

# KRISTALOGRAFIJA

doc. dr. Meta Dobnikar, soba 218, gov. ure: torek 10-12h

**Predavanja:** sreda 12-14h -obvezna

**Vaje:** teoretični del vse skupine v sredo od 14h-16h  
Delo v skupinah po razporedu – obvezne

**Preverjanje znanja:** Dva kolokvija – geometrični (pisni – začetek decembra)  
optika (ustni-v januarju)

**IZPIT** ustni v januarju

# KRISTALOGRAFIJA

## Priporočena literatura:

**Bloss F.D.:** Crystallography and Crystal Chemistry, Mineralogical Society of America, Washington, 2000, 545 pp.

**Giacovazzo C., Monaco H. L., Viterbo D., Scordari F., Gilli G., Zanotti G., Catti M.:** Fundamentals of Crystallography, International Union of Crystallography, Oxford, 1992, 653 pp.

**Grafenauer S.:** Kristalografija, FNT, Univerza v Ljubljani, 1974, 364 str.

**Hammond C.:** The basics of Crystallography and Diffraction, International Union of Crystallography, Oxford, 2001, 331 pp.

**Klein C., Hurlblut C.S.:** Manual of Mineralogy, John Wiley & Sons, New York, 1993, 681 pp.

**Phillips F. C.:** An Introduction to Crystallography, Longman, Singapore 1986, 351 pp.

**Rousseau J.-J.:** Basic Crystallography, John Wiley & Sons, New York, 1999, 414 pp.

## Kristalografija - veda o kristalih.

Preučuje kristalne snovi, rast kristalov, njihovo zunanjo obliko in notranjo zgradbo.  
krustallas - strjen z zamrznitvijo

Kristal je homogena trdna snov omejena s pravilno razporejenimi ravnimi, gladkimi ploskvami, ki so posledica prostorsko periodično urejene notranje strukture (tridimenzionalno pravilno razporejenih osnovnih gradnikov – atomov ali ionov) .

### Oblike kristalov v naravi

||

odvisne od pogojev, v katerih so nastajali

Če neka kristalna snov nima lepo razvitih zunanjih ploskev, se s tem njene osnovne fizikalne lastnosti kristala ne spremenijo.

**Kristal v širšem smislu - trdna snov z urejeno notranjo strukturo**

### Kristalografija

- 1) **geometrična** - zunanja oblika kristalov in simetrija
- 2) **strukturna** - notranja simetrija in struktura
- 3) **kristalna kemija** - medatomske vezi in razporeditve delcev
- 4) **fizikalna kristalografija** - fizikalne lastnosti kot posledica strukture

# KRATKA ZGODOVINA KRISTALOGRAFIJE

Začetki - opisna kristalografija - del mineralogije

od sredine 19. stoletja - samostojna veda

predpostavka - pravilne oblike kristalov so posledica notranje urejenosti snovi -  
Johannes Kepler (1619), Robert Hooke (1665), Christian Huygens (1690) (dvolom)

**1669 - Nils Steensen** predpostavi **prvi zakon kristalografije** - o stalnosti kotov (na osnovi merjenja kotov med ploskvami kristalov kremenca)

**1772 - Jean-Baptiste Romé de l'Isle** prvi zakon kristalografije tudi formalno predstavi

**1774 - Abbé René-Just Haüy** postavi **drugi zakon kristalografije** - zakon o racionalnih indeksih

**W.H. Miller** - vpelje metodo analitične geometrije in predlaga sistem oznak, ki je v uporabi še danes

**1849 - Auguste Bravais** postavi postulat, ki predstavlja osnovo kristalografiji:

**Za poljubno točko P v kristalu obstaja neskončno število točk v prostoru v vseh smereh, okoli katerih je razporeditev snovi popolnoma enaka kot za točko P.**

Iz tega postulata izhaja ideja o tridimenzionalni kristalni mreži in simetriji povezani z njo.

Bravais uvede tudi pojem recipročne mreže.

1782 - Carangeot - prvi goniometer

1810 - Babinet in Wollaston izdelata prvi enokrožni goniometer

Wulff - dvokrožni goniometer, ki ga izpopolni Fedorov

Do začetka dvajsetega stoletja je kristalografija popolnoma aksiomatična.



