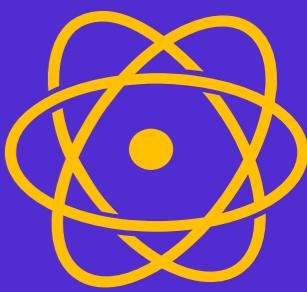


KUBNE jedinične čelije i Brave-ove rešetke

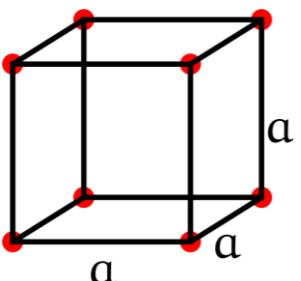
Fizička hemija čvrstog stanja

Bojana Vasiljević



cP

PROSTA KUBNA REŠETKA



Primitivna čelija

Broj položaja u rešetki $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$

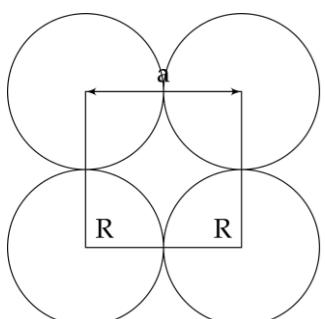
Broj najbližih suseda 6

Rastojanje između najbližih suseda a

Veza parametra čelije a i radijusa atoma r $2 \cdot r = a$

Atomska gustina pakovanja 52%

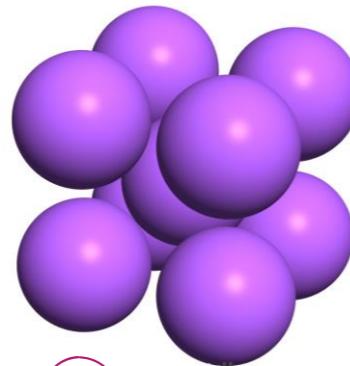
Primitivni vektori $a\vec{x}, a\vec{y}, a\vec{z}$



Polonijum

Cl

ZAPREMNISKI CENTRIRANA KUBNA REŠETKA



Konvencionalna čelija

Broj položaja u rešetki $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$

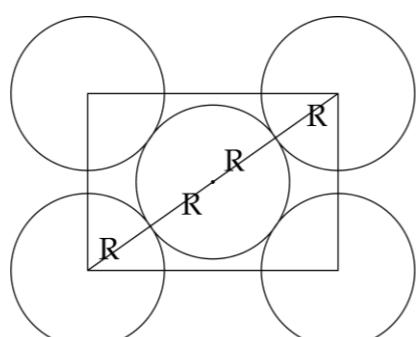
Broj najbližih suseda 8

Rastojanje između najbližih suseda $\frac{a\sqrt{3}}{2}$

Veza parametra čelije a i radijusa atoma r $4 \cdot r = a\sqrt{3}$

Atomska gustina pakovanja 68%

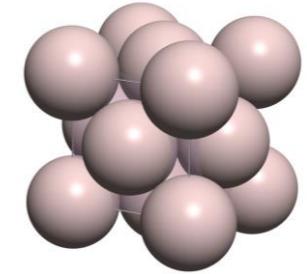
Primitivni vektori $a\frac{(-\vec{x}+\vec{y}+\vec{z})}{2}, a\frac{(\vec{x}-\vec{y}+\vec{z})}{2}, a\frac{(\vec{x}+\vec{y}-\vec{z})}{2}$



Natrijum

cF

POVRŠINSKI CENTRIRANA KUBNA REŠETKA



Konvencionalna čelija

Broj položaja u rešetki $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$

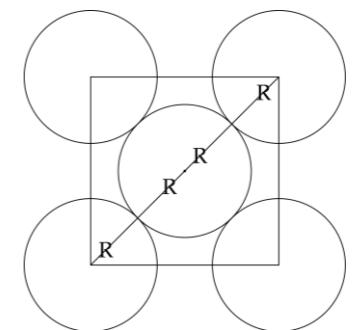
Broj najbližih suseda 12

Rastojanje između najbližih suseda $\frac{a\sqrt{2}}{2}$

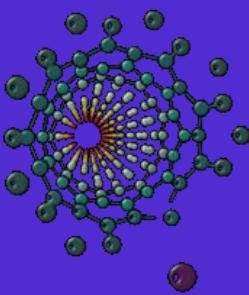
Veza parametra čelije a i radijusa atoma r $4 \cdot r = a\sqrt{2}$

