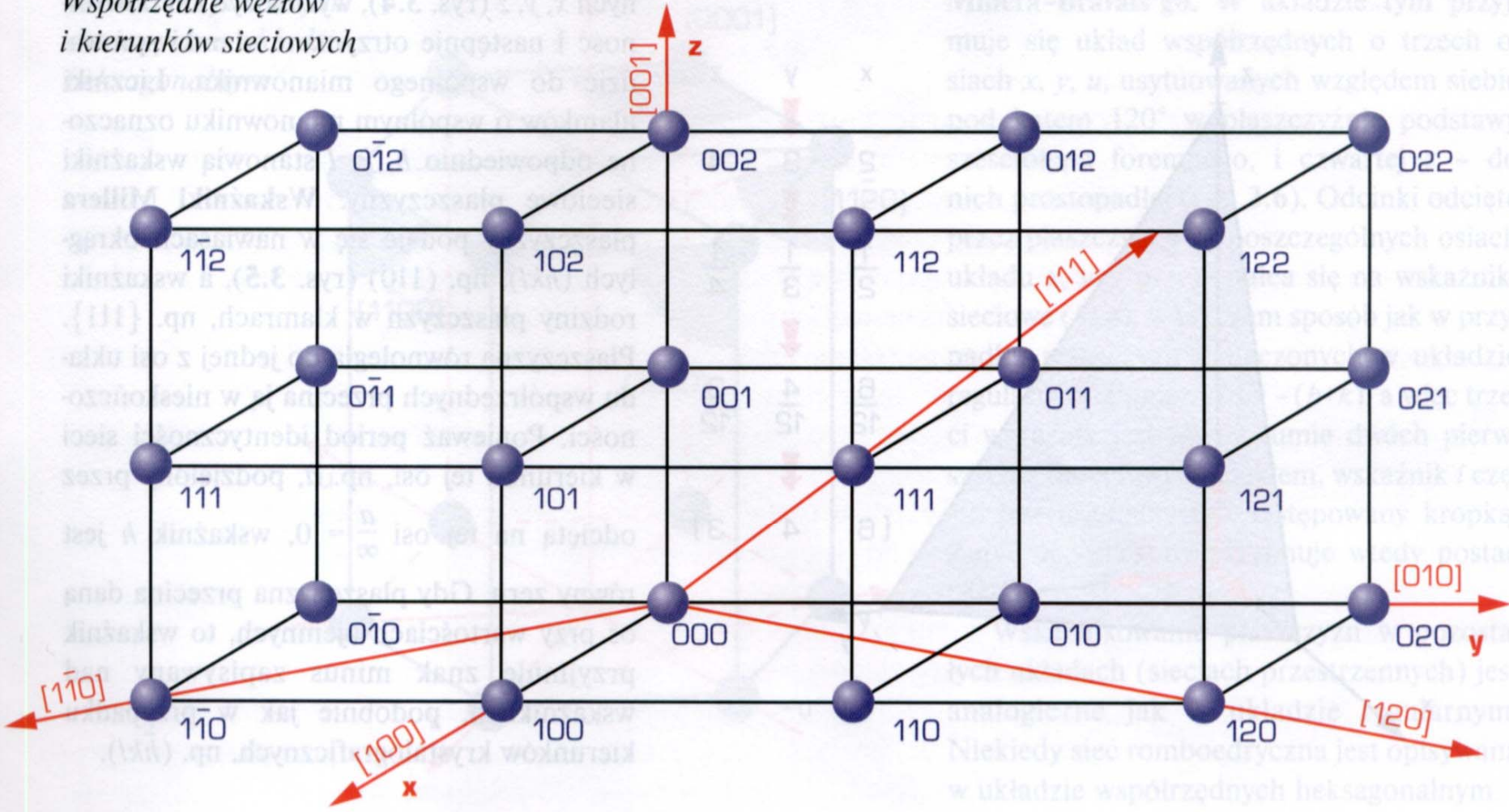


Wskaźnikowanie

- Wskaźnikowanie węzłów sieciowych hkl
- Wskaźnikowanie kierunków krystalograficznych $[hkl]$
- Wskaźnikowanie płaszczyzn krystalograficznych (hkl)

