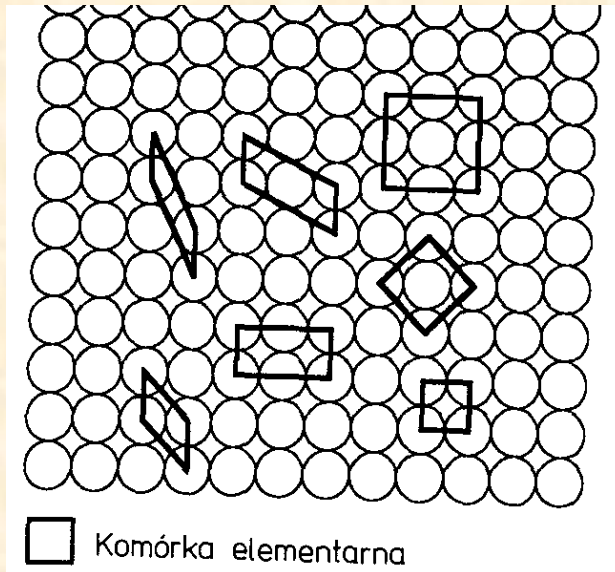


# Wykład 4: Struktura krystaliczna

Wg Blicharskiego, Wstęp do materiałoznawstwa

<http://webmineral.com/>

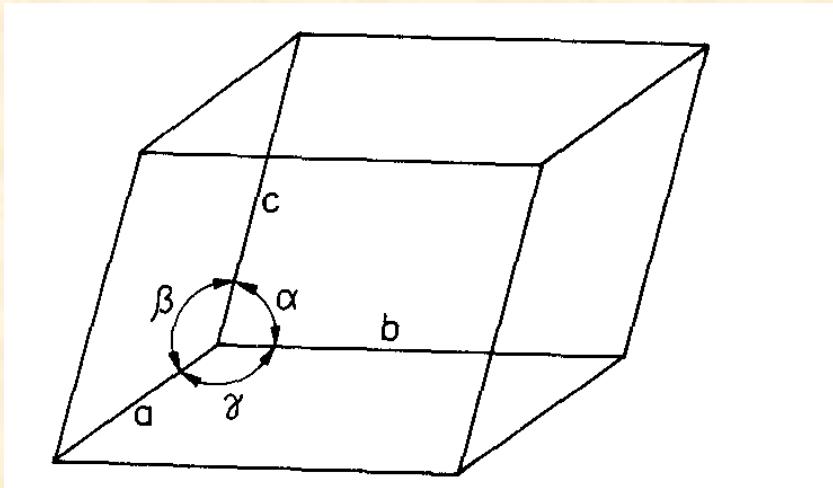
# Komórka elementarna



RYS. 3.1. Powtarzanie różnych elementów struktury umożliwiające odtworzenie całej struktury krystalicznej. Najprostszym elementem, którego powtarzanie odtwarza sieć, jest *komórka elementarna*


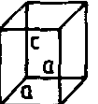
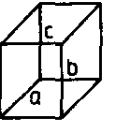
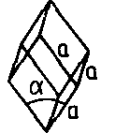
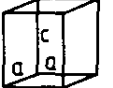
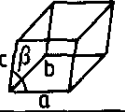
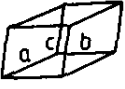
# Geometria komórki

RYS. 3.2. Geometria komórki elementarnej



Dla zdefiniowania trójwymiarowej komórki elementarnej należy podać trzy krawędzie i trzy kąty

# 7 układów krystalograficznych

Układ	Parametry sieciowe	Komórka elementarna
Regularny	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Tetragonalny	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Rombowy	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Trygonalny (romboedryczny)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Heksagonalny	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Jednoskośny	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Trójskośny	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

Układy krystalograficzne są uporządkowane według malejącej symetrii:

- w układzie regularnym (sześcián) trzy krawędzie są równe i kąty wynoszą  $90^\circ$
- w układzie tetragonalnym sześcián zamienia się w prostopadłościan, o podstawie kwadratu
- w układzie rombowym pozostaje prostopadłościan ale podstawa nie jest już kwadratem
- układ trygonalny przypomina romb, ale w trzech wymiarach
- układ heksagonalny ma w podstawie sześciokąt foremny (komórka elementarna to 1/3 tej podstawy)
- układ jednoskośny to zgnieciony (w jednym kierunku) prostopadłościan
- układ trójskośny jest zgnieciony w trzech kierunkach

RYS. 3.3. Siedem układów krystalograficznych

# 7 układów krystalograficznych

Układ	Parametry sieciowe	Komórka elementarna
Regularny	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Tetragonalny	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Rombowy	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Trygonalny (romboedryczny)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Heksagonalny	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Jednoskośny	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Trójskośny	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

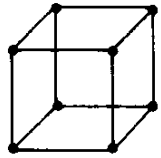
Układy krystalograficzne są uporządkowane według malejącej symetrii:

- w układzie regularnym (sześcian) trzy krawędzie są równe i kąty wynoszą  $90^\circ$
- w układzie tetragonalnym sześcian zamienia się w prostopadłościan, o podstawie kwadratu
- w układzie rombowym pozostaje prostopadłościan ale podstawa nie jest już kwadratem
- układ trygonalny przypomina romb, ale w trzech wymiarach
- układ heksagonalny ma w podstawie sześciokąt foremny (komórka elementarna to 1/3 tej podstawy)
- układ jednoskośny to zgnieciony (w jednym kierunku) prostopadłościan
- układ trójskośny jest zgnieciony w trzech kierunkach

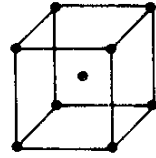
- rozciąganie w 1D
- zgniatanie w 1D lub 3D
- rozciąganie za 2 rogi

RYS. 3.3. Siedem układów krystalograficznych

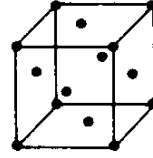
# 14 typów sieci



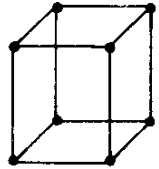
Regularna prymitywna



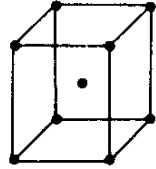
Regularna przestrzennie centrowana



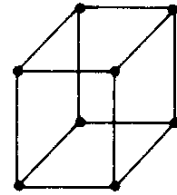
Regularna ściennie centrowana



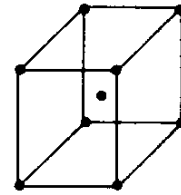
Tetragonalna prymitywna



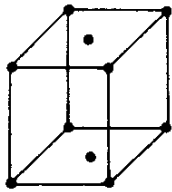
Tetragonalna przestrzennie centrowana



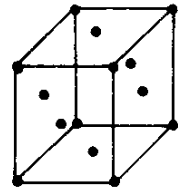
Rombowa prymitywna



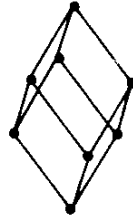
Rombowa przestrzennie centrowana



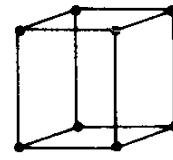
Rombowa o centrowanej podstawie



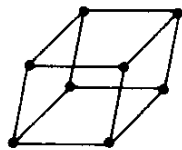
Rombowa ściennie centrowana



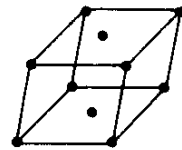
Trygonalna



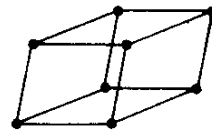
Heksagonalna



Jednoskośna prymitywna



Jednoskośna o centrowanej podstawie



Trójskośna

Proste struktury nie zapewniają największego upakowania, szczególnie w przypadku związków chemicznych.