Atomska gustina pakovanja 74%

Primitivni vektori $a\frac{(\vec{x}+\vec{y})}{2}, a\frac{(\vec{x}+\vec{z})}{2}, a\frac{(\vec{y}+\vec{z})}{2}$



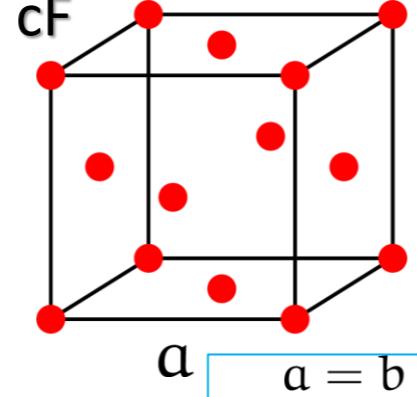
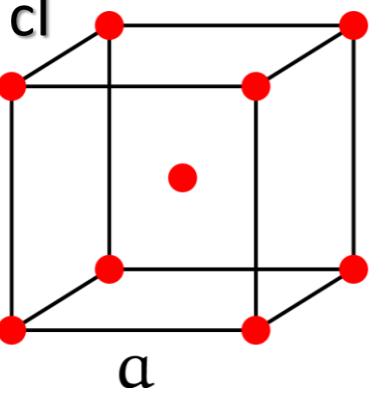
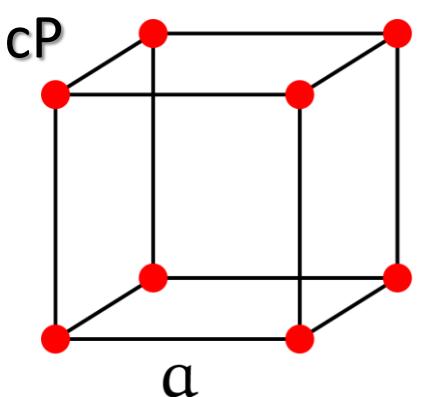
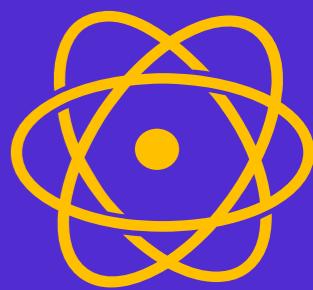
Aluminijum



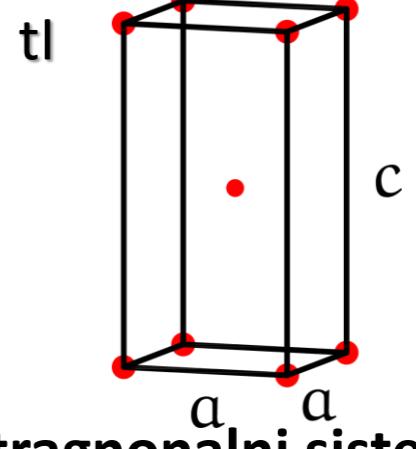
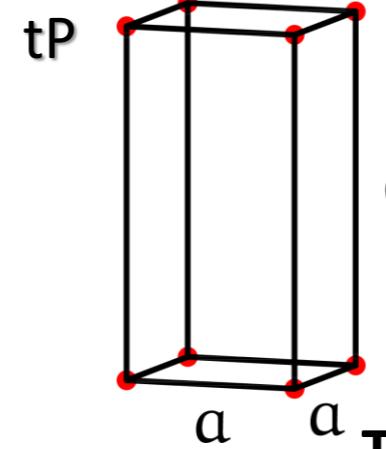
ČETRNAEST 3D BRAVAIS-ovih REŠETKI

