

# **Zaawansowane Metody Badań Materiałów**

**Badania strukturalne materiałów**

**Badania właściwości materiałów**

# Grafik zajęć – wykłady i seminaria

Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki

Katedra Chemii Krzemianów i Związków Wielkocząsteczkowych:

[kckizw.ceramika.agh.edu.pl](http://kckizw.ceramika.agh.edu.pl), [zmbm.ceramika.agh.edu.pl](http://zmbm.ceramika.agh.edu.pl)

zakładka: Zaawansowane Metody Badań Materiałów

Osoba odpowiedzialna za przedmiot: prof. dr hab. inż. Włodzimierz Mozgawa

Osoba koordynująca przedmiot: dr inż. Anna Adamczyk, pok. 332, B8

## Wykłady:

Czwartek 10.00 - 11.30, sala 010b B8

Tematyka wykładów:

1 / (6.10) Dyfrakcja rentgenowska

2 / (13.10) Dyfrakcja rentgenowska cd. /Mikroskopia Sił Atomowych AFM

3 / (20.10) Spektroskopia oscylacyjna

4 / (27.10) Spektroskopia oscylacyjna cd.

5 / (3.11) Metody termiczne

6 / (17.11) Metody termiczne cd. (10.00-10.45)

7 / (24.11) Mikroskopia elektronowa

8 / (1.12) Mikroskopia elektronowa cd. (10.0 - 10.45)

## Seminaria:

Czwartek 10.00 - 11.30, sala 010b B8

sem. 1 (8.12) Spektroskopia oscylacyjna

sem. 2 (15.12) Dyfrakcja rentgenowska

sem. 3 (5.01) Kolokwium zaliczeniowe !!!

Alternatywny termin: ?????

## Prowadzący zajęcia:

dr inż. Anna Adamczyk - XRD, AFM

prof. dr hab. inż. Włodzimierz Mozgawa - Spektroskopia osc.

dr inż.. Magdalena Król - Spektroskopia osc.

dr inż.. Magdalena Szumera - Metody termiczne

dr inż. Paweł Rutkowski – Metody termiczne

dr inż. Leszek Chlubny - Metody mikroskopowe SEM

# Grafik zajęć - Laboratoria

## Laboratoria:

- Dyfrakcja Rentgenowska (xrd) -1.24a B8
- Spektroskopia Oscylacyjna (sp) 3.12 B8
- Metody Termiczne (ter) 01 (niski parter) B6
- Mikroskopia Elektronowa (me) 08 (niski parter) B6
- Mikroskopia Sił Atomowych (afm) -1.23 B8

Nr zajęć/data	WTOREK godz. 8.30 – 10.15
	grupa 1
1 / 4.10	-----
2 / 11.10	xrd
3 / 18.10	xrd
4 / 25.10	xrd
5 / 8.11	xrd
6 / 15.11	sp
7 / 22.11	sp
8 / 29.11	sp
9 / 6.12	sp
10 / 13.12	ter
11 / 20.12	ter
12 / 3.01	me
13 / 10.01	me
14 / 17.01	afm

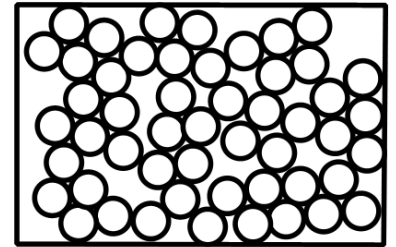
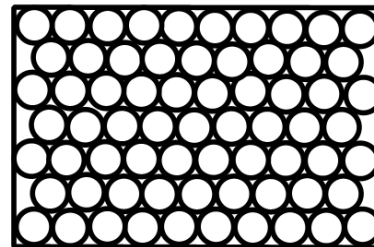
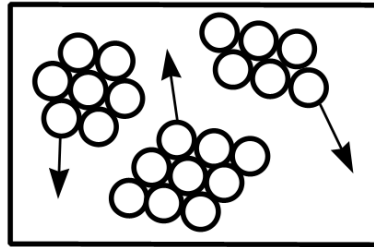
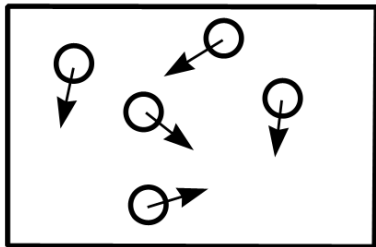
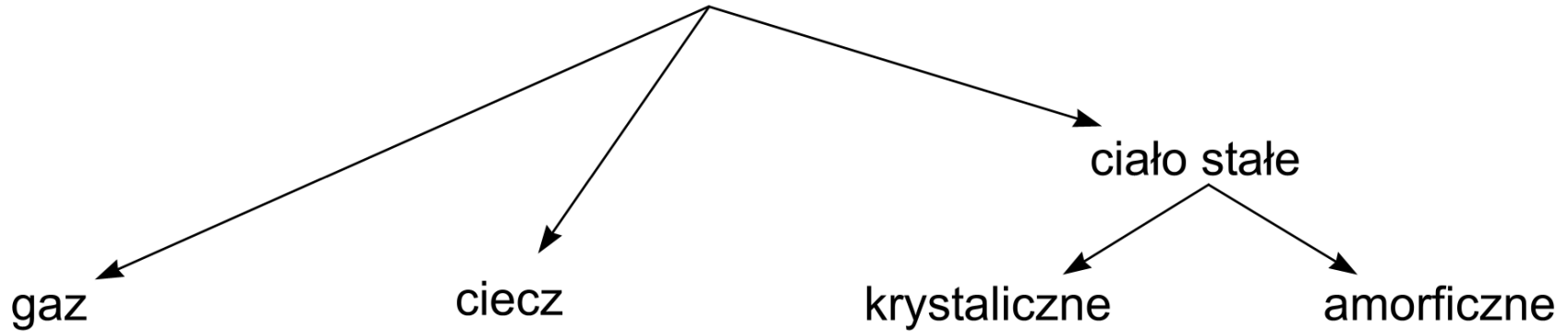
Adres strony Katedry Chemii Krzemianów i Związków Wielkocząsteczkowych:  
[kckizw.ceramika.agh.edu.pl](http://kckizw.ceramika.agh.edu.pl), adres przedmiotu: [zmbm.ceramika.agh.edu.pl](http://zmbm.ceramika.agh.edu.pl)

# Zaawansowane Metody Badań Strukturalnych

1. Struktura próbki a metoda badań strukturalnych
2. Podział metod badań struktury i właściwości
3. Metody rentgenograficzne
4. Promieniowanie rentgenowskie a materia
5. Teoria Braggów-Wulfa
6. Dyfraktometr rentgenowski
7. Rentgenowska analiza fazowa
  - jakościowa
  - ilościowa

# Materia nieożywiona

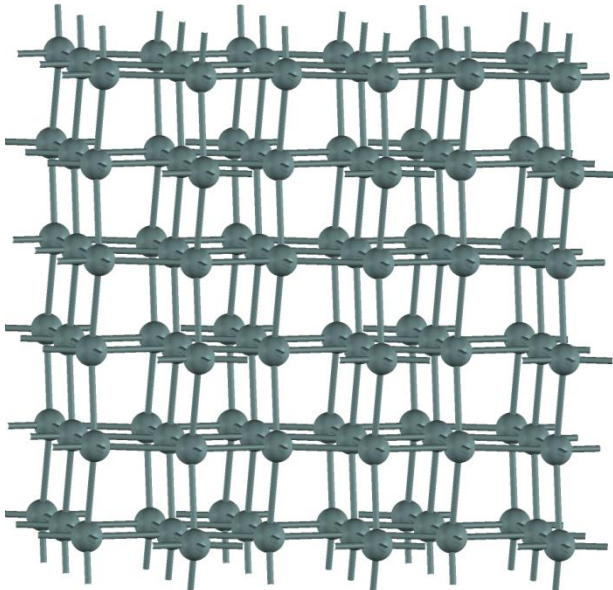
Stany skupienia materii



# Ciało stałe

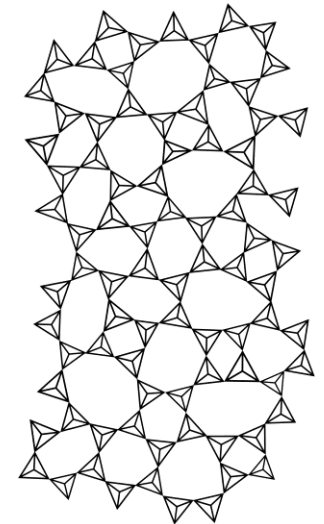
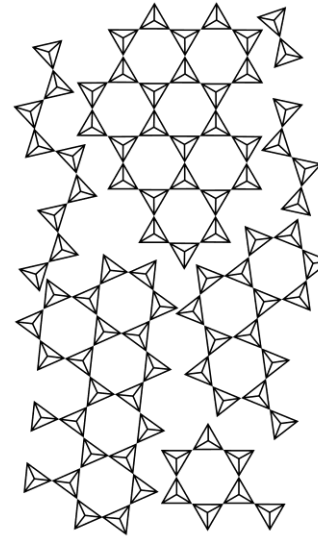
## krystaliczne:

- uporządkowana budowa wewnętrzna w dalekim i bliskim zasięgu
- anizotropia właściwości



## amorficzne:

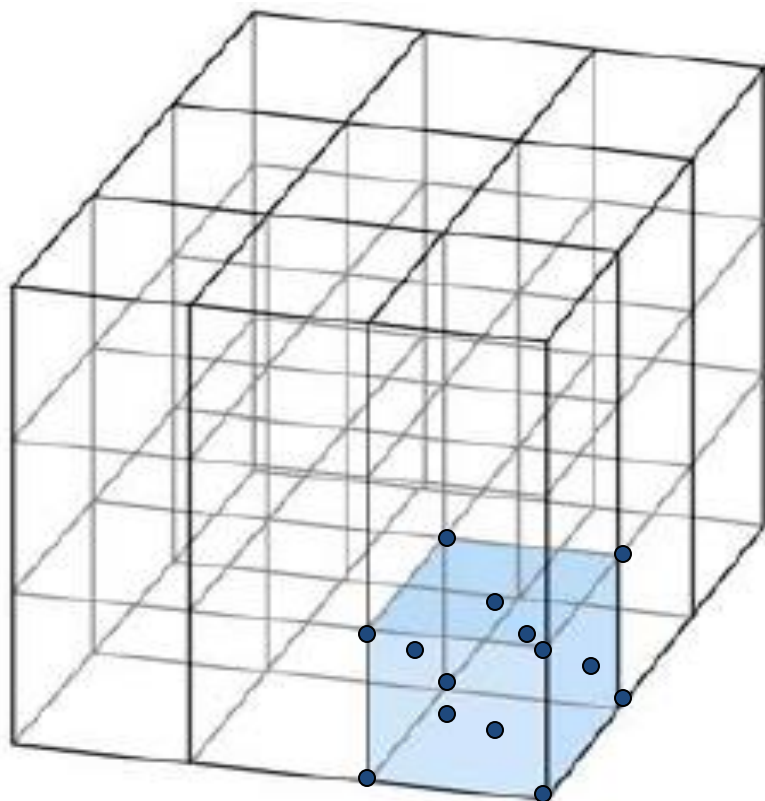
- uporządkowana budowa wewnętrzna tylko w bliskim zasięgu
- izotropia właściwości