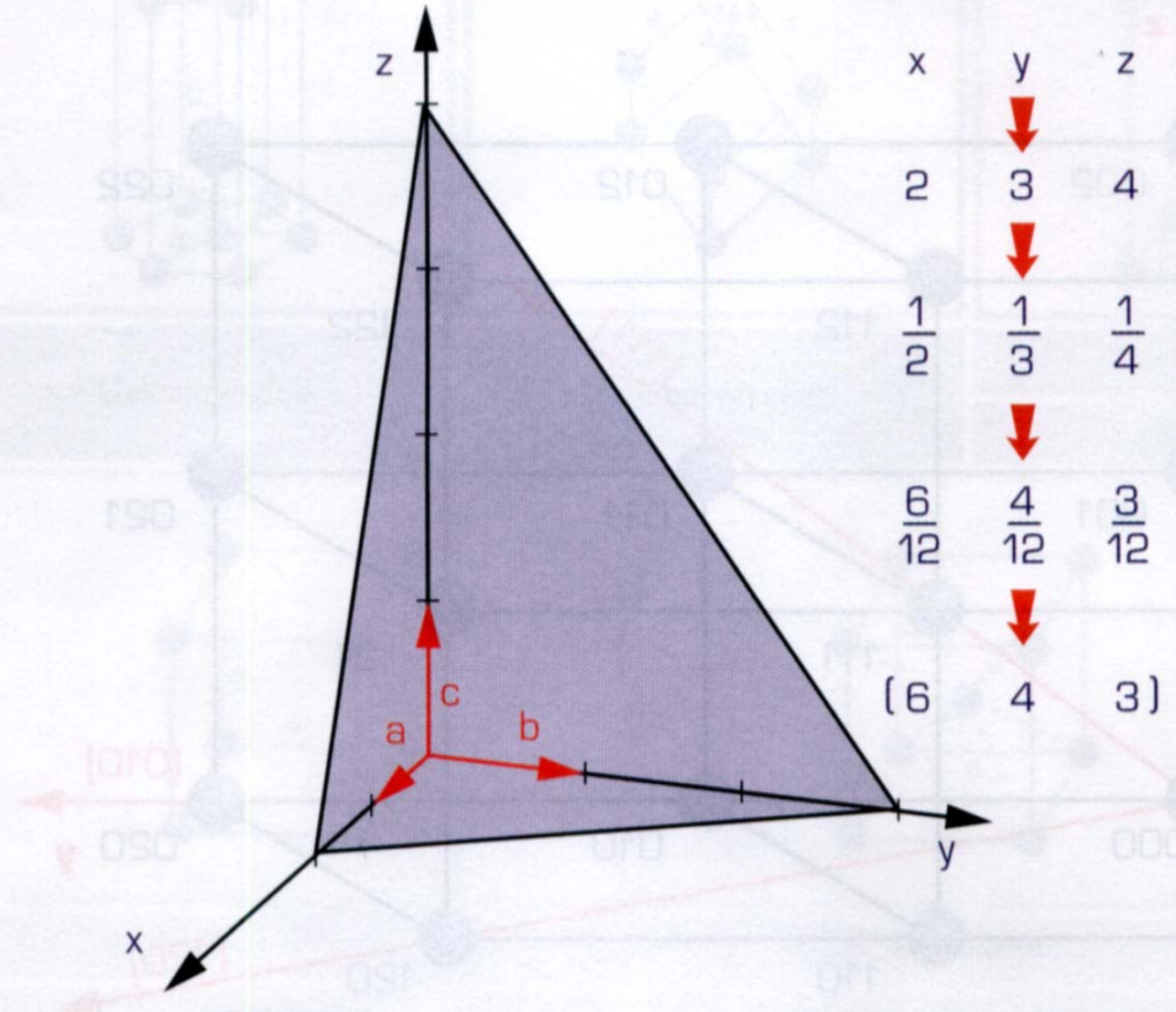
Rysunek 3.3

Współrzędne węzłów
i kierunków sieciowych



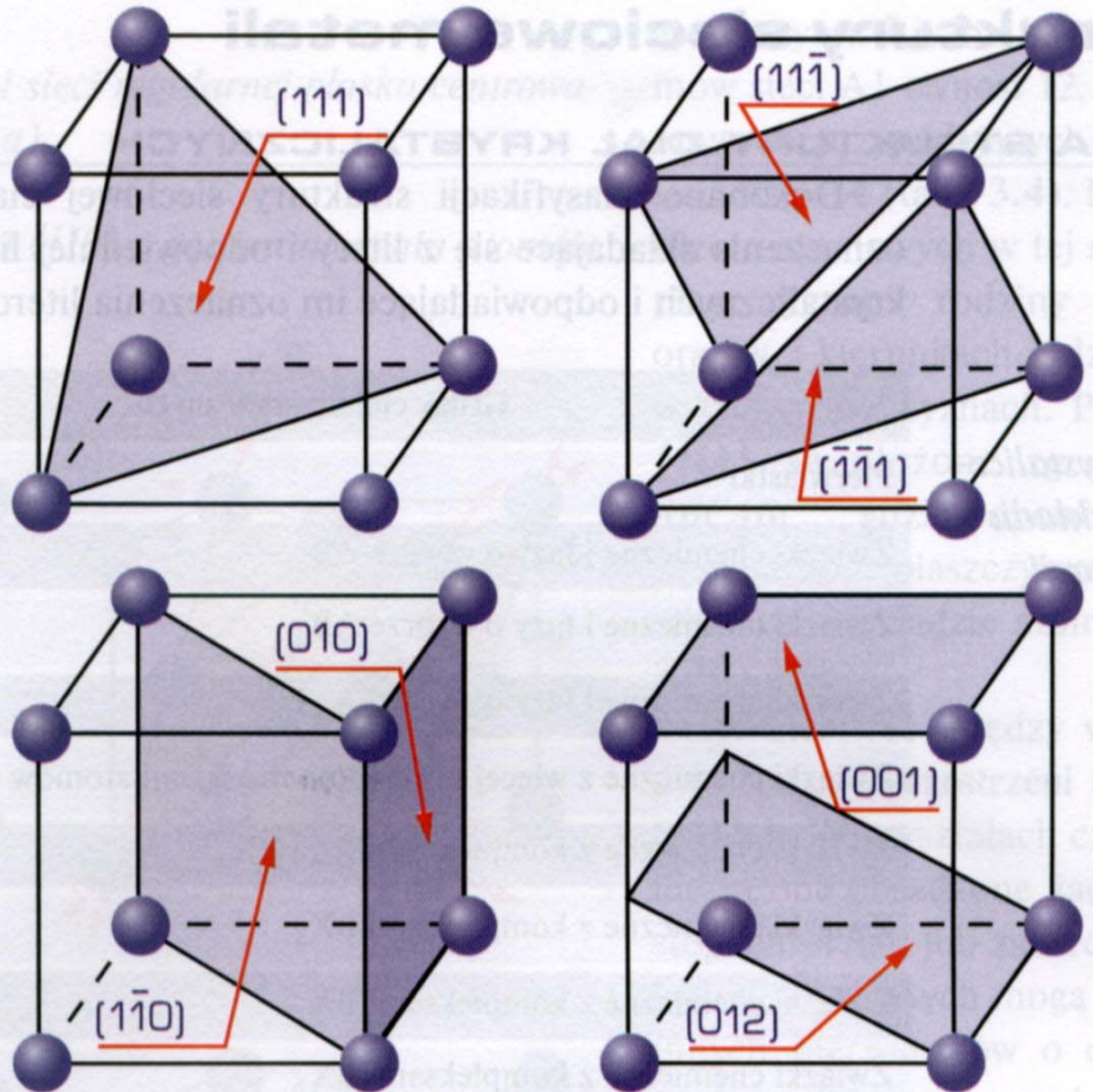
Rysunek 3.4

Wskaźnikowanie płaszczyzny sieciowej



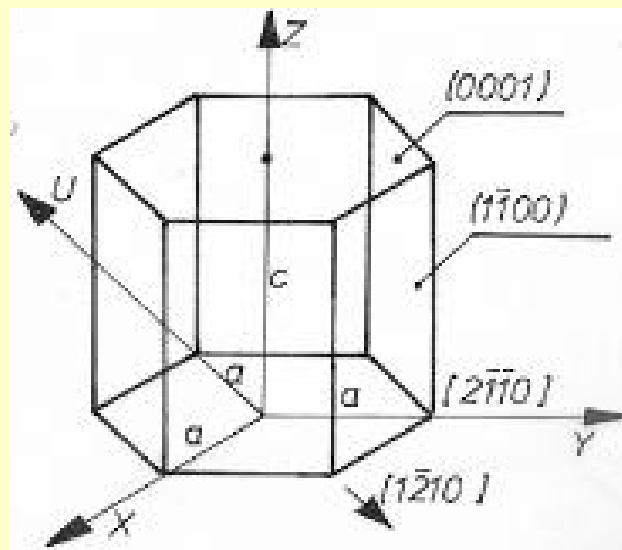
Rysunek 3.5

*Przykłady wskaźnikowania
płaszczyzn sieciowych
w układzie regularnym*



W sieci przestrzennej można wyróżnić równoważne płaszczyzny i kierunki, o tej samej konfiguracji węzłów. Na przykład, w układzie regularnym płaszczyzny wszystkich ścian komórki elementarnej są równoważne. Zespół takich płaszczyzn opisuje wskaźnik jednej dowolnej płaszczyzny, zamknięty w nawiasie klamrowym, np. $\{100\}$. Kierunki równoważne oznacza się natomiast zapisując wskaźniki jednego z kierunków w nawiasie ostrym $\langle 111 \rangle$.