Fizička hemija čvrstog stanja

Bojana Vasiljević

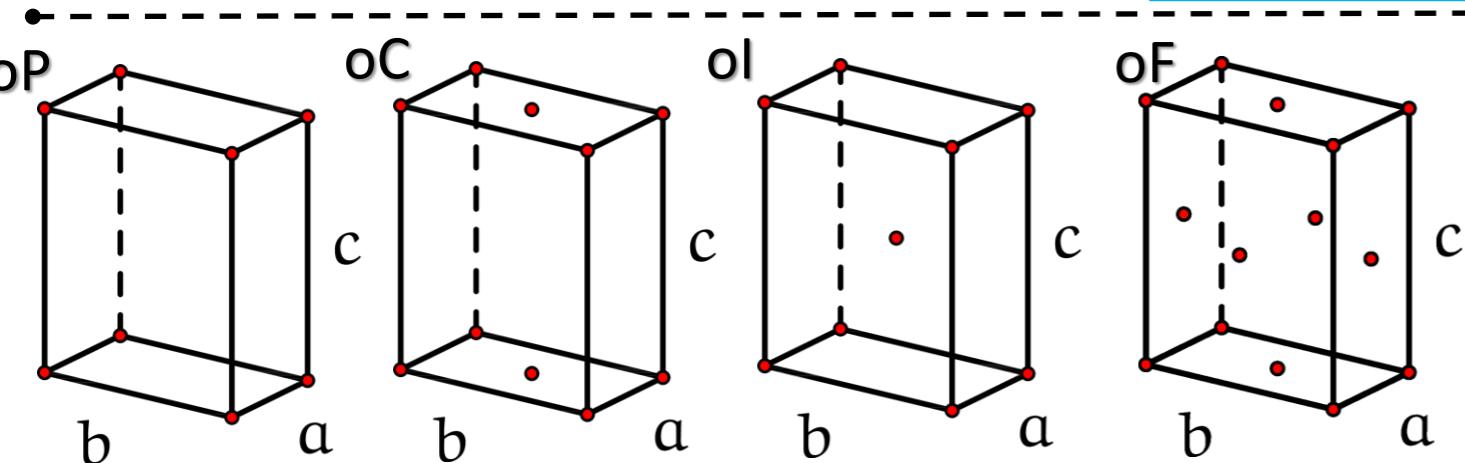


Kubni sistem

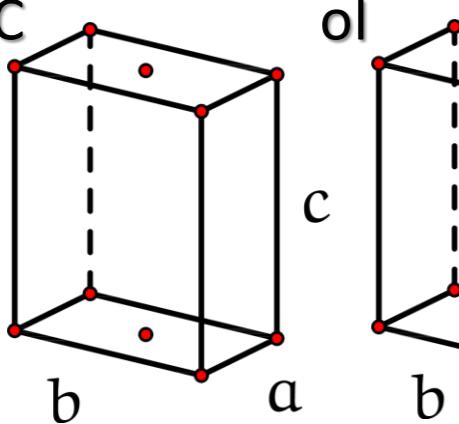


Tetragonalni sistem

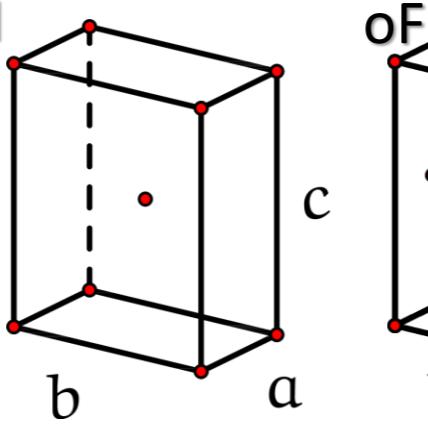
$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



