

41. ábra
A NaCl rács elemi cellája

Mindkét rácsra jellemző, hogy egy tetszés szerint kiválasztott pozitív vagy negatív töltésű iont ellentétes töltésű ionok vesznek körül. Különbség a közvetlen szomszédok számában van. A CsCl esetén a koordinációs szám 8, a NaCl-nál 6. Az itt bemutatott két rács típus több ionrácsú vegyület esetén is előfordul, ezért tipikus alakzatnak is tekintik.

Molekularácsok esetén a kristályrácsban molekulák foglalnak helyet, amelyeket gyenge van der Waals-erők, vagy hidrogén hidak kötnek össze. Makromolekulák esetén a kristályosodás alapfeltétele, hogy a lánc mentén szigorú ismétlődések legyenek, az elágazódások a láncokon minél kisebb számban forduljanak elő.

A molekularácsú vegyületek szilárdsága kicsi, „olvadáspontjuk” alacsonyabb, mint a kovalens kötésű kristályoké és az ionrácsú vegyületeké.

Az előzők alapján megállapítható, hogy a szilárdtestek kristályrácsai felépülhetnek azonos atomokból (ionokból, molekulákból), de különböző elemek részecskéiből is. A műszaki életben és főleg a gépészetben különös jelentősége van a fémeknek és ötvözeteinek. A fémek egyféle atomból (ionból) felépülő kristályrácsokat, elemrácsokat alkotnak. Ezért ezekkel, leírásuk lehetőségével, a rácsokat jellemző mérőszámokkal a következő fejezetben részletesen foglalkozom. Az ismertetés, az alkalmazható mérőszámok azonban más, nem fémes rácsok esetén is felhasználhatók értelemszerűen.

I.3.4. Kristálytani adatok

Az anyagok tulajdonságait, ezzel felhasználhatóságukat és megmunkálhatóságukat a kristályszerkezet és jellemző adatai döntően befolyásolják. Ezért célszerű összefoglalni a kristályrácsok jellemzésére használt mérőszámokat, amelyek közül a leggyakrabban alkalmazottakat ismertetem.

Koordinációs szám (K) egy atom (ion) legközelebbi szomszédainak a száma.

Az **elemi cellába foglalt atomok száma (N)** primitív elemi cellák esetén egy, illetve az elemi alakzatban található atomok száma. A nem primitív elemi celláknál az egy cellába eső atomok összegzett száma – figyelembe véve azt, hogy egy elemi cellához a csúcsokon, a határoló lapokon vagy az éleken található atomoknak (ionoknak) csak annyi rész tartozik, ahány elemi cellához a pont tartozik – könnyen meghatározható.

Rácsparaméter(ek) és az atomátmérő (atomsugár) kapcsolata abból a korábban ismertetett megfontolásból elemi geometriai ismeretekkel számítható, hogy a fémes rácsban helyet foglaló atomok

alakja jól közelíthető gömbbel. Ebben az esetben az atomátmérő két legközelebbi atom távolsága. Természetesen az értelmezésből adódó különbségek miatt ez az atomátmérő (atomsugár) nem egyezik meg a szabad atom átmérőjével (sugarával). Ugyanakkor a fémek többségénél a kétféle módon értelmezett atomsugár között nincs jelentős eltérés.

Térkitöltési tényező (T^T) megmutatja, hogy a gömbnek feltételezett atomok az elemi cella hányad részét (hány százalékát) foglalják el. Az elemi cellába foglalt atomok számának, a rácsparaméter és az atomátmérő kapcsolatának ismeretében egyszerű geometriai számításokkal meghatározható.

A síkkitöltési tényező (T^S) az atom(ok) által elfoglalt terület és a síkelem területének hányadosa.