Możliwe jest „dodanie” do sieci dodatkowych atomów, np. w środku sześcianu dla sieci regularnej.

Taką sieć nazywamy przestrzennie centrowaną. Inny sposób, to dodanie atomu na środku ściany – sieć ściennie centrowana.

RYS. 3.4. Komórki elementarne czternastu sieci Bravais'go

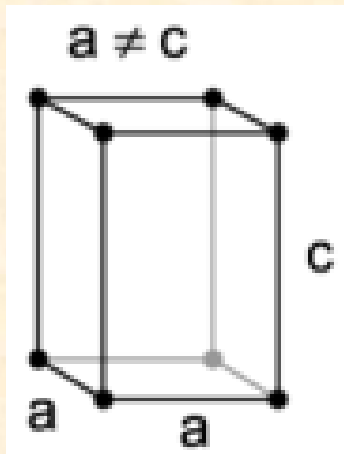
# Symbole układów

Układ krystalograficzny	Oznaczenie	Rodzaj sieci przestrzennej	Oznaczenie
Regularny	<i>c</i>	Prymitywna	<i>P</i>
Heksagonalny i trygonalny	<i>h</i>	Przestrzennie centrowana	<i>I</i>
Tetragonalny	<i>t</i>	Ściennie centrowana	<i>F</i>
Rombowy	<i>o</i>	Centrowana na podstawie	<i>C</i>
Jednoskośny	<i>m</i>	Romboedryczna	<i>R</i>
Trójskośny	<i>a</i>		

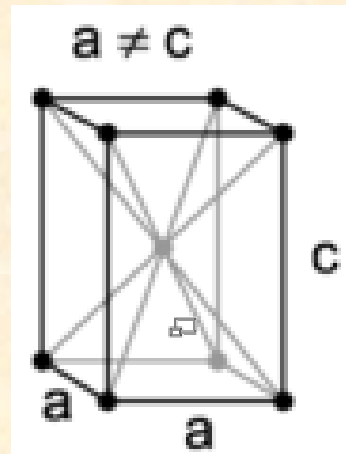
# Klasy krystalograficzne 0-1

tetragonalny

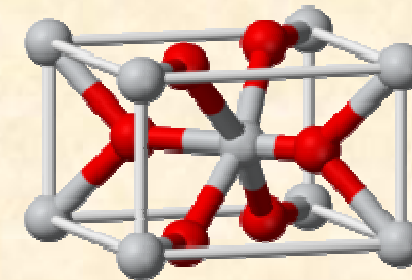
= prostopadłościan o podstawie kwadratowej



Simple tetragonal



Body-centered tetragonal



The unit cell of rutile  $\text{TiO}_2$ .  
Ti atoms are grey; O atoms are red.

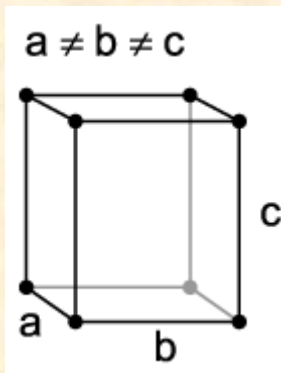


Rutyl w kwarcu

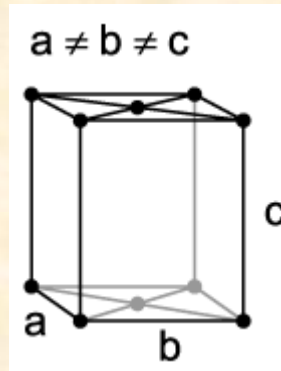
<http://en.wikipedia.org/wiki/File:Rutile@quartz.jpg>



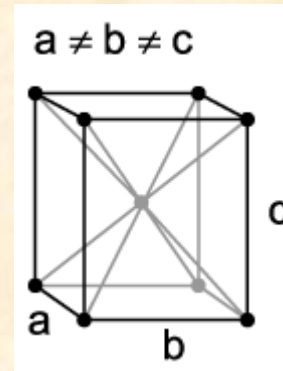
# Klasy krystalograficzne (0-2): rombowy (*orthorhombic*) = prostopadłościan „nieregularny”



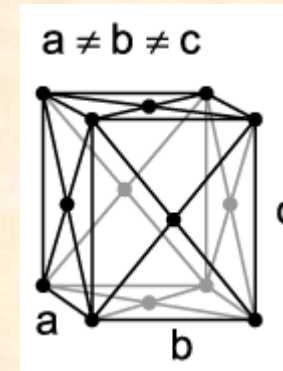
simple orthorhombic



base-centered  
orthorhombic



body-centered  
orthorhombic



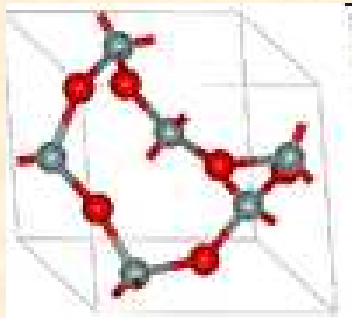
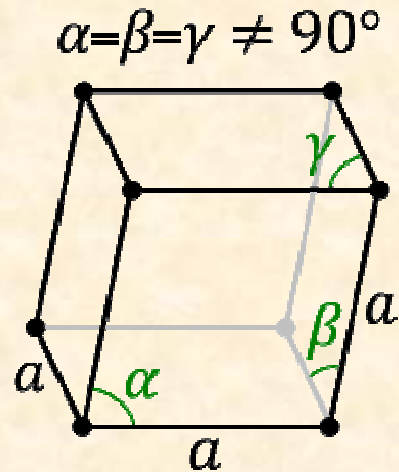
face-centered  
orthorhombic

Przykład: aragonit  
( $\text{CaCO}_3$ )  
ale  $\text{CaCO}_3$  kalcyt –  
trygonalny  
(rhombohedral)

<http://en.wikipedia.org/wiki/Orthorhombic>



# Klasy krystalograficzne (0-a): trygonalny (*trigonal, ≈rhombohedral*) = sześcián skrzywiony jednakowo w 3D



$\alpha$ -kwarc ( $\text{SiO}_2$ )



Korund ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ )

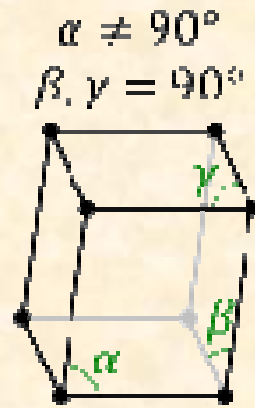
<http://en.wikipedia.org/wiki/Corundum>



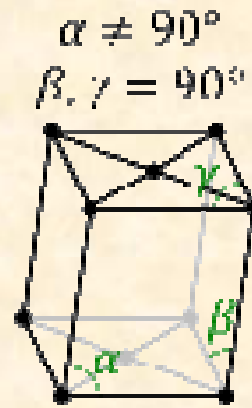
Cynober ( $\text{HgS}$ )

<http://en.wikipedia.org/wiki/Cinnabar>

# Klasy krystalograficzne (1a): jednoskośny (*monoclinic*) = prostopadłościan skrzywiony w 1D



Simple monoclinic (P)

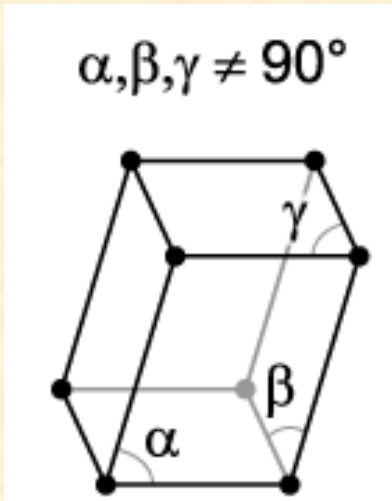


Centered monoclinic (C)



Gips ( $\text{CaSO}_4$ )

# Klasy krystalograficzne (1b): trójskośny (*triclinic*) = prostopadłościan skrzywiony w 3D



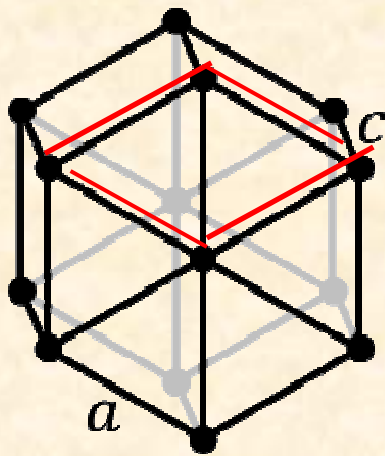
Triclinic ( $a \neq b \neq c$  and  $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ )

Brak osi symetrii



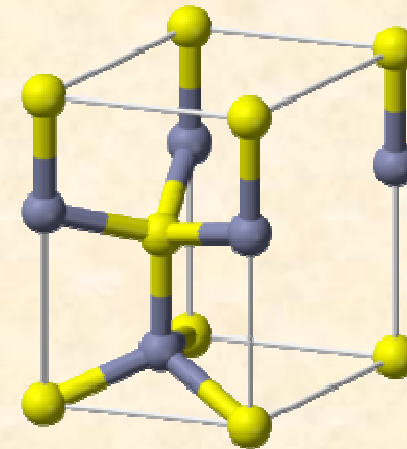
Plagioklasy, np. albit

# Klasy krystalograficzne (6): heksagonalny = prostopadłościan o podstawie 6-kąta



Three varieties of beryl:  
morganite, **aquamarine**  
and heliodor

<http://en.wikipedia.org/wiki/Beryl>



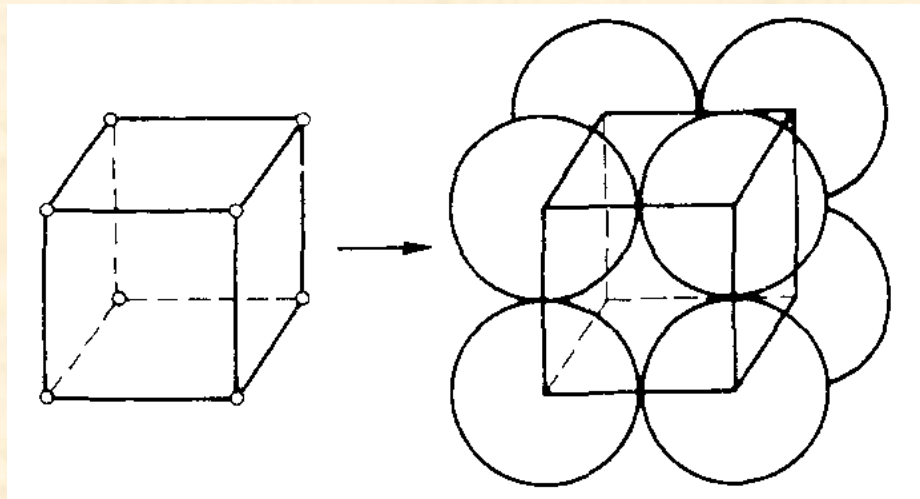
Wurtzite (ZnS, FeS, CdSe)

Wurtzite unit cell. The gray balls represent sulfur or selenium atoms, and yellow balls represent metal atoms.

# Sieć a kryształ

Kryształ to coś więcej niż sama (geometryczna) sieć:

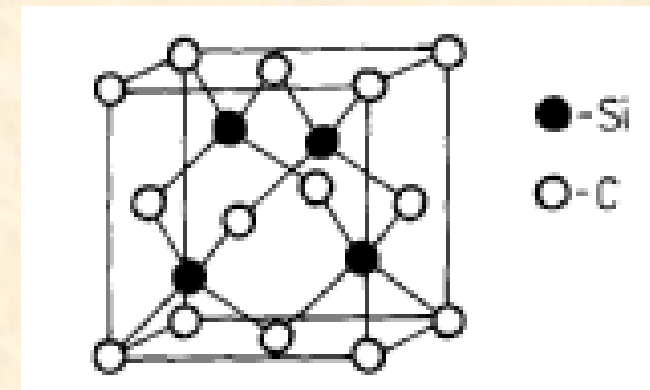
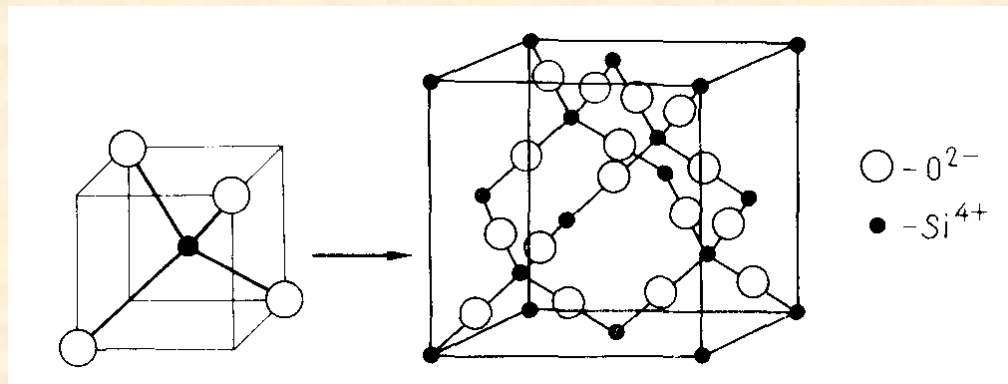
- kryształ powstaje przez wstawienie określonych atomów do węzłów sieci.