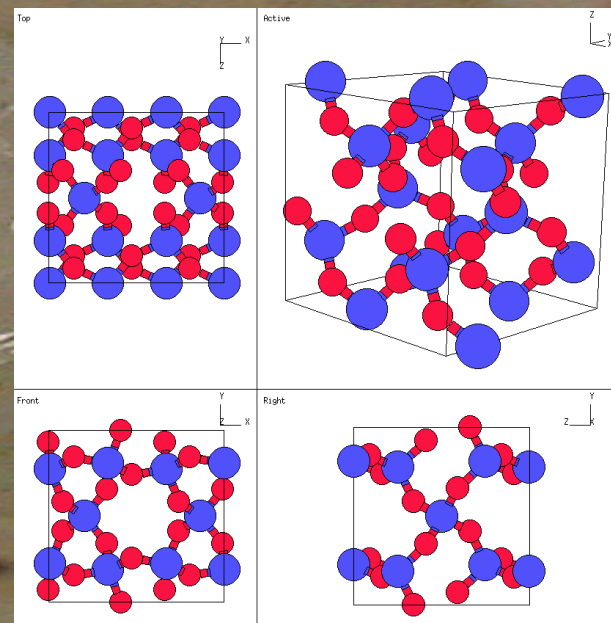
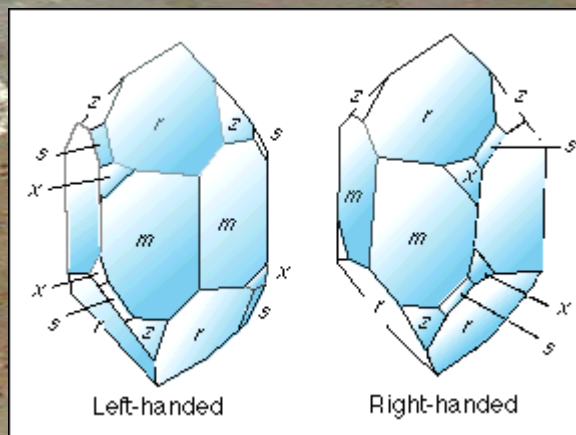
1912 - prvi poizkusi z RTG žarki na kristalih: W.Friederich in P.Knippping sledita idejam M. von Laue-ja

W. in L. Bragg - potrdita Bravaisov postulat.

Ukloni RTG žarkov na kristalih dajo eksperimentalni dokaz pravilne urejenosti strukture (notranjosti) kristalov.

Z uporabo novih tehnik, ki temeljijo na RTG žarkih se hitro začne razvijati t.i. rentgenska kristalografija, katere učinkovitost se močno poveča po letu 1960 z uvedbo računalnikov.

Danes v vsakem dobro opremljenem laboratoriju že v nekaj dneh v celoti določijo strukturo nove anorganske kristalne snovi.



# POSTULATI KRISTALOGRAFIJE

Postulat = predpostavka, izhodišče

## ZAKON O STALNOSTI KOTOV

Šop premic, ki se sekajo v katerikoli točki v kristalu in so pravokotne na kristalne ploskve, predstavlja stalno značilnost kristalne vrste.

Kot med dvema ploskvama posameznega kristala je stalen in se ne menja, če sta ploskvi premaknjeni zaradi rasti kristala.

V vseh kristalih iste snovi so koti med odgovarjajočimi ploskvami vedno stalni in med seboj enaki. Iz tega sledi, da so stalni tudi koti med robovi.



## ZAKON O RACIONALNIH INDEKSIH

- a) Izbira kristalografskih osi - tri poljubne premice, ke se sekajo v točki, ne nujno ortogonalne
- b) Izbira enotne ploskve - ploskev, vzporedna kristalni ploskvi, NI vzporedna NOBENI od kristalografskih osi in na kristalografskih oseh odseče odseke  $a$ ,  $b$ , in  $c$ . Položaj ploskve v prostoru je določen z razmerji  $a/b$ ,  $b/c$  in  $c/a$ .
- c) Odseke, ki jih na teh oseh odreže poljubna druga ploskev kristala lahko izrazimo kot:  $pa$ ,  $qb$  in  $rc$ , položaj ploskve v prostoru pa je določen z razmerji  $pa/qb$ ,  $qb/rc$  in  $rc/pa$ .