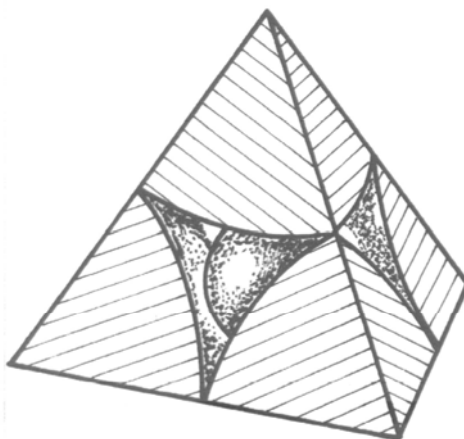
A vonalkitöltési tényező (T^V) az atomok által elfoglalt vonalhossz és a vizsgálat szakasz hosszának hányadosa.

A térbeli atomsűrűség (S^T) az egységnyi térfogatban található atomok számát mutatja.

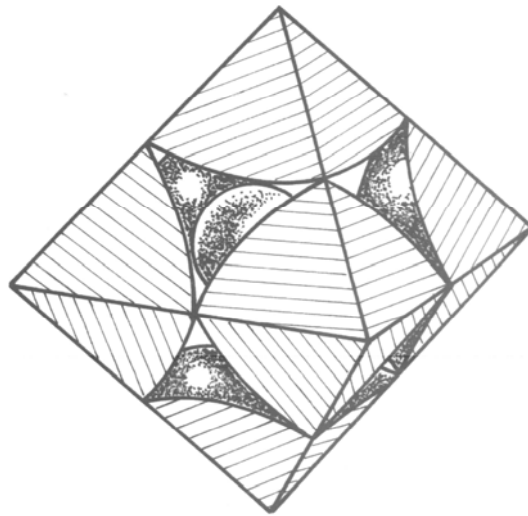
A síkbeli atomsűrűség (S^S) a felületegységre jutó rácspontok (atomok) számát jelzi.

A vonalmenti atomsűrűség (S^V) a hosszegységre eső rácspontok (atomok) számát jelenti.

A rácshézag mérete annak a gömbnek az átmérője (sugara), amelyet a kristályrács atomjai közé lehet illeszteni úgy, hogy a rács szomszédos atomjait érintse. A kristályrácsban a gömbnek feltételezett atomok között különböző rácshézagok találhatók. A fémeknél leggyakrabban előforduló rácstípusok esetén (térben középpontos köbös, felületen középpontos köbös és tömött hexagonális) két jellemző rácshézag is található. A tetraéder hézagot négy, az oktaéder hézagot hat atom határolja. A tetraéder hézagot határoló négy atom középpontja egy tetraéder csúcsain helyezkedik el (42. ábra), az oktaéder hézagot határoló hat atom köbös alapú, két négyzet alapú gúla csúcsain található (43. ábra). Az ábrákon az atomoknak csak azon részeit ábrázoltuk, amelyek a tetraéderbe, illetve oktaéderbe esnek, közöttük pedig a rácshézagokba illeszkedő gömböket lehet látni.

