KRISTALNE STRUKTURE

28.02.2020.

Geometrija kristala

1. Kristali
2. Rešetka
3. Čvorovi rešetke, translacije rešetke
4. Ćelija – primitivna i neprimitivna
5. Parametri rešetke
6. Kristal=rešetka+motiv

Materija

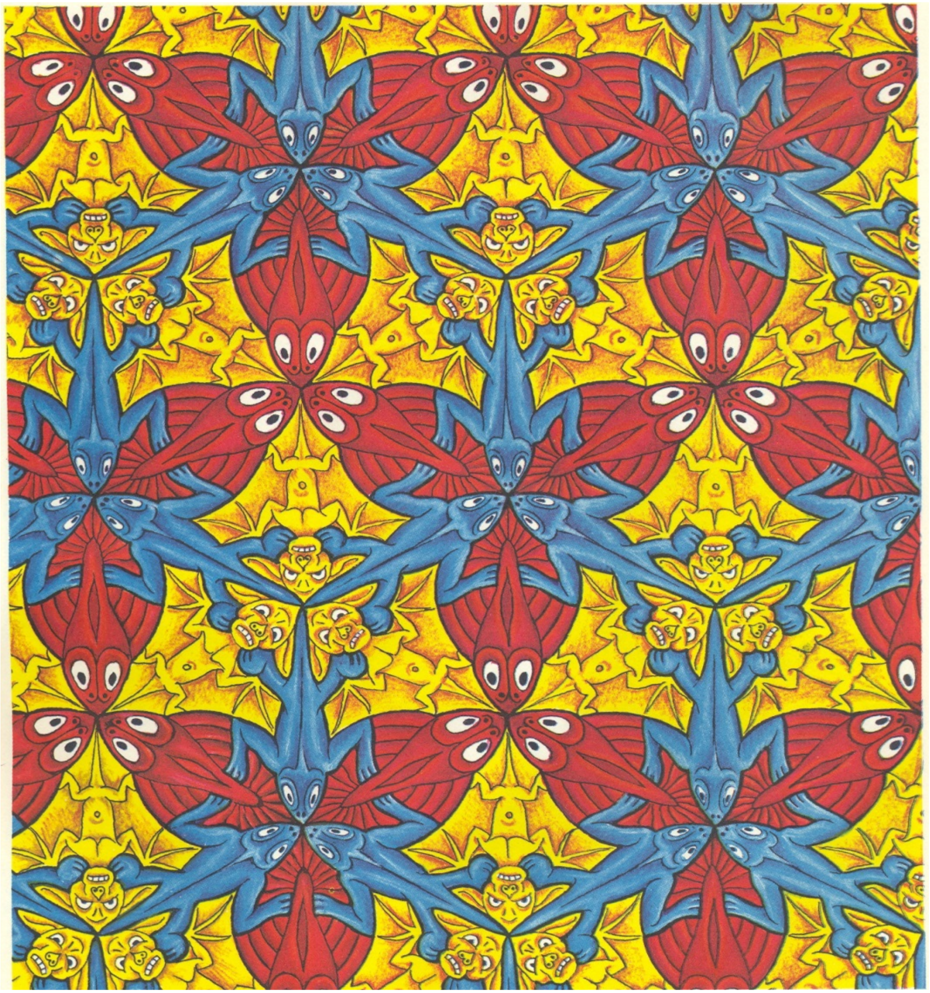
- **Čvrsto telo**
  - **Kristali**
  - Amorfni materijali
- Tečnost
- Gas

Kristal?

Trodimenzionalni translacioni periodični raspored atoma u prostoru zove se kristal.

Dvodimenzionalna periodična mustra (šara) od holandskog umetnika M.C. Escher-a

Vazduh, voda i zemlja



Rešetka?

Trodimenzionalni translacioni periodični raspored tačaka u prostoru zove se rešetka

Kristal

Trodimenzionalni translacioni periodični raspored

atoma

Rešetka

Trodimenzionalni translacioni periodični raspored

tačaka

Kakav je odnos između rešetke i kristala?

$\boxed{\text{Kristal = Rešetka + Motiv}}$

Motiv ili baza: atom ili grupa atoma koji su pridruženi svakom čvoru (tački) rešetke

Kristal=rešetka+osnova

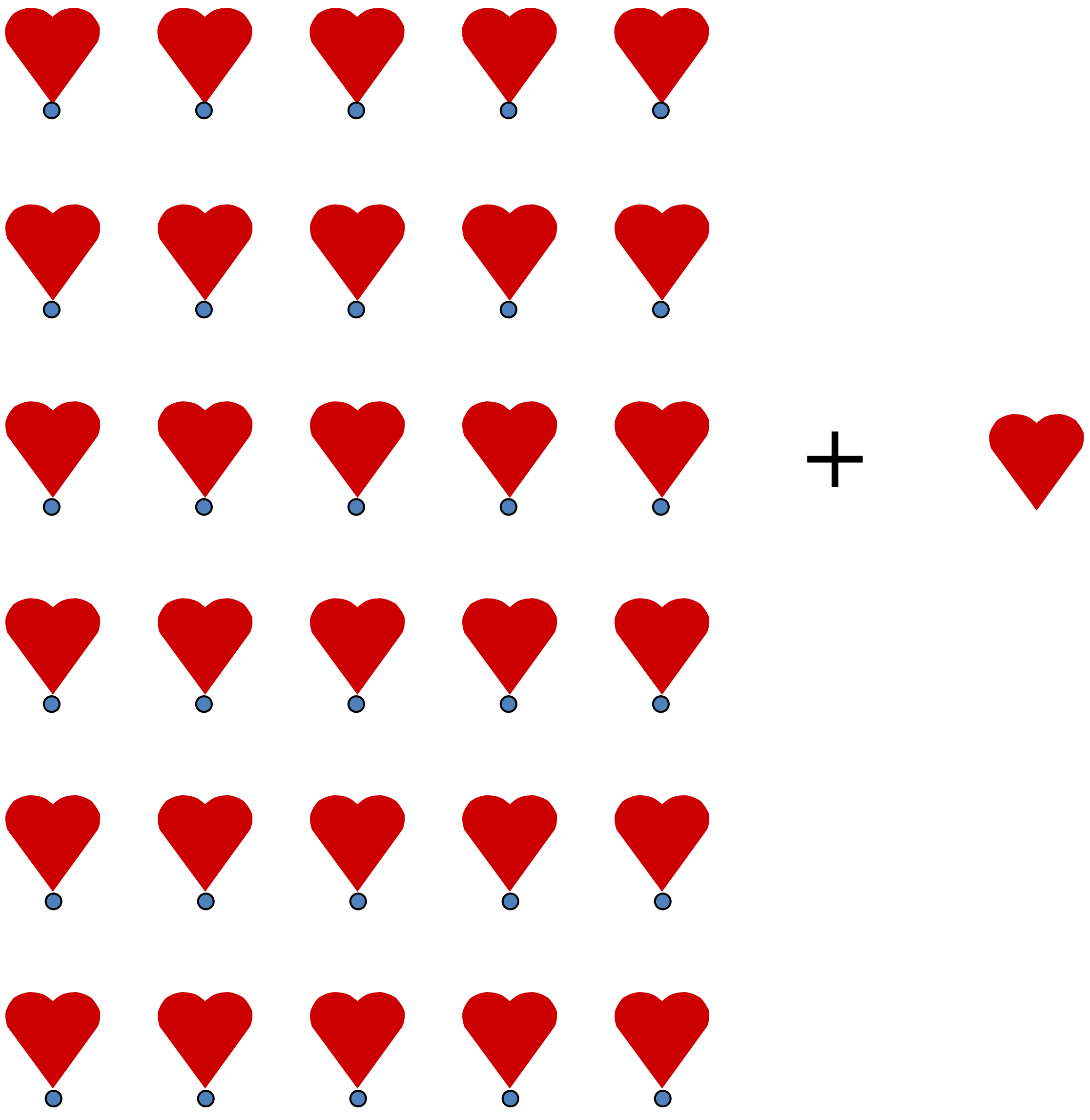
Rešetka: podloga periodičnosti kristala,

Baza: atom ili grupa atoma koji se pridružuju svakom čvoru rešetke

Rešetka: kako se nešto ponavlja

Motiv: šta se ponavlja

Mustra = Rešetka + Srce (motiv)



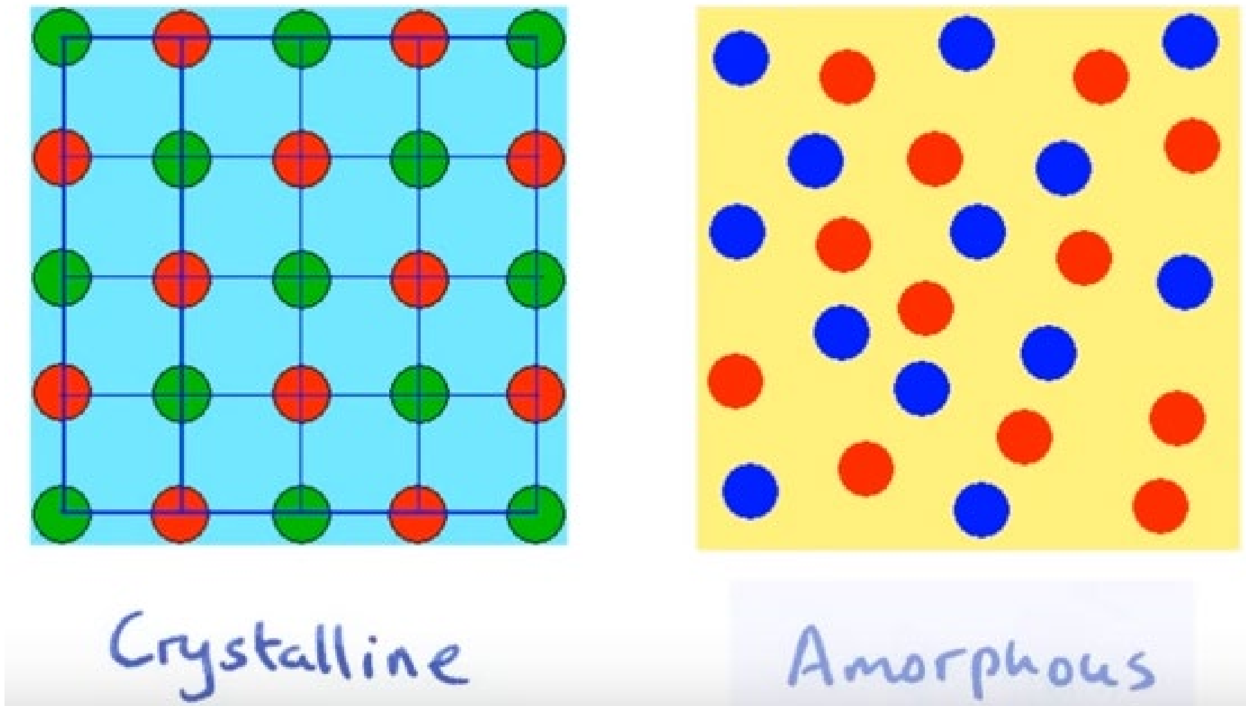
Prostorna rešetka

Diskretni poredak tačaka u *3-d prostoru* takav da svaka tačka ima ***identično okruženje***

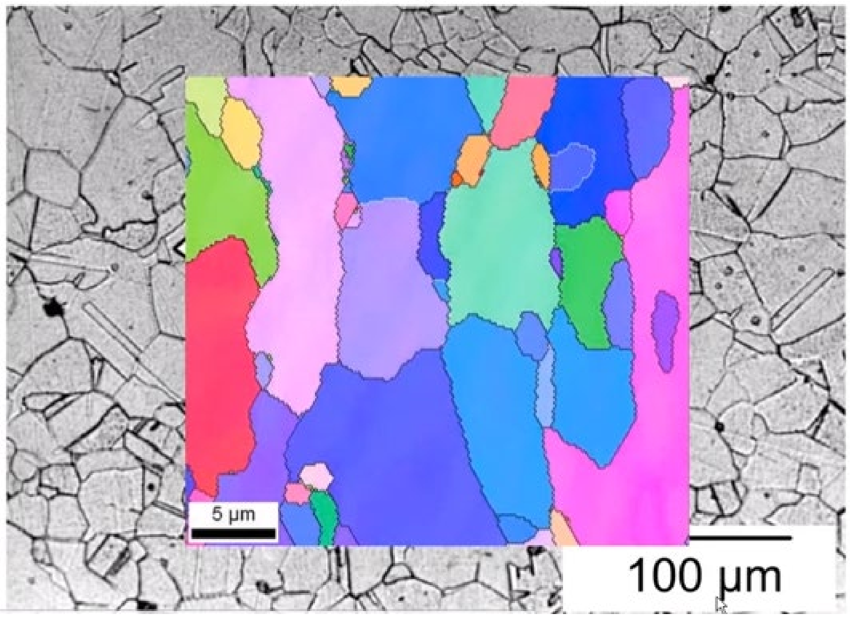
Rešetka

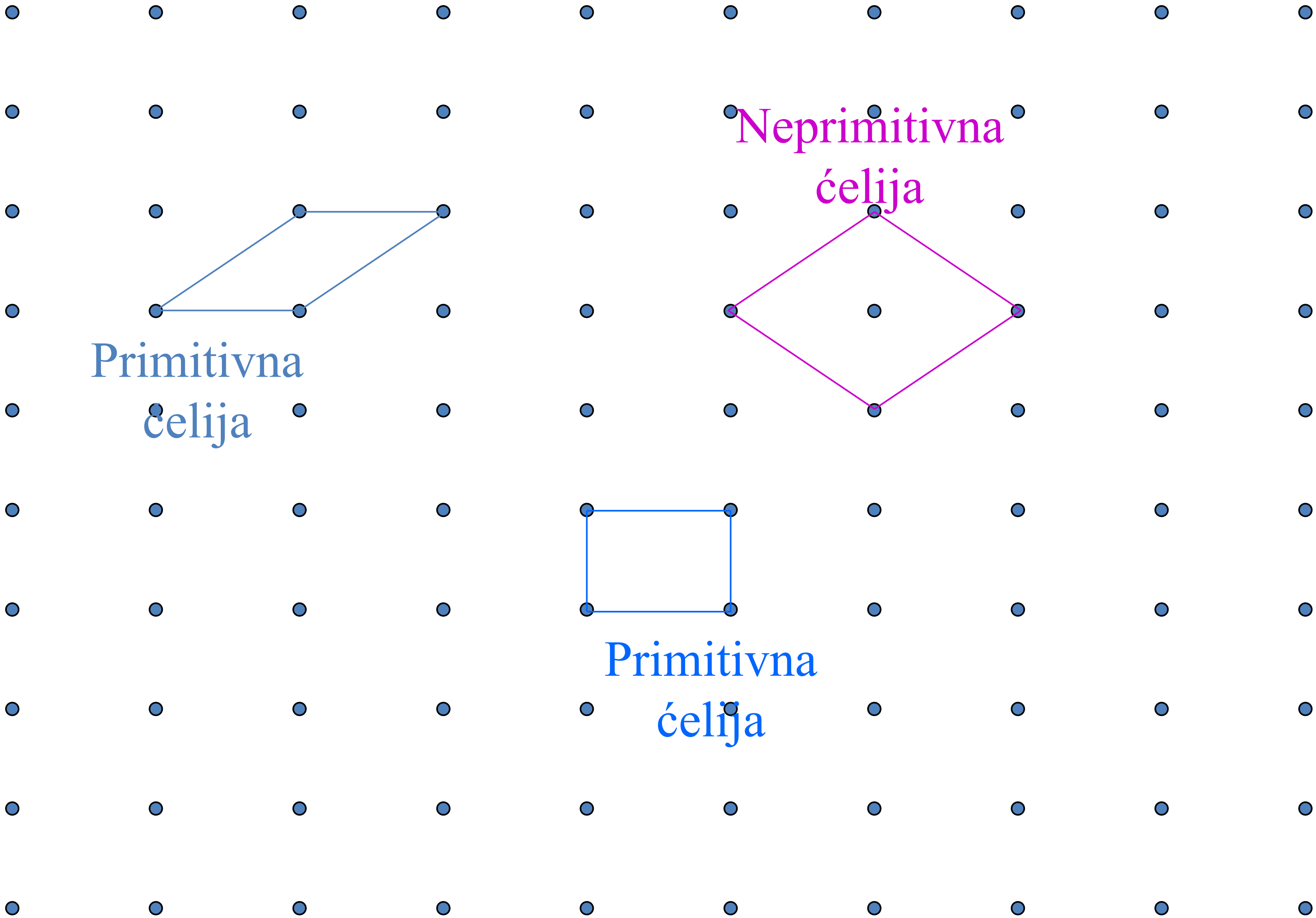
Konačna ili beskonačna?