# Sieć przestrzenna a sieć krystaliczna

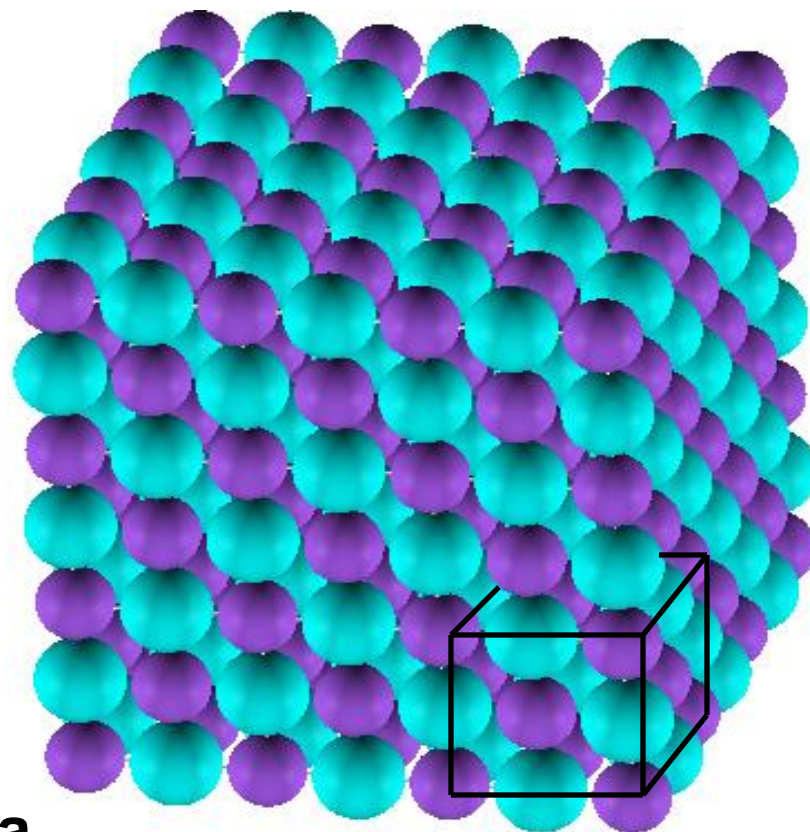
**Sieć przestrzenna** – konstrukcja matematyczna (zbiór punktów) powstała przez zastąpienie powtarzających się motywów sieci krystalicznej (atomów / jonów / molekuł) punktami zwanymi węzłami sieci.

**Sieć krystaliczna** - układ atomów/ jonów / molekuł powtarzający się w regularnych odstępach w trzech nierównoległych kierunkach w przestrzeni



**komórka elementarna**

●  
węzeł

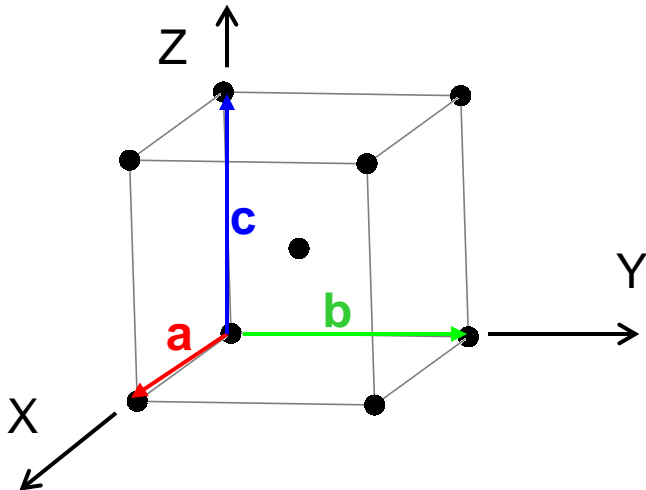


● ●  
powtarzający się motyw

# Komórka elementarna (zasadnicza)

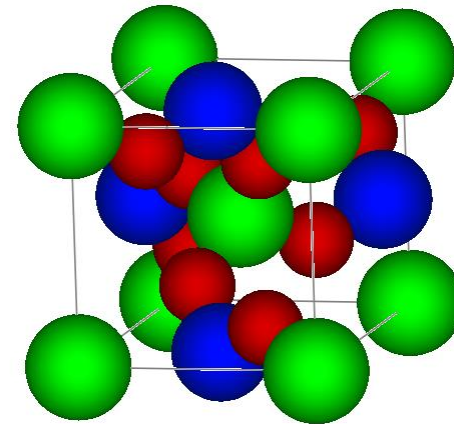
**Komórka elementarna** jest podstawowym elementem sieci (krystalicznej lub przestrzennej), zachowującym periodyczność i symetrię danej sieci, powtarzalnym dzięki translacji.

komórka elementarna  
sieci przestrzennej



kształt równoległościanu,  
o wężłach w narożach;  
równoległościan jest opisany przez  
wektory translacji  $a$ ,  $b$ ,  $c$ .

komórka elementarna  
sieci krystalicznej



najmniejsza, powtarzalna część  
struktury kryształu, zawierająca  
wszystkie rodzaje atomów / jonów  
/cząsteczek.



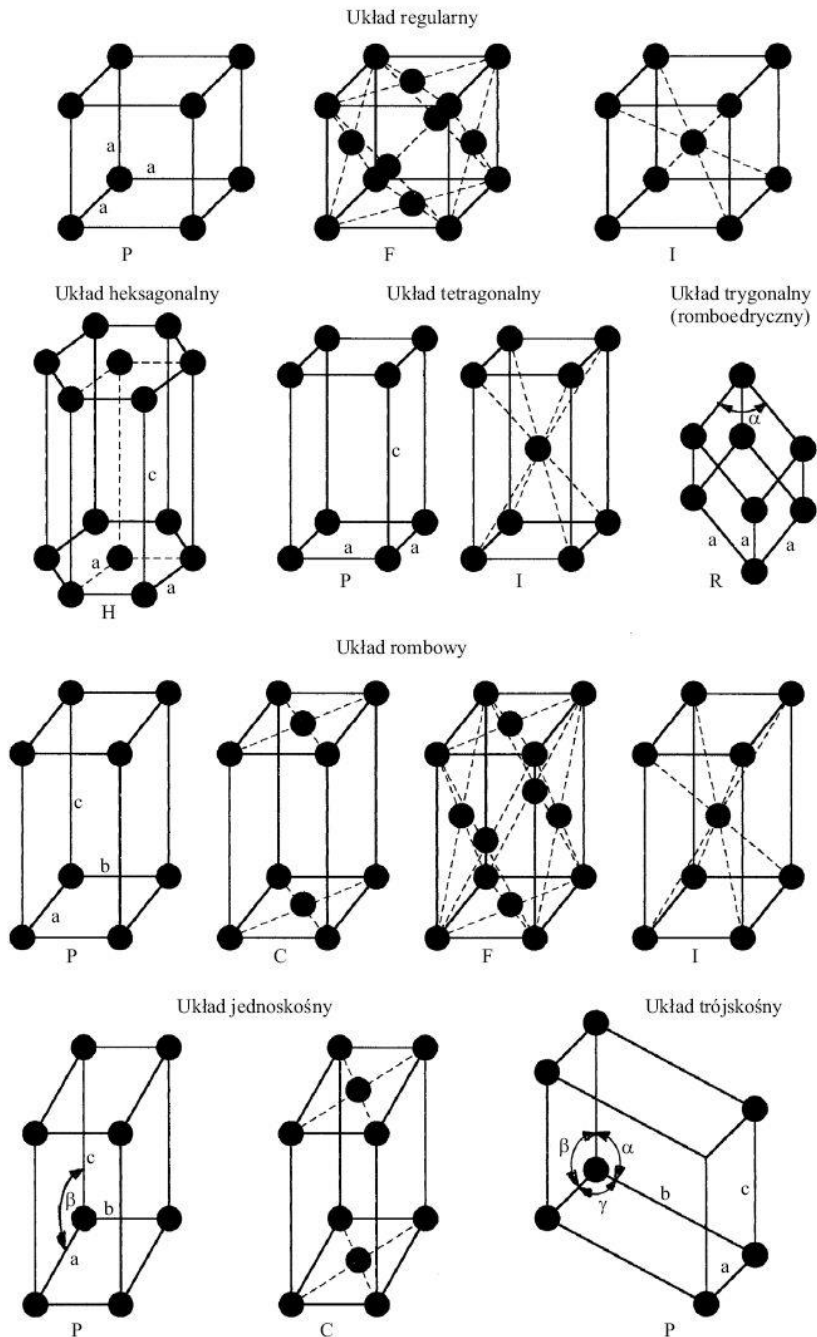
# Możliwe kształty komórek elementarnych oraz sposoby obsadzenia ich węzłami w poszczególnych układach krystalograficznych

## Układy krystalograficzne:

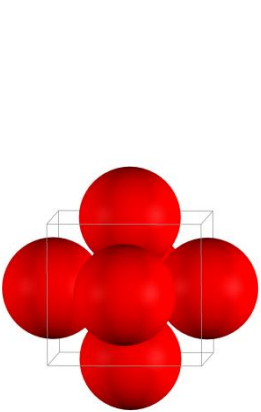
- regularny (kubiczny)
- tetragonalny
- ortorombowy
- heksagonalny (razem z układem trygonalnym)
- jednoskośny
- trójskośny

## Parametry sieciowe:

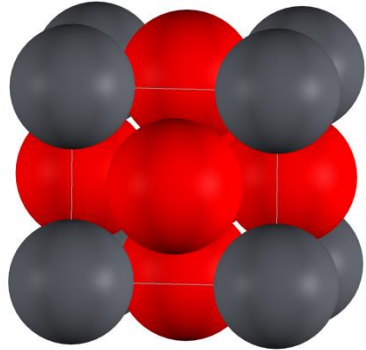
$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$



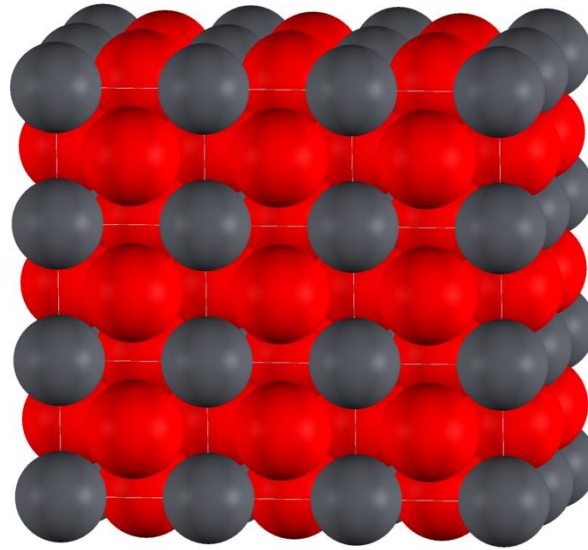
# Metoda badań strukturalnych a rodzaj uporządkowania



