

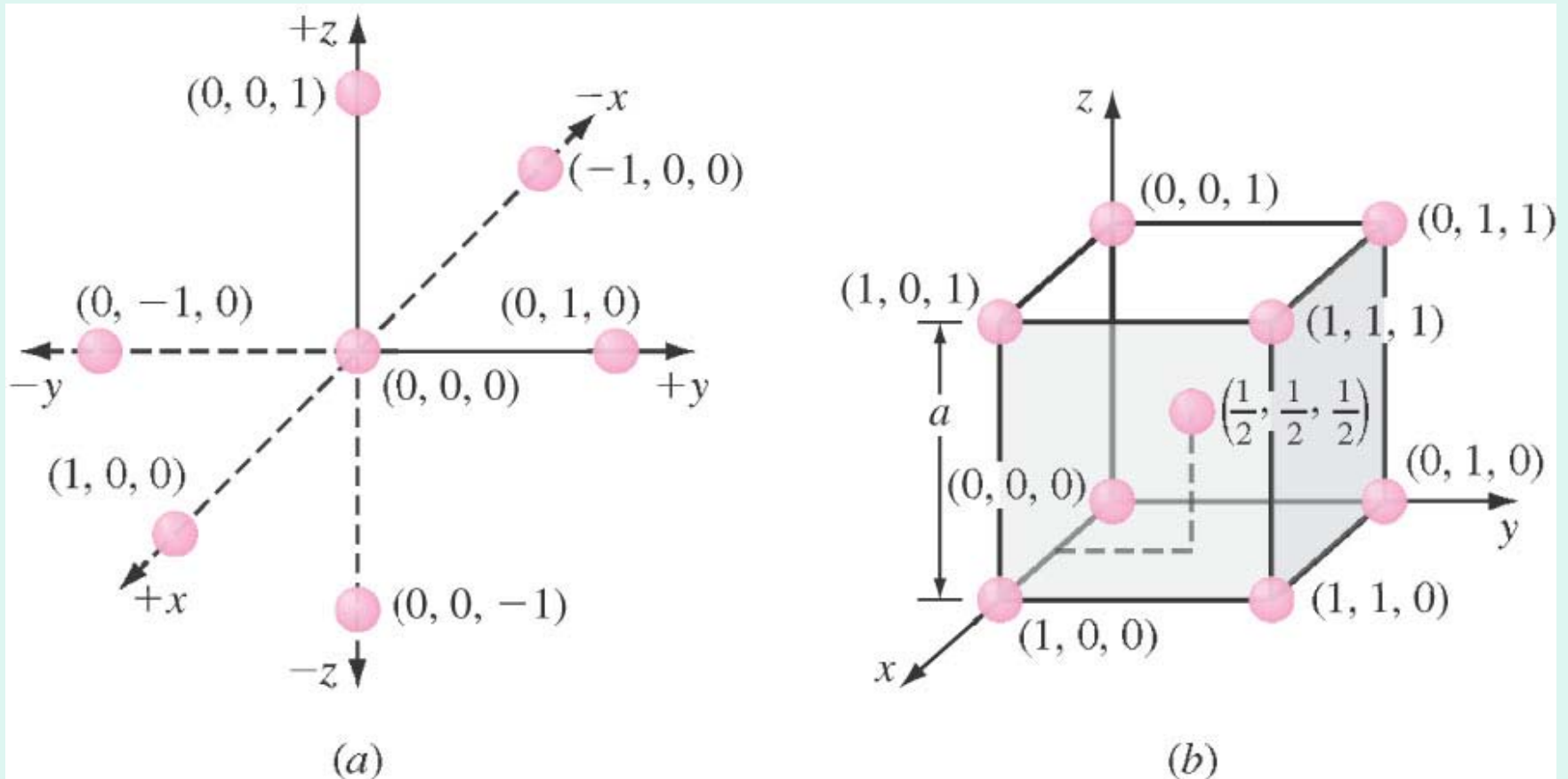
MATERIJALI I

Prof. dr. sc. Loreta Pomenić

KRISTALOGRAFSKI INDEKSI

- Za analizu strukture i svojstava kristala potrebno je definirati pojedine pravce i kristalne površine u kristalu ili prostornoj rešetki.
- Za to nam služe kristalografski pravci i Millerovi indeksi za plohe.
- Ti pravci i plohe su posebno važni za metale i legure čija se svojstva mijenjaju promjenom orijentacije kristala.