Dvodimenzionalna 2D ili trodimenzionalna 3D


Crystalline
Amorphous

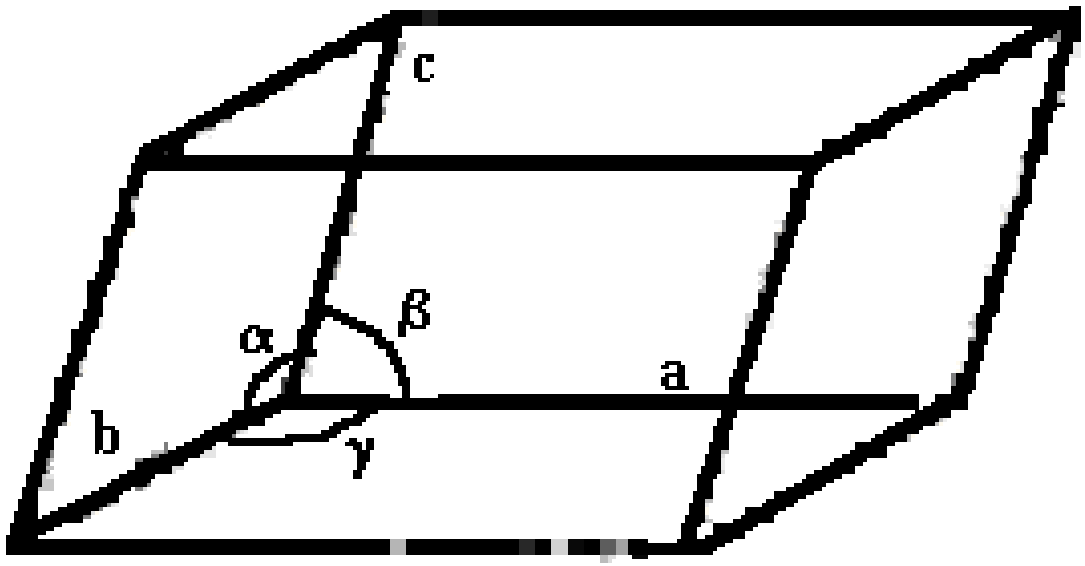
Polycrystals




Neprimitivna ćelija
Primitivna ćelija
Primitivna ćelija

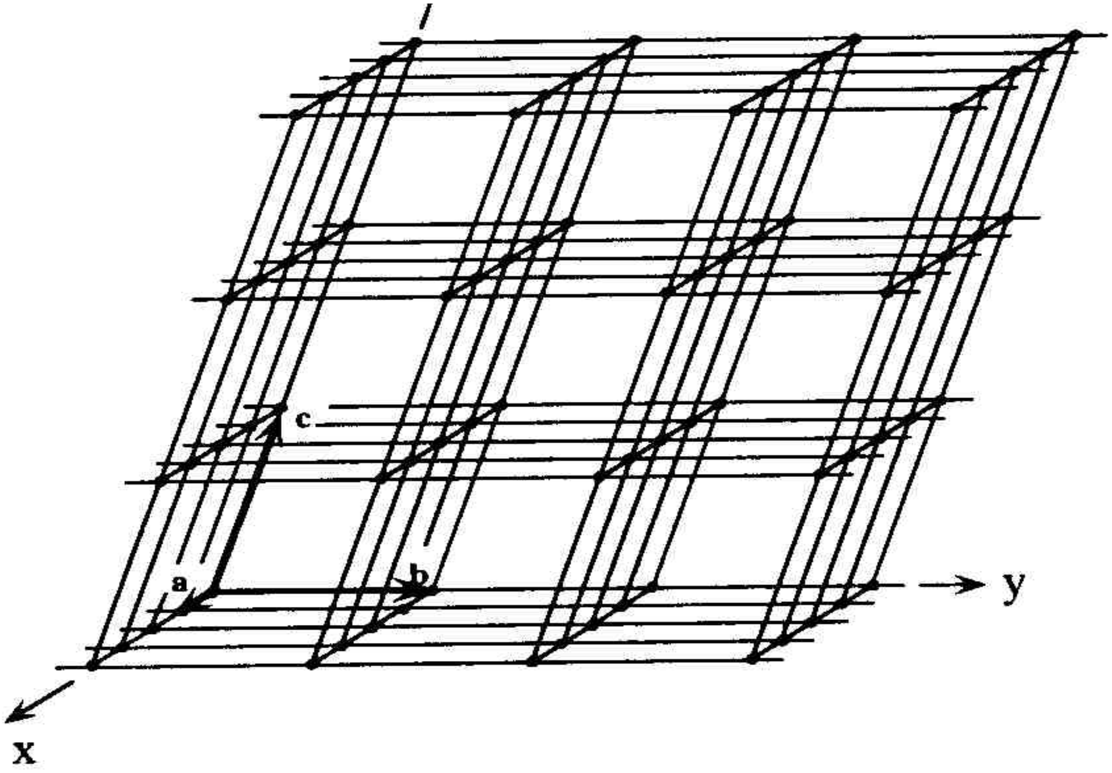
Kristali su napravljeni od beskonačnog broja jediničnih ćelija

Jedinična ćelija je najmanja jedinica u kristalu koja se ponavlja i koja tako pravi celi kristal.



Dimenzije jedinične ćelije kristala su definisane sa 6 parametara, dužinama tri ose, a, b, i c, i sa tri ugla među osama, α, β i γ.

Kristalna rešetka je 3-D poredak jediničnih ćelija.



Kristalna rešetka je imaginativni rešetkasti sistem u 3 dimenzije u kojem svaka tačka (ili čvor) ima okolinu koja je ista za bilo koju drugu tačku ili čvor.

Ćelije

- Ćelija je konačni predstavnik beskonačne rešetke.
- Ćelija je paralelogram (2D) ili paralelopiped (3D) sa čvorovima rešetke u njenim uglovima.
- Ako su čvorovi rešetke samo u uglovima, ćelija je primitivna.
- Ako postoje i čvorovi u ćeliji osim u uglovima, ćelija je neprimitivna.

Parametri rešetke

Dužine tri strane paralelopipeda :
a, b i c.

Tri ugla između strana:

α, β, γ

Konvencija

a paralna x-osi

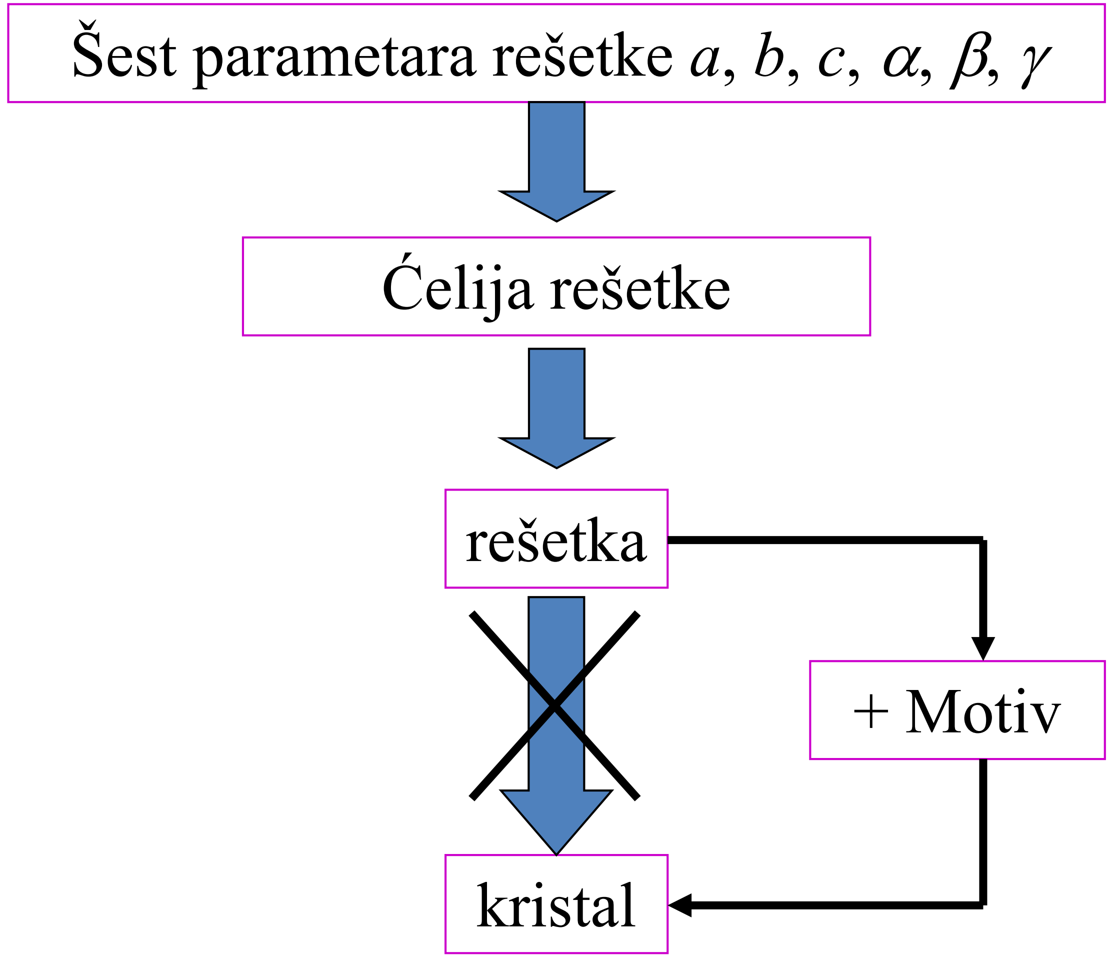
b paralna y-osi

c paralna z-osi

α Ugao između y i z

β Ugao između z i x

γ Ugao između x i y


Šest parametara rešetke a, b, c, α, β, γ
Ćelija rešetke
rešetka
+ Motiv
kristal

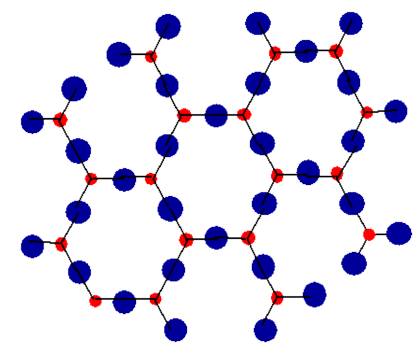
Kristalne strukture i njihove osobine

- Kako se atomi organizuju u strukturu čvrstog tela? (za sada ćemo se koncentrisati na metale)

- Kako gustina materijala zavisi od njegove strukture?

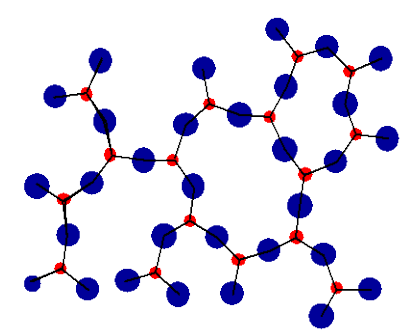
- Kako karakteristike materijala zavise od orjentacije uzorka?

MATERIJALI I PAKOVANJE



kristalni SiO_2

• Si ● Oxygen



nekristalni SiO_2

Kristalni materijali...

- atomi su pakovani u periodične, 3D nizove
- tipični predstavnici su
  - -metali
  - -mnoge keramike
  - -neki polimeri

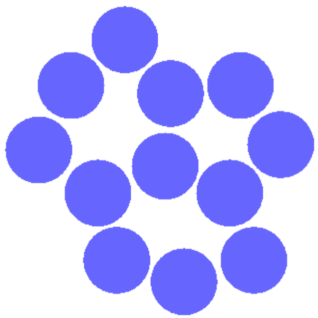
Nekristalni materijali...