Wskaźniki płaszczyzn i kierunków w sieci heksagonalnej, zwane wskaźnikami Millera-Bravais, wyznacza się stosując czteroosiowy układ współrzędnych. Osie x , y , u leżą w płaszczyźnie podstawy, a ich dodatnie kierunki tworzą kąty 120° ; oś z jest prostopadła do pozostałych. Wskaźnikami płaszczyzn są cztery liczby zawarte w nawiasie okrągłym $(hkil)$, a wskaźnikami kierunków – cztery liczby w nawiasie kwadratowym $[uvtw]$. Pierwsze trzy wskaźniki odnoszą się do osi leżących na płaszczyźnie podstawy, a czwarta – do osi pozostałej. Wskaźnik $i = -(h + k)$



Przykłady wskaźników płaszczyzn i kierunków w sieci heksagonalnej

Niektóre substancje występują w odmianach różniących się budową krystaliczną. Zjawisko to nazywa się polimorfizmem (wielopostaciowością), a w odniesieniu do pierwiastków chemicznych – alotropią. Odmiany alotropowe oznacza się greckimi literami α , β , γ itp., umieszczonymi przy symbolu chemicznym pierwiastka, np. Fe_α . Dwie odmiany alotropowe posiadają min.: żelazo, nikiel, kobalt, tytan, uran. Chrom, wapń i lit występują w trzech odmianach alotropowych, a mangan – w czterech. Zasadniczym czynnikiem wywołującym przemiany alotropowe jest temperatura.

Struktury sieciowe metali

Tablica 3.3

Klasyfikacja ciał krystalicznych na podstawie składu chemicznego i proporcji stechiometrycznych