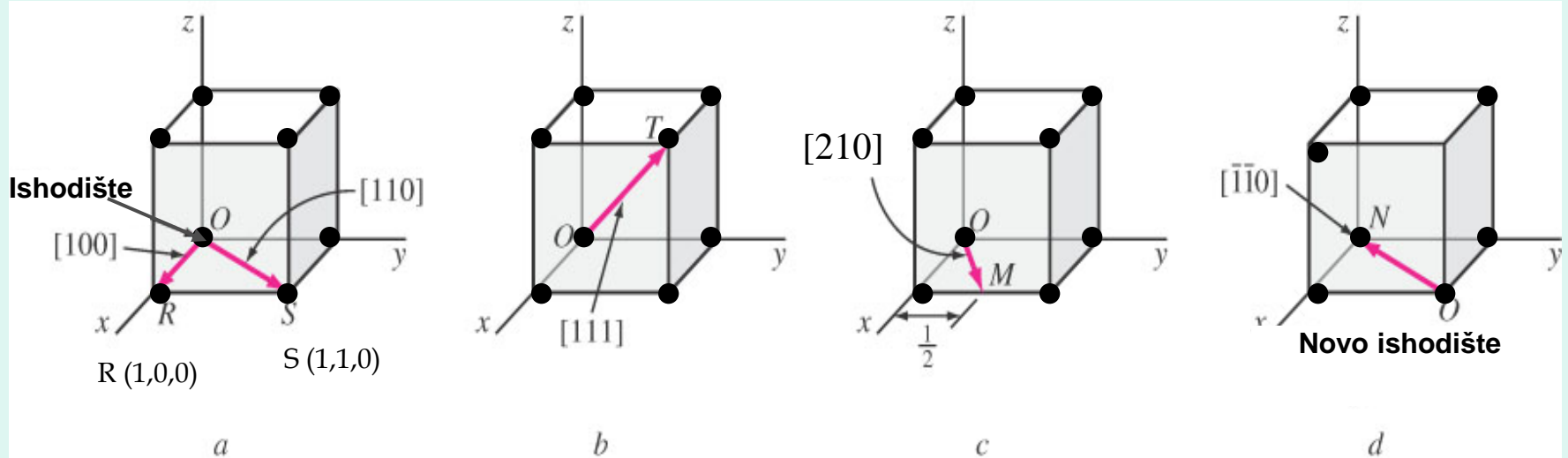
Neke koordinate atoma kubične rešetke u ortogonalnom koordinatnom sustavu



Slika 1. Primjer koordinata atoma u jednostavnoj jediničnoj kubičnoj rešetki

KRISTALOGRAFSKI PRAVCI

- Indeksi kristalografskog pravca određuju se iz koordinata točke vektora pravca koji izlazi iz ishodišta koordinatnog sustava i izlazi negdje u elementarnoj kristalnoj ćeliji (vrh strelice vektora pravca). Te se koordinate svode na najmanje cijele brojeve ali tako da ostaje njihov omjer.
- Ako su koordinate točke pozitivne vrijednosti tada vektor pravca izlazi iz ishodišta.
- Ako su koordinate točke negativne vrijednosti tada se mijenja ishodište vektora pravca i indeks pravca dobiva oznaku minus iznad indeksa.
- Indeksi pravca označavaju se u uglatim zagradama [].
- Indeksi pravca “pokazuju” na koje će atome naići vektor pravca u elementarnoj ćeliji



Slika 2. Primjeri kristalografskih pravaca u elementarnoj ćeliji kubičnog sustava

➤ **Ekvivalentni pravci su međusobno istovrsni, zamjenjivi pravci u promatranoj jediničnoj ćeliji.**

➤ **Označavanje ekvivalentnih pravaca $\langle stv \rangle$.**

Primjeri nekih ekvivalentnih pravaca:

$$\langle 100 \rangle \equiv [100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]$$

➤ paralenii pravci imaju iste indekse pravca

➤ ekvivalentni pravci imaju (obuhvaćaju) iste rasporede atoma

MILLEROVI INDEKSI ZA KRISTALOGRAFSKE PLOHE

➤ Definicija: Millerovi indeksi su recipročne vrijednosti odsječaka (a , b i c) koje ravnine odsjecaju na kristalografskim (koordinatnim) osima x , y i z na trima neparalelnim bridovima kubične jedinične ćelije, svedene na najmanje cijelobrojne vrijednosti, ali tako da ostane zadržan njihov omjer.

➤ Označavanje pojedinačnih ravnina, **Millerovi indeksi za plohu su: (hkl)**

$$h = 1/a \quad k = 1/b \quad l = 1/c$$

➤ Ekvivalentne ravnine su sve međusobno istovrsne, zamjenjive ravnine u promatranoj jediničnoj ćeliji

➤ Označavanje skupa ekvivalentnih ravnina: $\{hkl\}$

➤ Ravnina nikada ne prolazi kroz ishodište koordinatnog sustava!