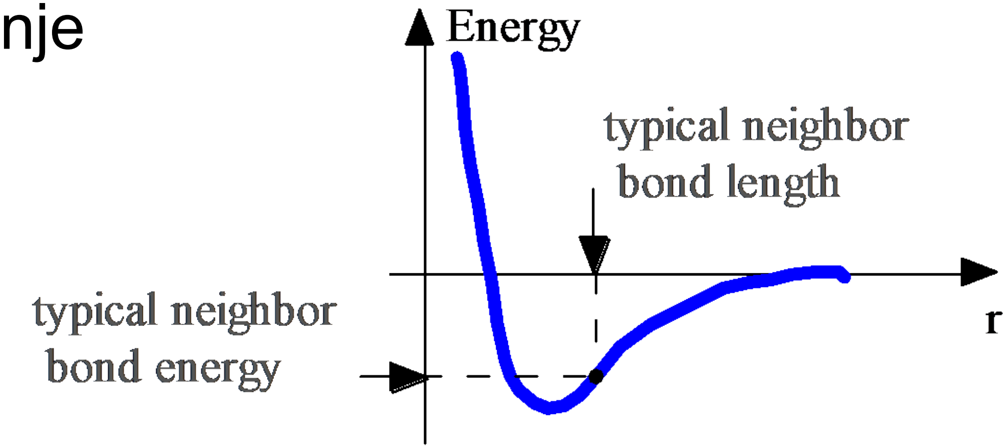
- atomi nemaju periodično pakovanje
- pojavljuju se kod:
  - -kompleksnih struktura
  - -naglog hlađenja

“Amorfni" = Nekristalni

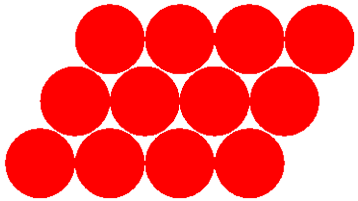
ENERGIJA I PAKOVANJE

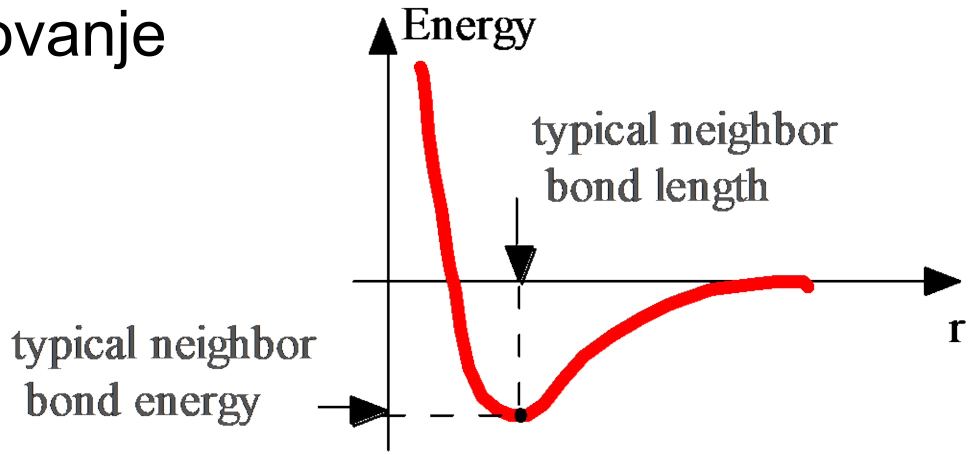
- Nasumično pakovanje





- Gusto, pravilno pakovanje





Guste, pravilno pakovane strukture imaju manje energije.

METALNI KRISTALI

- su gusto pakovani.
- ima nekoliko razloga za gusto pakovanje:

-Tipično je da su u metalima prisutni atomi samo jednog elementa pa su svi atomski radijusi isti.
- Metalna veza nije usmerena.
- Rastojanje najbližih suseda nastoji da bude što manje da bi se snizila energija veze.

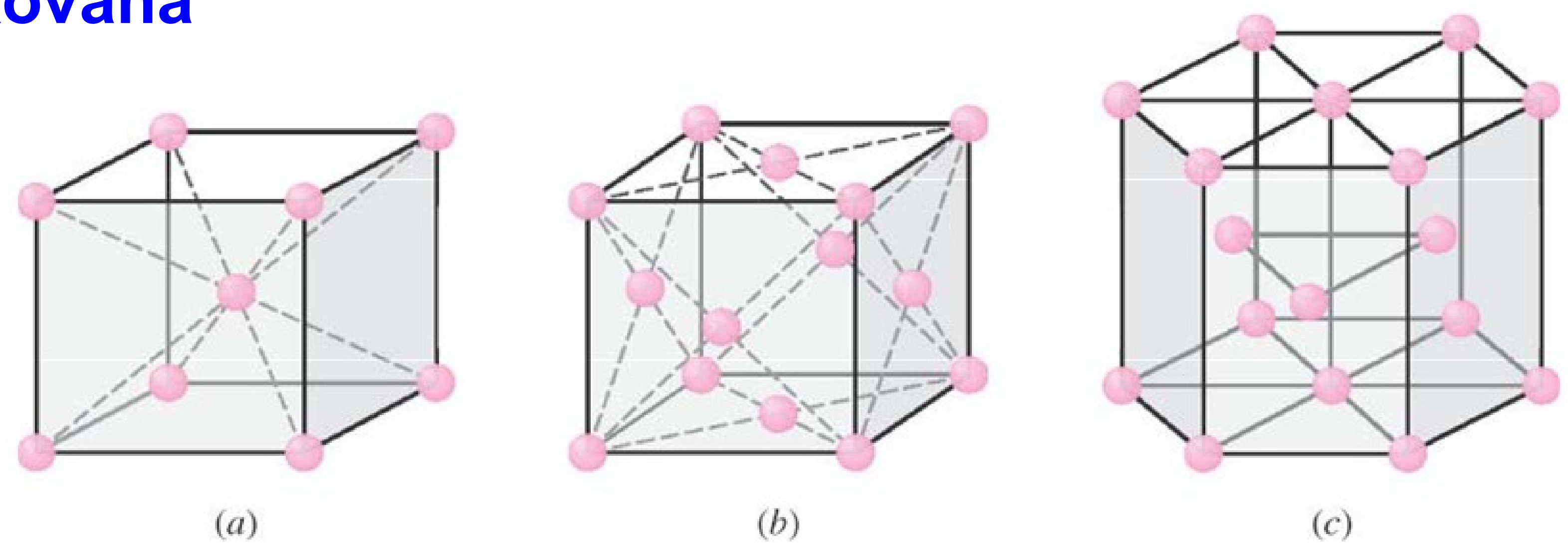
- imaju najjednostavnije kristalne strukture

Postoje tri glavne kristalne strukture metala

(a) Body-centered cubic (BCC), prostorno centrirana

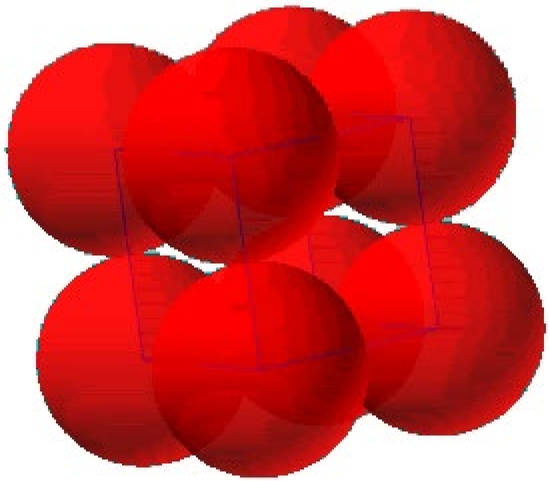
(b) Face-centered cubic (FCC), površinski centrirana

(c) Hexagonal close packed (HCP), heksagonalna gusto pakovana

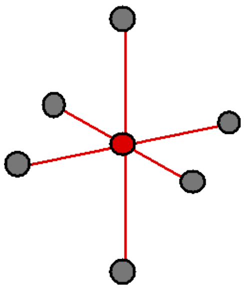


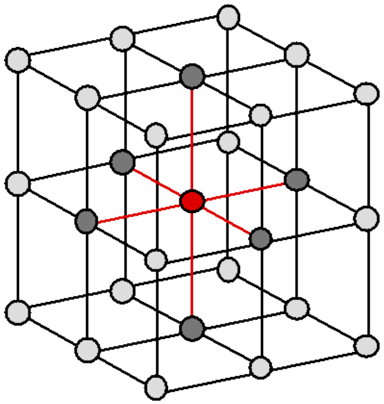
Pored FCC, BCC i HCP strukture postoji i JEDNOSTAVNA KUBNA STRUKTURA (SCC Simple Cubic Cristal)

- Vrlo je retka jer je loše pakovanje (samo Po ima ovu strukturu)
- Gusto pakovani pravci su ivice kocke.



- koordinacioni broj **(broj prvih suseda)** = 6





FAKTOR ATOMSKOG PAKOVANJA – APF je

- zapremina popunjena atomima u jediničnoj ćeliji
- zapremina jedinične ćelije

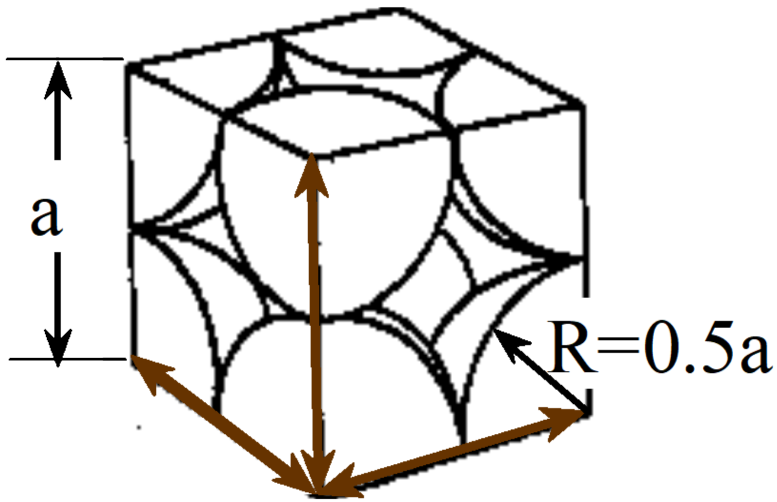
- Pod pretpostavkom da se radi o modelu čvrstih sfera

$$APF = \frac{\text{Volume of atoms in unit cell*}}{\text{Volume of unit cell}}$$

*assume hard spheres

FAKTOR ATOMSKOG PAKOVANJA

- APF za jednostavnu kubnu strukturu = 0.52



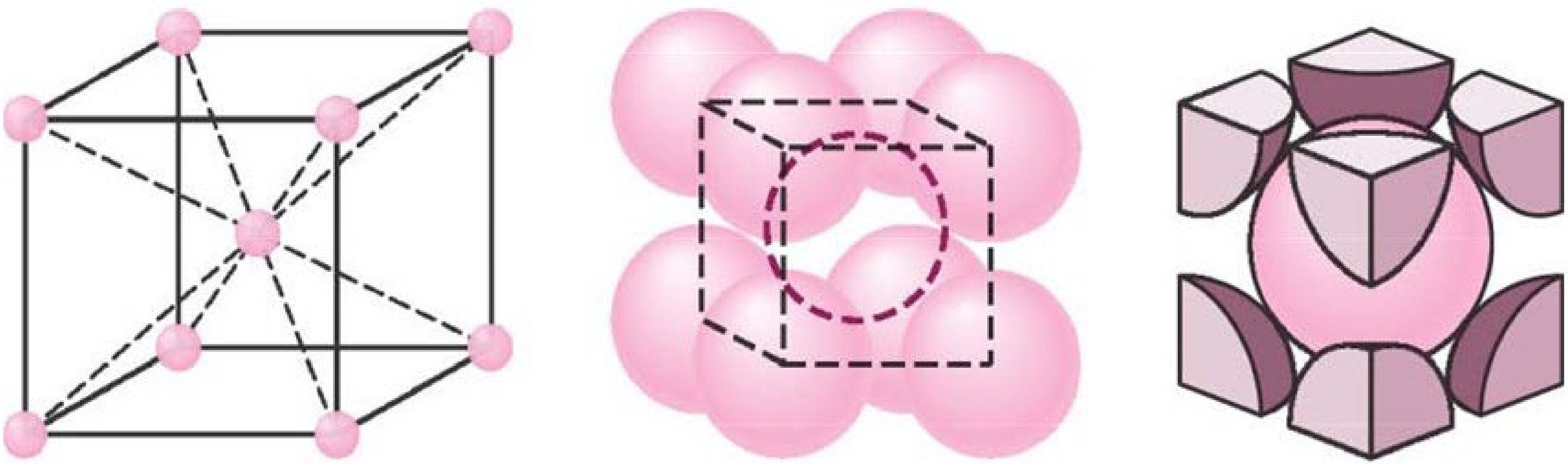
close-packed directions

contains 8 x 1/8 =
1 atom/unit cell

$$APF = \frac{\underbrace{1}_{\frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}}} \; \underbrace{\frac{4}{3}\pi(0.5a)^3}_{\frac{\text{volume}}{\text{atom}}}}{\underbrace{a^3}_{\frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}}}$$

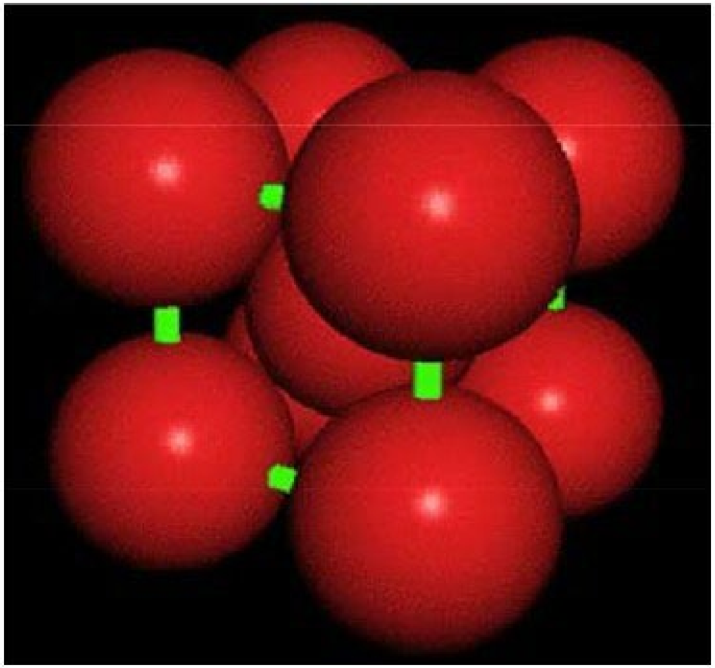
Body-centered cubic (BCC)

Prostorno centrirana kubna

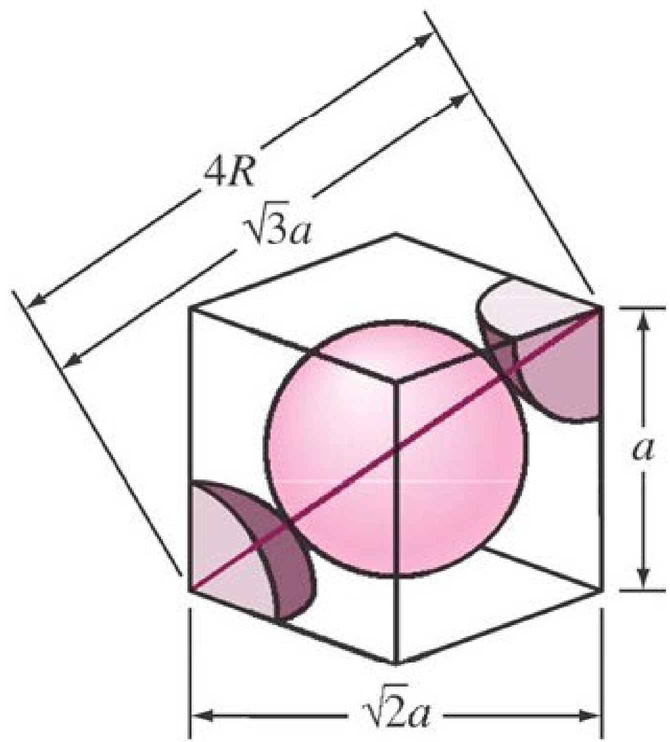


(a) (b) (c)

BCC struktura



Geometrija BCC strukture

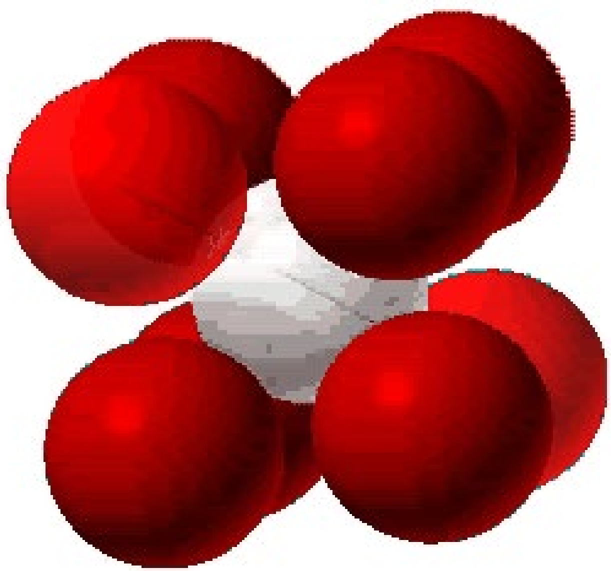


$$\sqrt{3}a = 4R$$

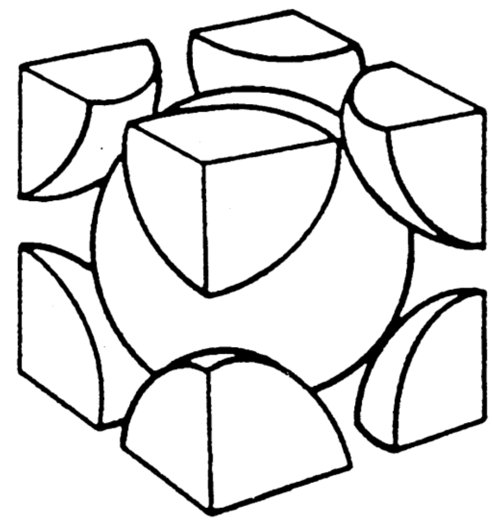
BODY CENTERED CUBIC STRUCTURE (BCC)

Prostorno centrirana kubna struktura

- Gusto pakovani pravci su dijagonale kocke.