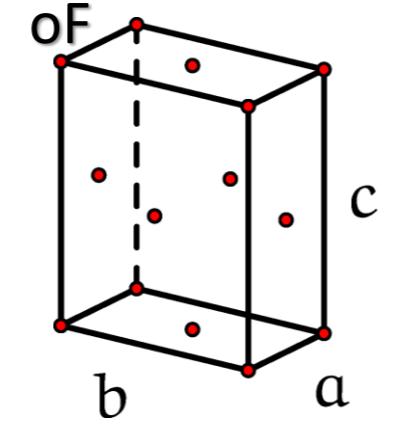
oC



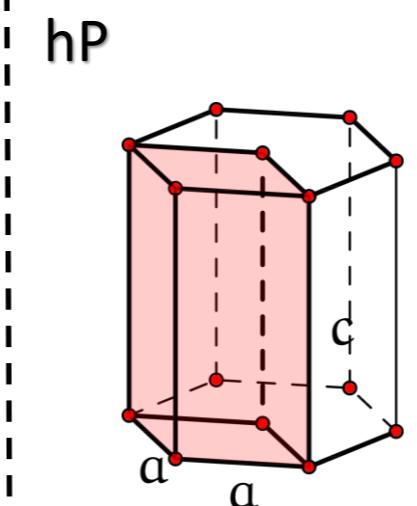
ol



oF



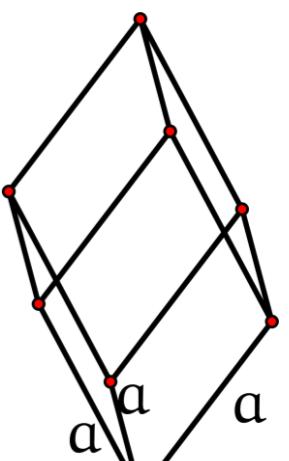
Ortorombični sistem



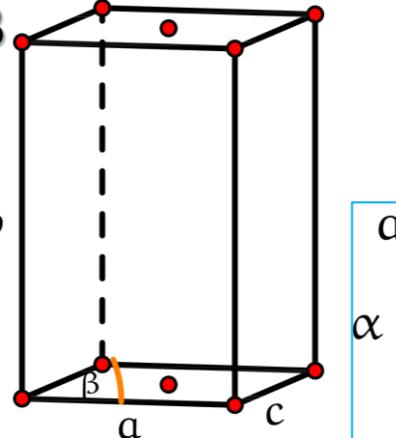
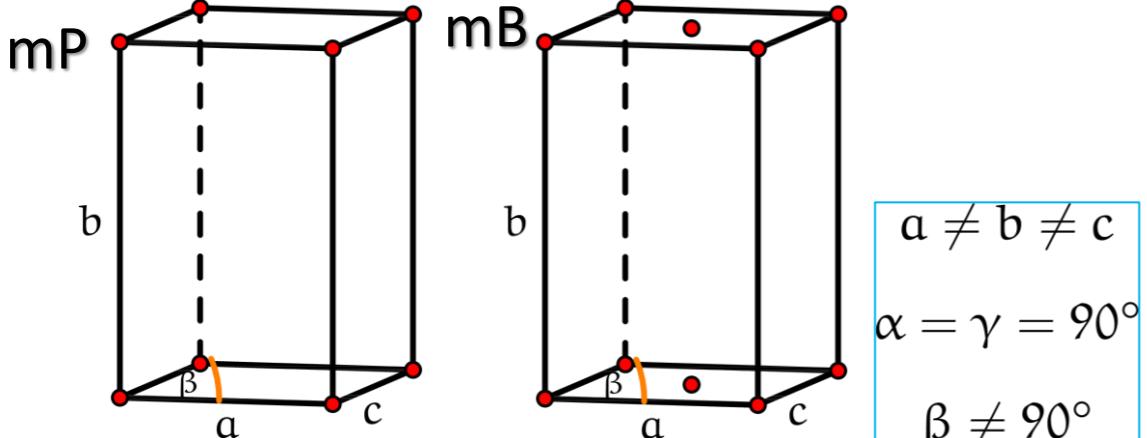
$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$

Heksagonalni sistem

hR
(rP)