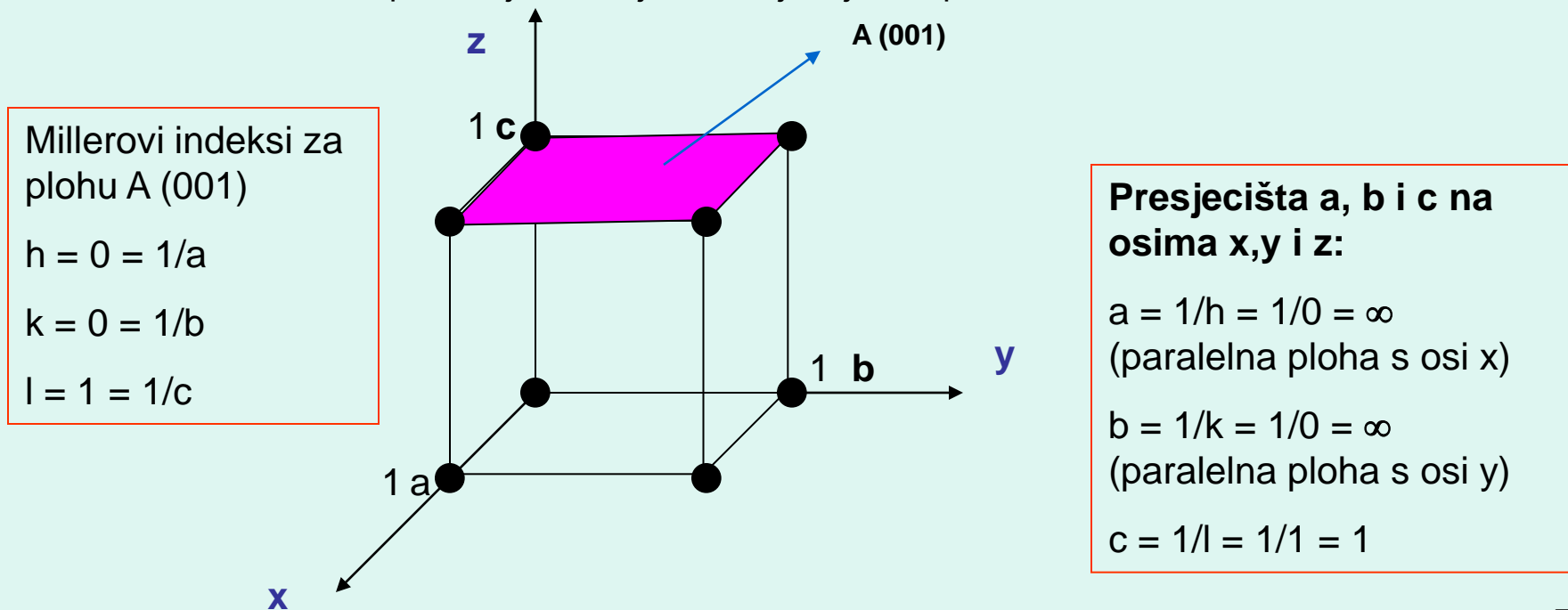
A) Crtanje plohe ako su zadani Millerovi indeksi (hkl):

1. Nacrtati jediničnu kubičnu rešetku u koordinatni sustav
2. Odrediti presjecišta (a, b i c) koje ploha presjeca na koordinatnim osima x, y i z te ih spojiti ih u plohu:

Po definiciji su Millerovi indeksi za plohe: $h = 1/a$, $k = 1/b$, $l = 1/c$.

Iz toga slijedi da su presjecišta : $a = 1/h$, $b = 1/k$, $c = 1/l$

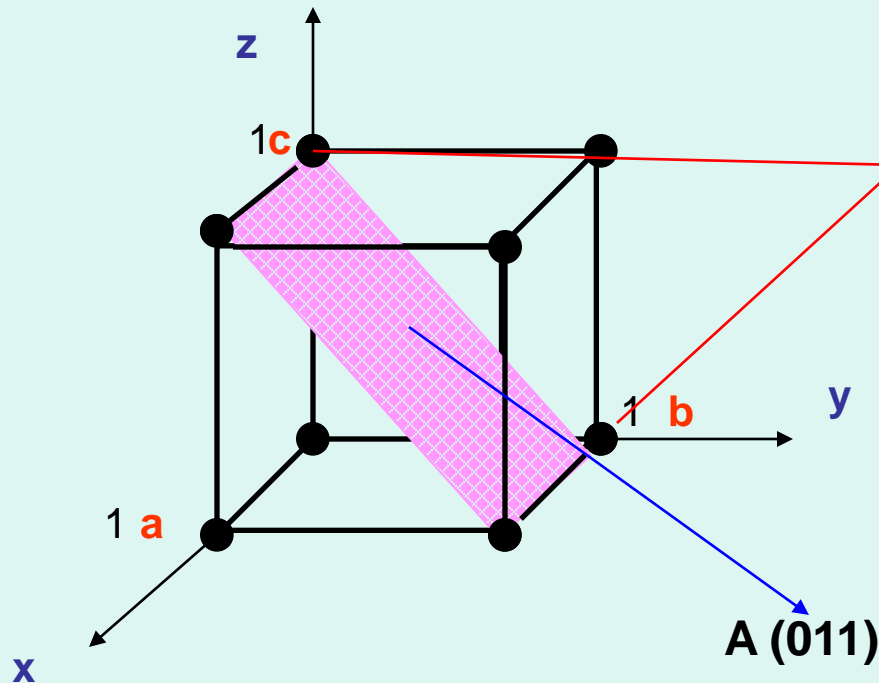
3. Presjecište je u ∞ (beskonačnsti) ako je ploha paralelna s tom osi
4. Ucrtati i označiti plohu u jediničnoj kristalnoj ćeliji te napisati Millerove indekse