Spektroskopia optyczna



Mikroskopia Sił Atomowych

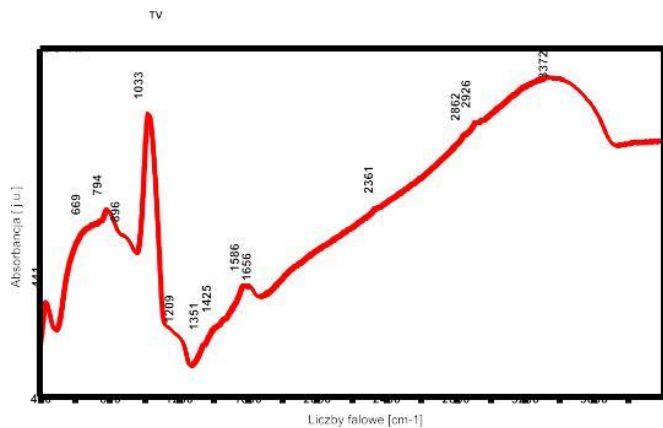


Dyfrakcja rentgenowska

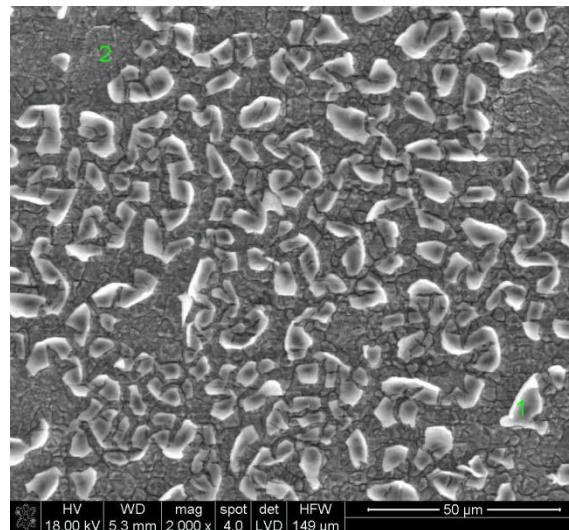


Mikroskopia elektronowa

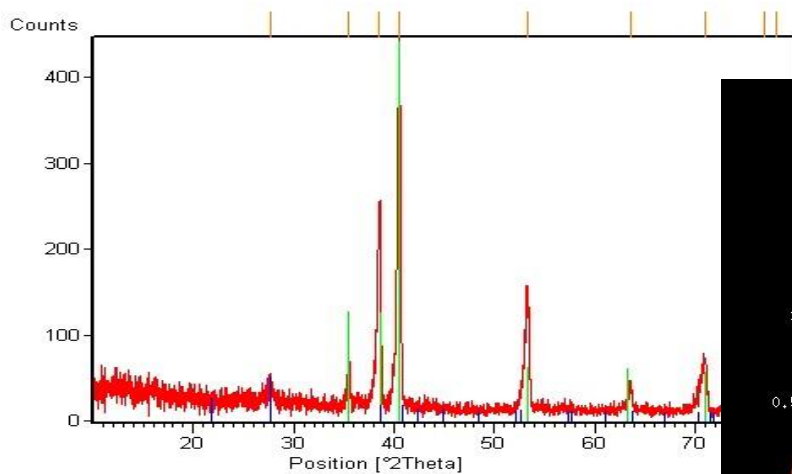
# Wyniki pomiarów



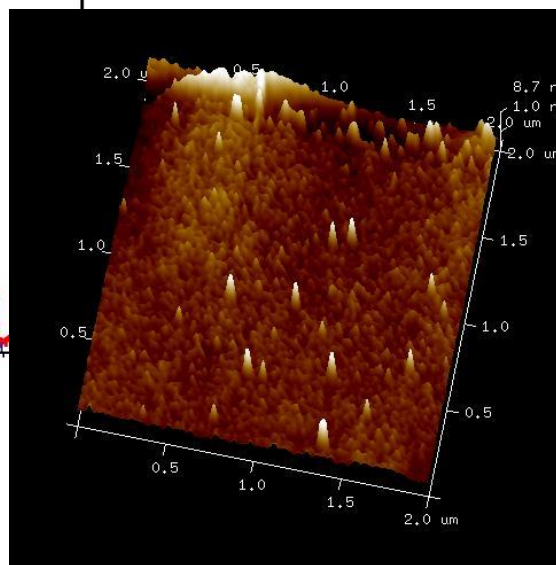
Widmo IR



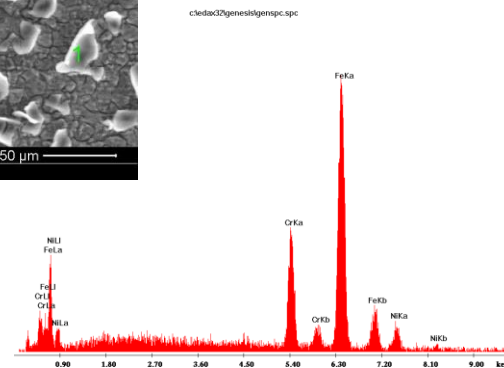
Obraz SEM



Dyfraktogram rentgenowski



Mikroskopia Sił Atomowych



Mikroanaliza rentgenowska EDX

# Właściwości materiałów

**Metody termiczne** - umożliwiają badanie zmian wybranych właściwości fizycznych materiałów w funkcji zmian temperatury

badanie reakcji chemicznych

badanie przemian fazowych



możliwość wyznaczenia składu fazowego i chemicznego materiałów

badanie czystości materiałów

# Podział metod badań strukturalnych

**Metody spektroskopowe** (dyspersja energii):

**Spektroskopia w podczerwieni (FTIR i Ramana)**

- Spektroskopia UV-Vis
- Spektroskopia fluorescencyjna
- Spektroskopia fotoelektronów w tym Auger'a
- Spektroskopia rezonansów magnetycznych
- Spektroskopia Mössbauerowska

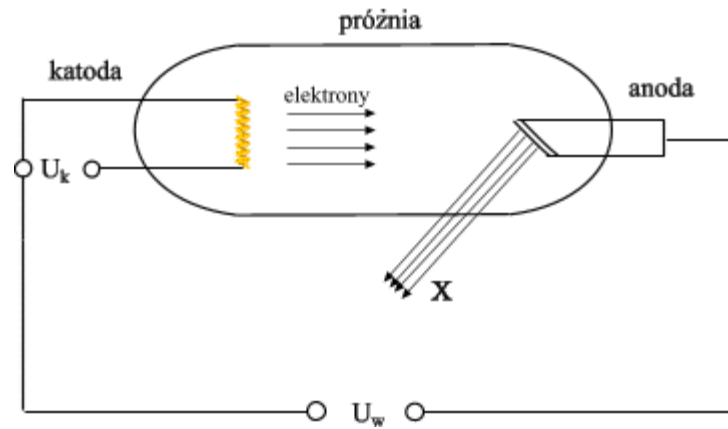
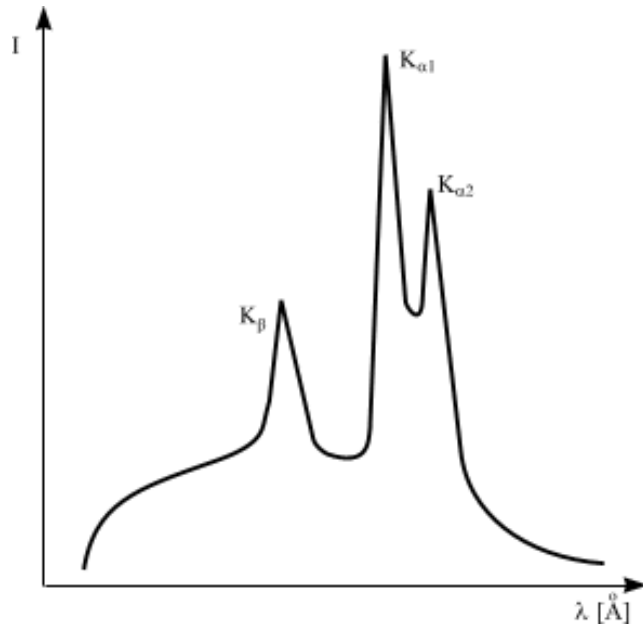
**Metody dyfrakcyjne** (rozpraszanie elastyczne):