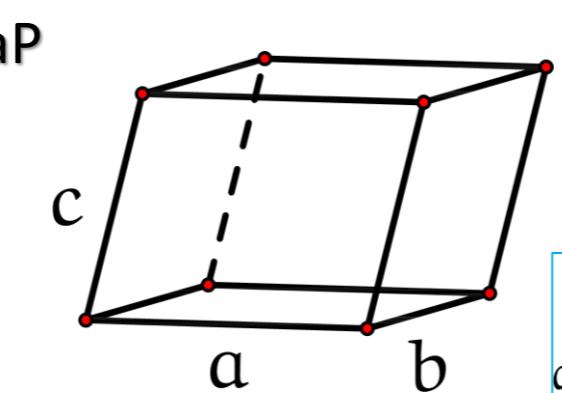


$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma < 90^\circ$$



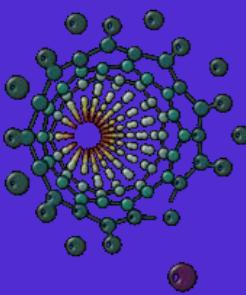
$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$
$$\beta \neq 90^\circ$$

Monoklinični sistem



$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma = 90^\circ$$

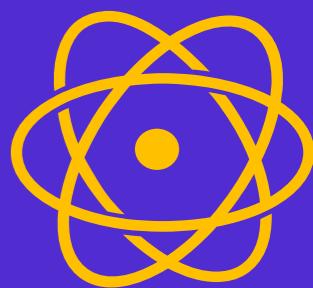
Triklinični sistem



VAŽNI PRIMERI NE BRAVAIS-OVIH REŠETKI

Fizička hemija čvrstog stanja

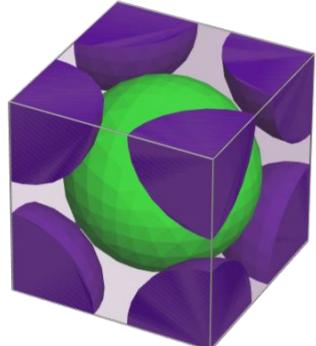
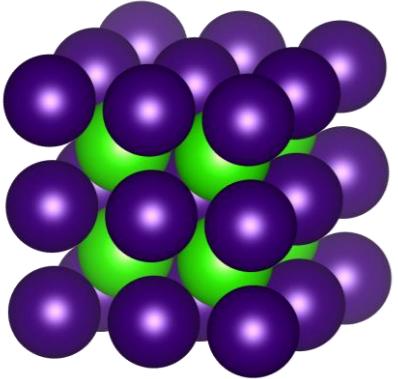
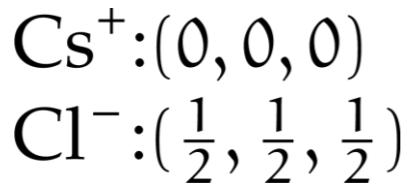
Bojana Vasiljević



Ne Bravais-ove rešetke se mogu svesti na Bravais-ove pogodnim izborom motiva u jediničnoj ćeliji

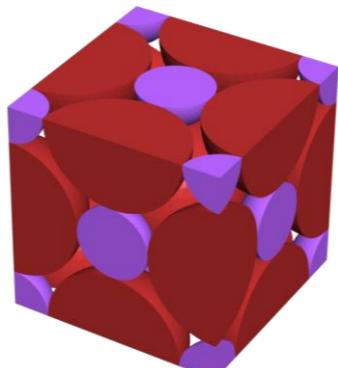
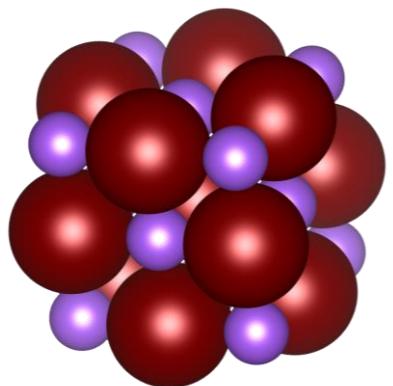
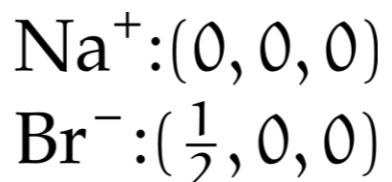
CEZIJUM HLORID