Slika 3. Crtanje plohe iz zadanih Millerovih indeksa

B) Određivanje Millerovih indeksa ako je zadana (ucrtana) ploha A

- Naći presjecišta plohe (a, b i c) na osima x, y i z
- Odrediti Millerove indekse h, k, i l
- Označiti plohu i Millerove indekse za tu plohu



Odrediti presjecišta plohe A s osima x, y, z:

$$a = \infty$$

$$b = 1$$

$$c = 1$$

Odrediti Millerove indekse za plohu A:

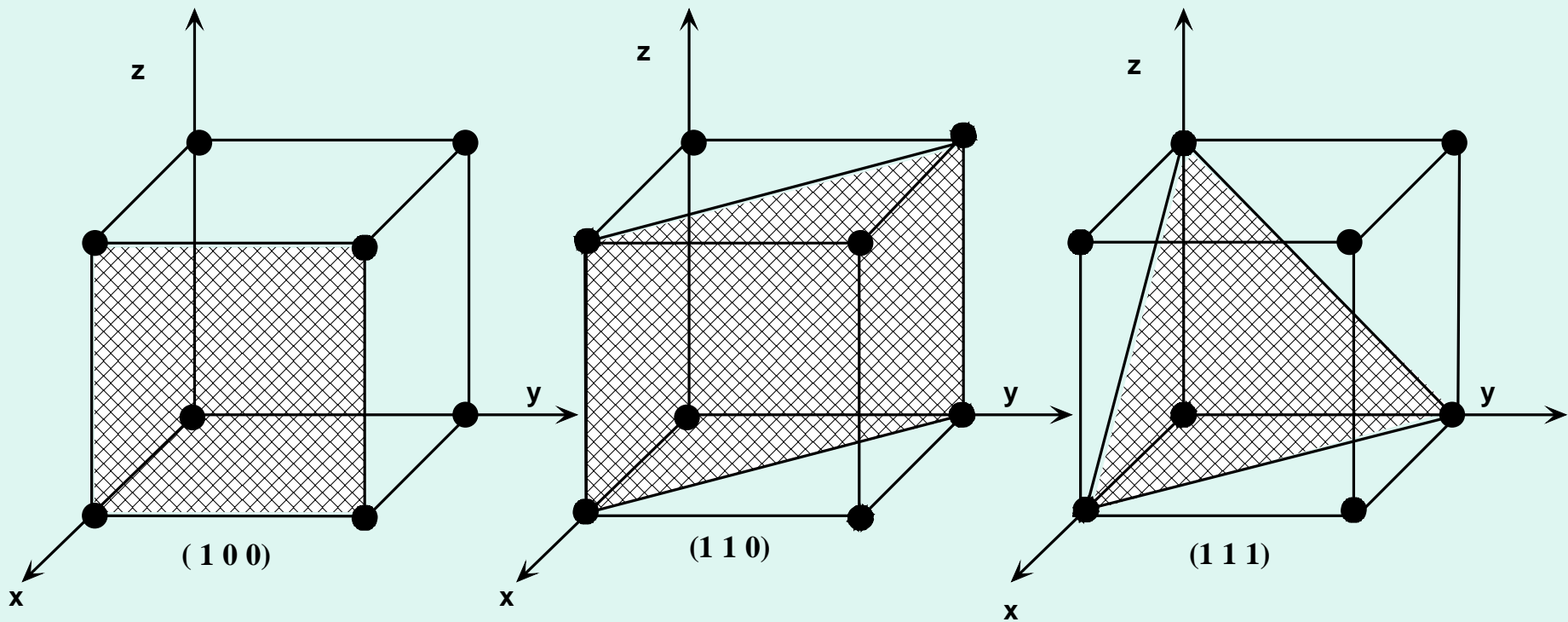
$$h = 1/a = 1/\infty = 0$$

$$k = 1/b = 1/1 = 1$$

$$c = 1/c = 1/1 = 0$$

Millerovi indeksi za plohu A: (011)