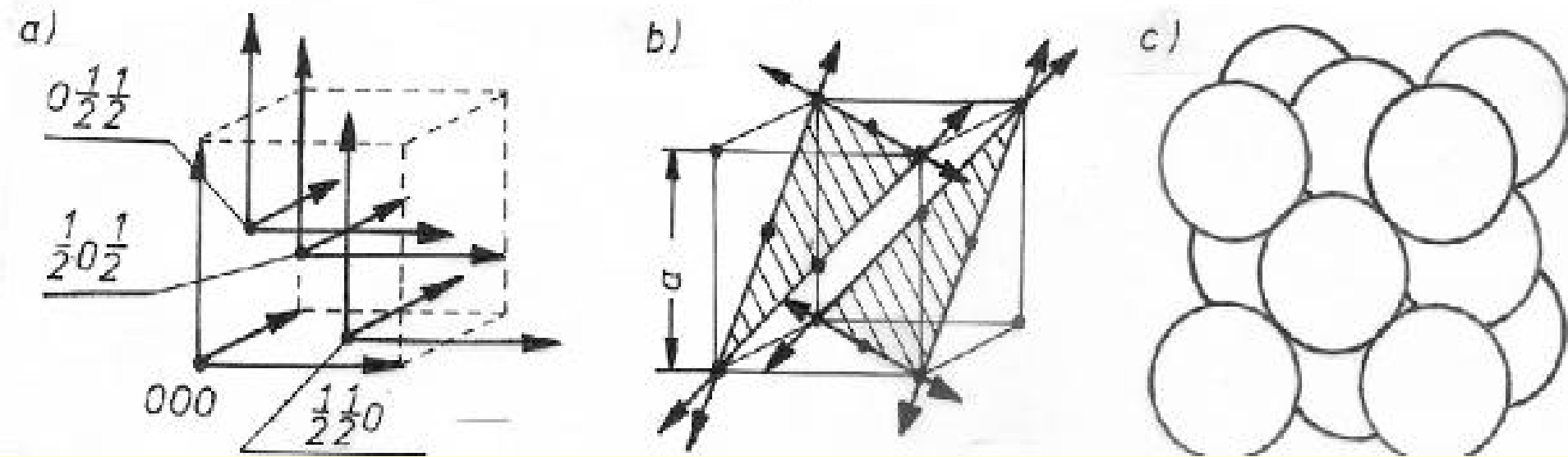
Grupy ciał krystalicznych	Symbol grupy
Pierwiastki	A
Związki chemiczne i fazy o wzorze AB	B
Związki chemiczne i fazy o wzorze AB ₂	C
Związki chemiczne i fazy o wzorze A _m B _n	D
Związki chemiczne z więcej niż dwoma rodzajami atomów (bez kompleksów)	E
Związki chemiczne z kompleksami BX i BX ₂	F
Związki chemiczne z kompleksami BX ₃	G
Związki chemiczne z kompleksami BX ₄	H
Związki chemiczne z kompleksami BX ₆	I
Związki chemiczne z kompleksami złożonymi	K
Stopy	L
Związki organiczne	O
Krzemiany	S

Układy i sieci krystalograficzne metali

- A1 (RSC) regularna ściennie centrowana
- A2 (RPC) regularna przestrzennie centrowana
- A3 (HZ) heksagonalna zwarta

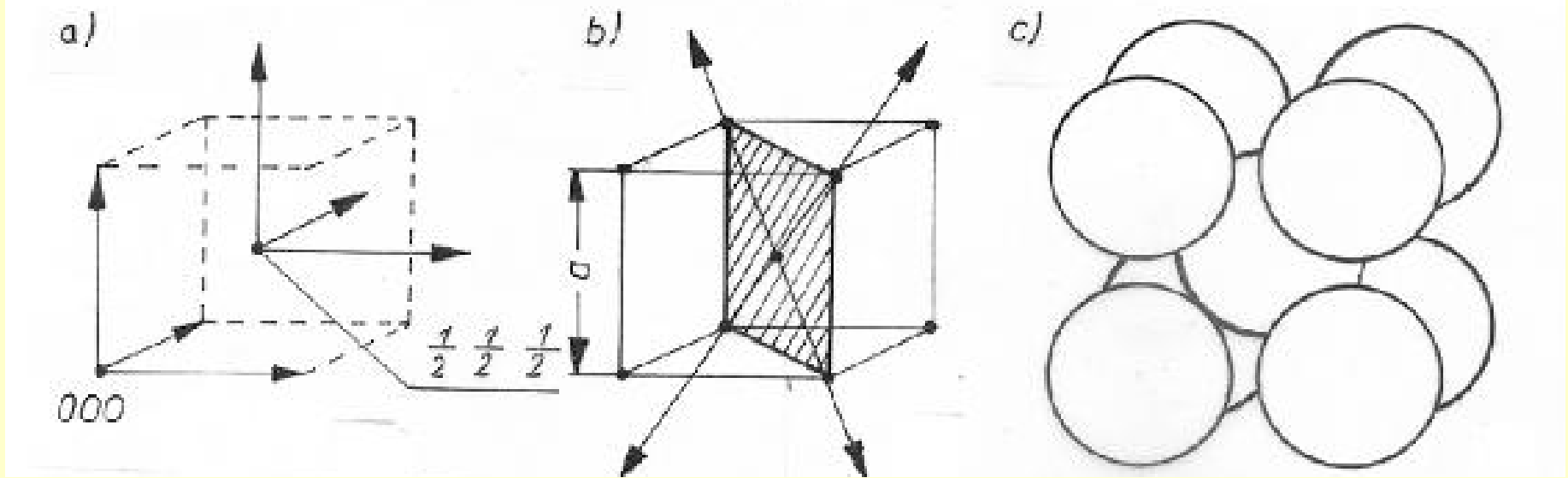
Metale nie krystalizują w układach jednoskośnym i trójskośnym