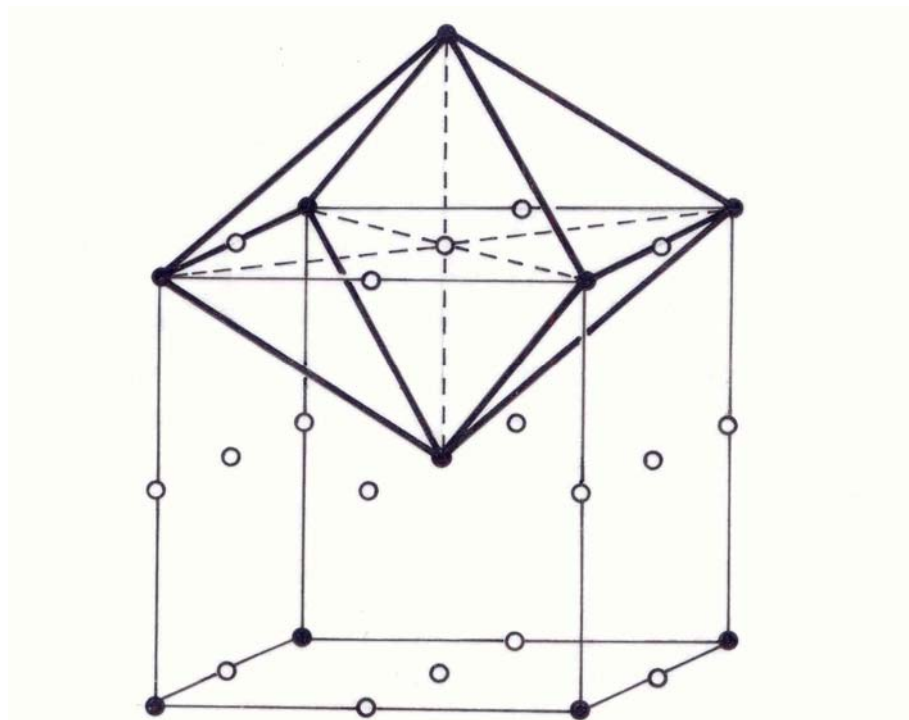


42. ábra
Tetraéder hézagot határoló atomok

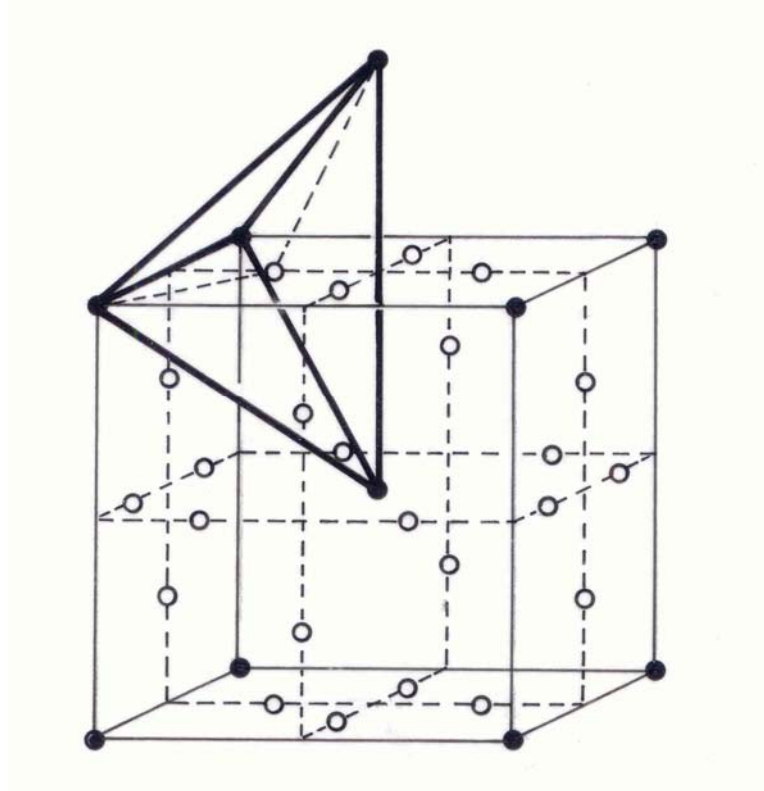


43. ábra
Oktaéder hézagot határoló atomok

A 44. ábra a térben középpontos köbös rács oktaéder hézagait mutatja. A hézagok közepét körök (a saját atomokat sötétített körök) jelzik. A 45. ábra ugyanezen rács típus tetraéder hézagainak helyét mutatja. A 46. és a 47. ábra a felületen középpontos köbös rács oktaéder illetve tetraéder hézagainak helyét mutatja. Mind a négy ábrán egy-egy rácshézag köré megrajzoltuk a határoló oktaédert, illetve tetraédert is. Az előzőekben ismertettek szerint rajzolt tömött hexagonális rács oktaéder és tetraéder hézagait a 48. és 49. ábra mutatja.