Slika 4. Određivanje Millerovih indeksa iz ucrtane plohe



Slika 5. Primjeri Millerovih indeksa triju važnih kristalnih ploha u kubičnoj jediničnoj rešetki

Ekvivalentne plohe u kubičnom sustavu

Skup ekvivalentnih ploha: plohe su jednake u odnosu na simetričnu strukturu i ne moraju biti paralelne

➤ kubična rešetka ima 6 ekvivalentnih ploha

➤ skup ekvivalentnih ploha označava se: $\{100\}$, a te su

$$\{100\} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0) \text{ i } (00\bar{1})$$

✓ Ploha (333) je paralelna s plohom (111) ali nisu ekvivalentne jer su presjecišta za plohu (333) $1/3, 1/3, 1/3$ i zato se ta ploha crta posebno, a ne kao (111)

✓ Ako je presjecište plohe na negativnoj koordinati tada je ploha izvan ucrtane jedinične ćelije, a određeni Millerov indeks za tu plohu označava se znakom “-” iznad indeksa

Određivanje razmaka između dviju ploha u kubičnoj kristalnoj rešetki pomoću Millerovih indeksa

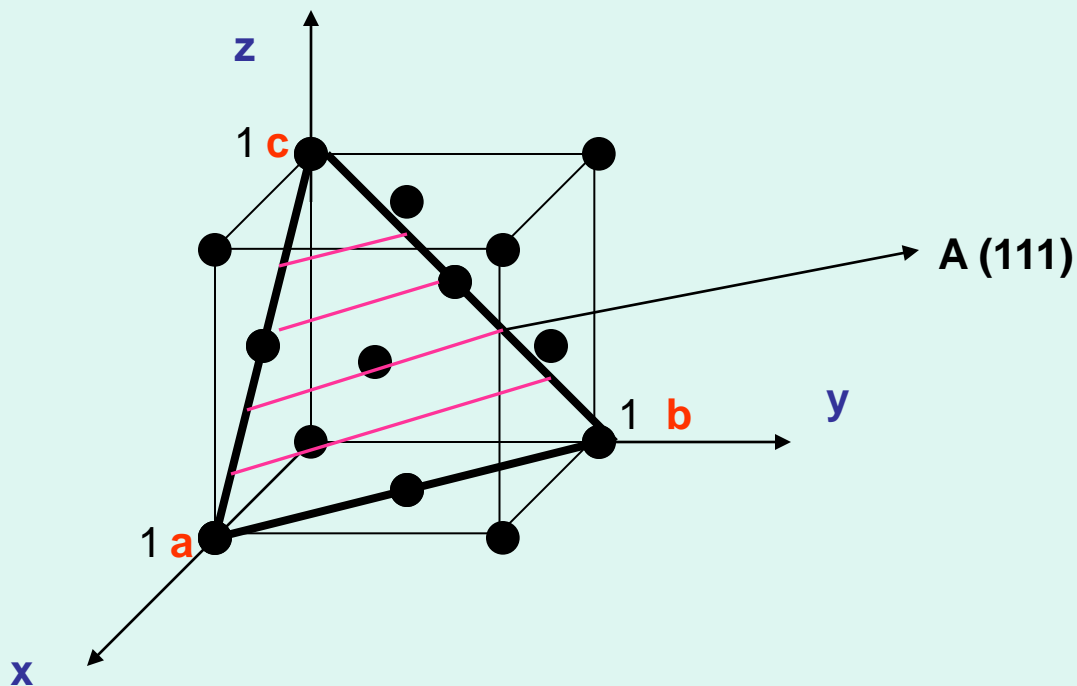
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

gdje je:

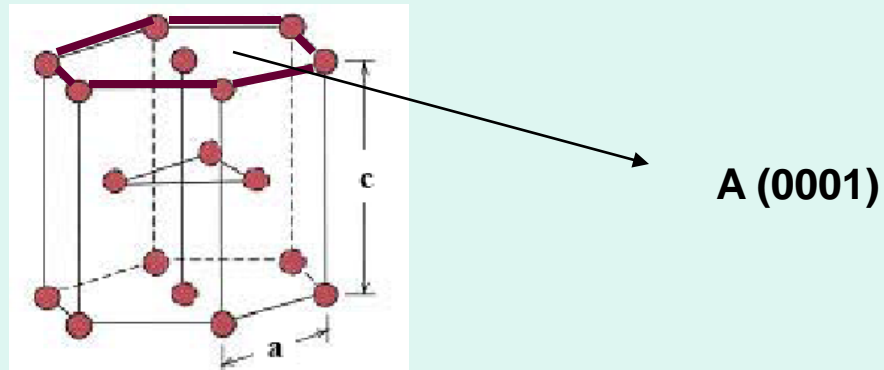
- d_{hkl} unutarnji razmak između ploha određen pomoću Millerovih indeksa $h, k, i l$
- a – parametar rešetke
- $h, k, i l$ su Millerovi indeksi za plohe u kubičnoj rešetki