- **Dyfrakcja rentgenowska**
- Dyfrakcja neutronowa
- **Dyfrakcja elektronowa**

**Metody mikroskopowe (ze skanującą sondą):**

- Skaningowa Mikroskopia Tunelowa
- **Mikroskopia Sił Atomowych**

# Widmo promieniowania rentgenowskiego

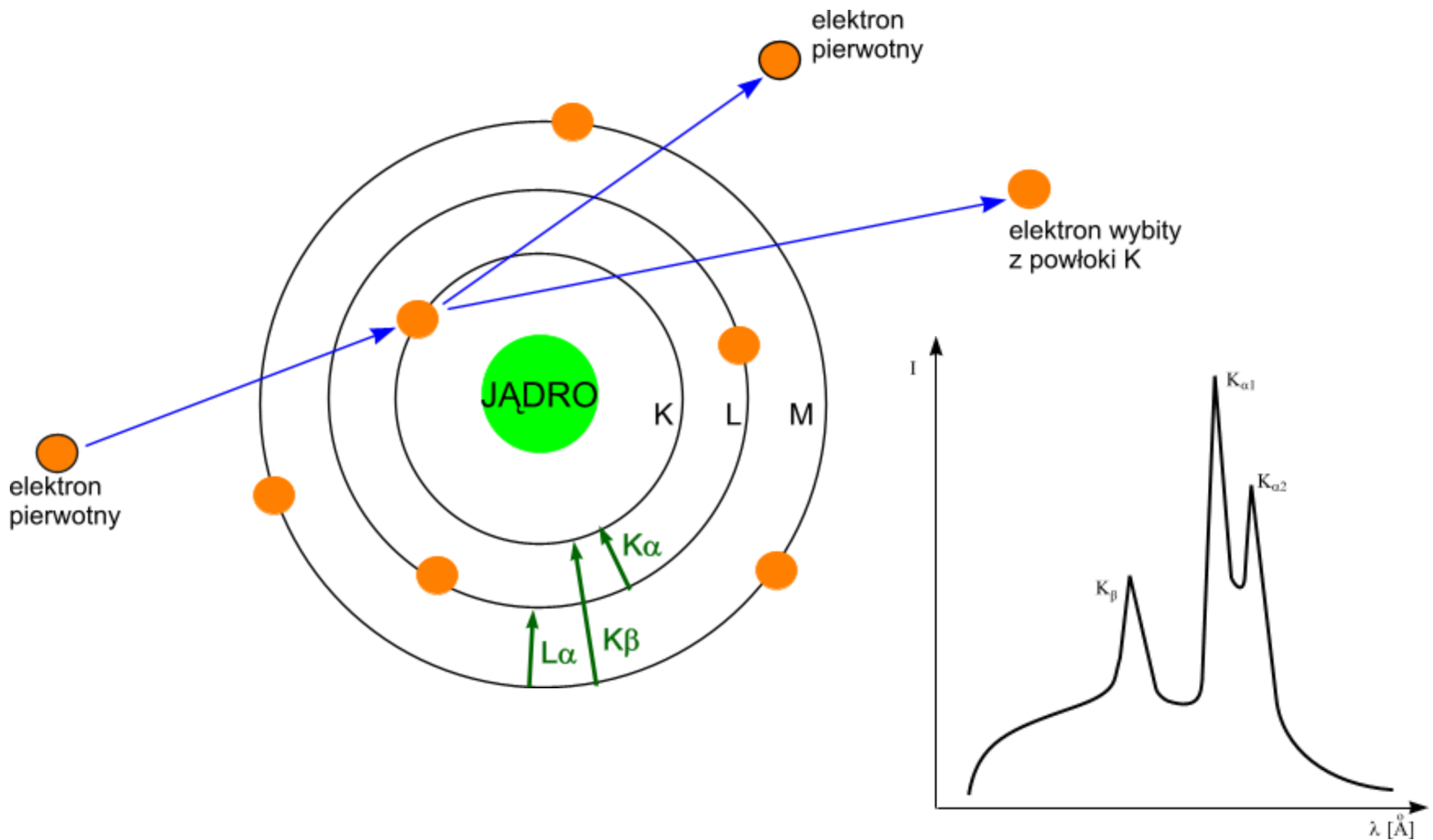


promieniowanie rentgenowskie:  
**0.05 - 500 Å**

metody rentgenograficzne  
(badania strukturalne): **0.2-2.5 Å**

Anoda	$K_{\beta}$ [Å]	$K_{\alpha 1}$ [Å]	$K_{\alpha 2}$ [Å]	Filtr	$K_{\alpha}$ śr. [Å]
Mo	0,63225	0,70926	0,71354	Cu	0.71069
Cu	1,39217	1,54051	1,54433	Ni	1.54178
Co	1,62075	1,78892	1,79278	Fe	1.79021
Fe	1,75653	1,93597	1,93991	Cr	1.93597

# Emisja rentgenowskiego promieniowania charakterystycznego

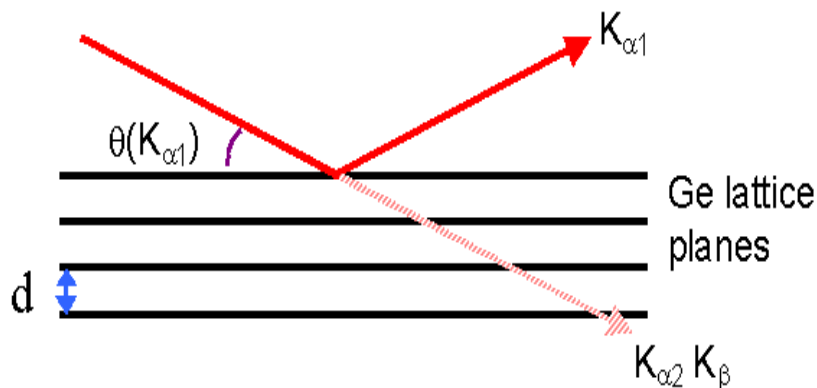


# Monochromatyzacja promieniowania rentgenowskiego

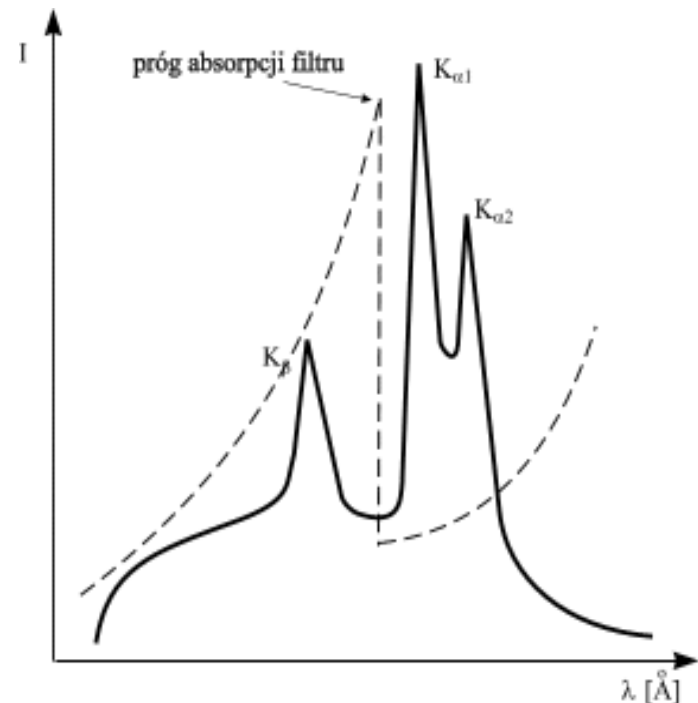
**Monochromator** - odpowiednio wypolerowany kryształ (kwarc, german, ...) silnie odbijający promieniowanie od jednej rodziny płaszczyzn. Kryształ ten orientuje się pod kątem Bragga odpowiednim dla promieniowania  $K\alpha_1$

**Monochromator wpływa na:**

- $K_\beta$ ;
- tło;
- fluorescencję próbki;

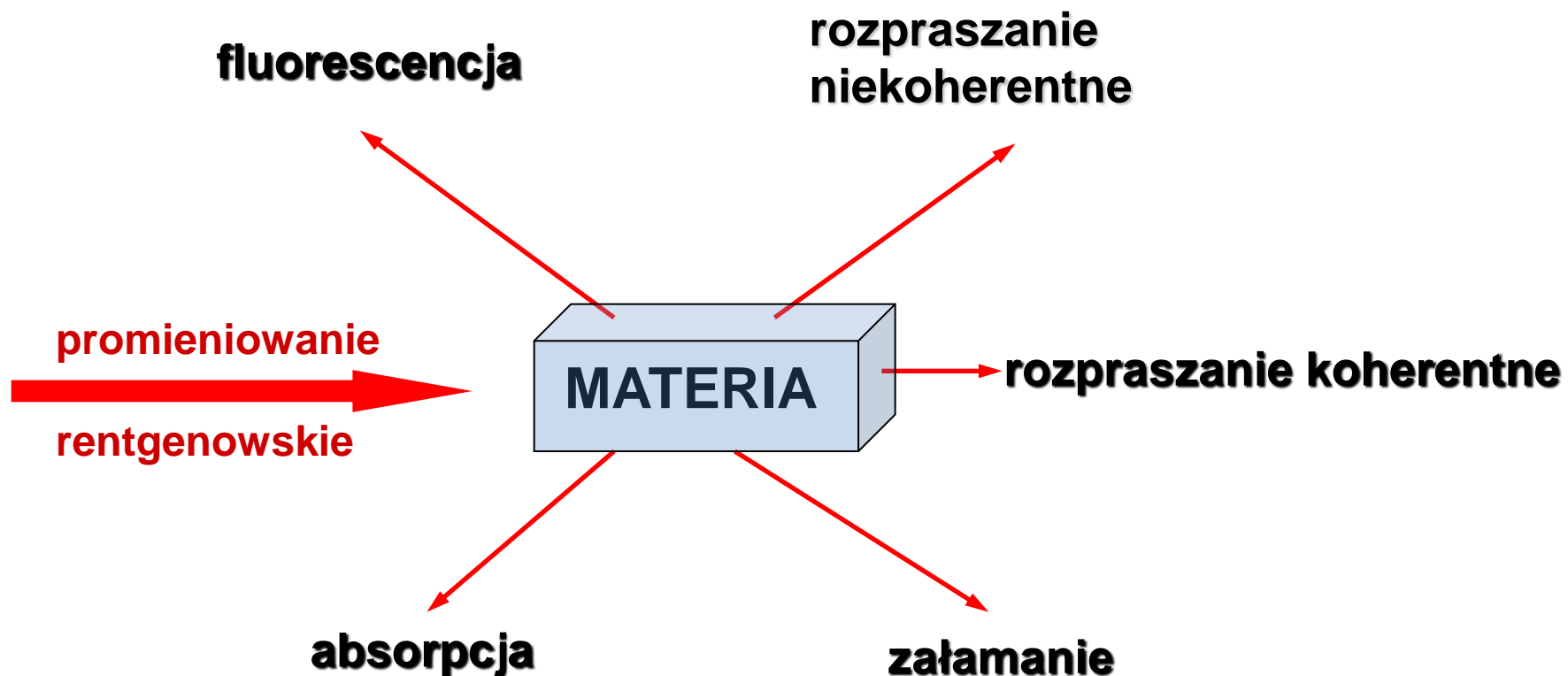


**Filtr** – dobierany odpowiednio do materiału anody, absorbuje silnie promieniowanie X w zakresie linii  $K_\beta$





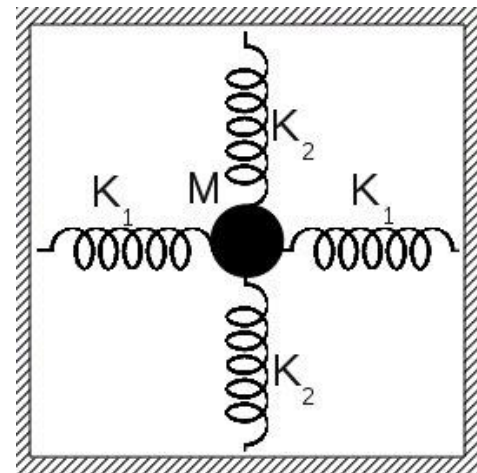
# Promieniowanie rentgenowskie a materia



## Rozpraszanie koherentne

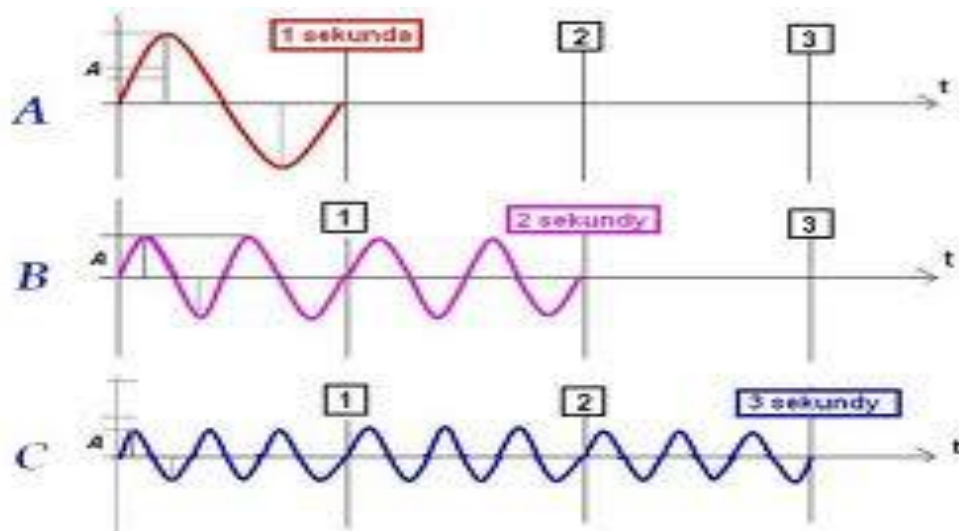
gdy elektrony zachowują się jak oscylatory - (drgając i emitując fotony promieniowania pod wpływem padających promieni X), wysyłają falę o tej samej długości i częstotliwości, jak promieniowanie padające, tylko przesuniętą w fazie, - mówimy o rozpraszaniu spójnym (sprężystym, koherentnym), które, rozchodząc się we wszystkich kierunkach, może ze sobą interferować.