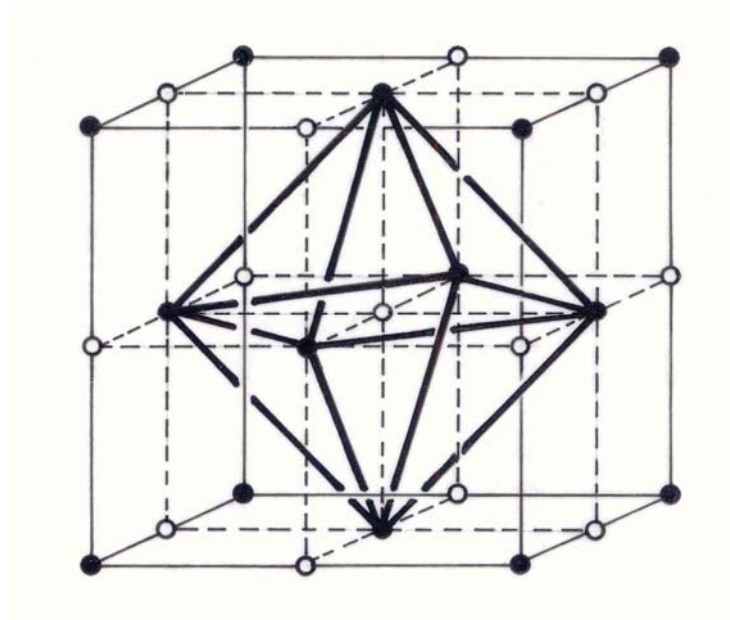


44. ábra
Térben középpontos köbös rács oktaéder hézagainak helyei



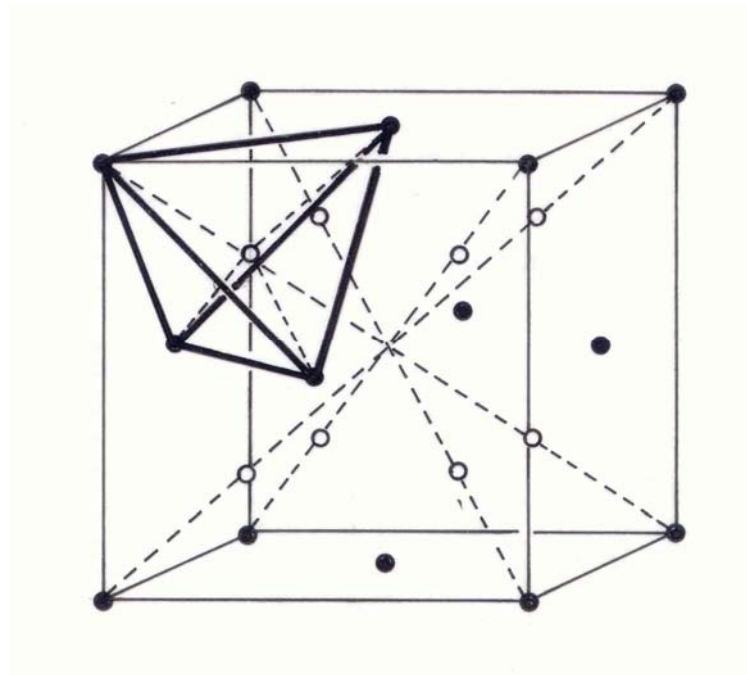
45. ábra

Tetraéder hézagok helye a térben középpontos köbös cellában



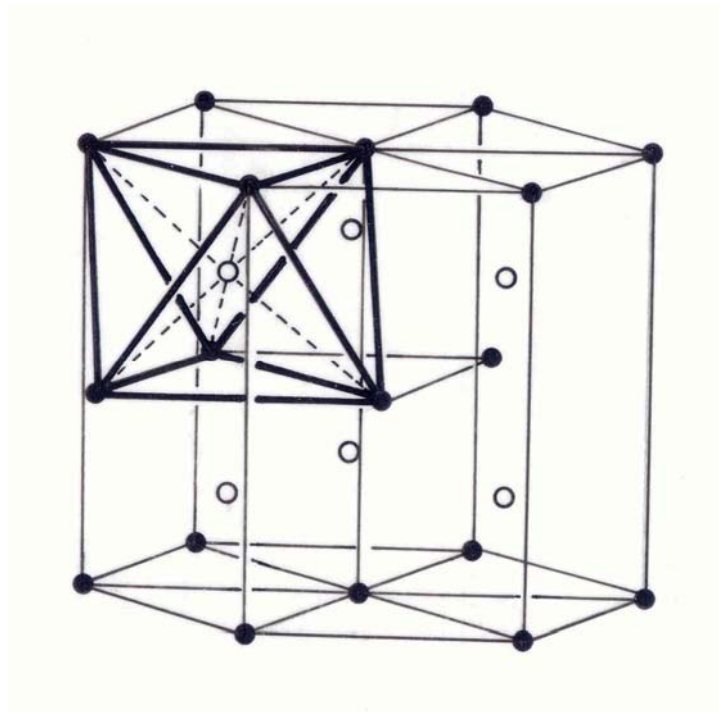
46. ábra

Felületen középpontos köbös kristályos oktaéder hézagainak helyei



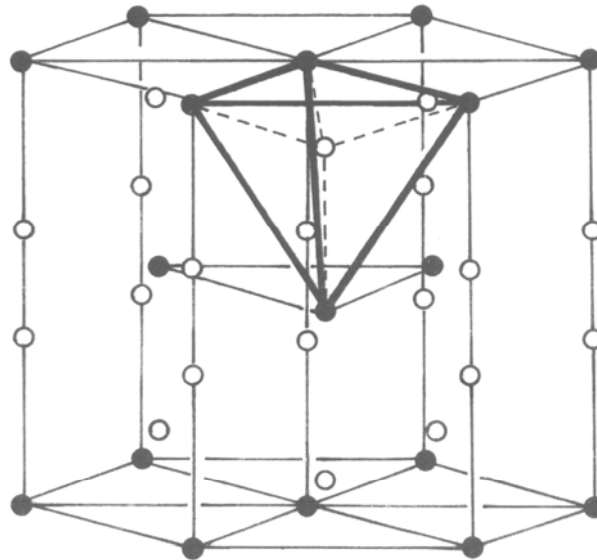
47. ábra

Felületen középpontos köbös rács tetraéder hézagainak helyei



48. ábra

Oktaéder hézagok helye a tömött hexagonális rácsban



49. ábra
Tömött hexagonális kristályrács tetraéder hézagainak helyei

A kristályrácsok szempontjaiból fontos tulajdonság a síksorozat egyes síkjainak **merőleges távolsága** (d). Ezen érték a térelem adatai (a , b , c , α , β , γ) és a síkok Miller-indexei (h , k , l) segítségével kiszámolható. Az összefüggések annál bonyolultabbak, minél kisebb a kristályrendszer szimmetriája. A három leggyakoribb rács típusra, a köbös, a tetragonális és a hexagonális rács rendszerre az összefüggések a következők:

- ◆ köbös:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (21)$$

- ◆ tetragonális:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + \left(\frac{a}{c}\right)^2}} \quad (22)$$

- ◆ hexagonális:

$$d = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2) + \left(\frac{a}{c}\right)^2}} \rho^2 \quad (23)$$

Az összefüggésekből megállapítható, hogy annál nagyobbak a síksorok egyes síkjai közötti távolság, minél kisebbek a síkok Miller-indexei.

A kristálytani síkok szabályok ismétlésével felépíthető az anyag. Természetesen ez a megállapítás csak azon síkokra igaz, amelyek a kristályrács minden rácspontját tartalmazzák. A primitív rácsok minden síkjuk egymásra helyezésével felépíthetők, a konvencionálisoknál ez nem általános. Kimutatható például, hogy a térben középpontos köbös rács minden pontján átmegy annak a síksorozatnak valamelyik tagja, amelyek a Miller-indexeinek összege páros. A felületen középpontos