Usporedba FCC, HCP i kristalnih struktura

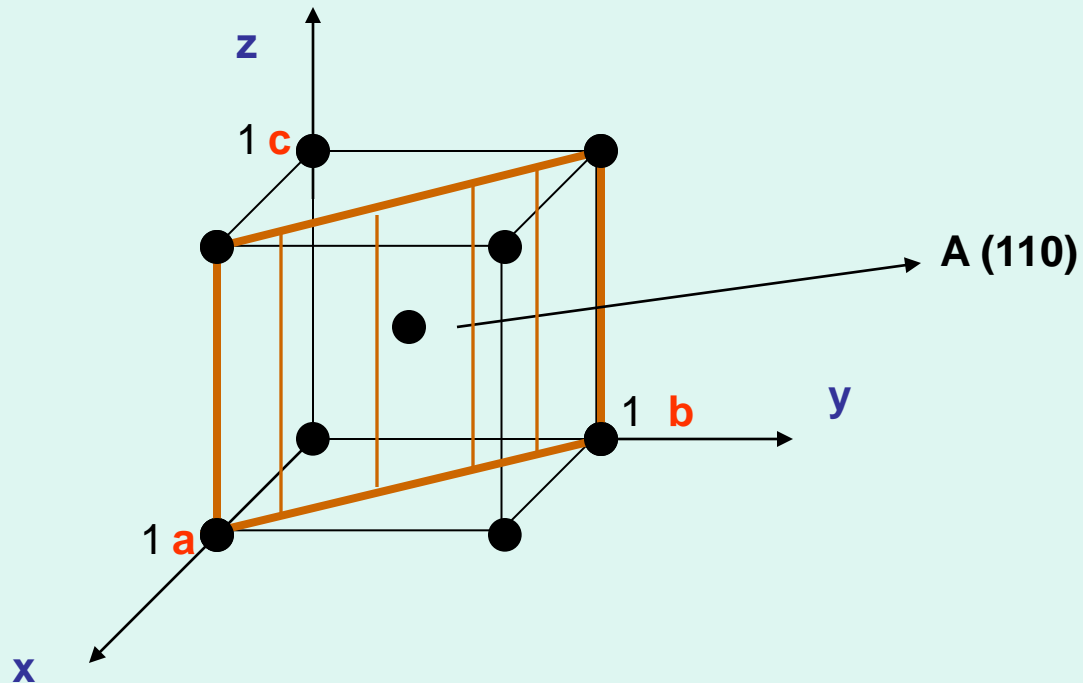
- Za FCC rešetku je najgušće zaposjednut skup ploha $\{111\}$; (FAGS za FCC je 74%)
- Za HCP (heksagonski sustav) je najgušće zaposjednuta ploha (0001); (FAGS za HCP je 74%)
- Za BCC rešetku je najgušće zaposjednut skup ploha $\{110\}$; (SAGS za BCC je 68%)



Slika 6. Najgušće zaposjednuta ploha u FCC rešetki, obuhvaća osim atoma na vrhu i tri atoma na plohama



Slika 7. Najgušće zaposjednuta ploha u HCP rešetki, obuhvaća plohu baze (6 atoma i središnji na plohi)



Slika 8. Najgušće zaposjednuta ploha u BCC rešetki, obuhvaća vršne atome i središnji atom

Anizotropnost

- Različiti smjerovi u kristalu imaju različita slaganja atoma o čemu ovise svojstva tih kristala.

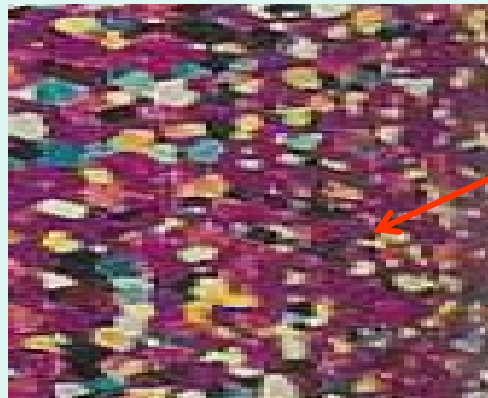
Npr.

atomi uzduž brida FCC jedinične ćelije su udaljeniji od atoma na dijagonalama ploha što uzrokuje **anizotropna** svojstava kristala. **Deformacije ovise o smjeru u kojem naprezanje djeluje.**

- Kod nekih su polikristaličnih materijala **orijentacija kristalnih zrna bez reda** (nasumično) pa je svojstvo takvog materijala **izotropno**.
- Neki kristalični materijali imaju kristalna zrna orijentirana u određenom smjeru (**tekstura**). Svojstva takvih materijala su određena orijentacijom teksture i materijal pokazuje **anizotropna** svojstva



Tekstura – kristalna zrna su orijentirana u jednom smjeru. Djelovanjem sile materijal pokazuje različita svojstva u odnosu na smjer sile. Svojstva takvih materijala su određena orijentacijom tekture i materijal pokazuje **anizotropna** svojstva.



Kristalna zrna su nasumično poredana. Djelovanjem vanjske sile materijal će se ponašati jednako bez obzira na smjer sile - **izotropna svojstva**

ODREĐIVANJE KRISTALNE STRUKTURE

Fenomen difrakcije rendgenskih zraka:

Refleksija rendgenskih zraka na atomskim plohama kristala zapravo je međusobno djelovanje rendgenskih zraka i elektrona atoma. Rendgenska zraka na svom putu kroz kristal predaje energiju elektronima u atomima i atomi regeneriraju primljenu energiju i zrače je u obliku elektromagnetskih valova iste duljine i to u svim smjerovima. Na taj se način ti valovi interferiraju, tj. pojačavaju ili se gase.

- Rendgenske su zrake elektromagnetski valovi valne duljine istog reda veličine kao razmak atoma unutar kristala
- Monokromatski snop rendgenskih zraka upada na površinu kristala i promatra se reflektirani snop tih zraka
- Reflektirani se valovi u određenim smjerovima interferentno pojačavaju – dolazi do difrakcije
- Raspored difrakcijskih maksimuma ovisi o vrsti atoma u kristalnoj rešetki i o njihovom prostornom rasporedu

Pomoću Braggove jednađbe može se odrediti:

- Razmak između ploha d_{hkl} u kristalnoj rešetki ako znamo valnu duljinu rentgenskih zraka i eksperimentalno određen Braggov kut θ .
- Određivanjem d_{hkl} dobijemo veličinu jedinične ćelije kristalne rešetke
- Možemo izračunati valnu duljinu ako znamo ostale dvije veličine

Braggov zakon i difrakcija rentgenskih zraka na kristalima

Padne li rentgenska zraka na ravnina (plohu) koju čine atomi u kristalnoj rešetki, dio energije upadnih zraka se rasprši na atomima.

Pojačanje zrake nastupa kada je:

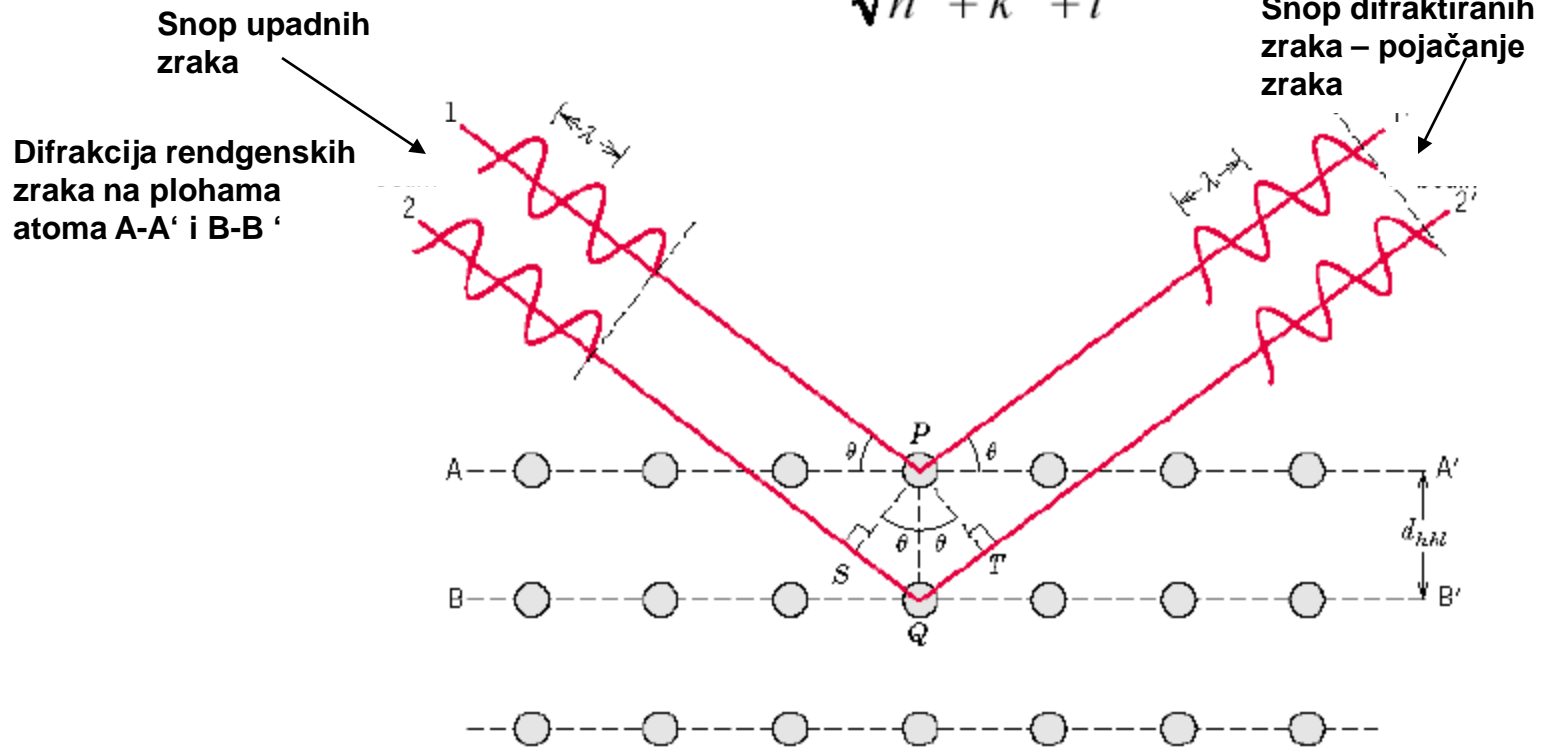
$$n \lambda = 2 d_{hkl} \sin \Theta \quad (\text{Braggova jednažba})$$