cP



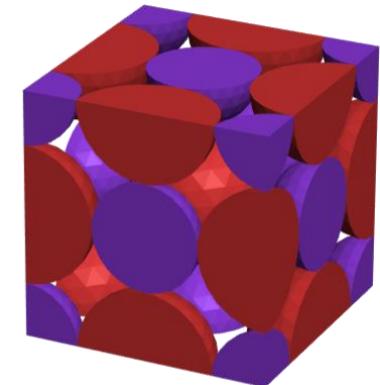
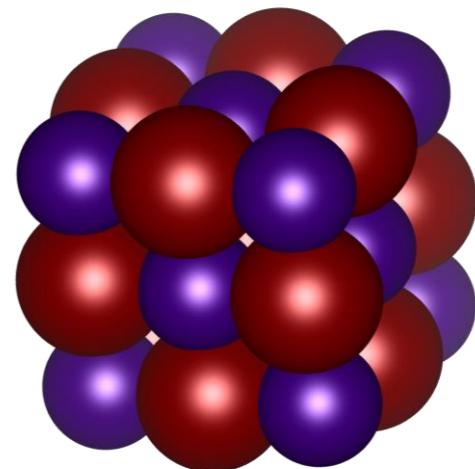
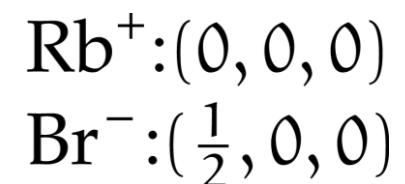
NATRIJUM BROMID

cF



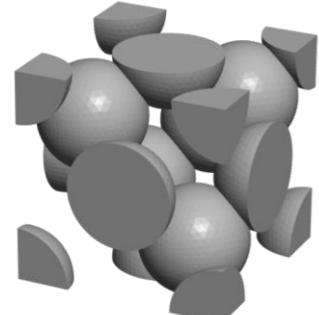
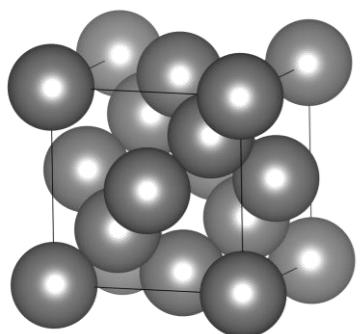
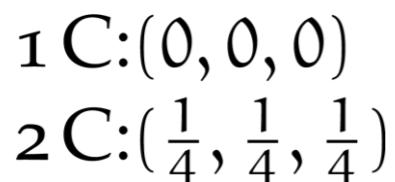
RUBIDIJUM BROMID

cF



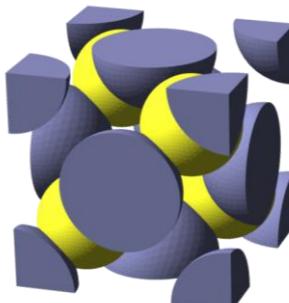
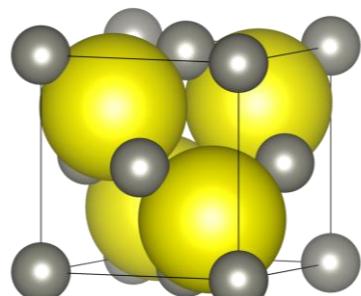
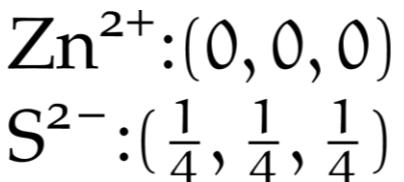
DIJAMANT

cF



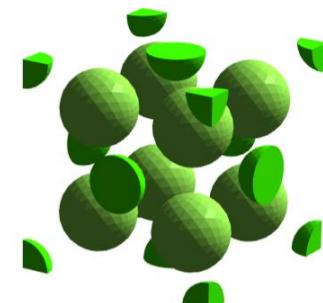
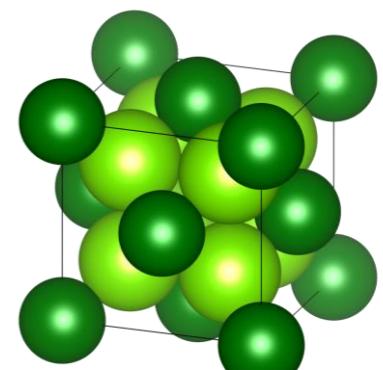
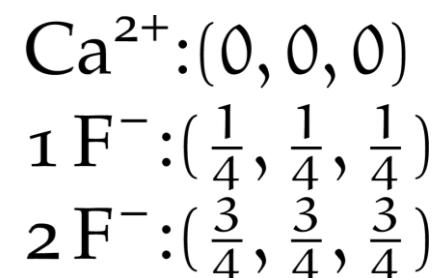
SFALERIT

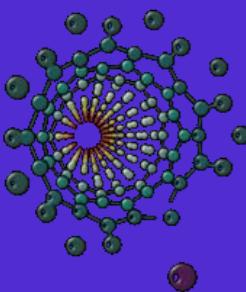
cF



KALCIJUM FLUORIT

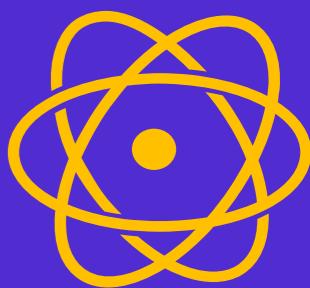
cF





PRAVCI I RAVNI U KRISTALIMA

Fizička hemija čvrstog stanja

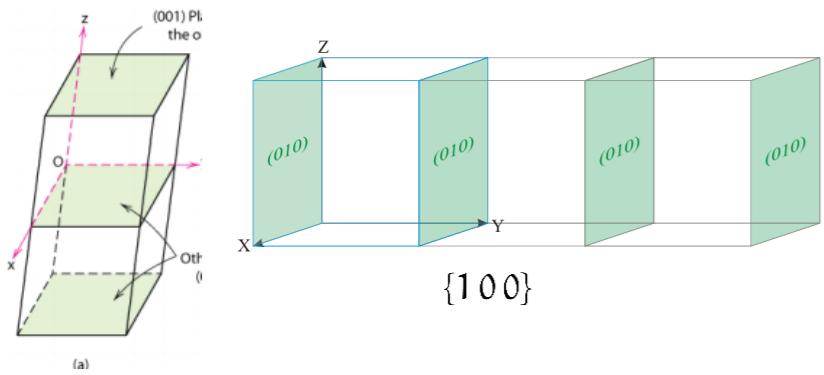


Bojana Vasiljević

Ravni u kristalima – Miler-ovi indeksi

Jedna određena ravan: $(h k l)$

Familija ekvivalentnih ravnih – $\{h k l\}$
skup svih simetrijski ekvivalentnih ravnih



Ukoliko ravan ne seče neku osu, odsečak sa tom osom je ∞ , pa kada se odredi recipročna vrednost dobija se indeks 0.

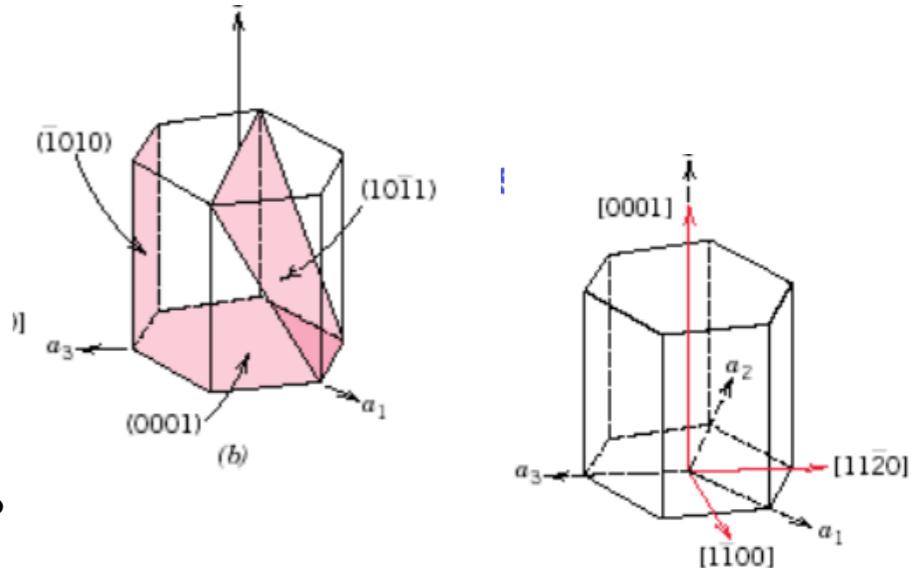
Procedura određivanja parametara:

- Odrediti koordinatne ose x , y i z
- Postaviti početak koordinatnog sistema tako da ga ravan ne sadrži.
- Odrediti preseke p , q i r koje ravan pravi na osama x , y i z
- Podeliti redom sa dužinom odgovarajuće ivice jedinične celije: $\frac{p}{a} : \frac{q}{b} : \frac{r}{c}$
- Naći recipročne vrednosti za ove brojeve
- Prevesti u cele brojeve tako što će svaki broj biti pomnožen najmanjim zajedničkim sadržaocem za brojeve u imeniciima

Heksagonalna rešetka

Kod heksagonalne rešetke uvodi se u baznoj ravni pored osa a_1 i a_2 još jedna osa (a_3) tako da se sve tri nalaze pod uglom od 120° , dok je četvrta osa c normalna na sve njih.

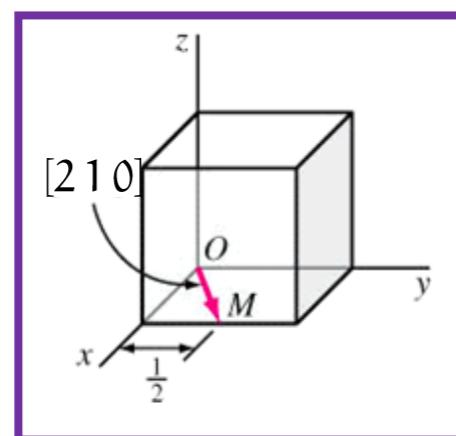
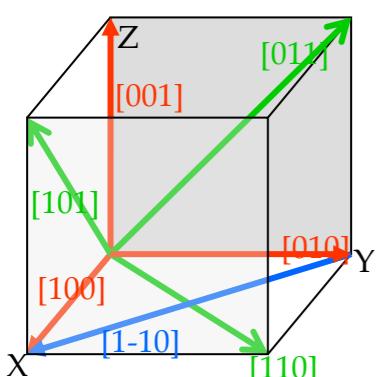
Tada su indeksi ravnih $(hkil)$, gde je $i = -(h+k)$.



Pravci u kristalima – Wajs-ovi parametri

Jedan određeni pravac: $[uvw]$

Familija ekvivalentnih pravaca: $\langle uvw \rangle$



Procedura određivanja parametara:

- Odrediti koordinatne ose x , y i z
- Postaviti početak koordinatnog sistema na početak vektora koji pokazuje pravac
- Odrediti preseke p , q i r na osama koje pravi posmatrani pravac
- Prevesti u cele brojeve
- Ukoliko je neki pravac negativan, označava se crtom iznad indeksa.

Sistem od četiri indeksa omogućava lakše uočavanje permutacijski povezanih indeksa kod simetrijski ekvivalentnih ravnih i pravaca.

$$[uvtw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2U - V)$$

$$v = \frac{1}{3}(2V - U)$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = W$$



Jednostavnije: ako su koordinate početka vektora (x_1, y_1, z_1) i kraja (x_2, y_2, z_2) , tada se pravac može dobiti oduzimanjem $(x_2 - x_1, y_2 - y_1, z_2 - z_1)$, najveći delilac se izvuče i preostali brojevi predstavljaju indekse pravca

Za kubnu kristalnu rešetku važi da je:

$$\langle 100 \rangle = [100]; [010]; [001]; [\bar{1}00]; [0\bar{1}0]; [00\bar{1}]$$