Wiązanie: metaliczne



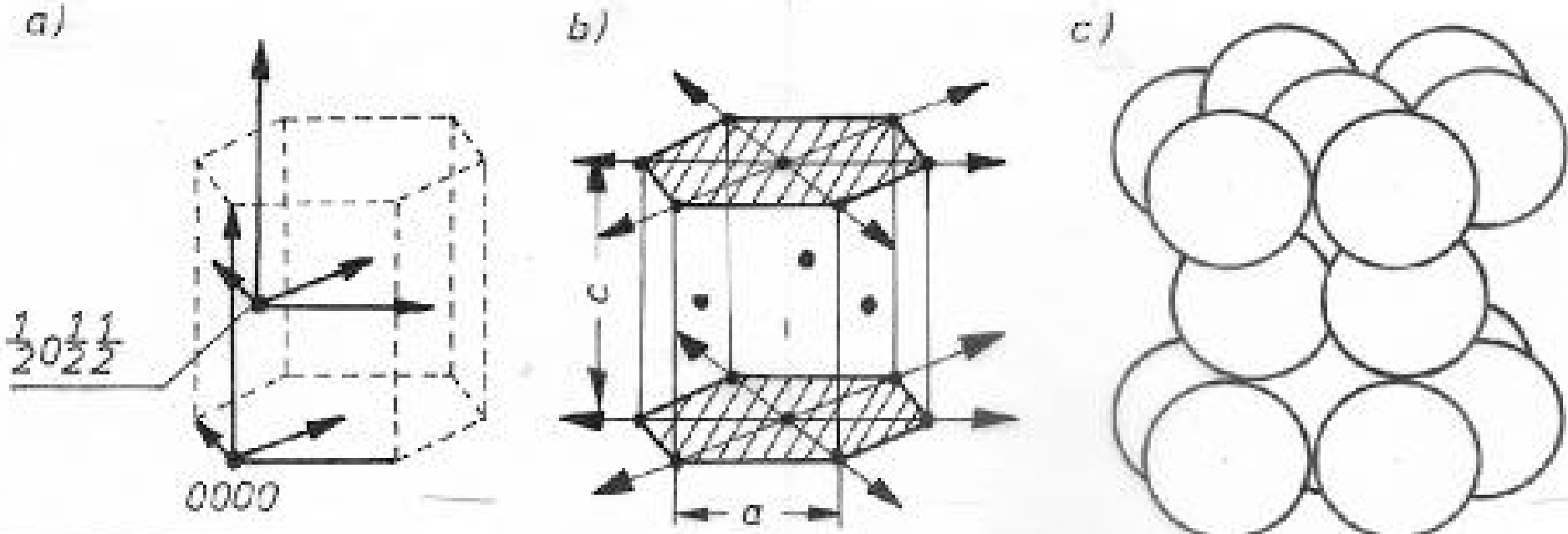
Sieć A1: a) schemat powstawania, b) komórka sieci z zaznaczonymi płaszczyznami $\{111\}$ i kierunkami $\langle 110 \rangle$ zwarcie wypełnionymi atomami, c) atomy komórki w postaci sztywnych kul

Sieć A1 charakteryzuje się zwartym ułożeniem atomów w przestrzeni, z płaszczyznami $\{100\}$ i kierunkami $\langle 110 \rangle$ zwarcie wypełnionymi atomami. W sieci A1 krystalizują metale o najwyraźniejszych cechach metalicznych: srebro, złoto, platyna, aluminium, miedź, nikiel, ołów, żelazo γ , kobalt β .



Sieć A2: a) schemat powstawania, b) komórka sieci z zaznaczonymi kierunkami zwarcie wypełnionymi atomami $\langle 111 \rangle$ na płaszczyźnie (110), c) atomy komórki w postaci sztywnych kul

W sieci A2 nie ma płaszczyzn zwarcie wypełnionych, są natomiast kierunki o zwartym ułożeniu atomów $\langle 111 \rangle$, znajdujące się na najgęściej wypełnionych płaszczyznach $\{110\}$. Strukturę A2 posiadają np. wanad, molibden, wolfram, niob, żelazo α , chrom α , tytan β .