RYS. 3.5. Przez umieszczenie atomu na każdym punkcie sieciowym prymitywna sieć rombowa staje się prymitywną rombowa strukturą krystaliczną

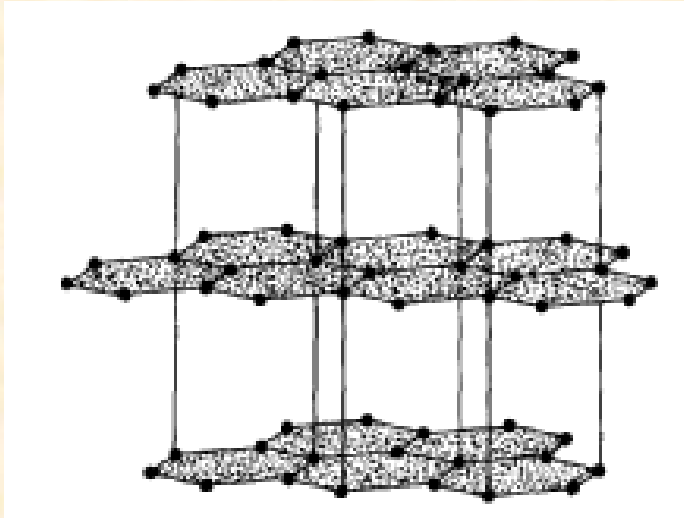
# Układ regularny: krystobalit, korund

33. a) Tetraedryczna konfiguracja atomów krzemu i tlenu, b) komórka elementarna krystobalitu ( $\text{SiO}_2$ ) stanowiąca sieć regularną ściennie centrowaną z sześcioma jonami ( $2\text{Si}^{4+}$  i  $4\text{O}^{2-}$ ) przypadającymi na punkt sieciowy



RYC. 3.29. Komórka elementarna węgla krzemu ( $\text{SiC}$ ) będąca komórką sieci regularnej ściennie centrowanej z dwoma atomami ( $\text{Si}$  i  $\text{C}$ ) przypadającymi na punkt sieciowy

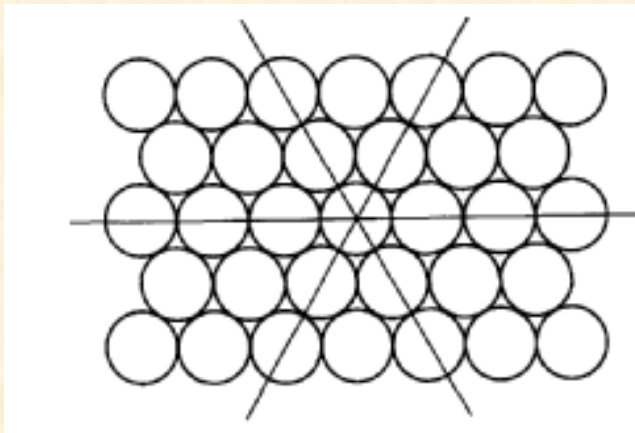
# Układ heksagonalny: grafit



- Wiązanie kowalencyjne (hybrydyzacja  $sp^2$ ) w pierścieniach + wiązanie van der Waalsa (słabe) między pierścieniami

-Dobre własności smarownicze (poślizg płaszczyzn)

