

KRISTALOGRAFSKE OSI

Pri opisovanju zunanjih oblik notranje simetrije uporabimo sistem treh (ali štirih) referenčnih osi - KRISTALOGRAFSKIH OSI.

Kristalografske osi pri opisovanju zunanje simetrije izberemo vzporedno robovom ali ploskvam kristala. Pri taki izbiri kristalografske osi sovpadajo tudi z osmi simetrije in/ali ravninami simetrije oz. so nanje pravokotne.

Za nekatere kristale obstaja več možnosti za izbiro kristalografskih osi, če jih izbiramo le na osnovi zunanje simetrije.

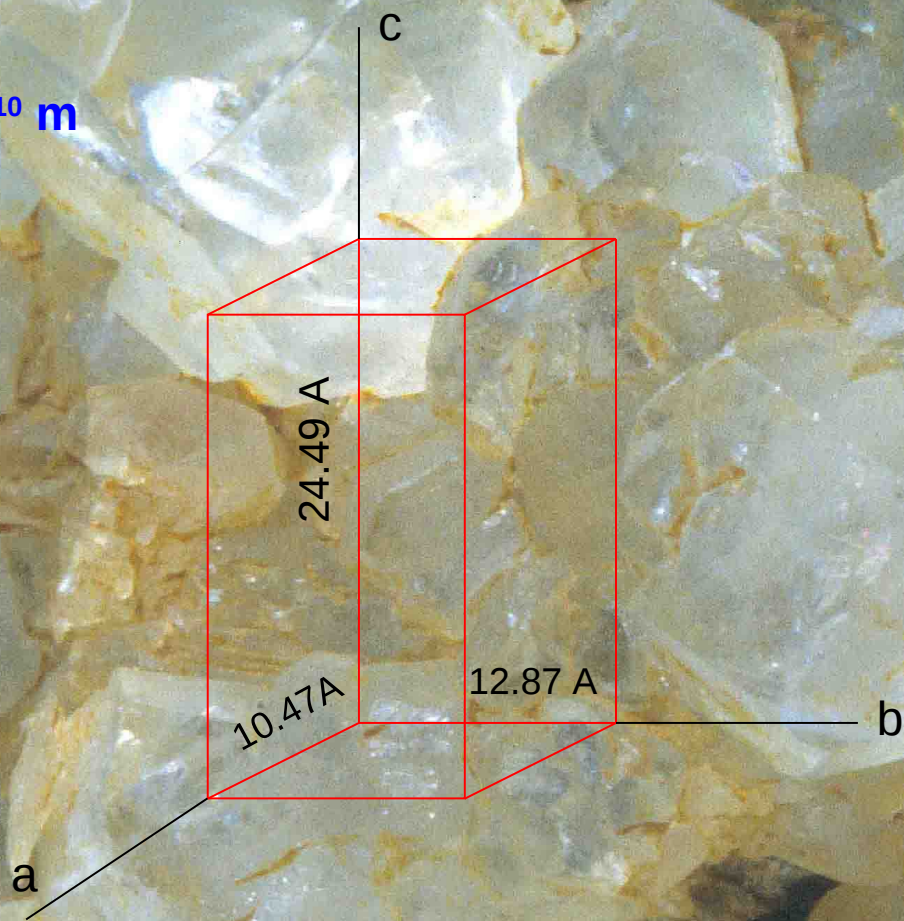
IDEALNA IZBIRA KRISTALOGRAFSKIH OSI:

Kristalografske osi morajo biti vzporedne robovom, enote na oseh pa proporcionalne dolžinam robov osnovne celice.

OSNOVNA CELICA - najmanjša ponavljajoča se enota kristalne mreže (strukture)