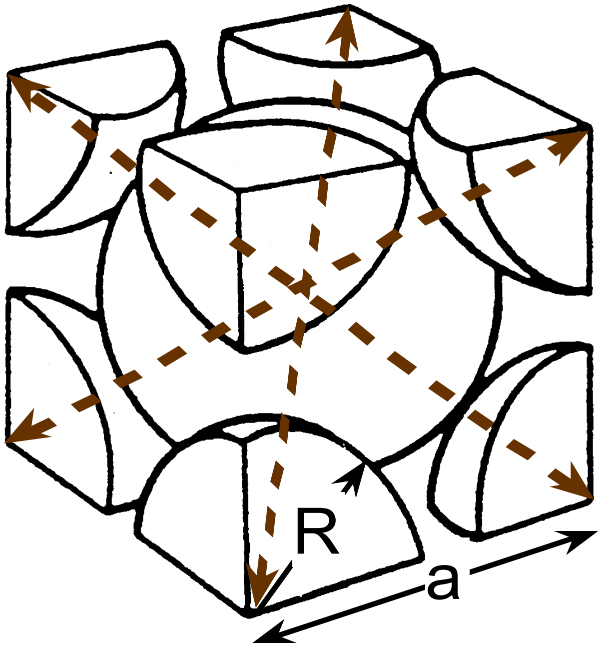


- koordinacioni broj = 8



FAKTOR ATOMSKOG PAKOVANJA za BCC

- APF za prostorno centriranu kubnu strukturu = 0.68



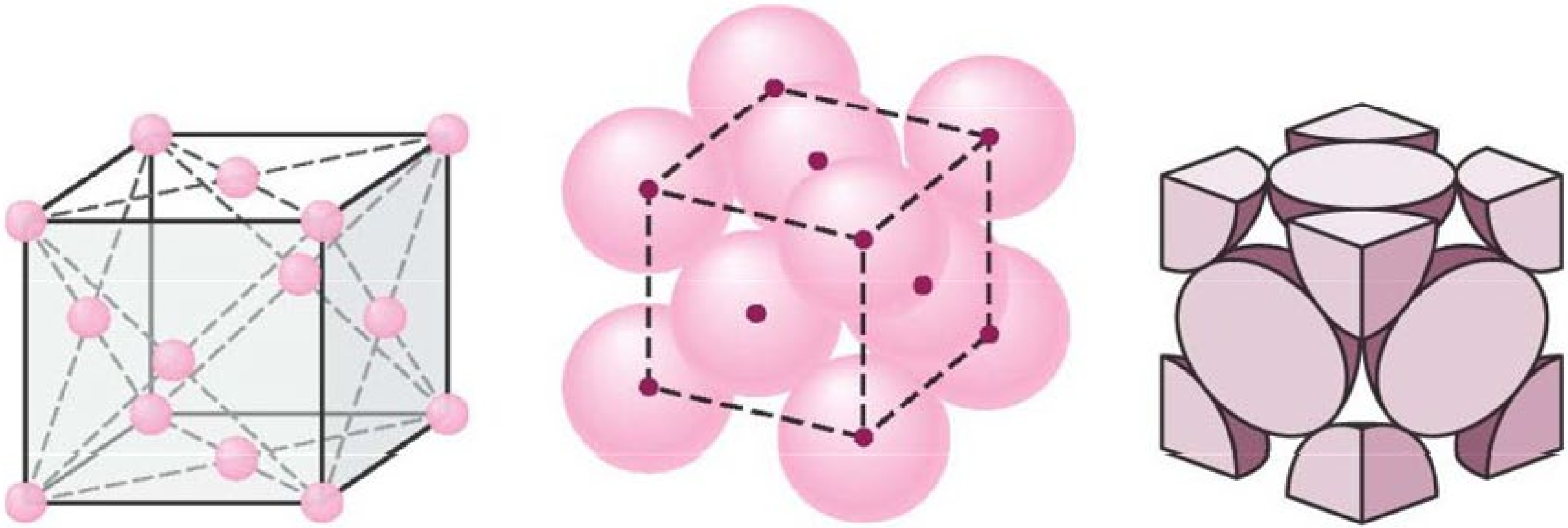
Close-packed directions:
length = 4R
$= \sqrt{3}\,a$

Unit cell contains:
1 + 8 x 1/8
= 2 atoms/unit cell

$$APF = \frac{\underbrace{2}_{\text{atoms/unit cell}} \; \underbrace{\frac{4}{3}\pi\left(\sqrt{3}a/4\right)^3}_{\text{volume/atom}}}{\underbrace{a^3}_{\text{volume/unit cell}}}$$

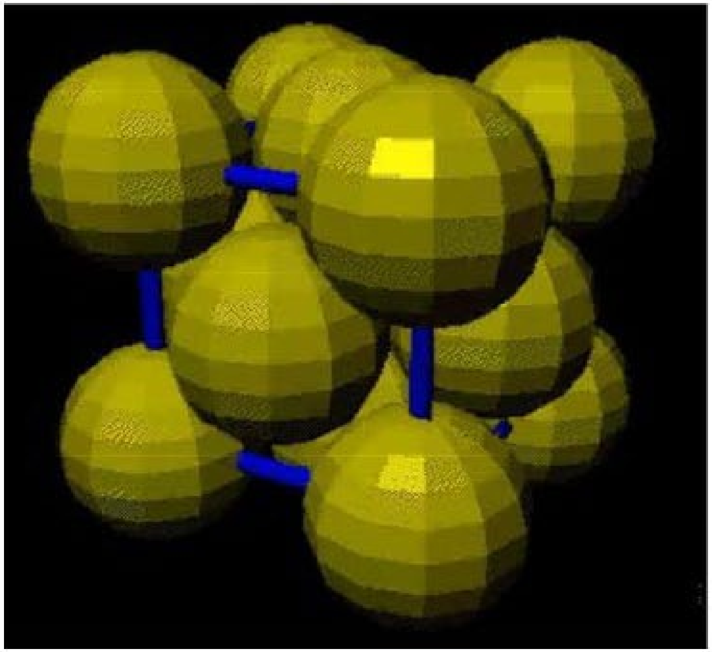
Face-centered cubic (FCC)

površinski centrirana kubna

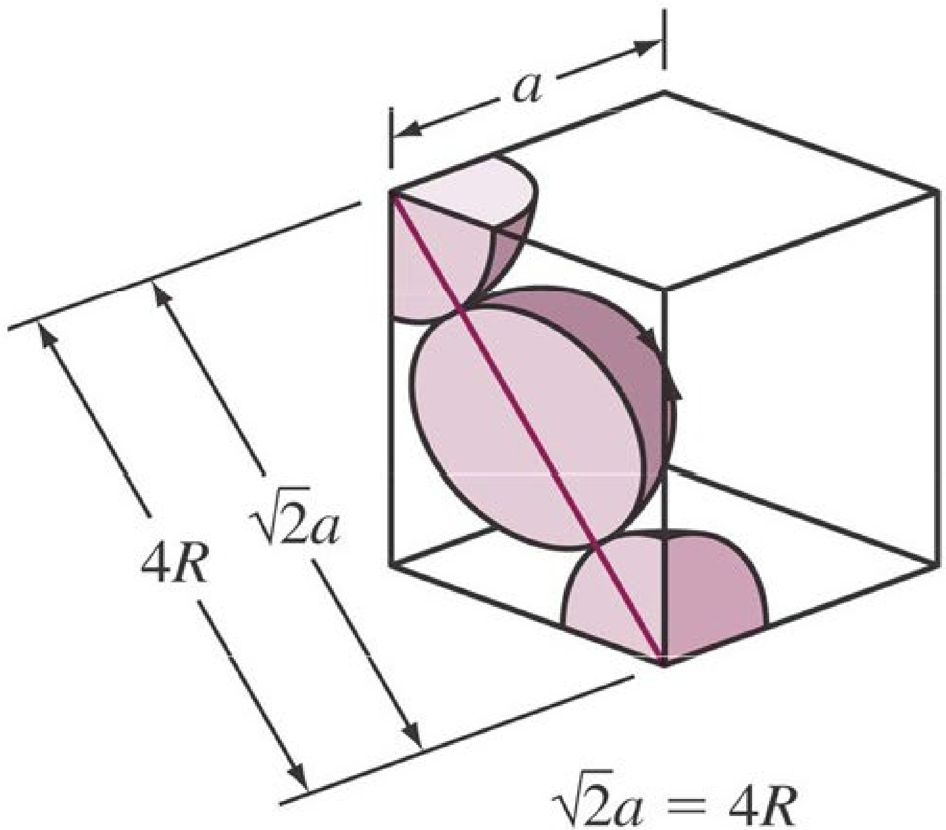


(a) (b) (c)

FCC struktura



Geometrija FCC Structure

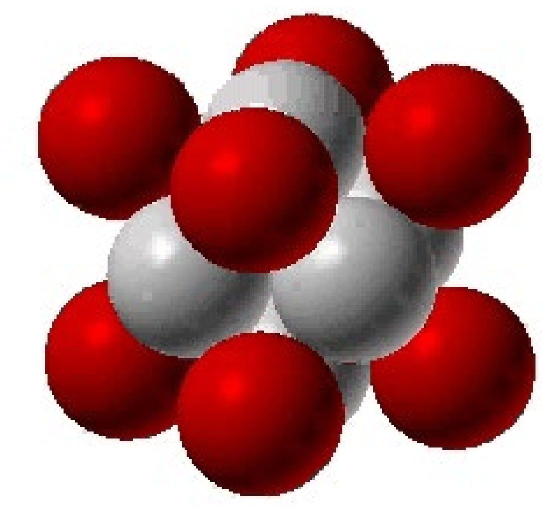


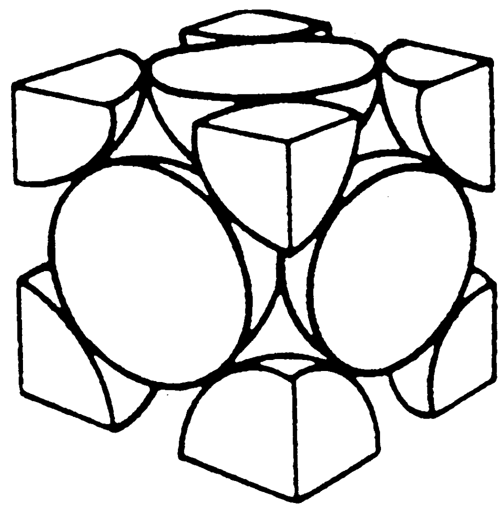
POVRŠINSKI CENTRIRANA KUBNA STRUKTURA
FACE CENTERED CUBIC STRUCTURE (FCC)

- Gusto pakovani pravci su dijagonale stranica.

--Napomena: svi atomi su isti; atomi na preseku površinskih dijagonala su drugačije boje (beli) da bismo ih lakše uočili.