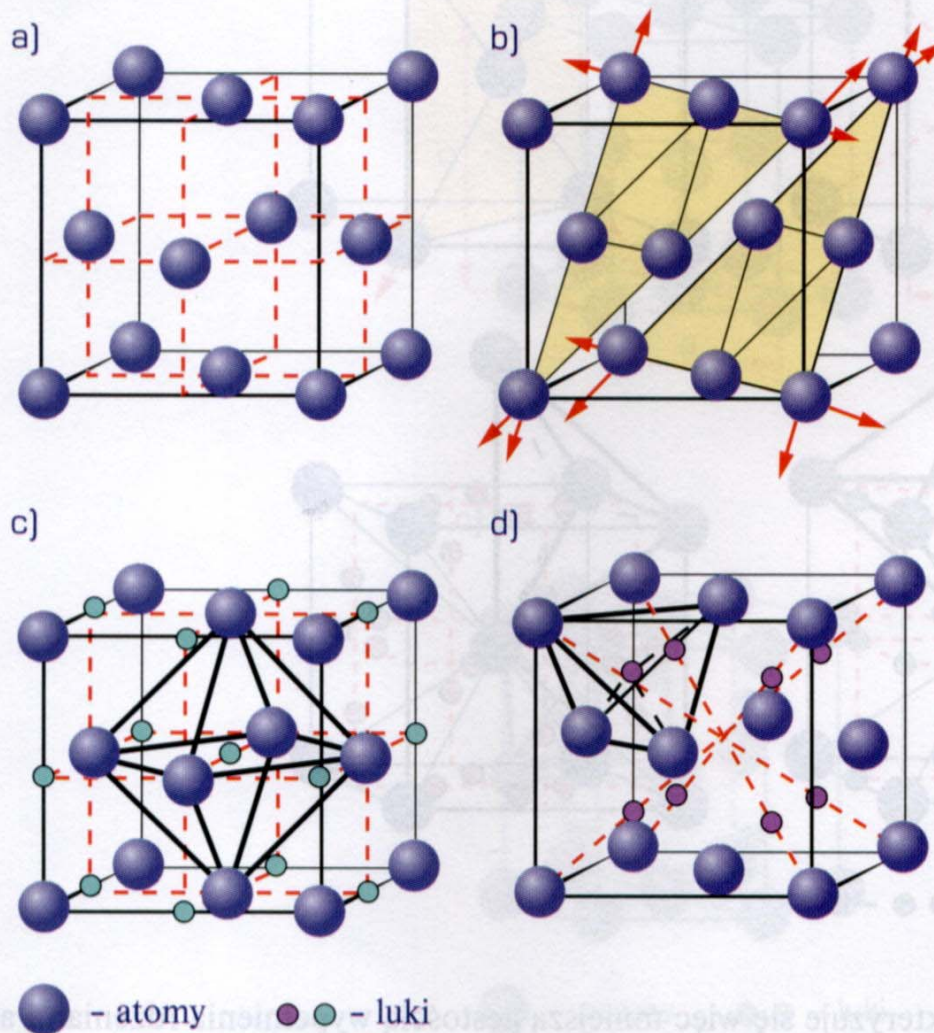
Sieć A3: a) schemat powstawania, b) komórka sieci z zaznaczonymi płaszczyznami $\{0001\}$ i kierunkami $\langle 1120 \rangle$ zwarcie wypełnionymi atomami, c) atomy komórki w postaci sztywnych kul

W idealnej sieci A3 stosunek osiowy c/a równy jest 1,633. Podobnie jak sieć A1, sieć A3 charakteryzuje się zwartym ułożeniem atomów w przestrzeni. W sieci A3 krystalizują m.in. beryl, magnez, cynk i kadm.