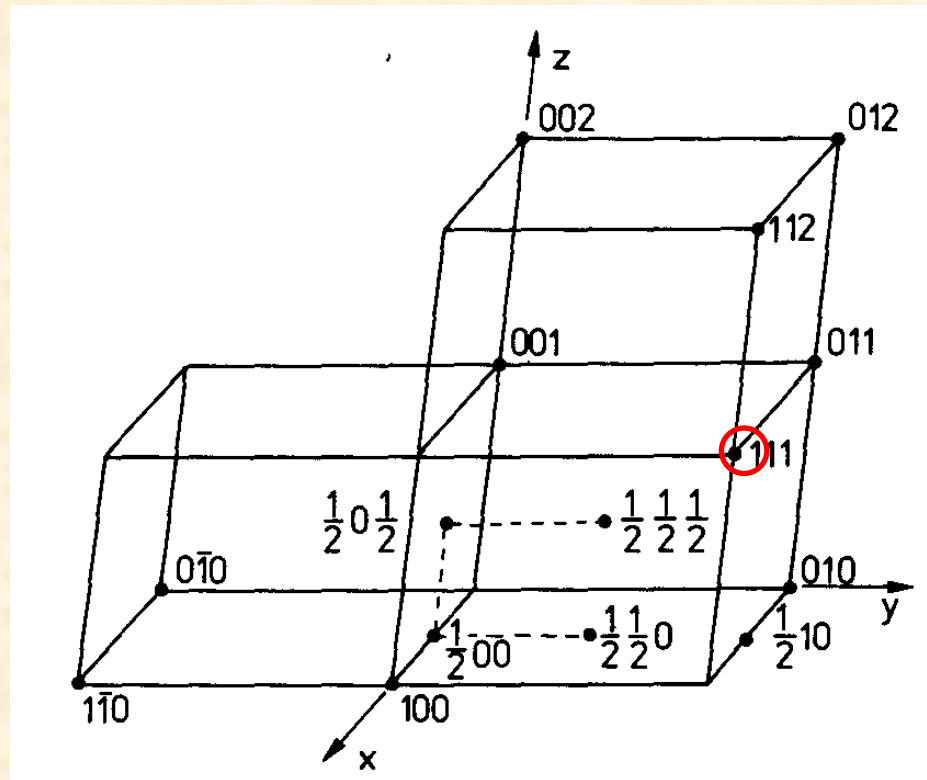
-Stopień wypełnienia przestrzeni 16.9%



Struktura heksagonalna – największego upakowania

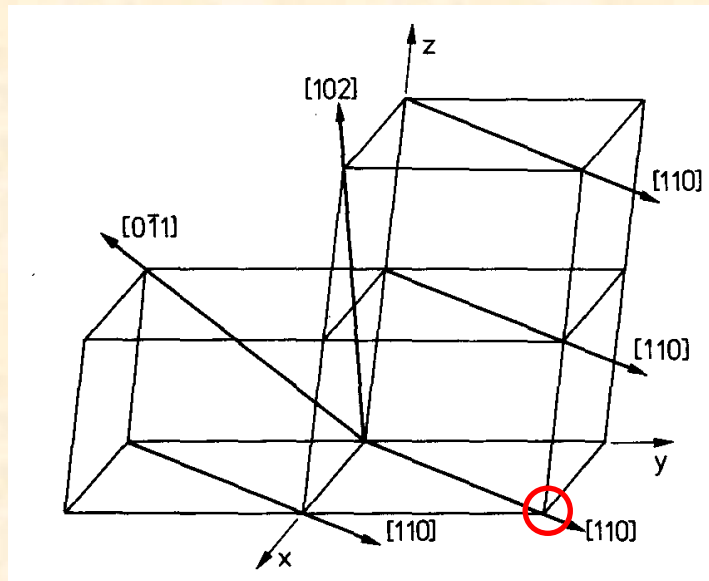


# Wskaźniki sieciowe (położenia)



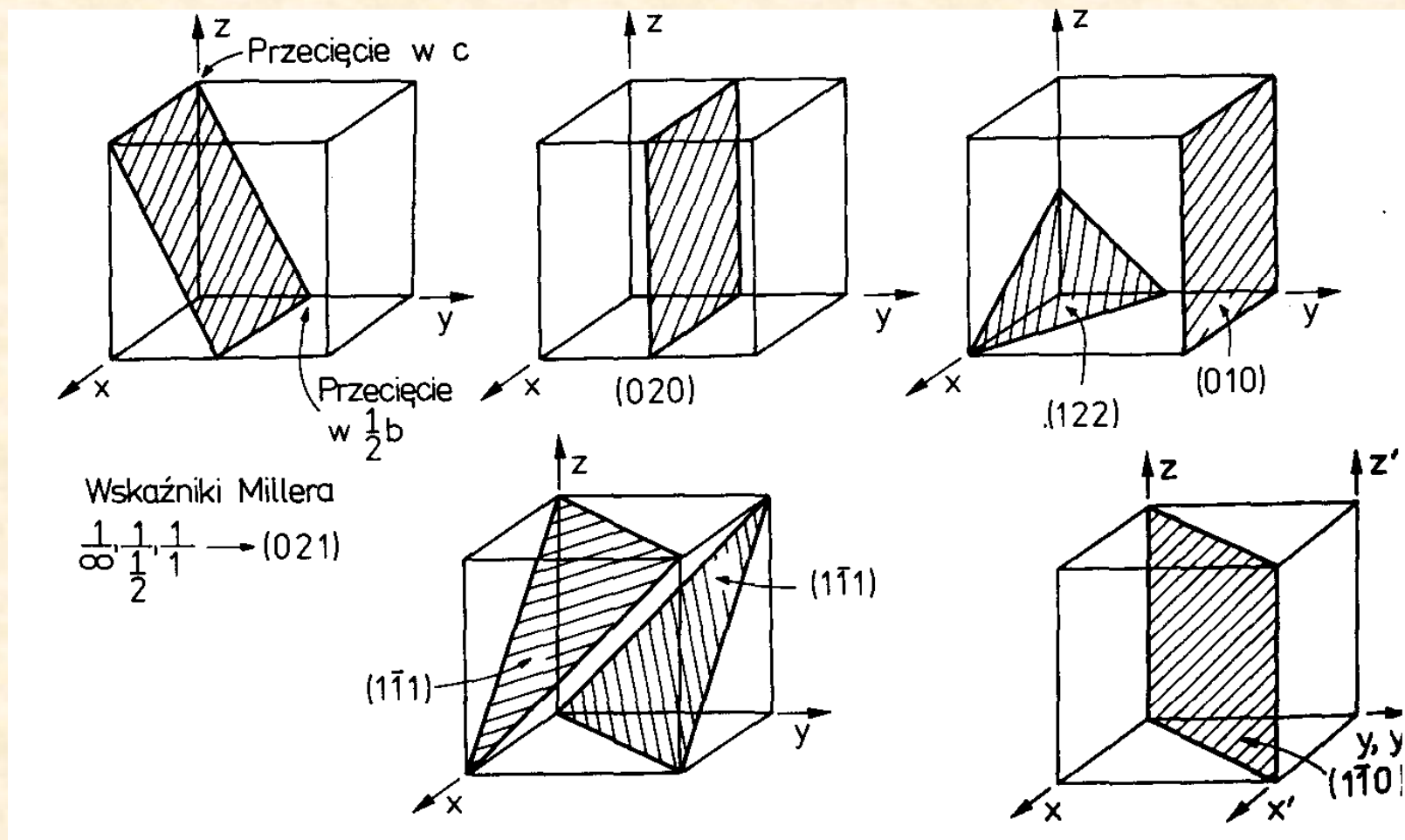
RYS. 3.6. Wskaźnikowanie położenia sieciowych. Cyfry oznaczają liczbę poszczególnych parametrów sieciowych

# Kierunki sieciowe



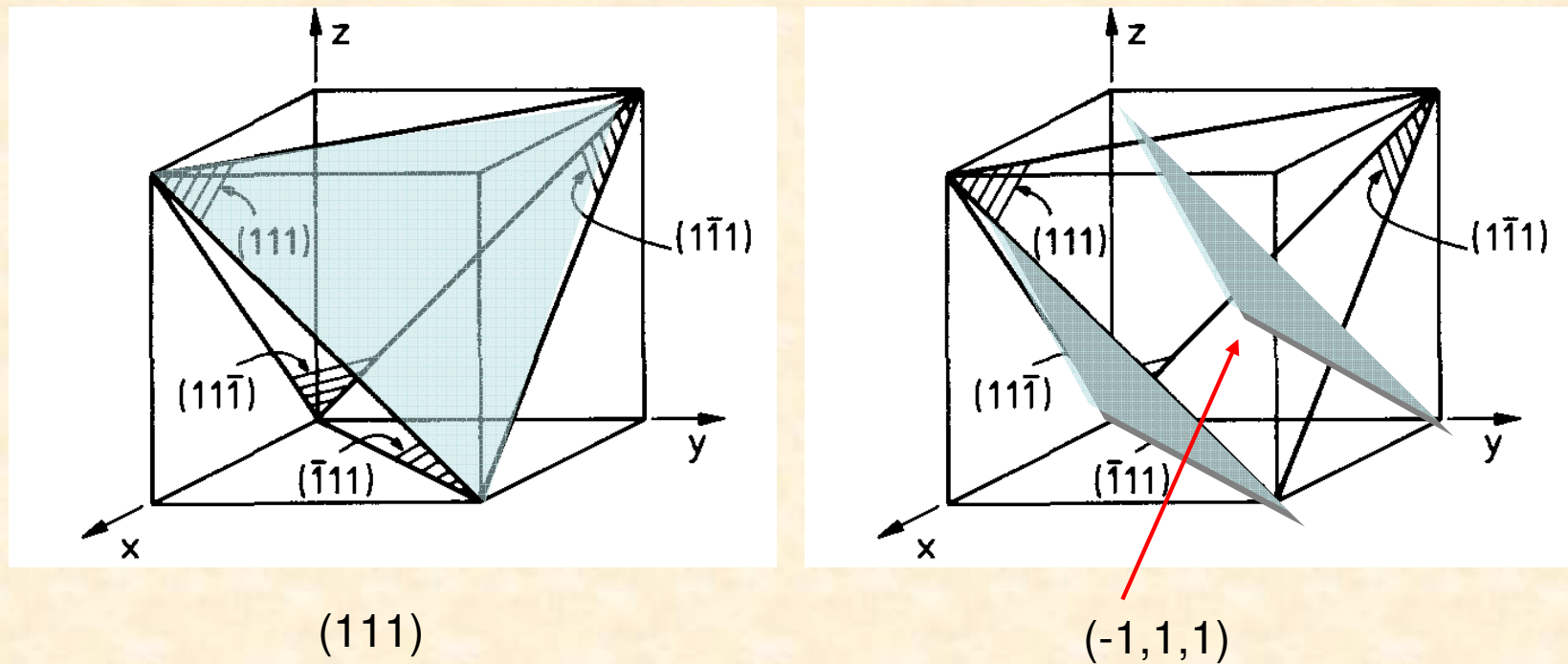
RYS. 3.7. Wskaźnikowanie kierunków sieciowych

