

KRYŠTÁLOVÁ ŠTRUKTÚRA KOVOV A ZLIATIN

- kovy patria medzi kryštalické látky.
- látky sú kryštalické, ak ich stavebné jednotky (atómy, ióny, molekuly) sú rozmiestnené v priestore s trojrozmernou periodicitou. Reálne usporiadanie stavebných častíc v priestore nazývame kryštálom a spôsob usporiadania kryštálovou štruktúrou.
- abstrakciou kryštálovej štruktúry je kryštalografická mriežka, v ktorej sú stavebné častice nahradené bodmi – uzlami mriežky.
- mriežka vyjadruje translačnú (posuvnú) periodicitu rozmiestnenia identických bodov v kryštáli, t.j. bodov s rovnakou hodnotou geometrickej alebo fyzikálnej vlastnosti.
- základnou bunkou mriežky sa nazýva najmenšia charakteristická časť priestorovej mriežky. Pre jej výber platia Bravaisove pravidlá:
 1. Jej symetria je zhodná s vonkajšou symetriou kryštálu.
 2. Má maximálny počet pravých uhlov.
 3. Pri splnení prvých dvoch podmienok má minimálny objem.
- dĺžky hrán základnej bunky a uhly, ktoré navzájom zvierajú sú parametre mriežky (niekedy označené ako mriežkové konštanty) a , b , c , α , β , γ .
- podľa súmernosti sú kryštály zatriedené do 7 kryštalografických sústav, ktoré popisujú 14 typov priestorových mriežok.
- kryštály kovov sa vyznačujú tesným usporiadaním atómov, aké umožňujú iba mriežky s vysokou súmernosťou. Preto väčšina z nich kryštalizuje v kubických a hexagonálnych kryštálových štruktúrach.

MRIEŽKY

- počet atómov v základnej bunke stanovujeme za predpokladu, že mriežka je ideálna, bez porúch.

ZADANIE: Nakreslite základnú mriežku aj s atómami a doplňte základné informácie o mriežkach.

Kubická priestorovo centrovaná mriežka	
Nákres:	Označenie: Koordináčné číslo: Parametre mriežky: Počet atómov patriacich jednej bunke (celý výpočet):

Kubická plošne centrovaná mriežka	
Nákres:	Označenie: Koordináčné číslo: Parametre mriežky: Počet atómov patriacich jednej bunke (celý výpočet):

Hexagonálna mriežka (s najtesnejším usporiadaním)	
Nákres:	Označenie: Koordináčné číslo: Parametre mriežky: Počet atómov patriacich jednej bunke (celý výpočet):

HUSTOTA ZAPLNIENIA V KRYŠTÁLOVÝCH ŠTRUKTÚRACH

- pri výpočte hustoty zaplnenia jednotlivých štruktúr predpokladáme guľovitý tvar atómov, ktorých polomery sa dajú vypočítať z tvarov a rozmerov ich mriežok.

- hustota zaplnenia sa udáva zaplneným objemom v percentuálnom vyjadrení k celému objemu alebo percentuálnym voľným objemom.

- vzťahy:

$$V_{CELK} = V_{ZAPL} + V_{VOL}$$

$$V_{VOL} = \frac{V_{CELK} - V_{ZAPL}}{V_{CELK}} \times 100 \quad [\%]$$

$$V_{ZAPL} = n \times V_{at}$$

V_{CELK} – celkový objem mriežky/objem elementárnej bunky [m^3]

V_{ZAPL} – zaplnený objem mriežky

V_{VOL} – voľný objem mriežky

V_{at} – objem atómu [m^3]

n – počet atómov patriacich jednej elementárnej bunke

ZADANIE: Vypočítajte percentuálny voľný objem V_{VOL} a potom percentuálny objem zaplnenia V_{ZAPL} pre základné mriežky.

Kubická priestorovo centrovaná mriežka

Výpočet:

$V_{VOL} =$

$V_{ZAPL} =$

Kubická plošne centrovaná mriežka

Výpočet:

 $V_{VOL} =$ $V_{ZAPL} =$ **Hexagonálna mriežka (s najtesnejším usporiadaním)**

Výpočet:

 $V_{VOL} =$ $V_{ZAPL} =$

MERNÁ HMOTNOSŤ

- poznatky o tvare a veľkosti základnej bunky a počte atómov v nej nám umožňujú vypočítať mernú hmotnosť akéhokoľvek prvku.

- hmotnosť atómu vypočítame z atómovej hmotnosti daného prvku, ktorú nájdeme v Mendelejevovej tabuľke.

- vzťahy:

$$m = \frac{M}{L}$$

$$\rho = \frac{G}{V}$$

$$\rho = \frac{n \times \frac{M}{L}}{V_{CELK}}$$

m – hmotnosť atómu [kg]

M – atómová hmotnosť [kg.kmol⁻¹]

L – Avogadrovo číslo (6,023.10²⁶) [kmol⁻¹]

ρ – merná hmotnosť [kg.m⁻³]

G – celková hmotnosť [kg]

V – objem telesa [m³]

n – počet atómov patriacich jednej elementárnej bunke

V_{CELK} – objem elementárnej bunky [m³]

PRÍKLADY:

Určte mernú hmotnosť volfrámu, ak viete, že kryštalizuje v priestorovo centrovanej kubickej sústave s parametrom mriežky $a = 3,1652 \cdot 10^{-10}$ m a jeho atómová hmotnosť je $M_W = 183,85$ kg.kmol⁻¹.

Výpočet:

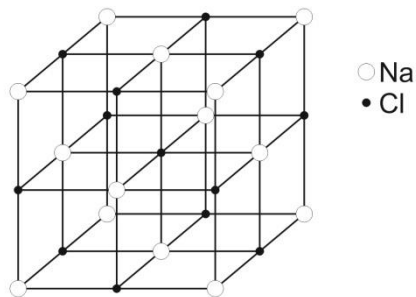
Určte mriežkovú konštantu chrómu, ak viete, že kryštalizuje v mriežke kubickej priestorovo centrovanej, jeho atómová hmotnosť $M_{Cr} = 51,990 \text{ kg.kmol}^{-1}$ a merná hmotnosť $\rho = 7190 \text{ kg.m}^{-3}$.

Výpočet:

Určte mernú hmotnosť Fe_γ pri teplote 916°C , ak viete, že kryštalizuje v plošne centrovanej kubickej sústave s parametrom mriežky $a = 3,1652 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ pri tejto teplote a jeho atómová hmotnosť je $M_{Fe} = 55,847 \text{ kg.kmol}^{-1}$.

Výpočet:

Vypočítajte mriežkovú konštantu NaCl, ak viete, že kryštalizuje v kubickej sústave podľa obrázku. Merná hmotnosť NaCl pri 20°C je $\rho = 2160 \text{ kg.m}^{-3}$ a atómová hmotnosť $M_{Na} = 22,991 \text{ kg.kmol}^{-1}$ a $M_{Cl} = 35,457 \text{ kg.kmol}^{-1}$.



Výpočet: