

# *Kristalografija i kristalohemija*

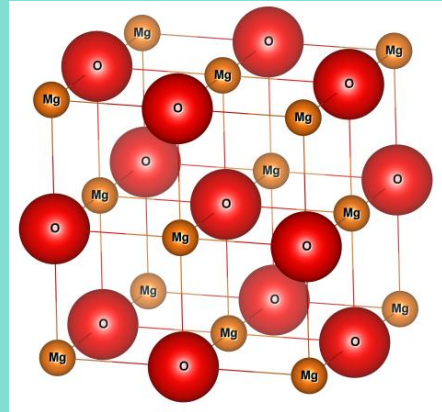
Zadaci

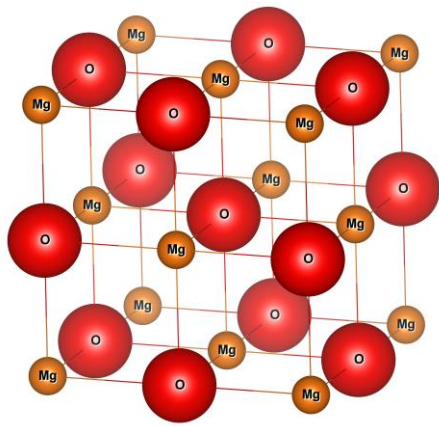


## Izračunavanje **atomskeg** faktora pakovanja za jonski kristal

Jedinična ćelija kristala MgO nacrtana je na slici i u osnovi je kocka.  
Jonski radijusi su:  $r_{\text{Mg}} = 0.072 \text{ nm}$     $r_{\text{O}} = 0.140 \text{ nm}$

Odrediti gustinu pakovanja za ovaj kristal.





## Šta je gustina pakovanja?

Odnos zapremine koju zauzimaju atomi u jediničnoj ćeliji i zapremine jedinične ćelije.

## Formula?

$$AFP = \frac{Z \cdot V_a}{V_{jc}}$$

Za razliku od prošlog časa gde smo određivali AFP za jediničnu ćeliju koja ima jednu atomsku vrstu, ovde imamo dve različite atomske vrste koje imaju različite poluprečnike, samim tim imaju i različite zapremine atoma. Za svaku atomsku vrstu odredićemo Z.

### Magnezijum

8 jona u rogljevima kocke  
6 jona u sredini stranica kocke

$$Z_{Mg} = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$$

### Kiseonik

1 jon u središtu kocke  
12 jona na sredini ivica kocke

$$Z_O = 1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$$



## Zapremina sfere

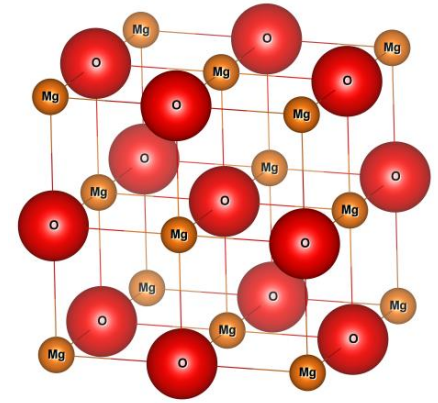
$$V_a = \frac{4}{3} r^3 \pi$$

Imamo poznate jonske radijuse za obe vrste

## Zapremina jedinične ćelije

$$V_{jc} = a^3$$

Potrebno je povezati jonske radijuse i parametar jedinične ćelije.



Prvo prepoznamo da je ivica jedinične ćelije od centra jednog jona magnezijuma do centra drugog jona duž nekog od pravca iz familije  $\langle 100 \rangle$ .

Na dužinu ivice jedinične ćelije stao je jedan radijus jona magnezijuma, pa dijametar jona kiseonika, pa još jedan jon magnezijuma. Što znači da je:

$$r_{\text{Mg}} + 2 \cdot r_{\text{O}} + r_{\text{Mg}} = a$$

$$a = 0.072 \text{ nm} + 2 \cdot 0.140 \text{ nm} + 0.072 \text{ nm}$$

$$a = 0.424 \text{ nm}$$



$$\text{AFP} = \frac{Z \cdot V_{\alpha}}{V_{\text{j c}}} = \frac{Z_{\text{Mg}} \cdot V_{\text{Mg}} + Z_{\text{o}} \cdot V_{\text{o}}}{V_{\text{j c}}}$$