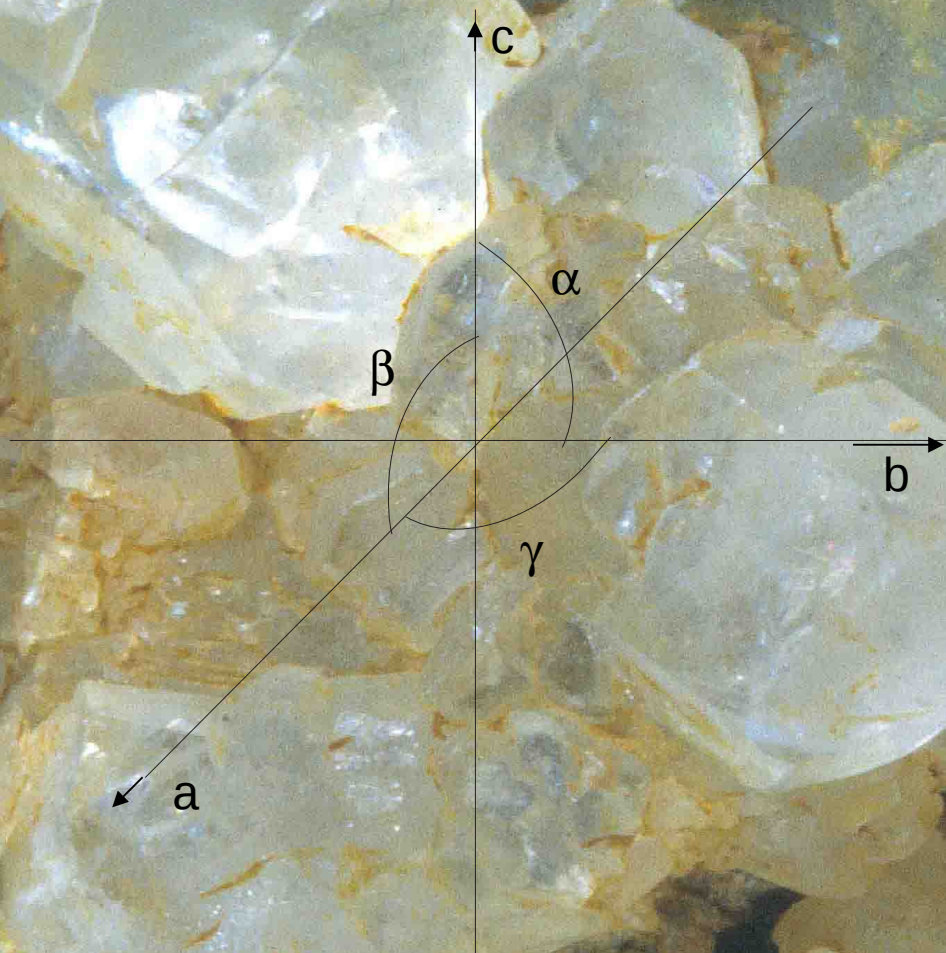
OSNOVNA CELICA ORTOROMBSKEGA ŽVEPLA

$\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$



Kristalni sistemi

32 simetrijskih razredov lahko na osnovi skupnih simetrijskih elementov razporedimo v sedem kristalnih sistemov, ki se med seboj ločijo po sistemih kristalografskih osi (dolžine, koti), ki predstavljajo osnovo sistema.



Kristalni sistemi

32 simetrijskih razredov lahko na osnovi skupnih simetrijskih elementov razporedimo v sedem kristalnih sistemov, ki se med seboj ločijo po sistemih kristalografskih osi (dolžine, koti), ki predstavljajo osnovo sistema.

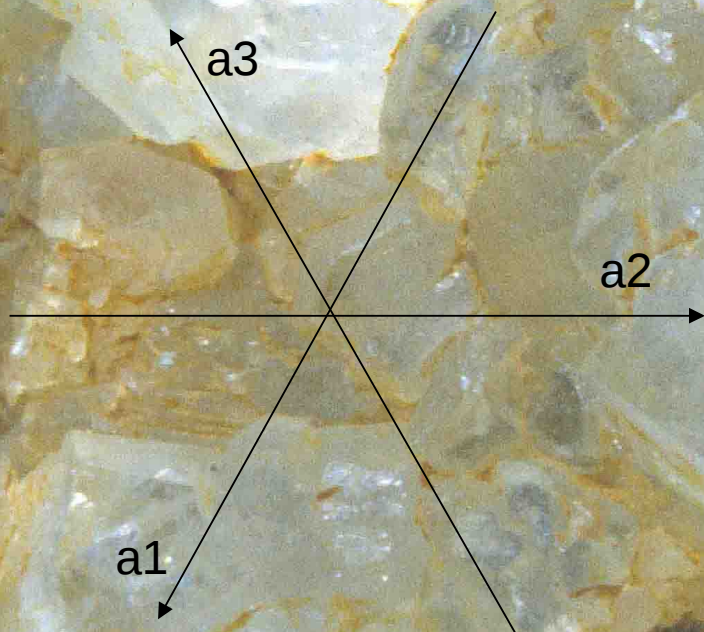
Trikliniski sistem ima najnižjo simetrijo. Kristalografske osi a , b in c so različno dolge in se sekajo pod koti, ki niso pravi in so medsebojno različni ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$).

Monoklinski sistem ima tri različno dolge kristalografske osi od katerih se dve sekata pod kotom različnim od 90° , tretja pa je pravokotna na ravnino, ki jo določata prvi dve osi ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$).

Ortorombski sistem ima tri različno dolge kristalografske osi, ki se sekajo pod pravimi koti ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$).

Tetragonalni sistem ima tri med seboj pravokotne osi, od katerih sta dve (ležita v horizontalni ravnini) enako dolgi (a_1, a_2) tretja (vertikalna) pa je daljša ali krajša ($a_1=a_2 \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$).

Heksagonalni in trigonalni sistem imata štiri kristalografske osi. Tri osi leže v horizontalni ravnini, so enako dolge (a_1, a_2 in a_3) in se sekajo pod kotom 120° . Četrta os je vertikalna ter daljša ali krajša od prvih treh.