**Wykorzystanie: dyfraktometria rentgenowska**



# Rozpraszanie niekoherentne: (comptonowskie)

Jeśli pod wpływem padającego promieniowania rentgenowskiego emitowane są fotony o mniejszej energii niż w wiązce padającej, to efektem będzie otrzymanie promieniowania o większej długości fali, zjawisko takie nazywamy rozpraszaniem niespójnym, takie fale nie mogą interferować, dając wiązkę wypadkową o jednej długości fali. Konsekwencją tego typu rozpraszania jest powstanie ciągłego tła promieniowania (linia tła na dyfraktogramie rentgenowskim).

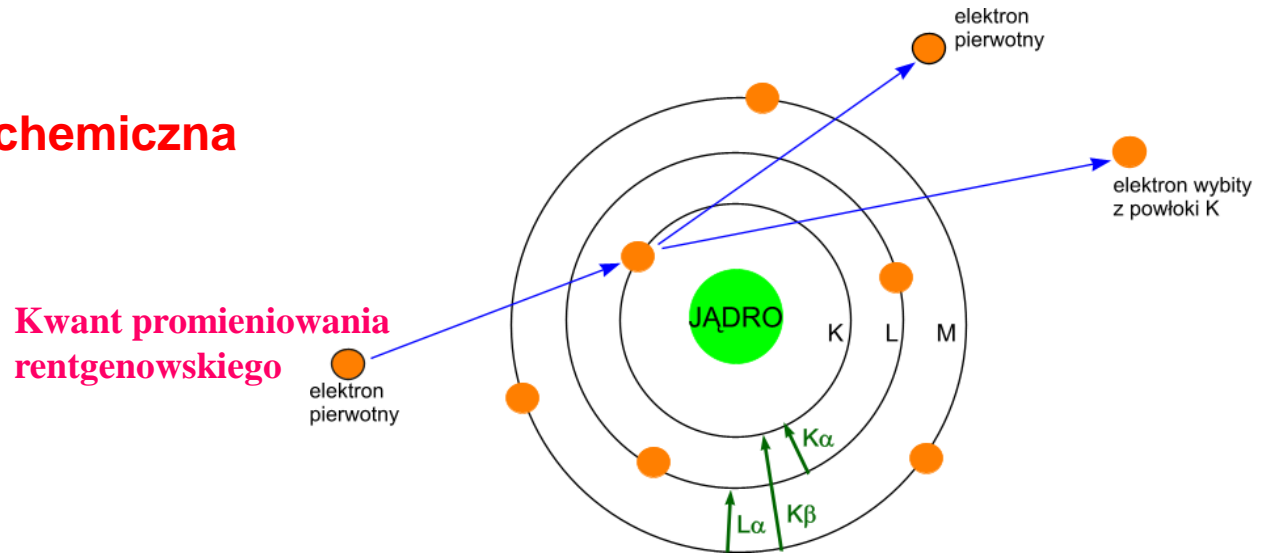


# Fluorescencja

• absorpcja odpowiednich kwantów promieniowania rentgenowskiego z jednoczesnym wzbudzeniem elektronów na wewnętrznych powłokach atomów. Energia padającego fotonu musi być na tyle duża, aby spowodować usunięcie elektronu z wewnętrznej powłoki i nadanie mu jednocześnie pewnej energii kinetycznej, powstająca w ten sposób luka na wewnętrznej powłoce jest zapełniana dzięki przejściom elektronów z kolejnych powłok, dozwolonych przez reguły wyboru (sformułowane przez mechanikę kwantową), efektem przejścia elektronu z poziomu o wyższej energii na niższy poziom energetyczny jest foton wtórnego promieniowania rentgenowskiego, odpowiadający charakterystycznej dla danego pierwiastka różnicy energii między tymi poziomami.

**Wykorzystanie: analiza chemiczna**

**Kwant promieniowania rentgenowskiego**



# Absorpcja

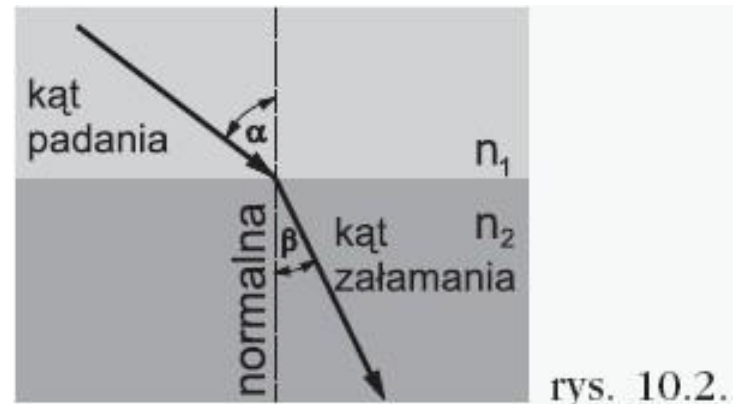
energia związana z kwantami promieniowania, pochłaniana jest przez elektrony powłok wewnętrznych w atomach, zdolność do absorpcji promieni X rośnie z liczbą atomową pierwiastka, „cięższe” atomy absorbują promieniowanie rentgenowskie w większym stopniu, niż atomy „lekkie”.

Wykorzystanie: prześwietlenie,  
tomografia komputerowa



# Załamanie

wiązka promieni rentgenowskich ulega załamaniu przy przechodzeniu z jednego ośrodka do drugiego, dla promieni rentgenowskich współczynnik refrakcji jest bliski jedności, co pozwala pominąć efekt załamania w dalszych rozważaniach.



# Teoria Braggów-Wulfa – ugięcie promieni X na płaszczyznach sieciowych

$$\Delta S = AB + BC = n\lambda$$

$$AB = d_{hkl} \sin\theta$$

$$BC = d_{hkl} \sin\theta$$

$$n\lambda = 2 d_{hkl} \sin\theta$$

gdzie:

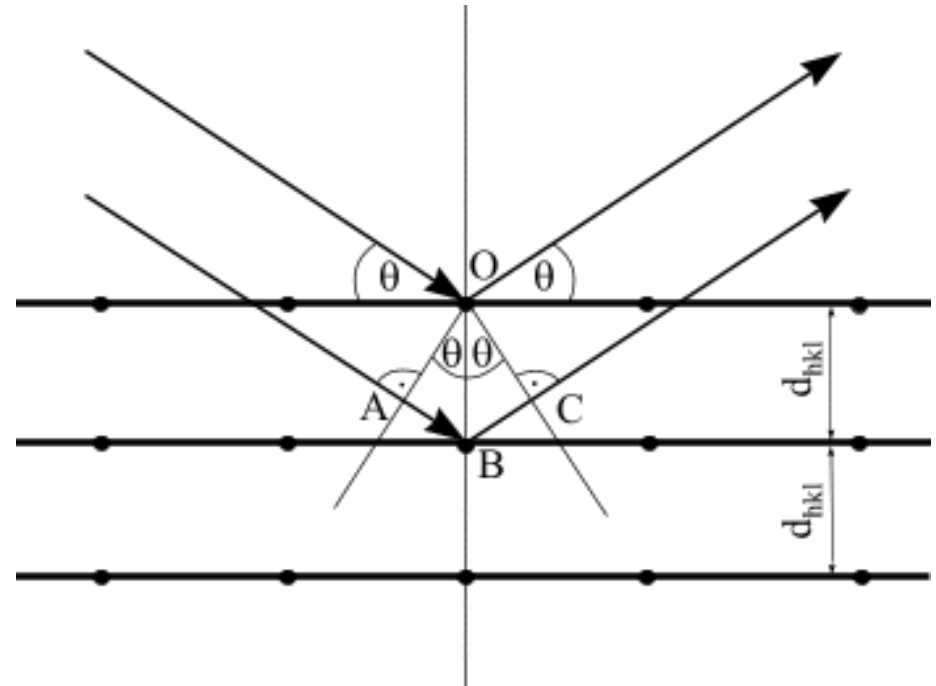
$d_{hkl}$  – odległość międzypłaszczyznowa;

$\theta$  - kąt odbłyску;

$n$  – liczba całkowita, rząd refleksu ugięcia;

$\lambda$  - długość fali;

$\Delta S$  – różnica dróg optycznych.



# Natężenie refleksu dyfrakcyjnego w układzie jednofazowym

$$J_{hkl} = C \cdot |F_{hkl}|^2 \cdot LP \cdot \rho \cdot A$$

$|F_{hkl}|^2$  – czynnik struktury,

$N$  - liczba komórek elementarnych w  $1 \text{ cm}^3$

$LP$  – czynnik Lorentza i polaryzacji (czynnik kątowy);

$\rho$  – czynnik krotności płaszczyzn;

$A$  – absorbcja;

$$C = J_0 \cdot \lambda^3 N^2 \cdot \left( \frac{\mu_0 e^2}{4\pi m r} \right)^2$$

$J_0$  – natężenie promieniowania padającego;

$\lambda$  - długość fali;

$\mu_0$  – przenikalność magnetyczna próżni;

$e$  – ładunek elektronu;

$m$  – masa elektronu;

$r$  - odległość elektronu od punktu pomiarowego,

$N$  - liczba komórek elementarnych w  $1 \text{ cm}^3$ .