Rysunek 3.7

Schemat elementarnej komórki sieci regularnej płasko centrowanej AI (rys. według R.W. Cahna)

- rozłożenie atomów,
- płaszczyzny $\{111\}$ i kierunki $\langle 110 \rangle$ o gęstym ułożeniu atomów,
- luki oktaedryczne,
- luki tetraedryczne



Rysunek 3.8

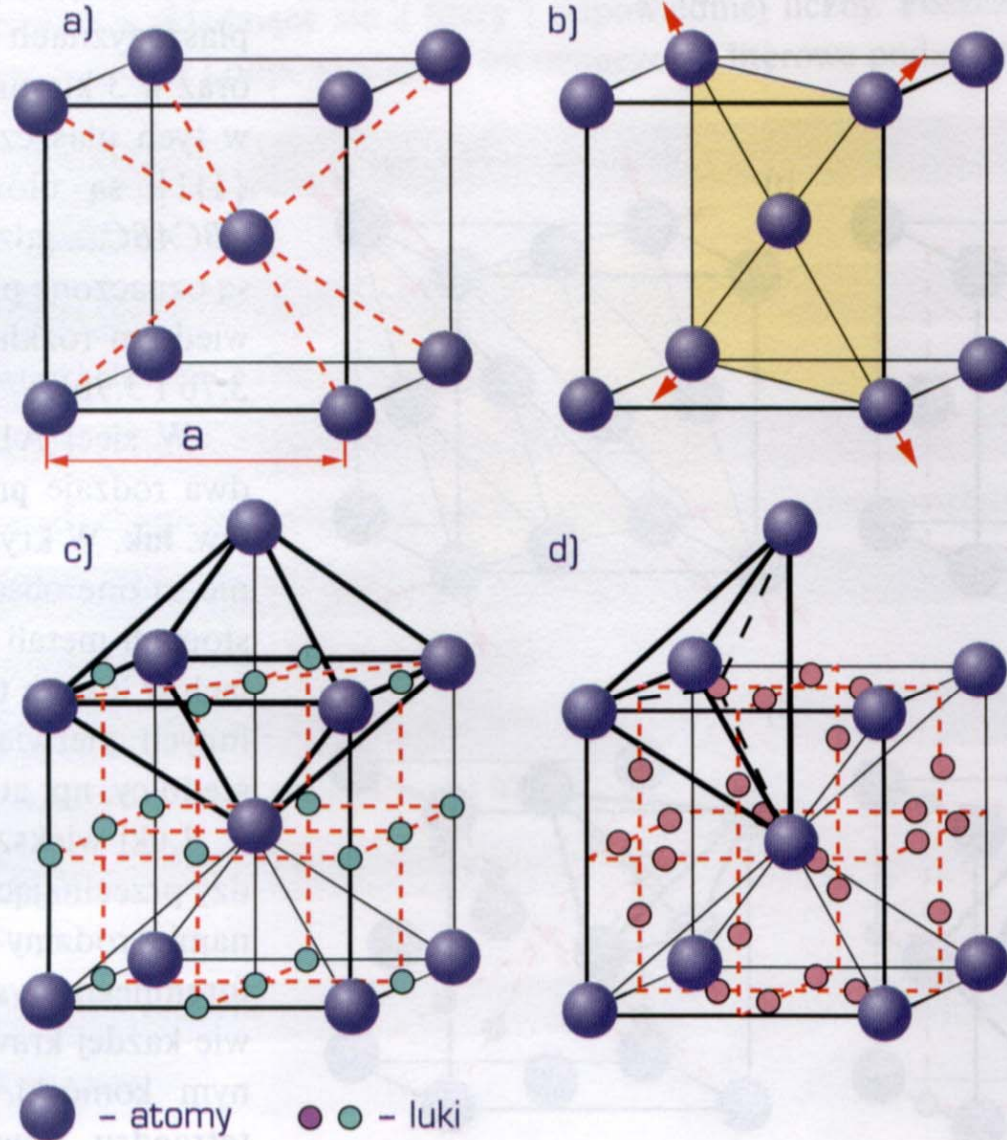
Schemat elementarnej komórki sieci regularnej przestrzennie centrowanej A2 (według R.W. Cahna)

a) rozłożenie atomów,

b) płaszczyzny $\{110\}$ i kierunki $\langle 111 \rangle$ o gęstym ułożeniu atomów,

c) luki oktaedryczne,

d) luki tetraedryczne



Rysunek 3.9

Schemat elementarnej komórki sieci heksagonalnej zwartej A3 (według R.W. Cahna)

a) rozłożenie atomów,

b) schemat sekwencji ułożenia płaszczyzn (0001) w sieci A3 (A i B) oraz {111} w sieci A1 (A, B i C) o najgęstszym ułożeniu atomów,

c) luki oktaedryczne,

d) luki tetraedryczne