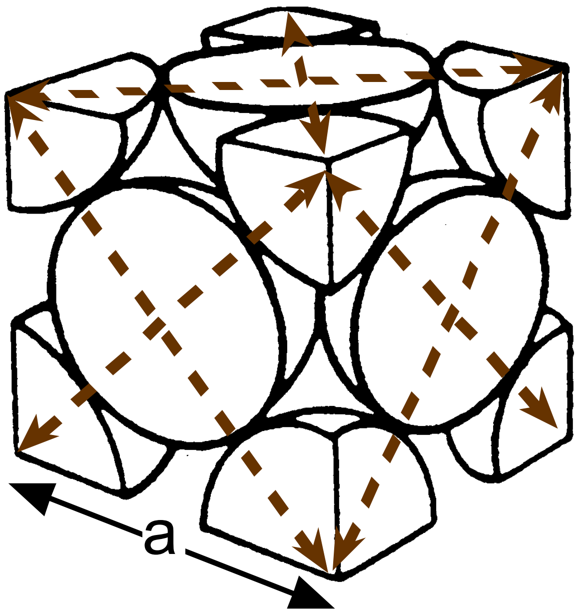
- koordinacioni broj = 12





FAKTOR ATOMSKOG PAKOVANJA za FCC

- APF ZA POVRŠINSKI CENTRIRANU KUBNU = 0.74



Close-packed directions:

length = 4R $= \sqrt{2}\,a$

Unit cell contains:

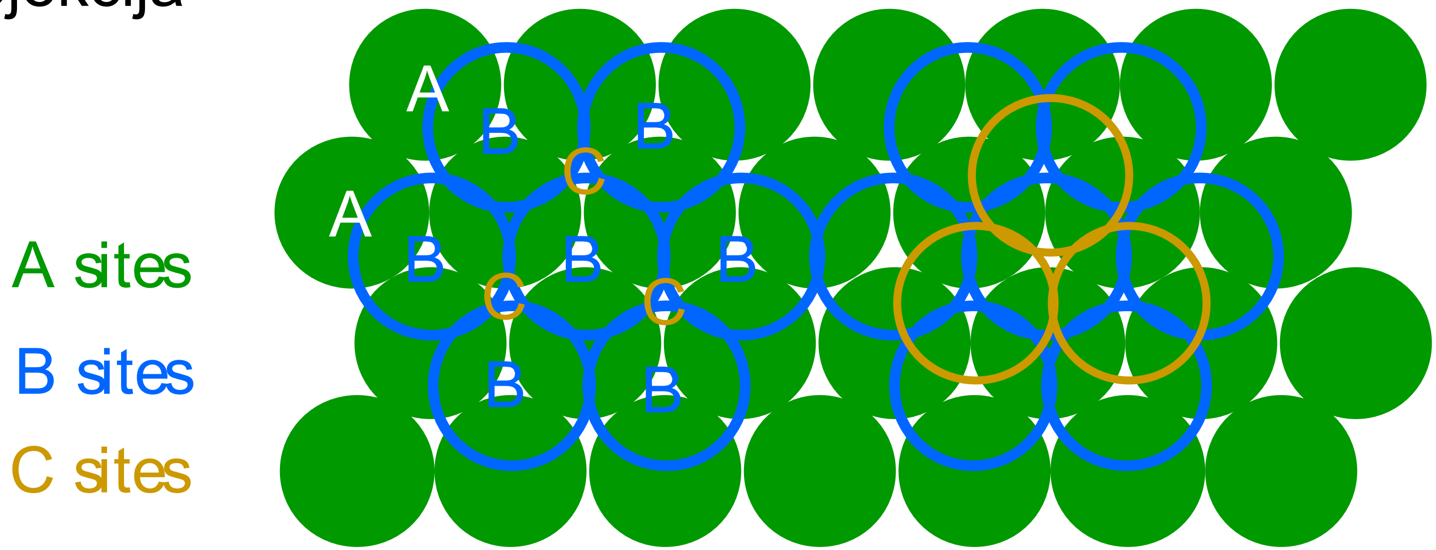
6 x 1/2 + 8 x 1/8

= 4 atoms/unit cell

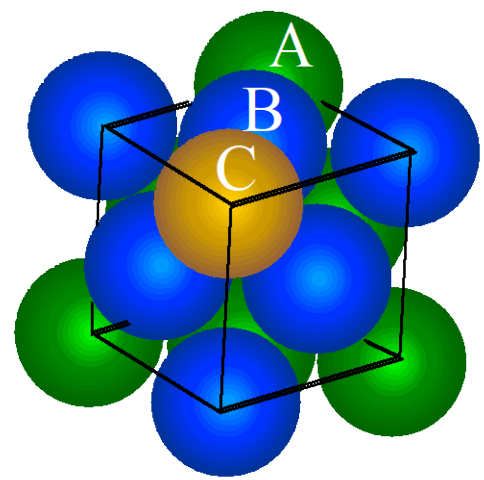
$$\text{APF} = \frac{\overbrace{4}^{\frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}}}\ \overbrace{\frac{4}{3}\pi\left(\sqrt{2}a/4\right)^3}^{\frac{\text{volume}}{\text{atom}}}}{\underbrace{a^3}_{\frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}}}$$

FCC SEKVENCA

- ABCABC... Sekvenca pakovanja
- 2D Projekcija

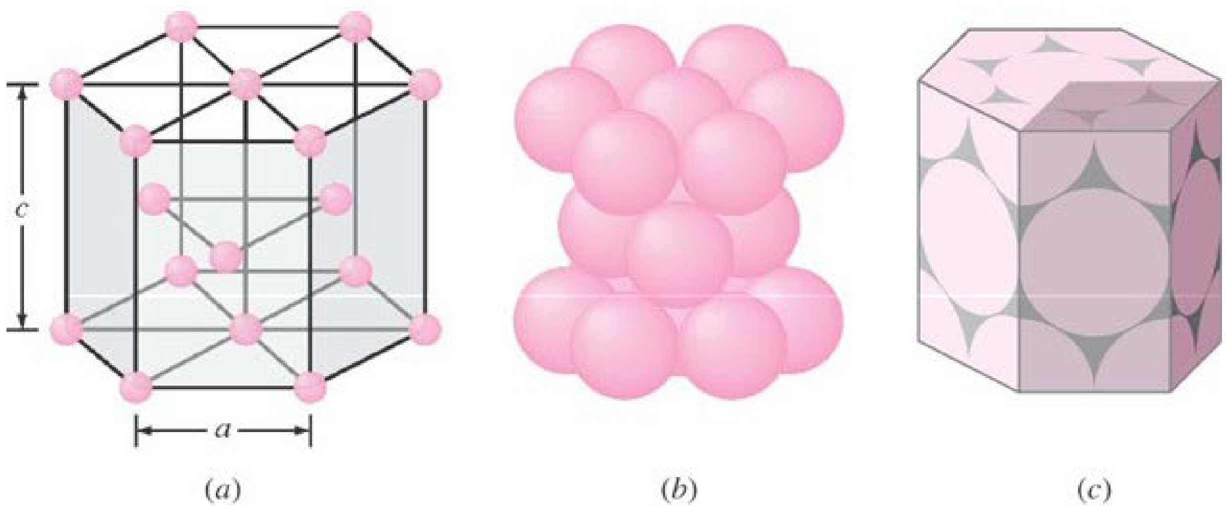


- FCC jedinična ćelija

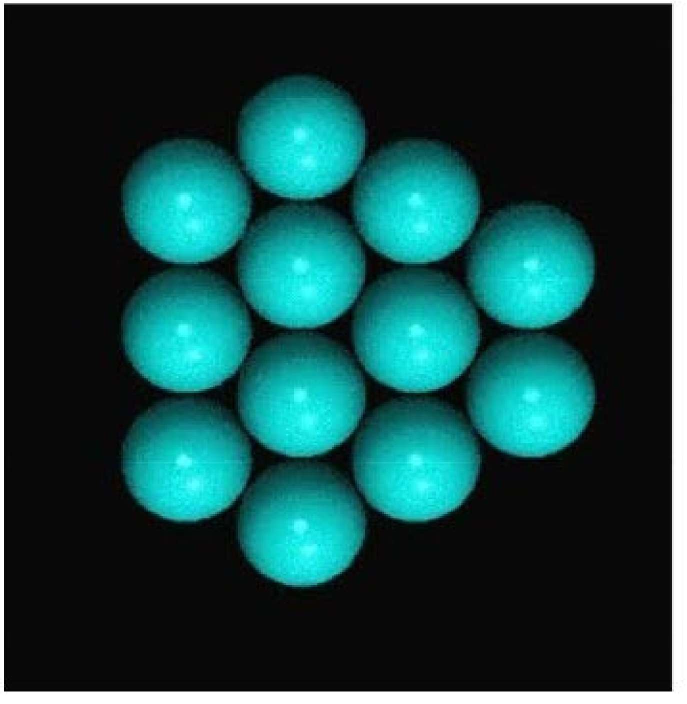


Hexagonal close-packed (HCP)

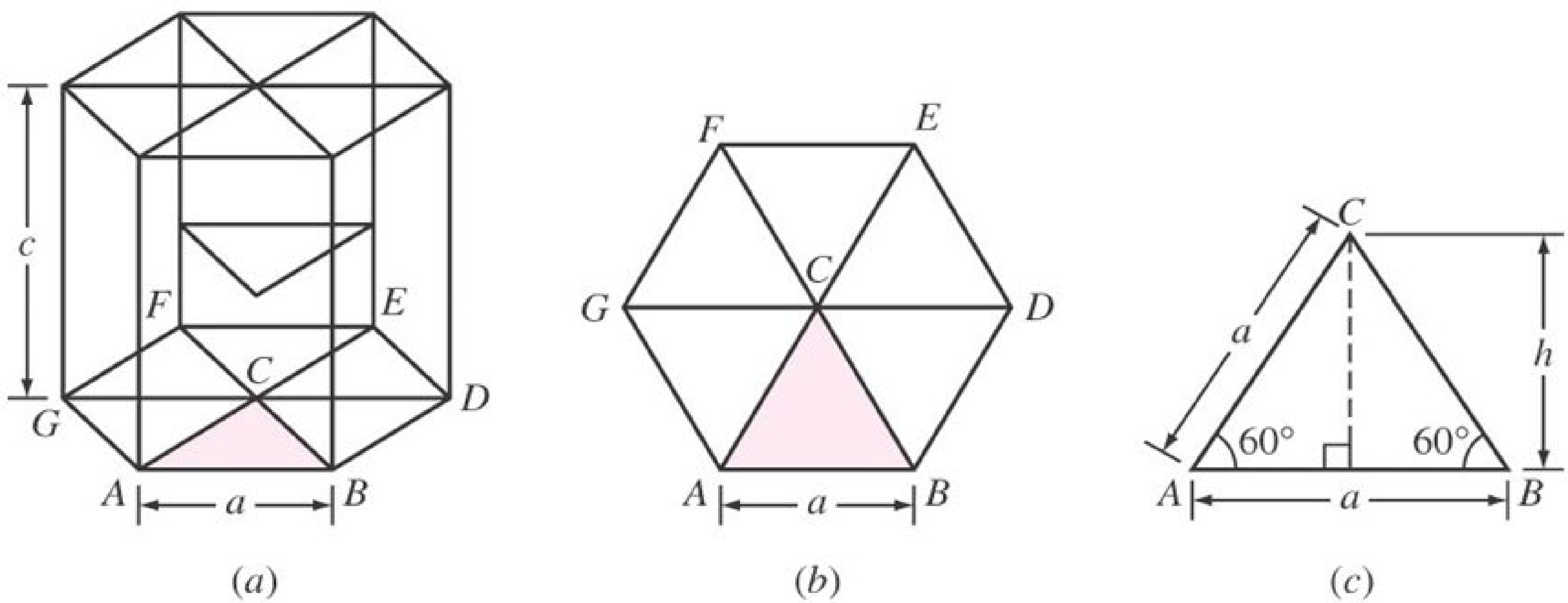
heksagonalna gusto pakovana



HCP struktura



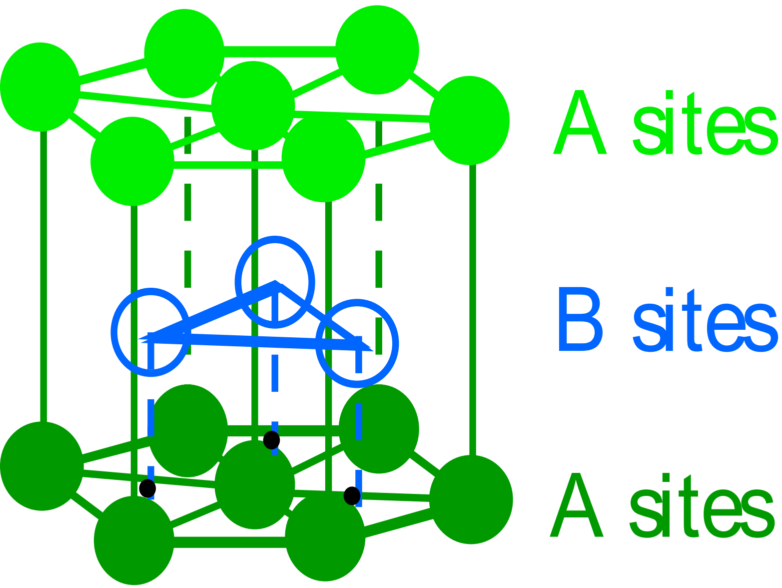
Geometrija HCP Strukture



HEKSAGONALNA GUSTO PAKOVANA (HCP)

(Hexagonal close packed)

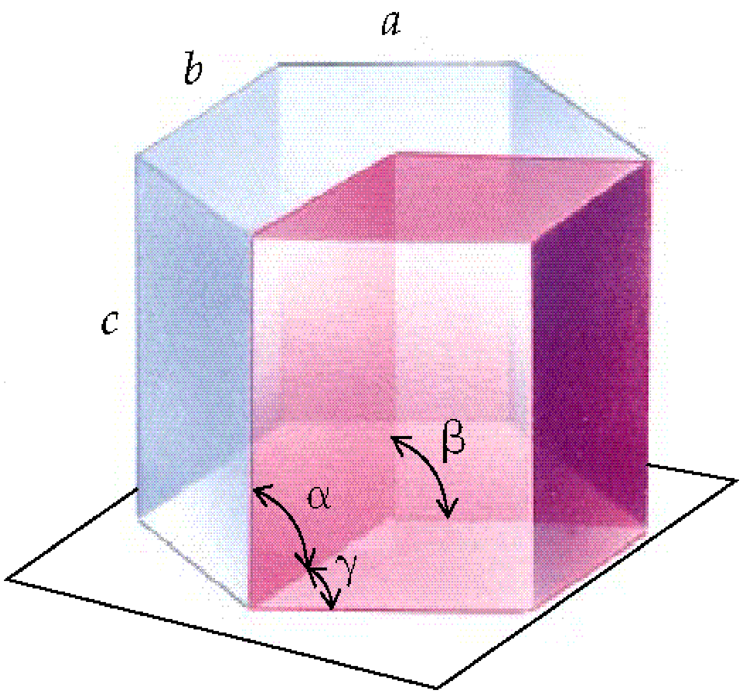
- ABAB... Sekvenca pakovanja
- 3D Projekcija
- 2D Projekcija

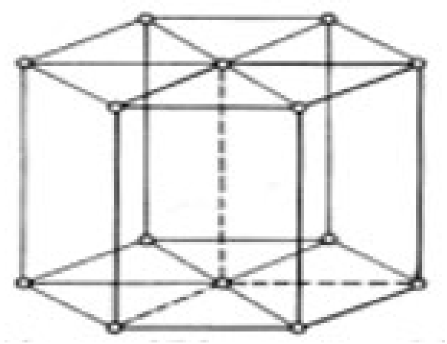


- koordinacioni broj = 12
- APF = 0.74

Građa i izgled HCP-a

- Izgled ćelije heksagonalnog kristalnog sistema - imamo dva nezavisna parametra



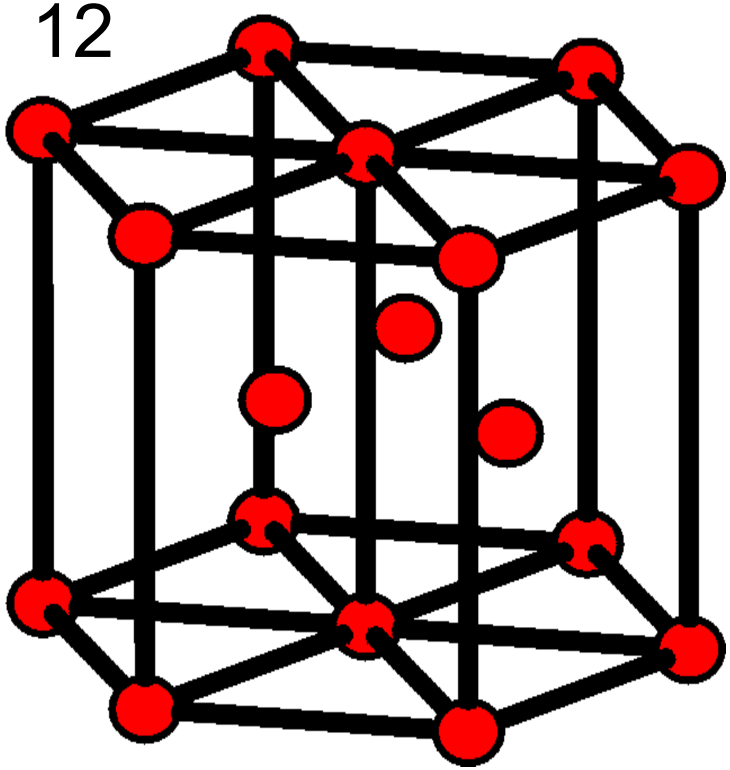


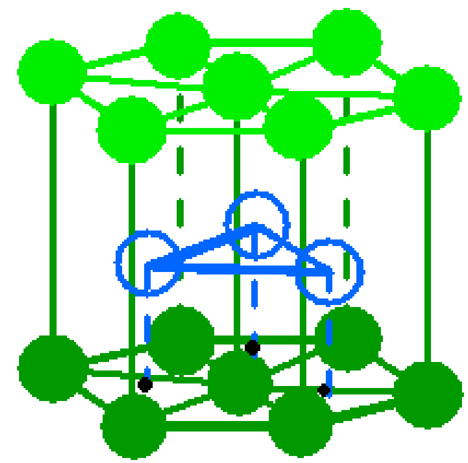
$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^{\circ}$ $\gamma = 120^{\circ}$