$$\text{AFP} = \frac{Z_{\text{Mg}} \cdot \frac{4}{3} \pi r_{\text{Mg}}^3 + Z_{\text{o}} \cdot \frac{4}{3} \pi r_{\text{o}}^3}{a^3}$$

$$\text{AFP} = \frac{4}{3} \pi \frac{Z_{\text{Mg}} \cdot r_{\text{Mg}}^3 + Z_{\text{o}} \cdot r_{\text{o}}^3}{a^3}$$

$$\text{AFP} = \frac{4}{3} \pi \frac{4 \cdot (0.072 \text{ nm})^3 + 4 \cdot (0.140 \text{ nm})^3}{(0.424 \text{ nm})^3}$$

$$\text{AFP} = 68\%$$



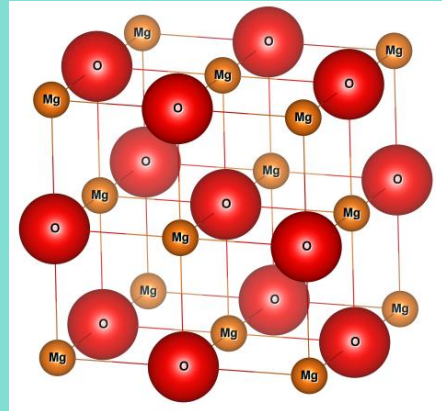


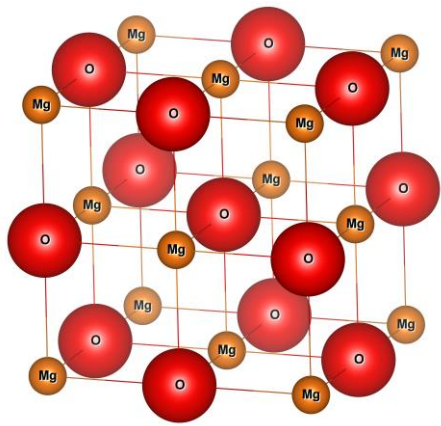
## Izračunavanje **atomskeg** faktora pakovanja za jonski kristal

Jedinična ćelija kristala MgO nacrtana je na slici i u osnovi je kocka.  
Jonski radijusi su:  $r_{\text{Mg}} = 0.072 \text{ nm}$     $r_{\text{O}} = 0.140 \text{ nm}$

Odrediti gustinu pakovanja za ovaj kristal.

Odredite tip rešetke i broj atoma u strukturnom motivu.





⚡ Ako pogledamo samo jone Mg uočavamo da formiraju podrešetku cF.  
Joni kiseonika takođe formiraju podrešetku cF.

⚡ Imamo rešetku cF. ✓

⚡ Izračunali smo da ovaj kristal ima 4 jona magnezijuma i 4 jona kiseonika u jediničnoj ćeliji.

⚡ Imamo ukupno  $4+4=8$  atoma po jediničnoj ćeliji, a znamo da cF rešetka ima 4 mesta za motiv po jednoj jediničnoj ćeliji.

$8/4 = 2$  atoma u motivu – jedan Mg i jedan O ✓





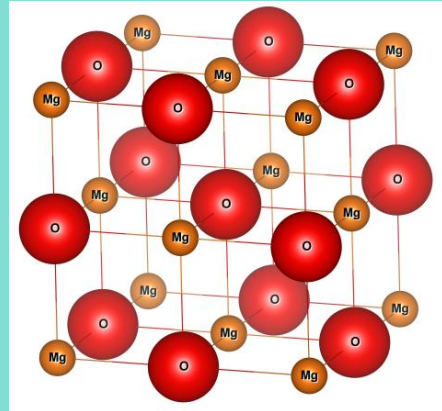
## Izračunavanje **atomskeg** faktora pakovanja za jonski kristal

Jedinična ćelija kristala MgO nacrtana je na slici i u osnovi je kocka.  
Jonski radijusi su:  $r_{\text{Mg}} = 0.072 \text{ nm}$     $r_{\text{O}} = 0.140 \text{ nm}$

Odrediti gustinu pakovanja za ovaj kristal.

Odredite tip rešetke i broj atoma u strukturnom motivu.

Izračunajte koordinacioni broj jona Mg.