# Wskaźniki płaszczyzn (Millera)



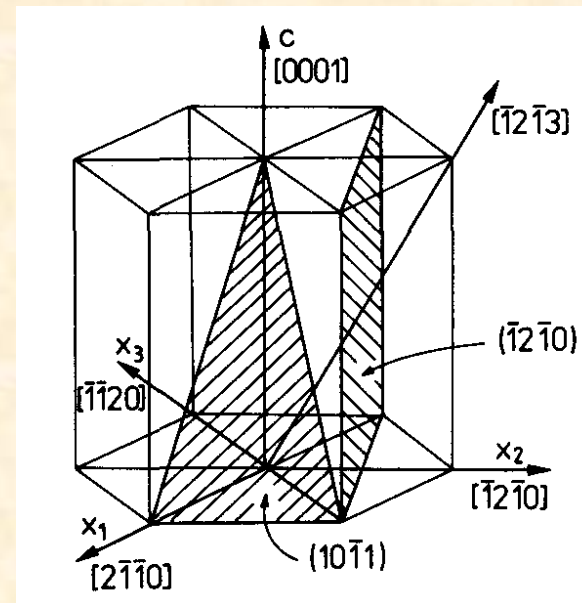
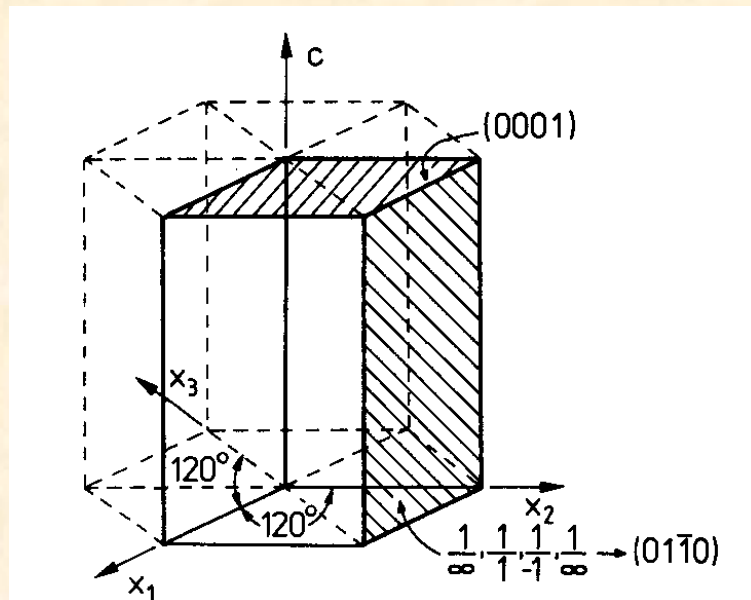
RYS. 3.9. Przykłady wskaźnikowania płaszczyzn sieciowych

# Wskaźniki płaszczyzn: układ regularny (np. Si)



RYS. 3.10. Płaszczyzny należące do rodziny płaszczyzn  $\{111\}$  układu regularnego

# Wskaźniki płaszczyzn: heksagonalny



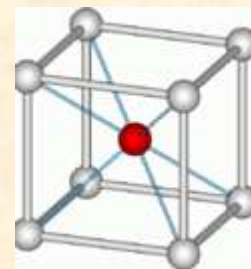
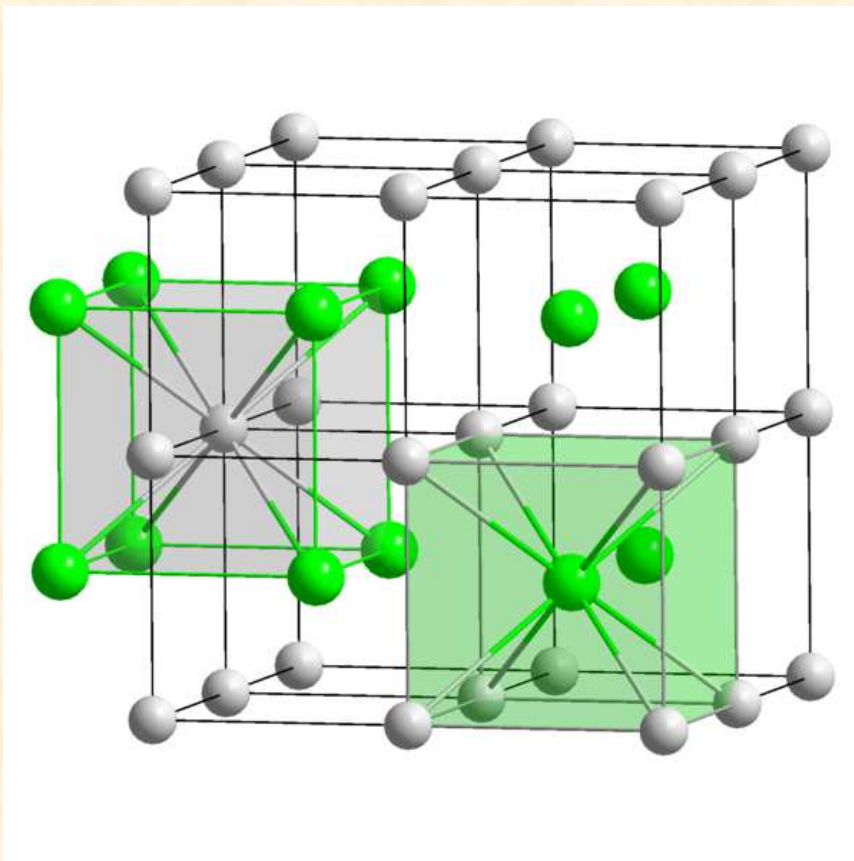
RYS. 3.11. Wskaźniki Millera-Bravais'go dla układu heksagonalnego