# Czynnik struktury $F_{hkl}$

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^N f_n \exp(i\psi_n)$$

$f_n$  – atomowy czynnik rozpraszania n-tego atomu w komórce elementarnej;

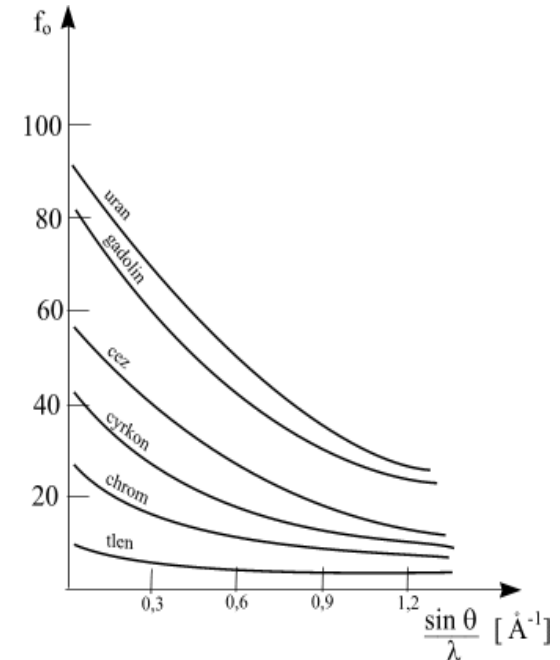
$\psi_n$  – kąt fazowy promieniowania rozproszonego na n-tym atomie w odniesieniu do promieniowania ugiętego na atomie położonym w początku układu;

$$\psi_n = 2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)$$

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^N f_n \exp [2\pi i (hx_n + ky_n + lz_n)]$$

$x_n, y_n, z_n$  – współrzędne n-tego atomu

$hkl$  – krystalograficzne wskaźniki płaszczyzny sieciowej



## Czynnik struktury $|F_{hkl}|^2$

$$|F_{hkl}|^2 = [\sum f_n \cos 2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)]^2 + [\sum f_n i \sin 2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)]^2$$

Czynnik struktury  $|F_{hkl}|^2$  to zawsze dodatnia liczba rzeczywista

Czynnik struktury  $F_{hkl}$  dla struktur posiadających środek symetrii:

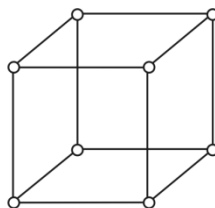
$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^N f_n \cos 2\pi (hx_n + ky_n + lz_n)$$

# Czynnik struktury a wygaszenia systematyczne

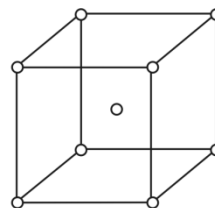
Komórka prymitywna (jeden rodzaj atomów) w pozycji 0,0,0 :

$$F_{hkl} = f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0)$$

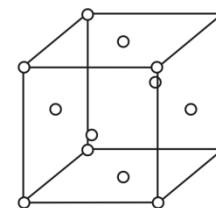
$$F_{hkl} = f_{n1}$$



komórka prymitywna (P)

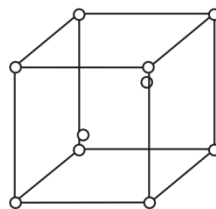


komórka przestrzennie centrowana (I)

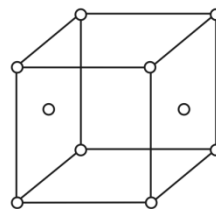


komórka płasko centrowana (F)

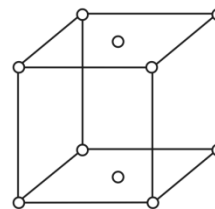
brak wygaszeń systematycznych



A

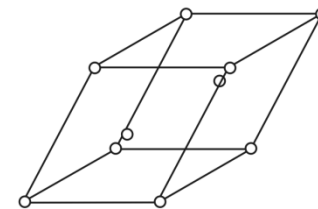


B



C

komórki centrowane na jednej parze ścian



komórka romboedryczna (R)

komórka prymitywna (dwa rodzaje atomów) np. 0,0,0 oraz 1/2, 1/2, 1/2 :

$$F_{hkl} = f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0) + f_{n2} \cos 2\pi (h \cdot \frac{1}{2} + k \cdot \frac{1}{2} + l \cdot \frac{1}{2})$$

$$F_{hkl} = f_{n1} + f_{n2}$$

dla  $h + k + l = 2n$

$$F_{hkl} = f_{n1} - f_{n2}$$

dla  $h + k + l = 2n + 1$  wygaszenia

# Amplituda struktury w sieciach typu I i F

Komórka przestrzennie centrowana I (jeden rodzaj atomów)  $0,0,0$  oraz  $1/2,1/2,1/2$  :

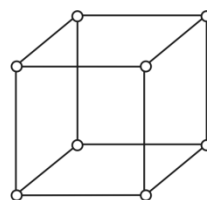
$$F_{hkl} = f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0) + f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 1/2 + k \cdot 1/2 + l \cdot 1/2)$$

$$F_{hkl} = 2 f_{n1} \quad \text{dla} \quad h + k + l = 2n$$

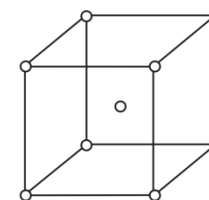
$$F_{hkl} = 0 \quad \text{dla} \quad h + k + l = 2n + 1$$

wygaszenia

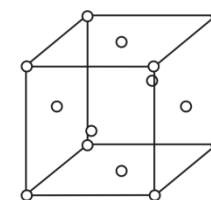
brak refleksów np. 320, 111 itp..



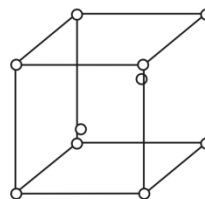
komórka prymitywna (P)



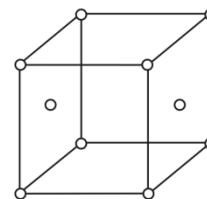
komórka przestrzennie centrowana (I)



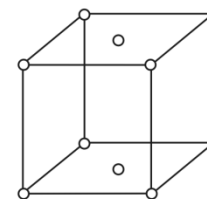
komórka płasko centrowana (F)



A

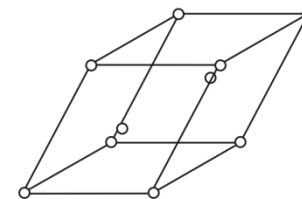


B



C

komórki centrowane na jednej parze ścian



komórka romboedryczna (R)

Komórka płasko centrowana F

atomy:  $0,0,0$ ;  $1/2,1/2,0$ ;  $0,1/2,1/2$ ;  $1/2,0,1/2$  :

$$F_{hkl} = f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0) + f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 1/2 + k \cdot 1/2 + l \cdot 0)$$

$$+ f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 1/2 + k \cdot 0 + l \cdot 1/2) + f_{n1} \cos 2\pi (h \cdot 0 + k \cdot 1/2 + l \cdot 1/2)$$

$$F_{hkl} = 4 f_n \quad \text{dla} \quad h + k + l = 2n$$

$$F_{hkl} = 0 \quad \text{dla} \quad hkl \text{ mieszanych wygaszenia np. } 110, 223, 230 \text{ itp.})$$

# Metody doświadczalne dyfrakcji rentgenowskiej (XRD)

a) ze względu na wykorzystywane promieniowanie rentgenowskie:

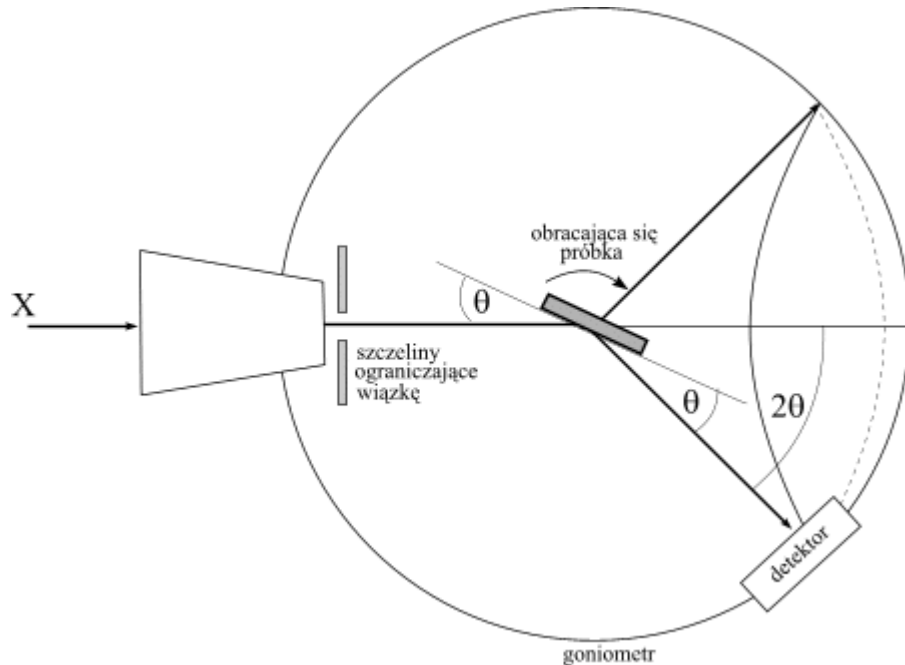
- polichromatyczne - metoda Lauego,
- monochromatyczne - metoda obracanego kryształu;
  - metoda proszkowa DSH
  - dyfraktometria XRD

b) ze względu na rodzaj badanego materiału:

- monokryształ
  - metoda Lauego,
  - metoda obracanego kryształu
  - metody dyfraktometryczne:
    - dyfraktometr czterokołowy
- polikrystaliczny
  - metoda proszkowa DSH (technika filmowa)
  - dyfraktometria (dyfraktometr rentgenowski dwukołowy)

Współczesna rentgenografia opiera się na metodach dyfrakcyjnych

# Zasada działania dyfraktometru – konfiguracja $\theta$ - $2\theta$

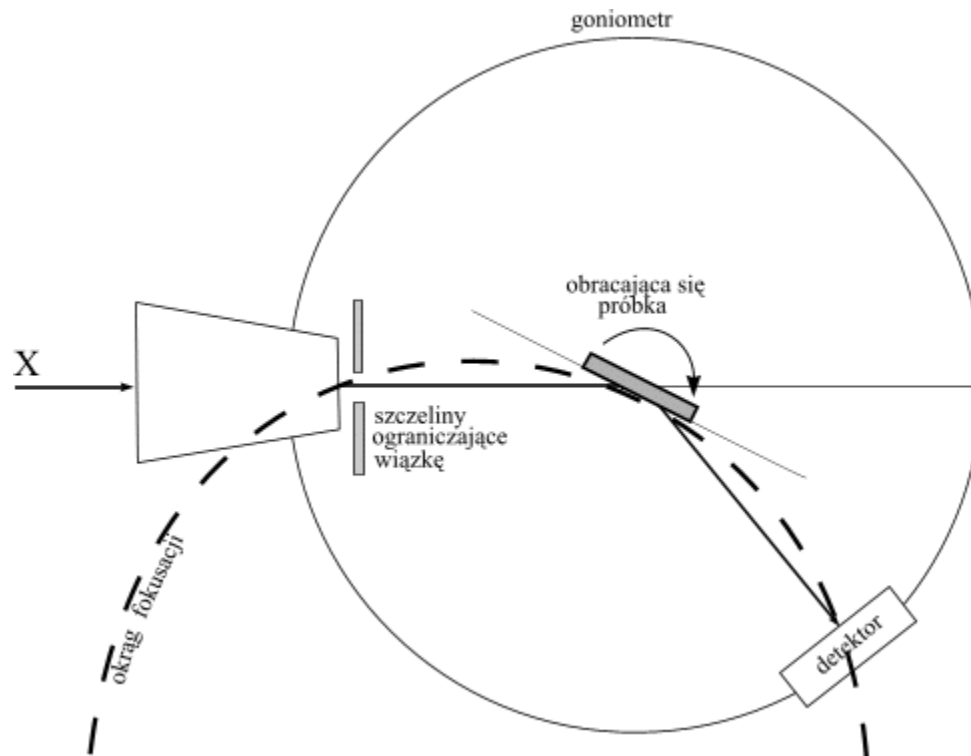


- licznik scyntylacyjny
- licznik proporcjonalny
- licznik paskowy (np. X`Celerator)
- licznik nowej generacji (np. PIXcell-3d)