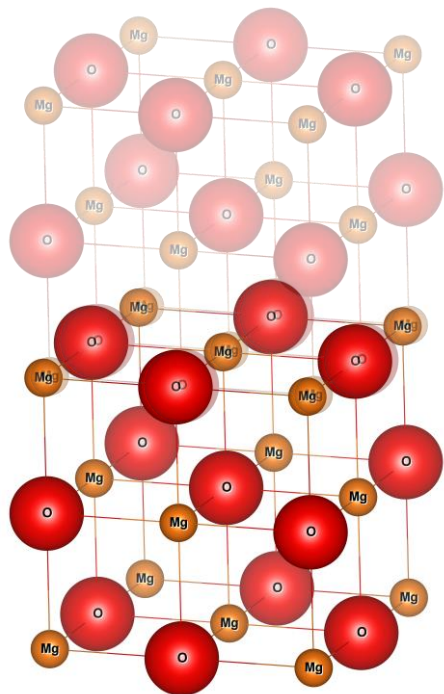




Pronađemo jon Mg na slici. On je okružen u jednoj ravni sa četiri jona kiseonika, i ima ispod ravni jedan jon kiseonika.



Kako znamo da se i iznad ove jedinične ćelije nalazi još jedna identična, mora postojati i jon kiseonika iznad jona magnezijuma.



$$KB(Mg) = 6$$





## Izračunavanje **atomskeg** faktora pakovanja za jonski kristal

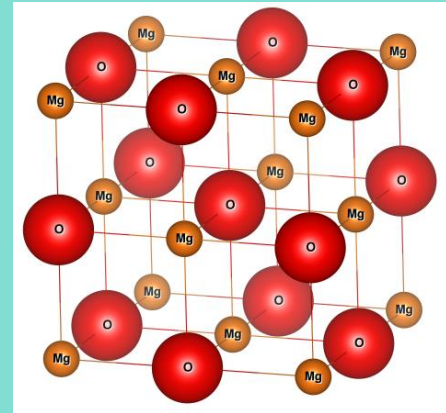
Jedinična ćelija kristala MgO nacrtana je na slici i u osnovi je kocka.  
Jonski radijusi su:  $r_{\text{Mg}} = 0.072 \text{ nm}$     $r_{\text{O}} = 0.140 \text{ nm}$

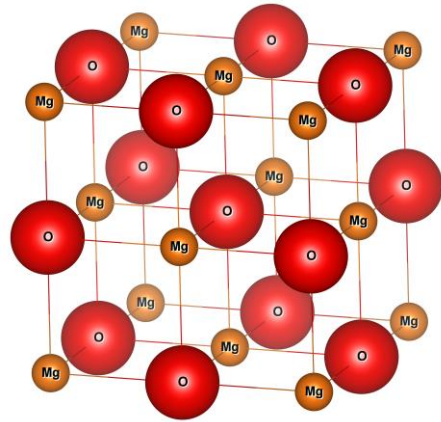
Odrediti gustinu pakovanja za ovaj kristal.

Odredite tip rešetke i broj atoma u strukturnom motivu.

Izračunajte koordinacioni broj jona Mg.

Procenite gustinu kristala.  $M(\text{Mg}) = 24$     $M(\text{O}) = 16$     $\text{amu} = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$





$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m_{jc}}{V_{jc}}$$

$$\rho = \frac{Z \cdot M \cdot \text{amu}}{V_{jc}} = \frac{Z \cdot M}{V_{jc} \cdot N_a}$$

$$\rho = \frac{(Z_{Mg} \cdot M_{Mg} + Z_o \cdot M_o) \cdot \text{amu}}{a^3}$$

$$\rho = \frac{(4 \cdot 24 + 4 \cdot 16) \cdot 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}}{(0.424 \times 10^{-9} \text{ m})^3}$$

$$\rho = \frac{160 \cdot 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}}{0.076 \times 10^{-27} \text{ m}^{-3}}$$

$$\rho = 3484 \text{ kg/m}^3$$





Izračunavanje zapremine jedinične ćelije na osnovu primitivnih vektora

Primitivni vektori kristala  $\alpha$ -Hg su (u  $\text{\AA}$ ):

$$\vec{a}_1 = 2.93\vec{i} + 0.48\vec{j} + 0.48\vec{k}$$

$$\vec{a}_2 = 0.48\vec{i} + 2.93\vec{j} + 0.48\vec{k}$$

$$\vec{a}_3 = 0.48\vec{i} + 0.48\vec{j} + 2.93\vec{k}$$

Odredite zapreminu jedinične ćelije.