# Metale

Metal	Strukt.	R [nm]	Metal	Strukt.	R[nm]
Al	fcc	0.1431	Ni	fcc	0.1246
Cd	hcp	0.1490	Ag	fcc	0.1445
Cu	fcc	0.1278	Ti( $\alpha$ )	hcp	0.1445
Fe( $\alpha$ )	bcc	0.1241	W	bcc	0.1371
Pb	fcc	0.1750	Zn	hcp	0.1332

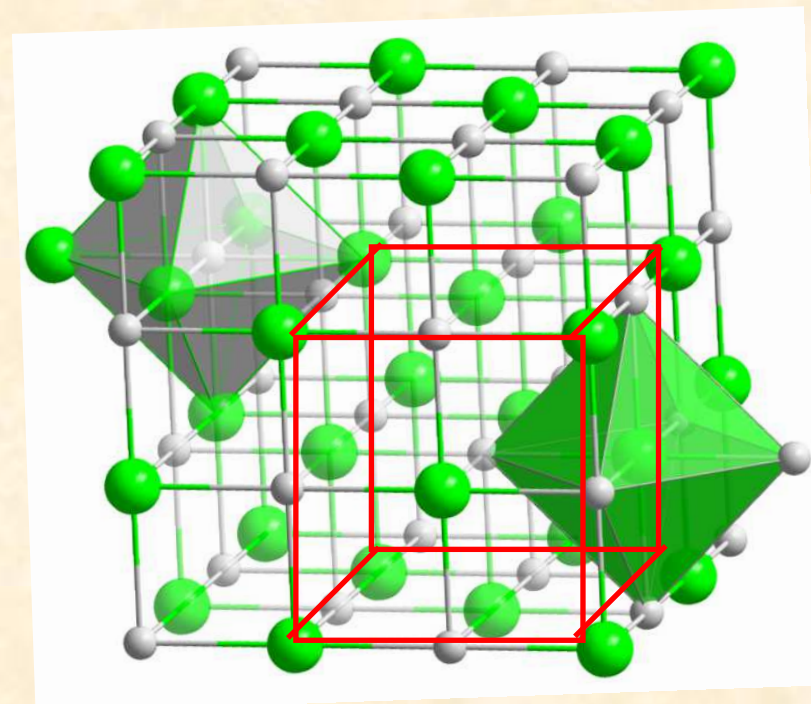
fcc = face-centered cubic; hcp = hexagonal close-packed; bcc = body-centered cubic

# Kryształ regularny: chlorek cezu



Układ regularny prosty  $\text{Cl}^-$  z jonami  $\text{Cs}^+$  w lukach tetrahedrycznych = **przestrzenie** centrowany (atomy centrujące – Cs)

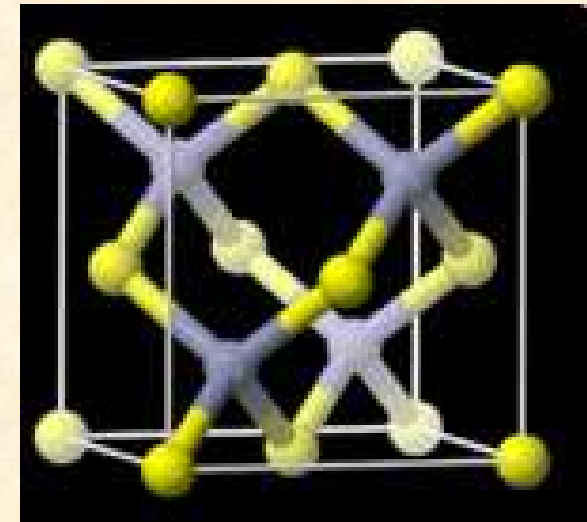
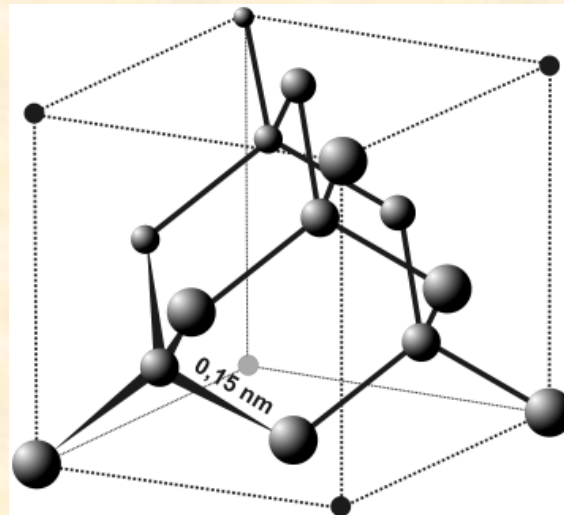
# Kryształ regularny: chlorek sodu



Układ regularny **ściennie centrowany** dla  $\text{Cl}^-$  (zielone)  
z jonami  $\text{Na}^+$  (szare) w lukach oktaedrycznych



# Kryształ regularny: diament



ZnS – blenda cynkowa  
(*sfaleryt*)

Układ regularny, **ściennie centrowany**

Kubisch flächenzentrierte Kristallstruktur (fcc) des Diamant.

Jedes Kohlenstoffatom ist gleichwertig mit vier Nachbaratomen **kovalent** gebunden, <http://de.wikipedia.org>  
unten links in der Zeichnung hervorgehoben.

# System trygonalny ( $\approx$ romboedryczny)

**name**

rhombohedral holohedral

rhombohedral hemimorphic

rhombohedral tetartohedral

trapezohedral

rhombohedral tetartohedral

**Schoenflies**

$D_{3d}$

$C_{3v}$

$S_6$

$D_3$

$C_3$

**examples**

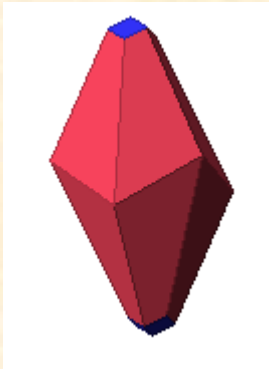
[calcite](#), [corundum](#), [hematite](#)

[tourmaline](#), [alunite](#)

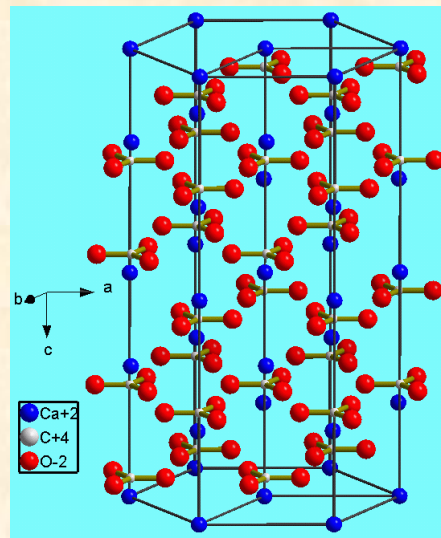
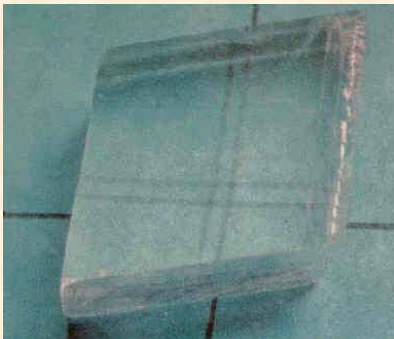
[dolomite](#), [ilmenite](#)