$\theta$  - kąt odbłyску (kąt padania lub kąt odbicia), zawarty między wiązką ugiętą (lub pierwotną) a płaszczyznami, na których nastąpiło ugięcie

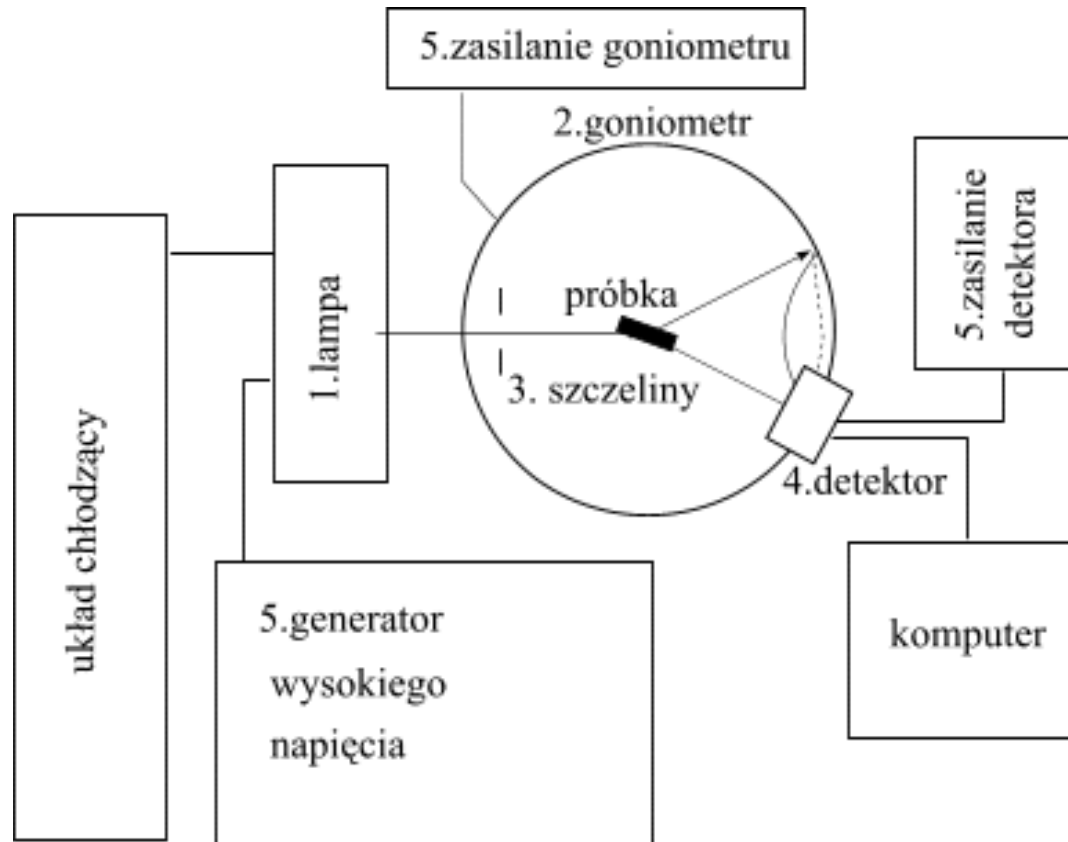
$2\theta$  - kąt ugięcia, zawarty pomiędzy kierunkiem wiązki pierwotnej a wiązką ugiętą

# Ogniskowanie metodą Bragg-Brentano



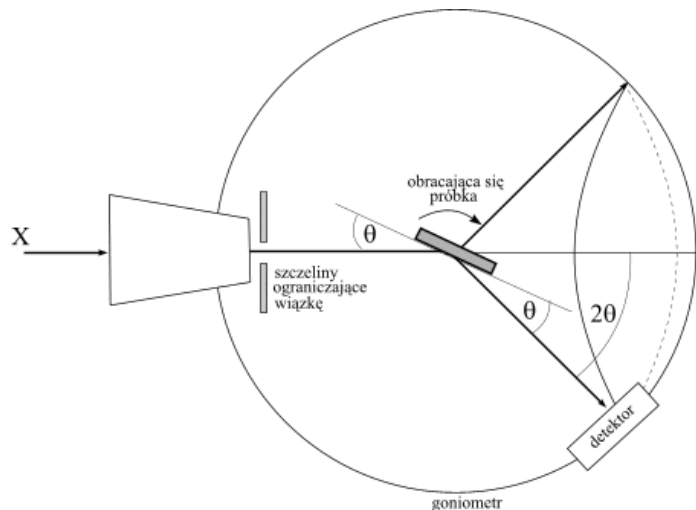
Trzy elementy: **źródło**, **próbka** oraz **detektor** muszą w trakcie pomiaru leżeć na jednym okręgu fokusacji (ogniskowania), o zmiennym promieniu  $r$ .

# Dyfraktometr rentgenowski – układ pomiarowy





# Dyfraktometria rentgenowska materiałów polikrystalicznych



## próbka:

- materiał proszkowy polikrystaliczny o optymalnym uziarnieniu  $0,1 - 10 \mu\text{m}$  ( $0,0001 - 0,001 \text{ mm}$ ),
- materiał lity (uwaga na efekt tekstury i naprężenia)

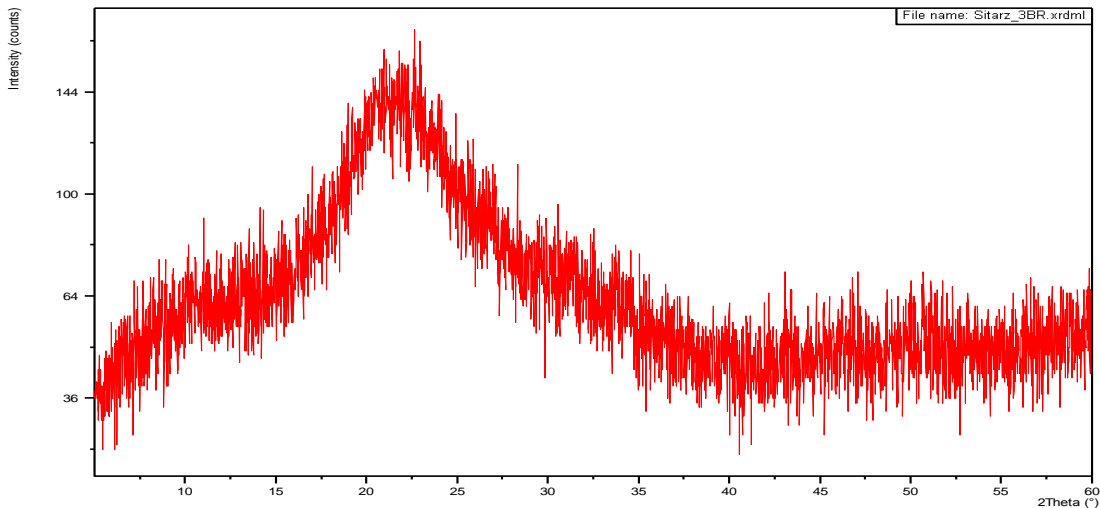
## Promieniowanie X:

- monochromatyczne  $K\alpha$  lub  $K\alpha^1$ , zależnie od sposobu monochromatyzacji

## układ pomiarowy:

- goniometr dwukołowy
- geometria Bragg-Brentano (najczęściej)

# Dyfraktogramy substancji amorficznej i krystalicznej

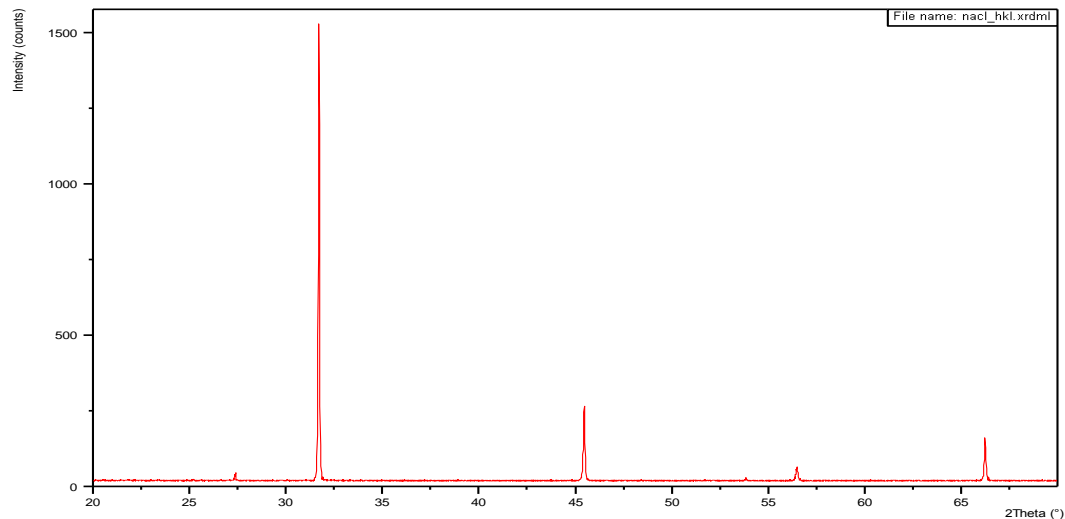


**materiał amorficzny:**

- brak refleksów
- podniesione tło – halo amorficzne
- niska intensywność podniesionego tła