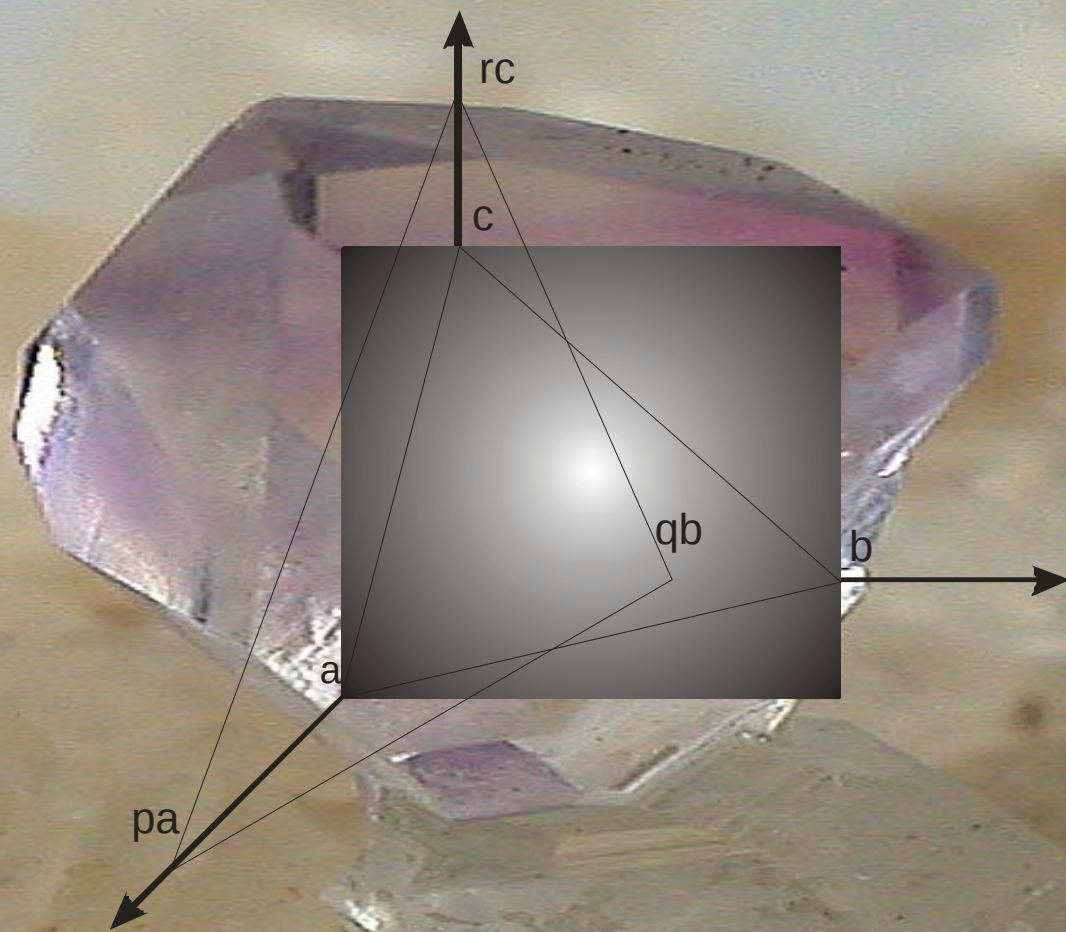
Števila  $p$ ,  $q$  in  $r$ , ki določajo položaj kristalne ploskve so cela števila in relativno primarna.

Če imajo števila  $p$ ,  $q$  in  $r$  skupni delitelj, jih lahko z njim delimo in s tem orientacije ploskve v prostoru ne spremenimo.

ploskev  $p'=p/n$ ,  $q'=q/n$ ,  $r'=r/n$  je vzporedna ploskvi  $p$ ,  $q$ ,  $r$ .







Števíla  $p$ ,  $q$  in  $r$ , ki določajo položaj kristalne ploskve so cela števíla in relativno primarna.

Če imajo števíla  $p$ ,  $q$  in  $r$  skupni delitelj, jih lahko z njim delimo in s tem orientacije ploskve v prostoru ne spremenimo.

ploskev  $p'=p/n$ ,  $q'=q/n$ ,  $r'=r/n$  je vzporedna ploskvi  $p$ ,  $q$ ,  $r$ .

# POSTULATI KRISTALOGRAFIJE

**Bravaisov postulat:** Za vsako točko P v kristalu obstaja neskončen niz točk v tridimenzionalnem prostoru, okoli katerih je razporeditev snovi enaka kot za točko P.

**Schönflies-Fedorov postulat:** Za vsako točko P v kristalu obstaja neskončen niz točk v tridimenzionalnem prostoru, okoli katerih je razporeditev snovi enaka kot za točko P ali predstavlja podobo te razporeditve.

Schönflies-Fedorov - uvedeta pojem **podobe = simetrija glede na točko**

**Posledice:** set homolognih točk predstavlja periodično prostorsko mrežo, karakterizirano s tremi osnovnimi translacijami. Vsaka dana mreža je karakterizirana s setom simetrijskih operacij ali translacij, ki definirajo invariantnost mreže.

# MREŽE, VZORCI, STRUKTURE

Poznavanje kristala temelji na poznavanju treh vektorjev, ki definirajo mrežo in razpored atomov znotraj osnovne celice.

Osnovna celica - osnovna, ponavljajoča se enota strukture

Kristalna struktura - periodično ponavljanje osnovne celice z mrežnimi translacijami.



+



**POZOR: Mreža opisuje le periodičnost strukture, torej simetrijske lastnosti.  
Vozlišča mreže ne ustrezajo nobeni fizikalni entiteti, in jih ne smemo  
zamenjevati z atomi!**

prehod od ene do druge identične točke v mreži =  $n \cdot \mathbf{a} + m \cdot \mathbf{b}$  (n, m celi števili)

**Zunanja simetrija - točkovne grupe - simetrija končnih (zaprtih) predmetov**

**Notranja simetrija - prostorske grupe - simetrija v neskončnost ponavljajočih se  
struktur**