[quartz](#), [cinnabar](#)

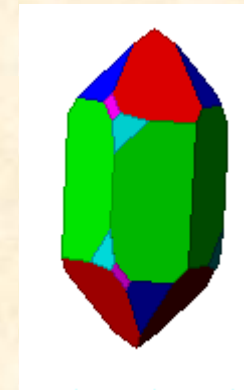
none verified



Kalcyt  $\text{CaCO}_4$

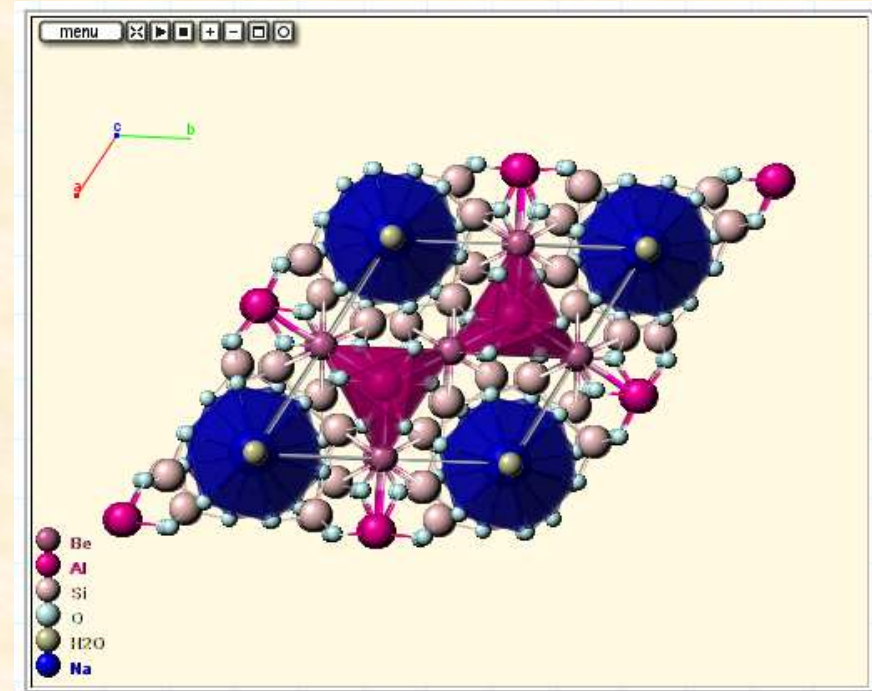
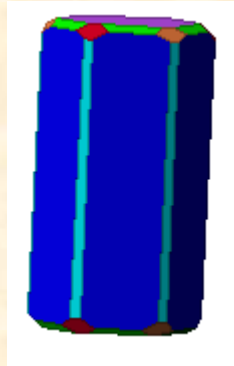


Kwarc  
 $\text{SiO}_2$



# Kryształ heksagonalny

Szmaragd  $\text{Be}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_3)_6$



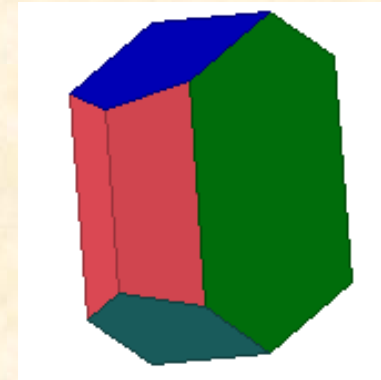
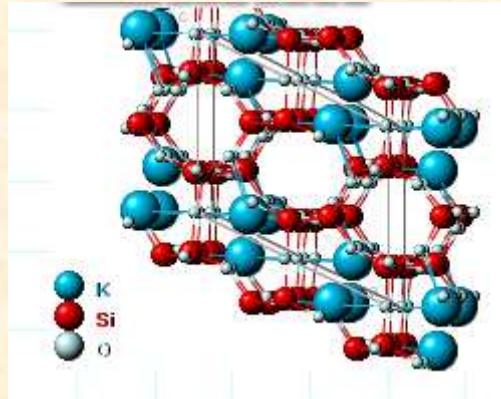
<http://webmineral.com>

800px-Émeraude\_(Brésil).jpg

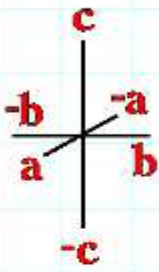
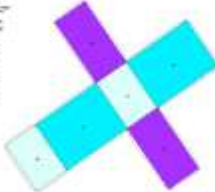
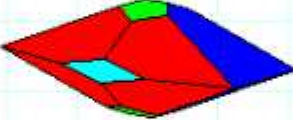
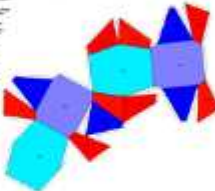
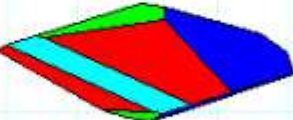
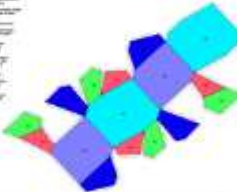
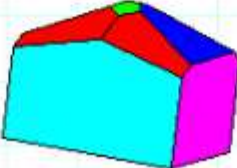
300px-National\_Museum\_of\_Natural\_History\_Emeralds\_2.JPG

# Kryształ jednoskośny

Ortoklaz  $\text{KAlSi}_3\text{O}_8$



## Orthorhombic Crystal Classes

Crystal Axes	Example Form	Java Example Forms and Links to Mineral Listings	Paper Models
 <p data-bbox="271 687 483 783">Orthorhombic Crystallographic Axes</p>	<p data-bbox="555 336 853 400">Orthorhombic Minerals Crystal Form Example</p> <p data-bbox="555 432 943 464">[214], [104], [024], [100], [010]</p>	<p data-bbox="981 336 1379 368"><a href="#">Class Unknown Mineral</a> Listing.</p>	
		<p data-bbox="981 584 1335 679">Orthorhombic <a href="#">Dipyramidal Mineral</a> Listing H-M Symbol (2/m 2/m 2/m)</p> <p data-bbox="987 719 1234 751">Java Crystal Pop-up</p>	
		<p data-bbox="981 839 1335 935">Orthorhombic <a href="#">Disphenoidal Mineral</a> Listing H-M Symbol (2 2 2)</p> <p data-bbox="987 975 1234 1007">Java Crystal Pop-up</p>	
		<p data-bbox="981 1078 1301 1174">Orthorhombic <a href="#">Pyramidal Mineral</a> Listing H-M Symbol (mm2)</p> <p data-bbox="987 1214 1234 1246">Java Crystal Pop-up</p>	