**materiał krystaliczny:**

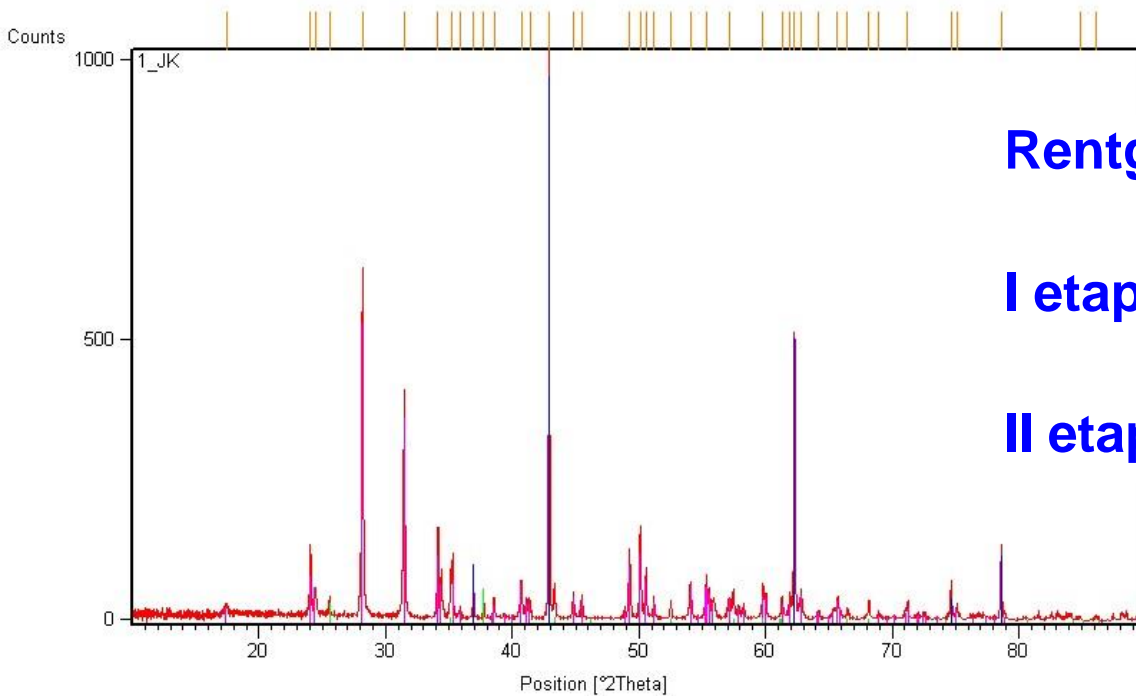
- wyraźnie zarysowane refleksy
- znaczące wartości intensywności refleksów w stosunku do linii tła



# Opis dyfraktogramu

No.	Pos. [°2Th.]	FWHM [°2Th.]	h	k	l	Area [cts*°2Th.]	d-spacing [Å]	Height [cts]	Rel. Int. [%]
1	16.3505	0.1536				18.62	5.41697	90.90	7.28
2	19.3751	0.1536				12.77	4.57761	62.37	5.00
3	19.7959	0.0768				12.03	4.48124	117.51	9.42
4	22.8608	0.0960				34.58	3.88691	270.14	21.65
5	23.7880	0.0768				51.48	3.73747	502.78	40.29
6	24.3476	0.1728				68.97	3.65282	299.35	23.99
7	24.8300	0.1536				175.07	3.58293	854.82	68.50
8	25.7795	0.1728				287.53	3.45308	1247.98	100.00
9	28.3837	0.1536				11.74	3.14190	57.34	4.59
10	30.6270	0.1152				11.01	2.91669	71.65	5.74
11	33.8843	0.4608				14.08	2.64339	22.91	1.84
12	34.6529	0.2304				9.04	2.58649	29.43	2.36
13	36.3157	0.4608				11.55	2.47179	18.79	1.51
14	37.6160	0.1728				40.00	2.38928	173.63	13.91
15	38.1574	0.2304				30.53	2.35662	99.38	7.96
16	39.2492	0.1920				15.88	2.29354	62.03	4.97
17	40.1972	0.3072				10.58	2.24161	25.84	2.07
18	43.9671	0.1536				10.76	2.05775	52.52	4.21

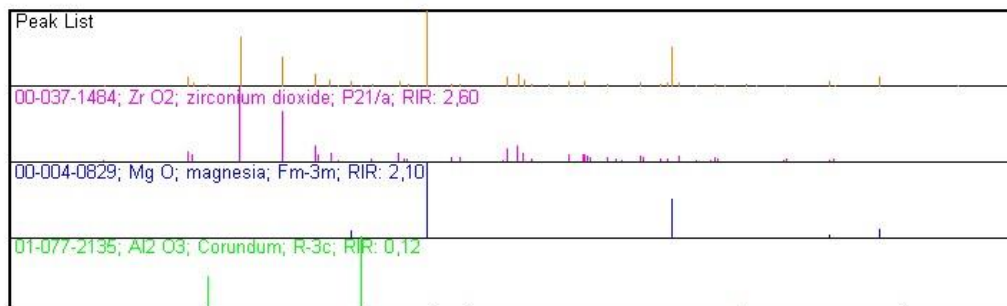
# Dyfraktogram proszkowy polikrystaliczny



Rentgenowska Analiza Fazowa

I etap: jakościowa

II etap: ilościowa



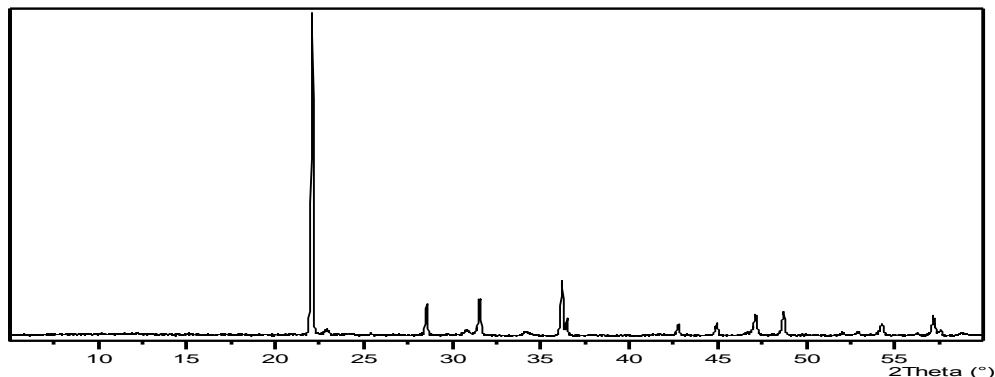
# Analiza fazowa jakościowa

$$n \lambda = 2 d_{hkl} \sin\theta$$

$$d_{hkl} = \frac{\lambda}{2 \sin\theta}$$

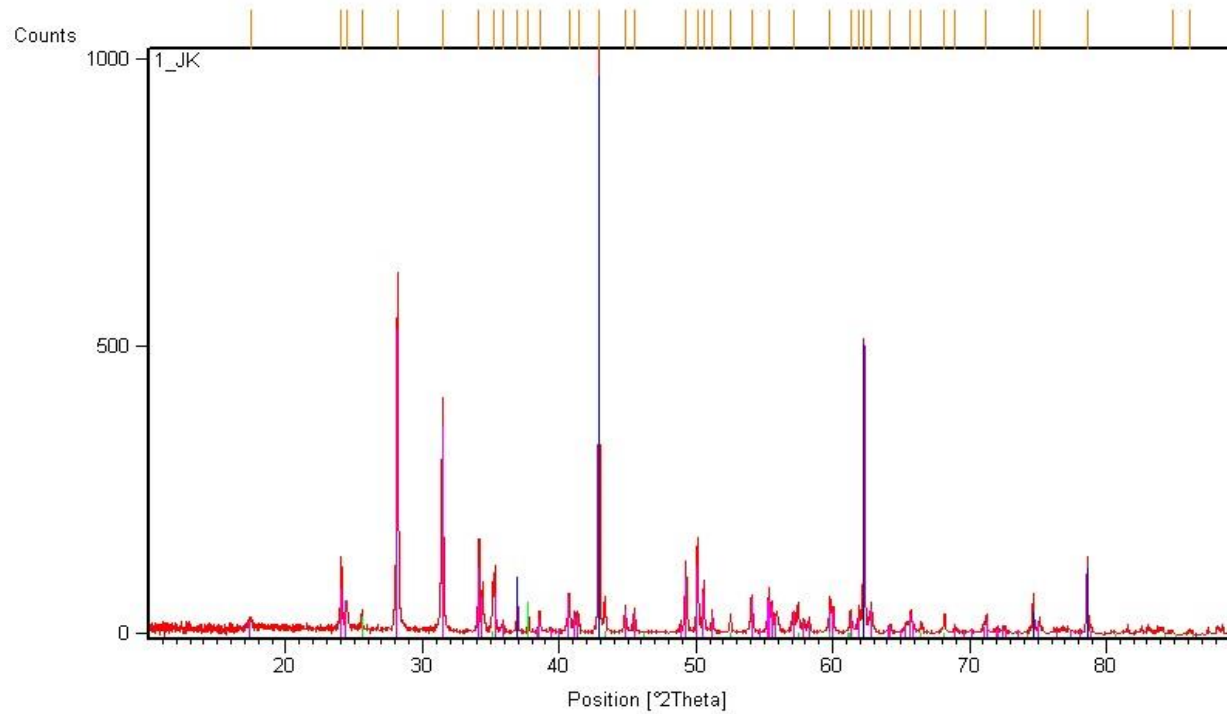
$$I_{wzg} = \frac{I_n}{I_{max}} \cdot 100 (\%)$$

Intensity (counts)



14-0696	Wavelength = 1.5405				
<b>BPO<sub>4</sub></b> Boron Phosphate	d (Å)	Int	h	k	l
	3.632	100	1	0	1
Rad.: CuKα1    λ: 1.5405    Filter    d-sp: Guinier 114.6	3.322	4	0	0	2
Cut off:            Int.: Film            I/cor.: 3.80	3.067	4	1	1	0
Ref: De Wolff. Technisch Physische Dienst. Delft	2.254	30	1	1	2
The Netherlands. ICDD Grant-In-Aid	1.973	2	1	0	3
Sys.: Tetragonal            S.G. I 4̄ (82)	1.862	8	2	1	1
a: 4.338    b:            c: 6.645    A:    C: 1.5318	1.816	4	2	0	2
α:            β:            γ            Z: 2    mp:	1.661	1	0	0	4
Ref: Ibid	1.534	2	2	2	0
Dx: 2.809    Dm:            SS/FOM:F <sub>18</sub> =89(.0102 . 20)	1.460	8	2	1	3
	1.413	1	3	0	1
	1.393	1	2	2	2
	1.372	2	3	1	0
	1.319	4	2	0	4
PSC: tl12. To replace 1-519. Deleted by 34-0132.    Mwt: 105.78	1.271	1	1	0	5
Volume [CD]: 125.05	1.268	2	3	1	2
	1.211	2	3	0	3
	1.184	2	3	2	1

# Rentgenowska Fazowa Analiza Jakościowa



Reference	Phase Name	Crystal System	RIR
00-037-1484	Zr O <sub>2</sub> ; zirconium dioxide	P21/a	2,60
00-004-0829	Mg O; magnesia	Fm-3m	2,10
01-077-2135	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ; Corundum	R-3c	0,12