(nezavisni parametri – *a* i *c*)

Građa i izgled HCP-a

- Jedinična ćelija HCP-a :
  - Koordinacioni broj je 12

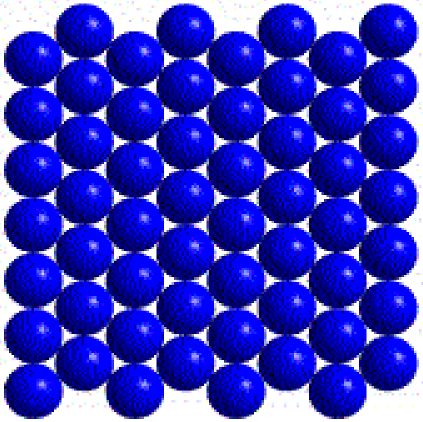


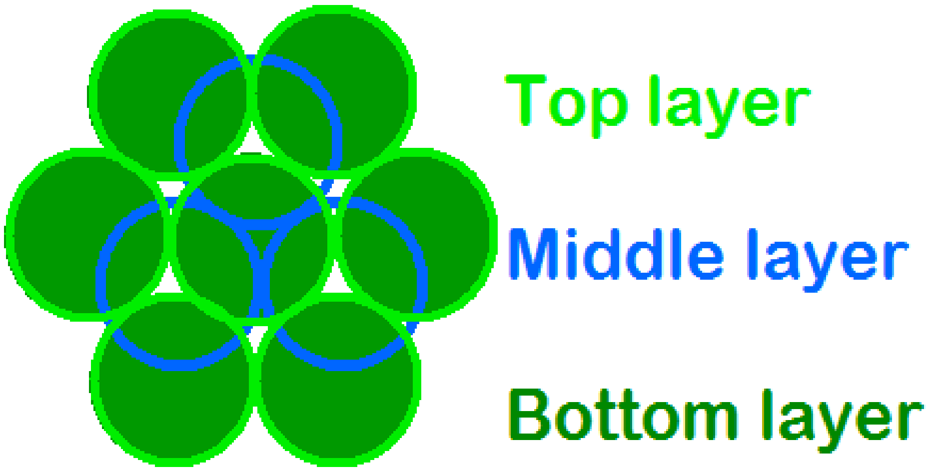


- U crvenim tačkama se nalaze motivi, jednake kuglice koje se dodiruju sa 6 kuglica u istom nivou, 3 kuglice ispod i 3 kuglice iznad – **gusto pakovanje**

Građa i izgled HCP-a

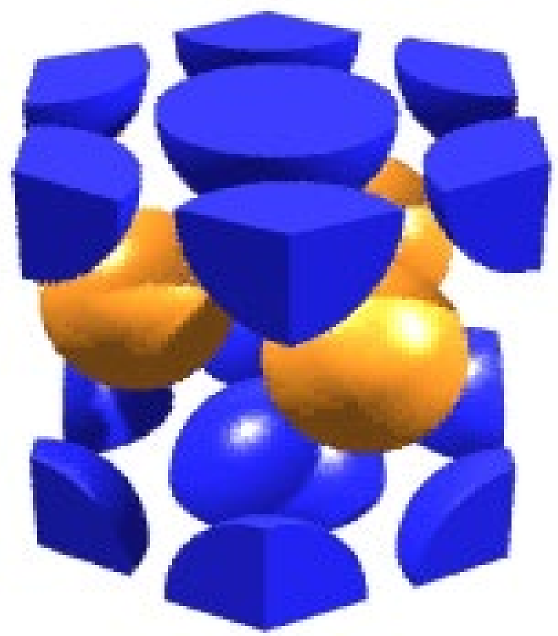
•Način na koji se dobije HCP je sledeći:
U jednoj ravni se poredjaju kugle tako da se svaka dodiruje sa 6 susednih i to se naziva ravan **A**. Na taj red kugli se postavlja drugi red, ravan **B**, pa na kraju treći red se postavi tako da ima identičan raspored kao ravan **A**. Ovo se naziva
ABAB... Sekvenca pakovanja





•Najveći mogući faktor pakovanja

Računanje faktora pakovanja za HCP-ćeliju



Imamo ukupno $2*(6*\frac{1}{6}+1*\frac{1}{2})+3=6$ kugli

$$APF = \frac{\text{zapremina kugli}}{\text{zapremina ćelije}}$$

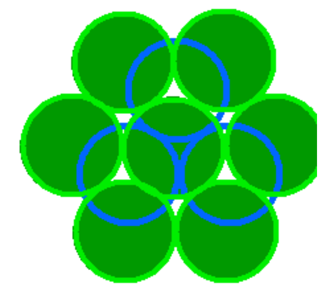
Računanje faktora pakovanja za HCP-ćeliju

Površina baze A=6* $\dfrac{ah}{2} = 6*\dfrac{a\dfrac{a\sqrt{3}}{2}}{2} = \dfrac{3\sqrt{3}}{2}a^2 \qquad a = 2R$

Četiri kugle, tri iz sloja A i jedna iz B, kad im se spoje centri

čine pravilni tetraedar čije je visina H′= $\sqrt{\dfrac{2}{3}}a$,ukupna visina ćelije

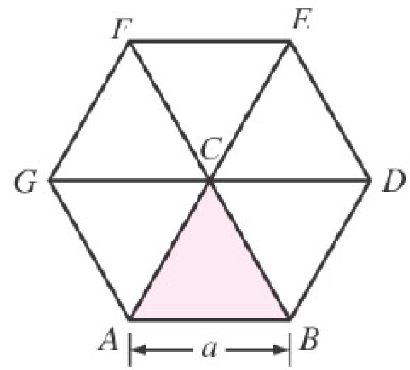
je $H = 2H' = 2\sqrt{\dfrac{2}{3}}a$ pa je ukupna zapremina ćelije

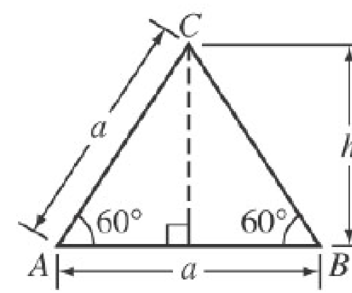


V=HA= $3\sqrt{2}a^3$ Zapremina kugle je $V' = \dfrac{4}{3}R^3\pi$

$$APF = \frac{6V'}{V} = \frac{6\dfrac{4}{3}R^3\pi}{3\sqrt{2}(2R)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$$

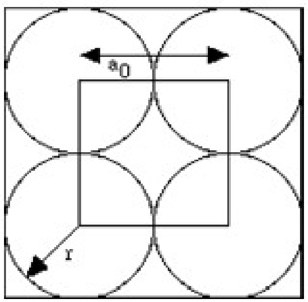
$$APF \approx 0.74$$

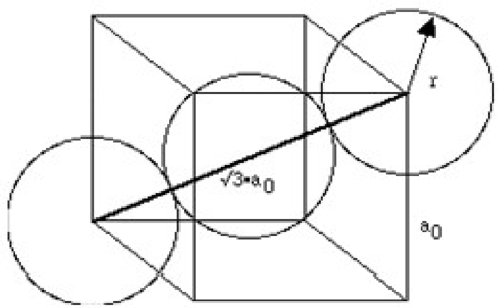


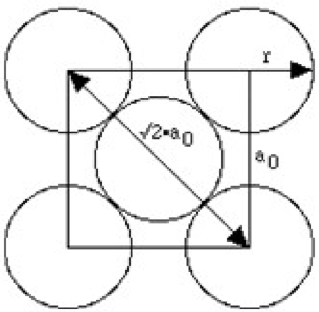


Odnosi stranica jedinične ćelije i poluprečnika sfera

SC **BCC** **FCC**







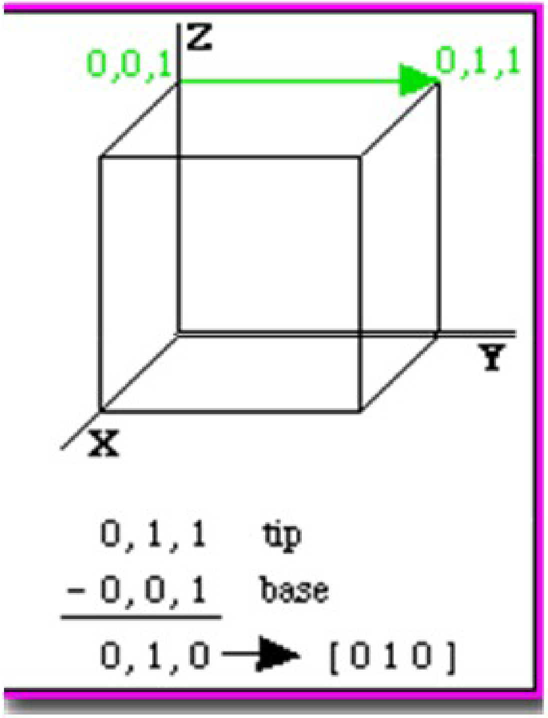
a = 2 r

$\sqrt{3}\cdot a = 4\cdot r$

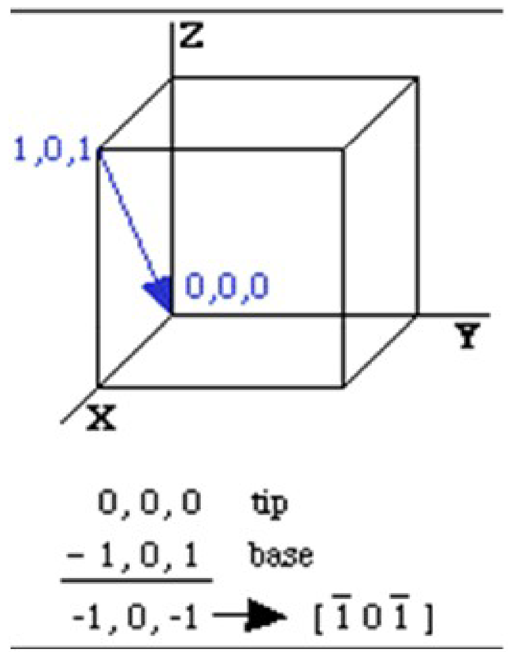
$\sqrt{2}\cdot a = 4\cdot r$

Kristalni pravci

Milerovi indeksi

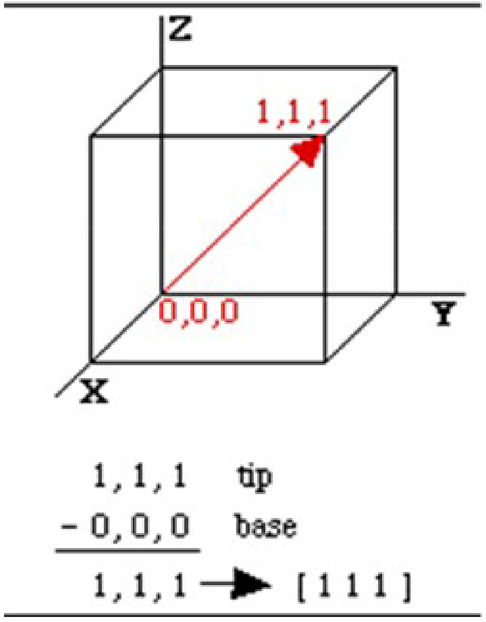


Kristalni pravci
Milerovi indeksi

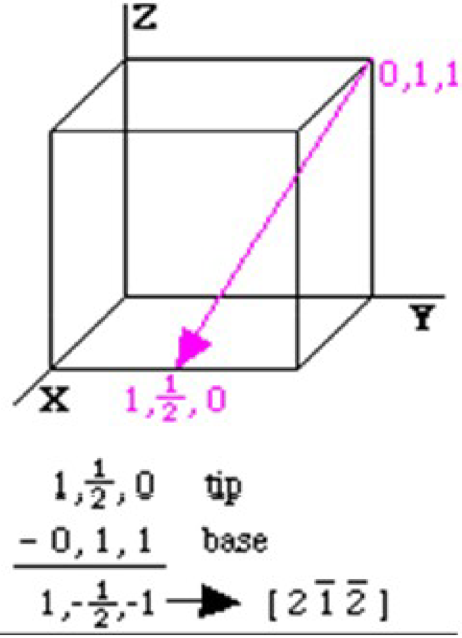


Negativni: **minus se piše iznad broja**

Primer

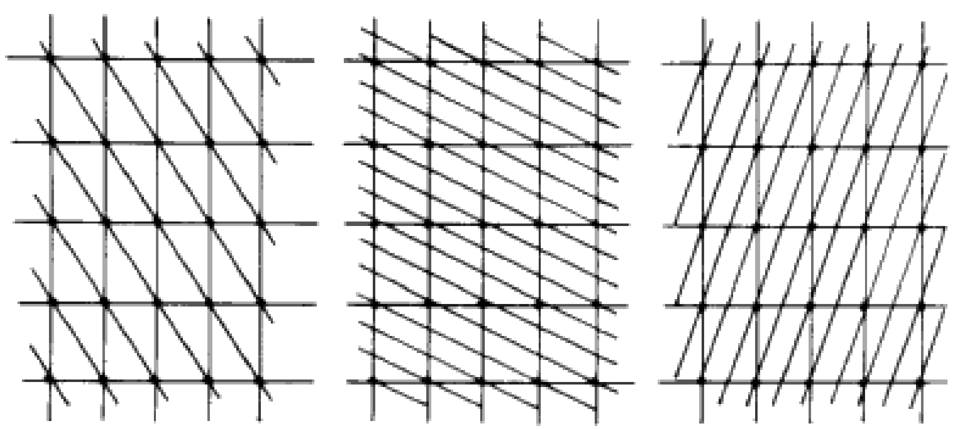


Razlomci



Ravni u rešeci i Milerovi indeksi

Bitan koncept u rešeci su ravni i familije ravni. Svaka ravan se konstruiše tako da se spoje najmanje 3 različite tačke rešetke, radi periodičnosti rešetke postoje familije (serije) ravni paralelnih međusobno koje prolaze kroz svaku tačku rešetke.
Zgodan način da se opiše orjentacija bilo koje od ovih familija su Milerovi indeksi u obliku tri broja (hkl) tako što ravan pravi presek sa jediničnom ćelijom na mestima *a*/h, *b*/k i *c*/l. Prema tome, Milerovi indeksi su recipročne vrednosti ovih dužina preseka