Zapremina jedinične ćelije (zapremina geometrijskog tela oivičenog sa tri nekoplanarna vektora):

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

$$V = (2.93\vec{i} + 0.48\vec{j} + 0.48\vec{k}) \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 0.48 & 2.93 & 0.48 \\ 0.48 & 0.48 & 2.93 \end{vmatrix}$$

$$V = (2.93\vec{i} + 0.48\vec{j} + 0.48\vec{k})((2.93 \cdot 2.93 - 0.48 \cdot 0.48)\vec{i} - (0.48 \cdot 2.93 - 0.48 \cdot 0.48)\vec{j} + (0.48 \cdot 0.48 - 0.48 \cdot 2.93)\vec{k}) =$$

$$= (2.93\vec{i} + 0.48\vec{j} + 0.48\vec{k})(8.3545\vec{i} - 1.176\vec{j} - 1.176\vec{k}) = \quad \text{Nema mešovitog proizvoda}$$

$$V = 23.37 \text{ \AA}^3 \quad \checkmark$$





Izračunavanje zapremine jedinične ćelije na osnovu primitivnih vektora

Primitivni vektori kristala  $\alpha$ -Hg su (u Å):

$$\vec{a}_1 = 2.93\vec{i} + 0.48\vec{j} + 0.48\vec{k}$$

$$\vec{a}_2 = 0.48\vec{i} + 2.93\vec{j} + 0.48\vec{k}$$

$$\vec{a}_3 = 0.48\vec{i} + 0.48\vec{j} + 2.93\vec{k}$$

Odredite zapreminu jedinične ćelije.

Ako znate da su svi uglovi jednaki i manji od  $90^\circ$ , odredite tip Bravaisove rešetke.

$$\vec{a}_1 = 2.93\vec{i} + 0.48\vec{j} + 0.48\vec{k}$$

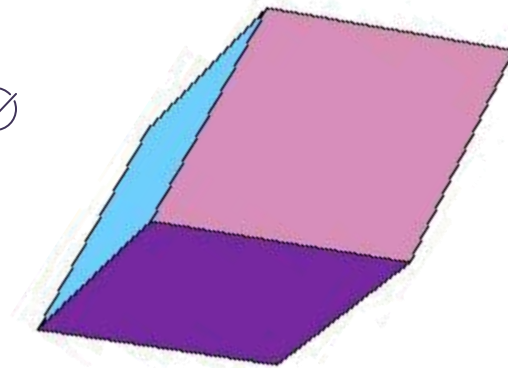
$$\vec{a}_2 = 0.48\vec{i} + 2.93\vec{j} + 0.48\vec{k}$$

$$\vec{a}_3 = 0.48\vec{i} + 0.48\vec{j} + 2.93\vec{k}$$

Sva tri vektora imaju iste brojeve ispred i, j, k, samo se permutuju mesta.

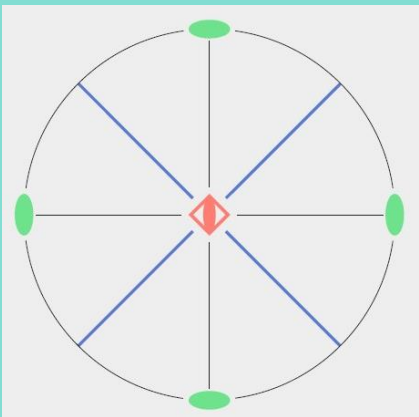
To znači da im je intenzitet isti, dok su različito usmereni u prostoru.

Ako još dodatno znamo da su sva tri ugla jednaka i manja od 90 stepeni, tada je rešetka romboedarska.



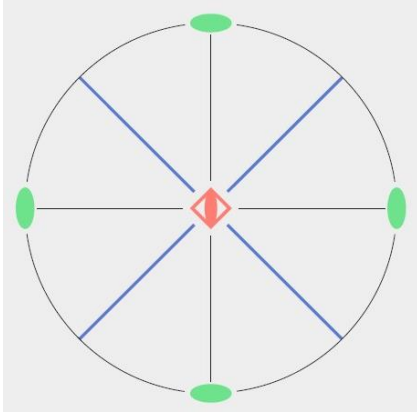


## Stereografska projekcija



Pročitajte elemente simetrije, navedite sistem, familiju, kategoriju.





Inverzna osa 4 reda  
Dve ose drugog reda  
Dve ravni

Sistem je tetragonalni  
Familja je tetragonalna  
Kategorija je srednja

ovo je tetragonalni disfenoid  
nastaje od tetragonalne prizme na isti način kao tetraedar od kocke