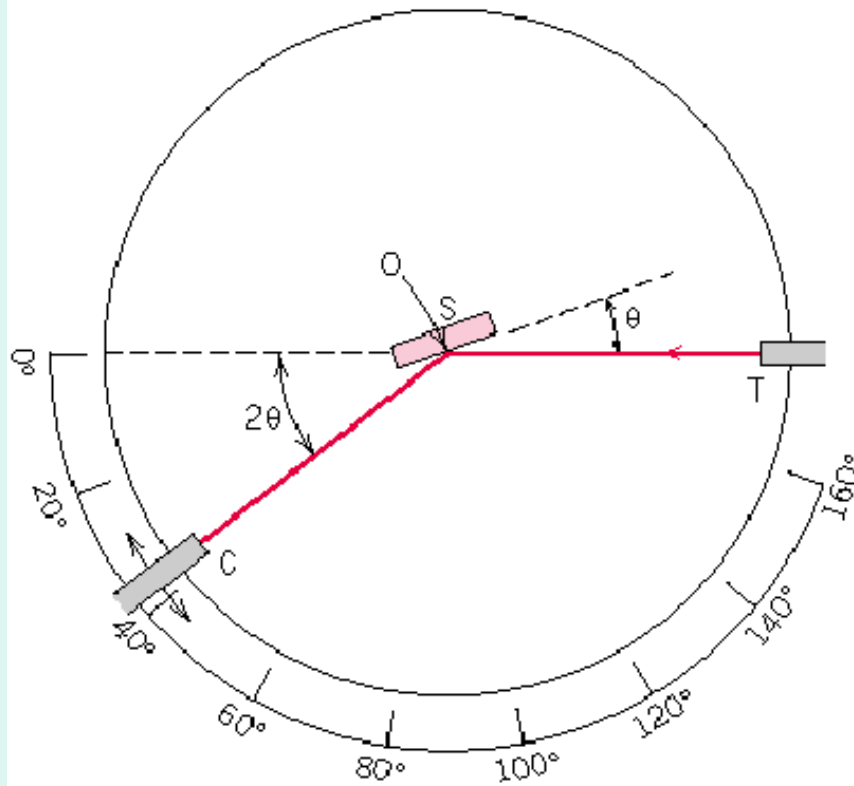
- d_{hkl} – razmak između ravnina atoma (ploha) u kristalnoj rešetki
- Θ - kut upada rentgenskih zraka na ravnine atoma (kristalnu plohu) Millerovih indeksa (hkl); kut pod kojim se pojačava rentgenska zraka – Braggov kut (sjaja)
- λ - valna duljina rentgenskih zraka
- $n \lambda$ - višekratnik valne duljine
- n – cijeli broj

$$n\lambda = \overline{SQ} + \overline{QT}$$

$$n\lambda = 2d \sin\theta \quad \text{Braggova jednađba}$$

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





T – izvor rendgenskih zraka

S – uzorak kristala

C- detektor

O – os oko koje uzorak i detektor rotiraju

Slika 10. Shematski prikaz rendgenskog difraktometra