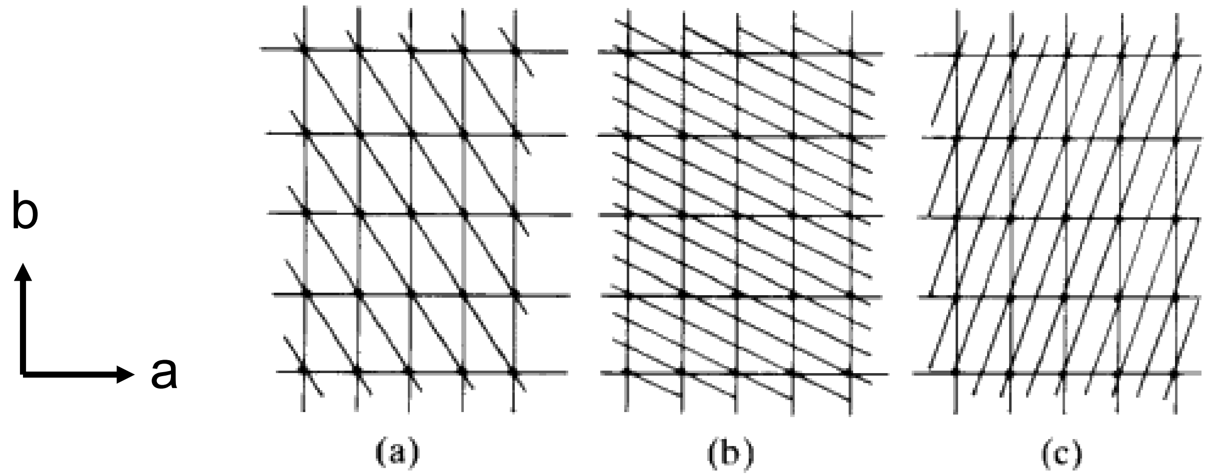
(a) (b) (c)

2-D ravni

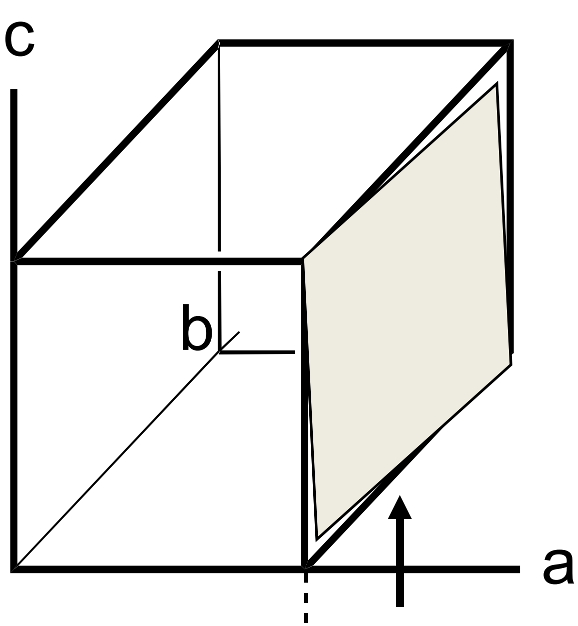
Napomena: Ako ravan ne preseca osu, presek je onda u ∞ a recipročna vrednost je 0.

Napomena: Ako je recipročna vrednost preseka razlomak, treba pomnožiti svaku od h, k i l vrednosti sa njihovim najmanjim zajedničkim sadržaocem tako da postanu celi brojevi!

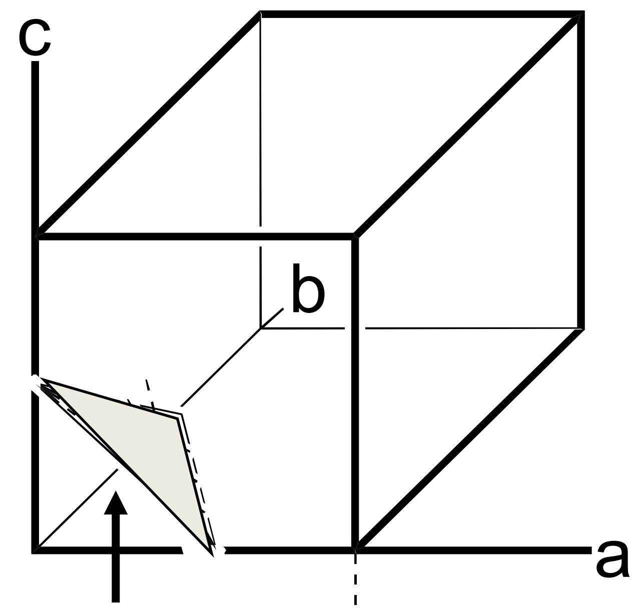
Ravni u rešeci i Milerovi indeksi



(110) ravni **(130) ravni** **(-210) ravni**



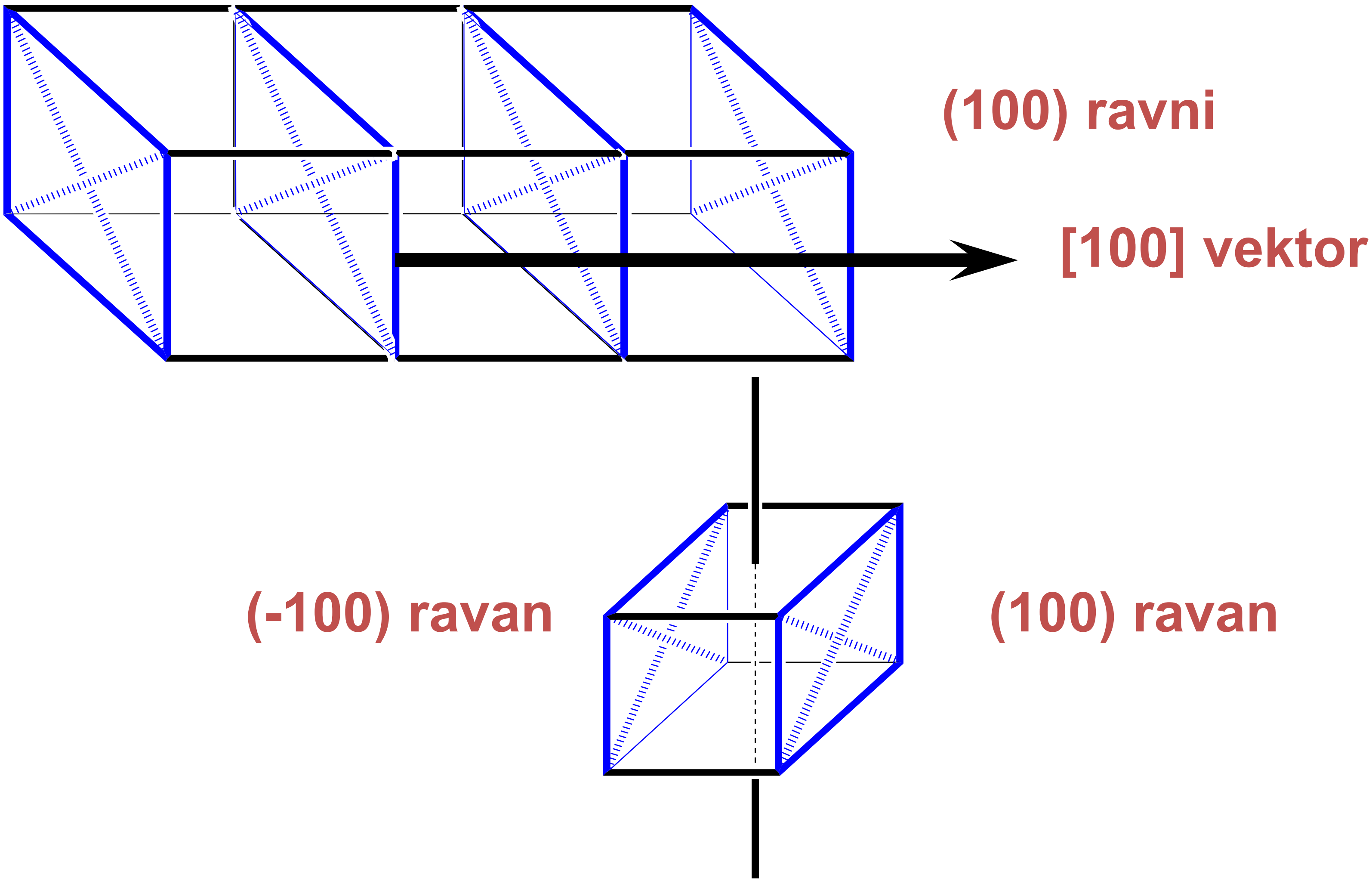
(100) ravan



(222) ravan

Ravni u rešeci i Milerovi indeksi

Orjentacija ravni se najbolje predstavlja vektorom normalnim na ravan. Pravac seta ravni se označava vektorom u četvrtastim zagradama koji sadrže Milerove indekse seta ravni.



Ravni u rešeci i Milerovi indeksi

Oznake za ravni:

(hkl) označava set ravni

[hkl] označava vektor (pravac ravni)

{hkl} set stranica kao što su:

{100} ovo je set (100) i (-100) stranica

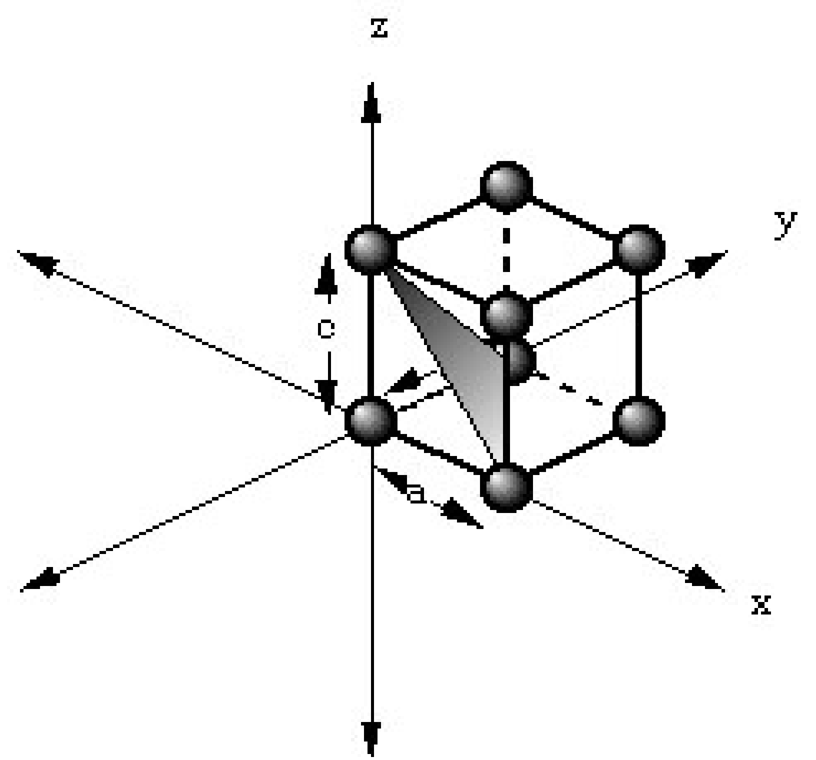
{111} su
(111),(11-1),(1-11),(11-1),(-1-11),(-11-1),(1-1-1),(-1-1-1) stranice

Millerovi Indeksi

Pravila za određivanje Milerovih indeksa:

1. Odrediti presek strane sa kristalografskim osama i izraziti ih *preko dimenzija jedinične ćelije.*
2. Uzeti recipročne vrednosti
3. Dobiti razlomke
4. Svesti ih na najmanji sadržalac

Primer (111) ravni (h=1, k=1, l=1) prikazan je desno



	a	b	c
intercept length	1	1	1
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$
cleared fraction	1	1	1
Miller indice	(111)		

Drugi primer:

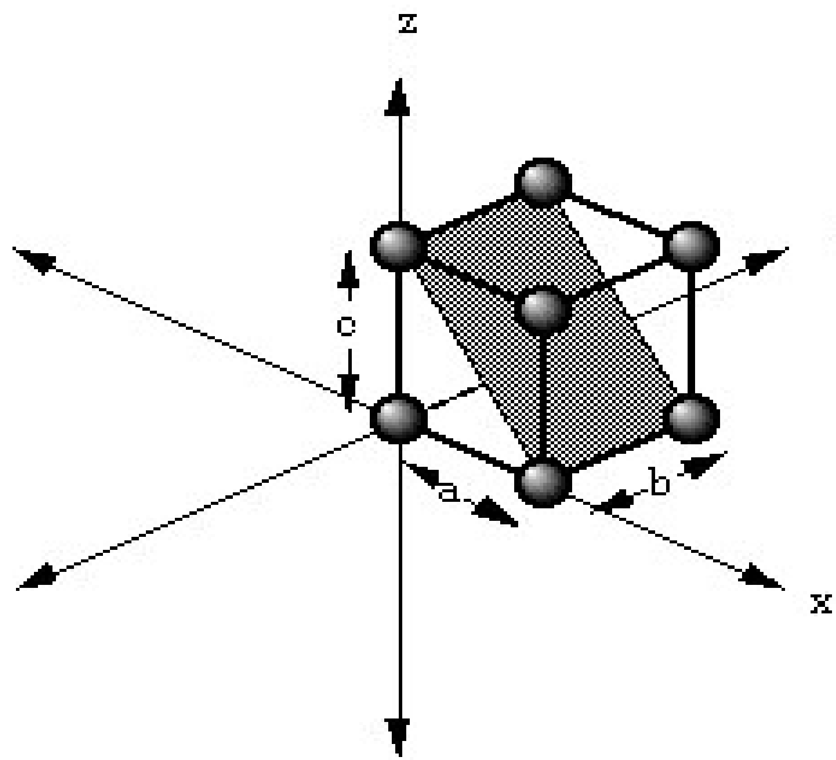
Pravila za određivanje Milerovih indeksa:

1. Odrediti presek strane sa kristalografskim osama i izraziti ih ***preko dimenzija jedinične ćelije.***

2. Uzeti recipročne vrednosti

3. Dobiti razlomke

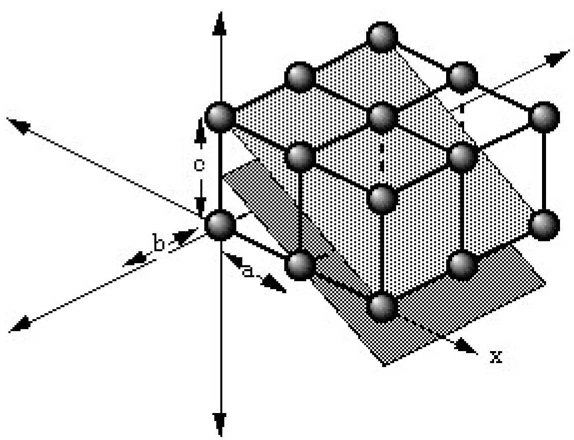
4. Svesti ih na najmanji sadržalac



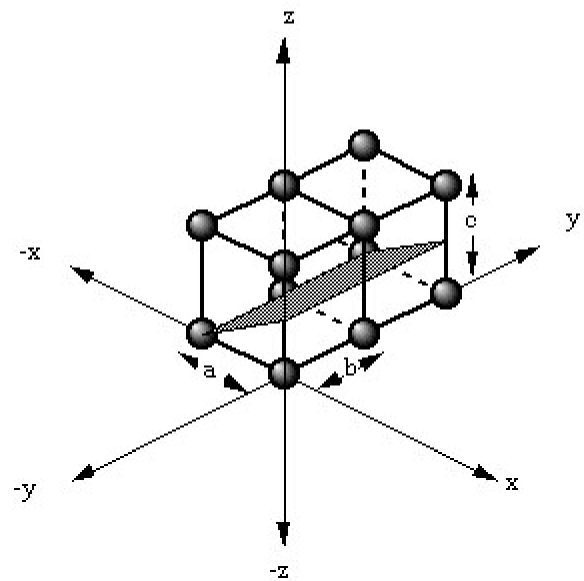
	a	b	c
intercept length	1	∞	1
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1}$
cleared fraction	1	0	1

Miller indice (101)

Ravni u rešeci i Milerovi indeksi

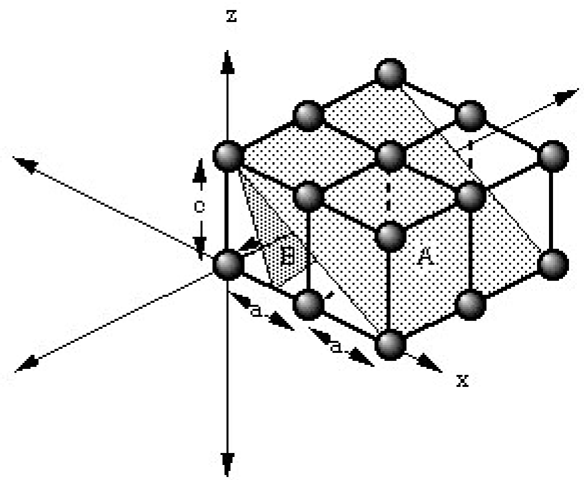


	a	b	c
intercept length	1	∞	1/2
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1/2}$
cleared fraction	1	0	2
Miller indice		(102)	



	a	b	c
intercept length	-1	∞	$\frac{1}{2}$
reciprocal	$\frac{1}{-1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1/2}$
cleared fraction	-1	0	2
Miller indice		$(\bar{1}02)$	

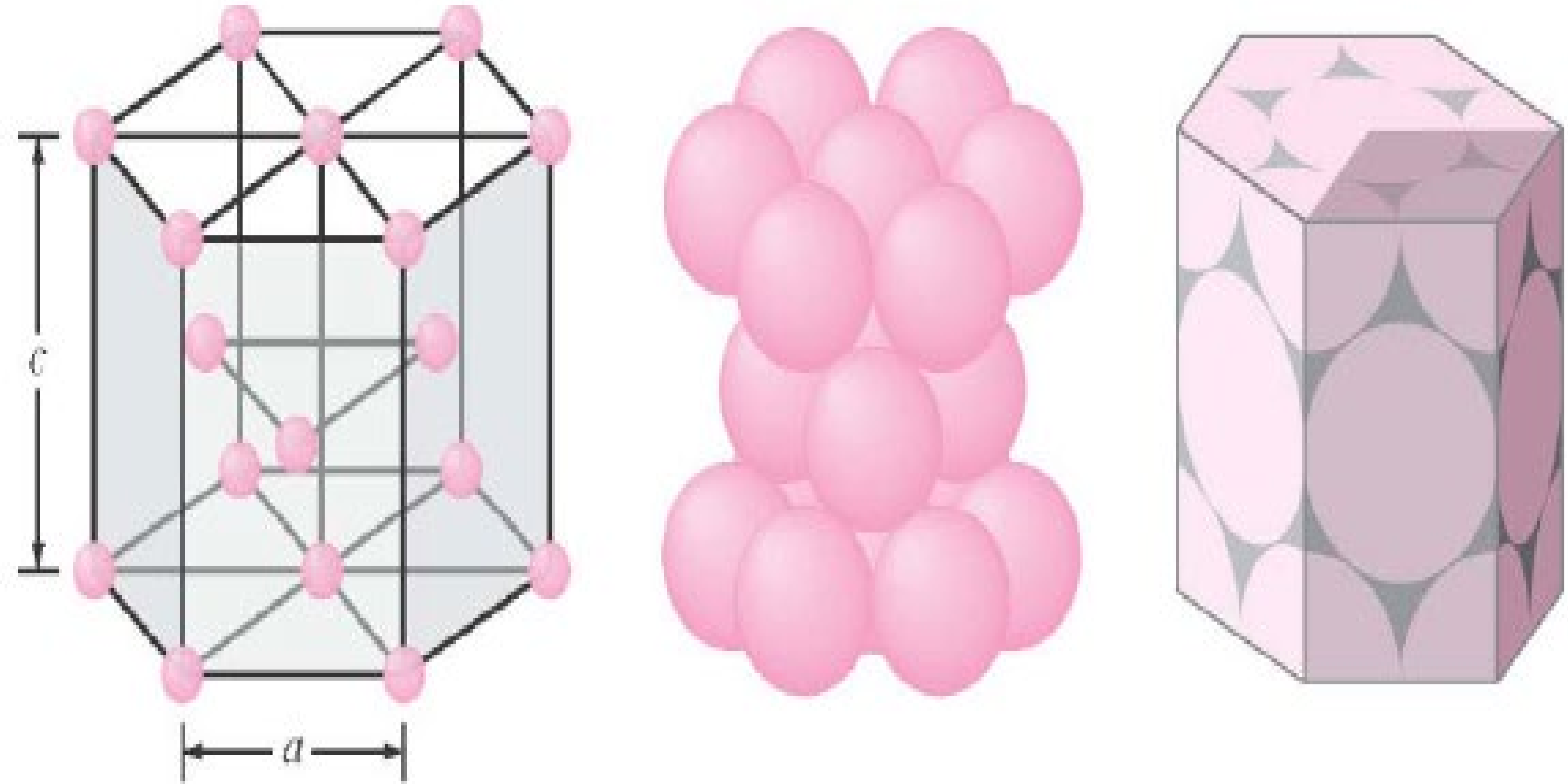
Ravni u rešeci i Milerovi indeksi



	plane A			plane B		
	a	b	c	a	b	c
intercept length	1	∞	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	∞	1
reciprocal	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1/2}$	$\frac{1}{1/2}$	$\frac{1}{\infty}$	$\frac{1}{1}$
cleared fraction	1	0	2	2	0	1
Miller indice	(102)			(201)		

Građa i izgled HCP-a

- Izgled ćelije HCP



Milerovi indeksi za HCP

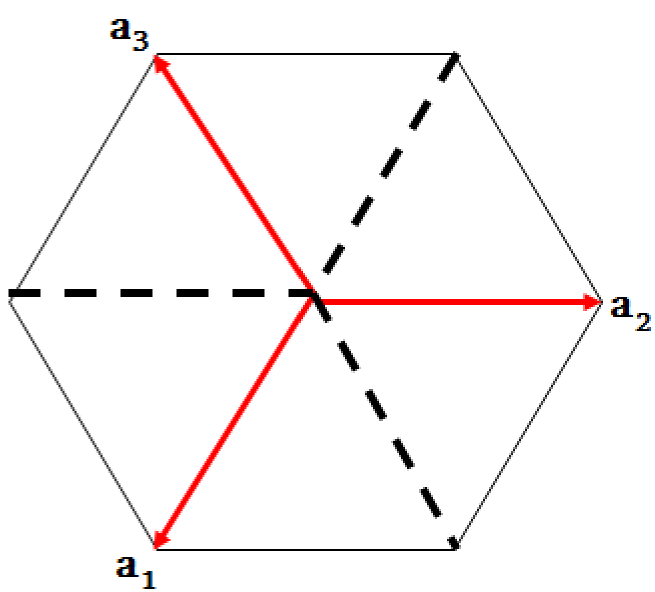
•Koriste se Miler-Bravisovi indeksi koji imaju oblik (*hkil*).

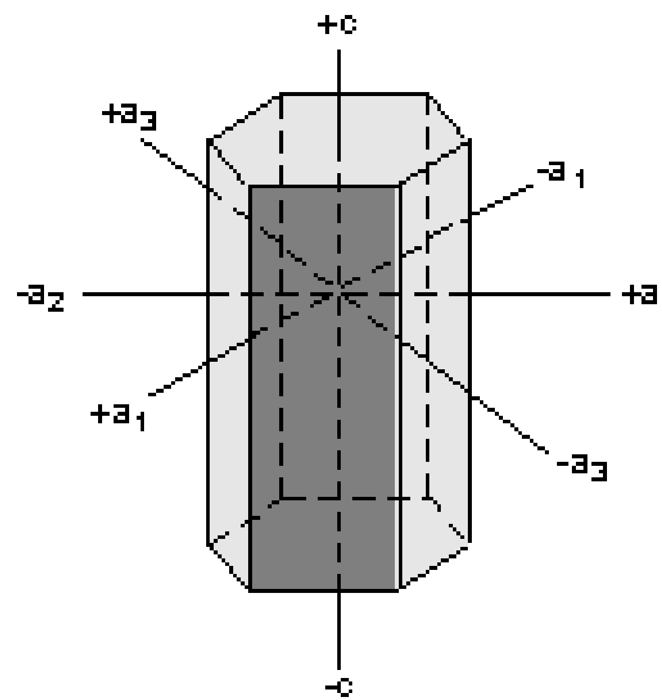
•Odrede se preseci date ravni sa tri ko-planarna vektora prikazana na slici. Nađe se njihova recipročna vrednost i to odgovara indeksima *hki.*

•Nađe se presek ravni sa **c**.

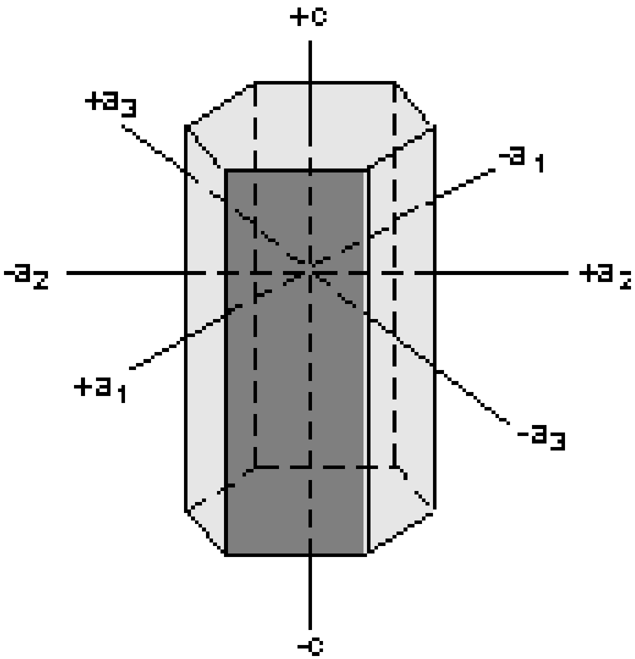
Recipročna vrednost odgovara četvrtom indeksu *l.*

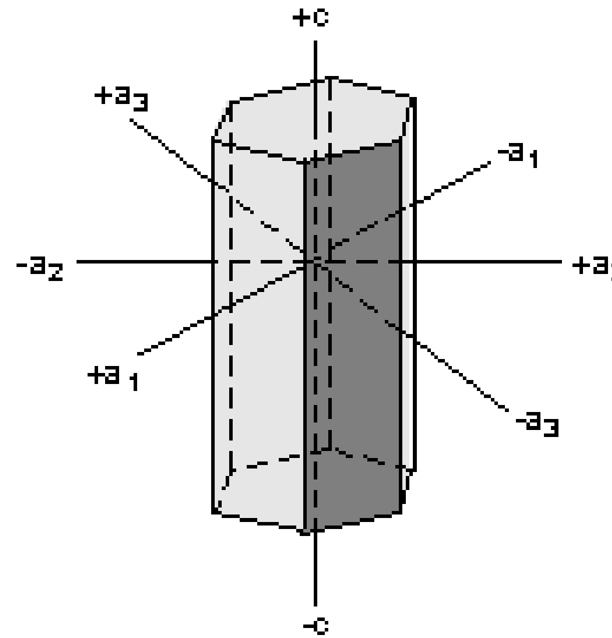
•Na kraju se eventualno pomnoži sa najmanjim zajedničkim sadržaocem imenioca, kako bi se rešili razlomci



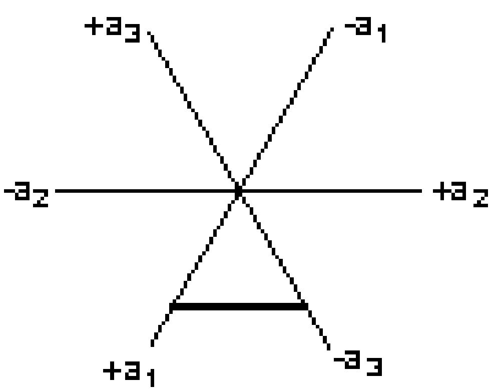


Milerovi indeksi za HCP

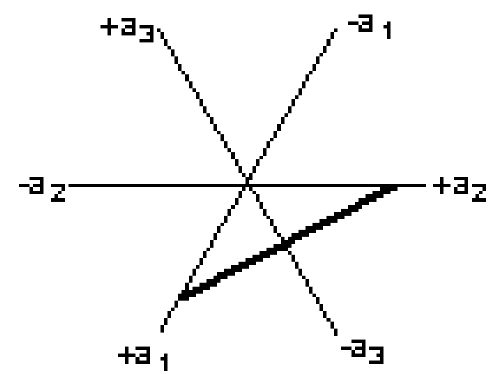




Treba primetiti da h, k i i nisu linearno nezavisne tako da uvek mora biti ispunjeno pravilo da je **h+k+i = 0** .



$1a_1, \infty a_2, -1a_3, \infty c$ $(10\bar{1}0)$



$1a_1, 1a_2, -1/2a_3, \infty c$ $(11\bar{2}0)$

$$h+k+i = 0$$