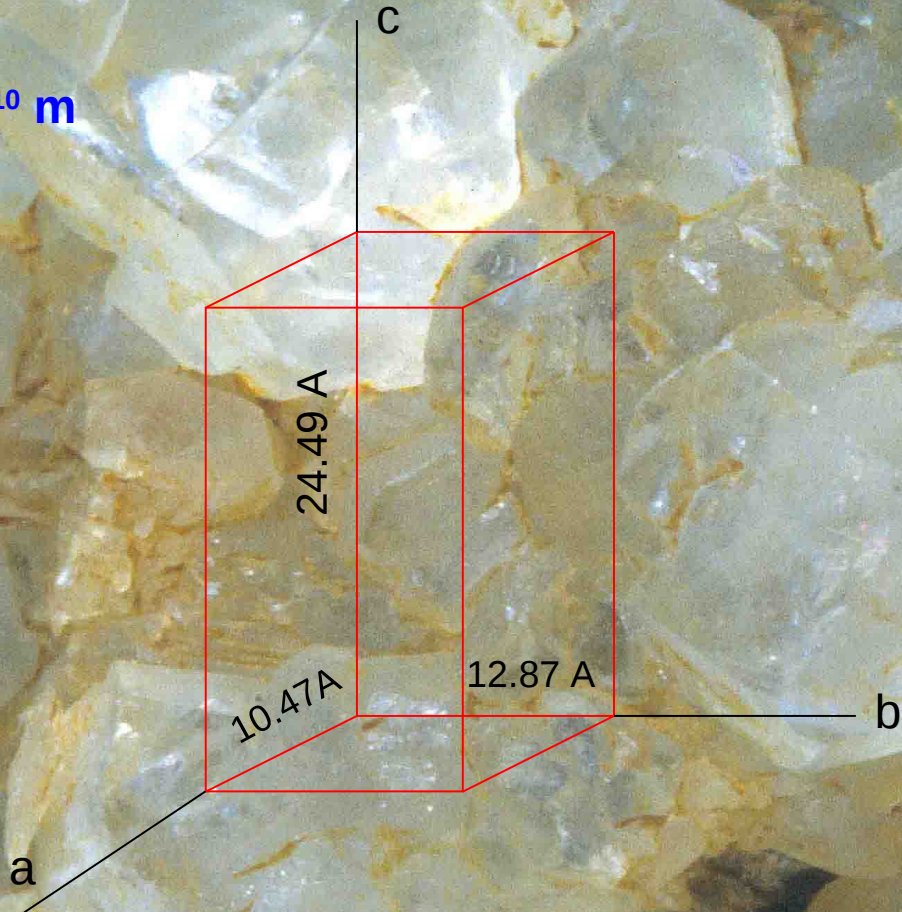
Kubični sistem ima najvišjo simetrijo. Tri kristalografske osi so med seboj pravokotne in enako dolge (a_1, a_2, a_3).

OSNA RAZMERJA

Dimenzije osnovne celice - določimo z rentgenskimi metodami

OSNOVNA CELICA ORTOROMBSKEGA ŽVEPLA

$\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$





za ortorombsko osnovno celico žvepla:
 $a=10.47 \text{ \AA}$, $b=12.87 \text{ \AA}$, $c=24.49 \text{ \AA}$

Za enoto se uporabi vrednost b

Razmerja med osmi so:
 $a/b : b/b : c/b = X : 1 : Y$

Za primer žvepla lahko zapišemo:
 $a : b : c = 0.813 : 1 : 1.903$

Razmerja predstavljajo relativne (ne absolutne) dolžine robov osnovne celice, ki odgovarjajo kristalografskim osem.



Osna razmerja lahko dobimo tudi z izračuni iz kotov med ploskvami
(pred odkritjem rtg žarkov).

Žveplo - osna razmerja določena iz morfologije kristala (1869):

$$a : b : c = 0.8131 : 1 : 1.9034$$

Žveplo - osna razmerja določena s pomočjo rtg žarkov (1960):

$$a : b : c = 0.8135 : 1 : 1.9029$$

ODSEKI PLOSKEV

Položaj kristalne ploskve je določen z odseki, ki jih odseče na kristalografskih oseh.

Določiti moramo relativne razdalje odsekov ploskve na kristalografskih oseh.

Kristalne ploskve so vzporedne družini možnih mrežnih ravnin!!

AA - vzporedna b in c osi ($1a, \infty b, \infty c$)

A'A' - $2a, \infty b, \infty c$

BB - vzporedna a in c osi ($\infty a, 1b, \infty c$)

AB - $1a, 1b, \infty c$

enotna ploskev - $1a, 1b, 1c$

Če dimenzije osnovne celice niso poznane, za enotno ploskev izberemo največjo ploskev, ki seka vse tri kristalografske osi!

ODSEKI PLOSKEV

Položaj kristalne ploskve je določen z odseki, ki jih odseče na kristalografskih oseh.

Določiti moramo relativne razdalje odsekov ploskve na kristalografskih oseh.

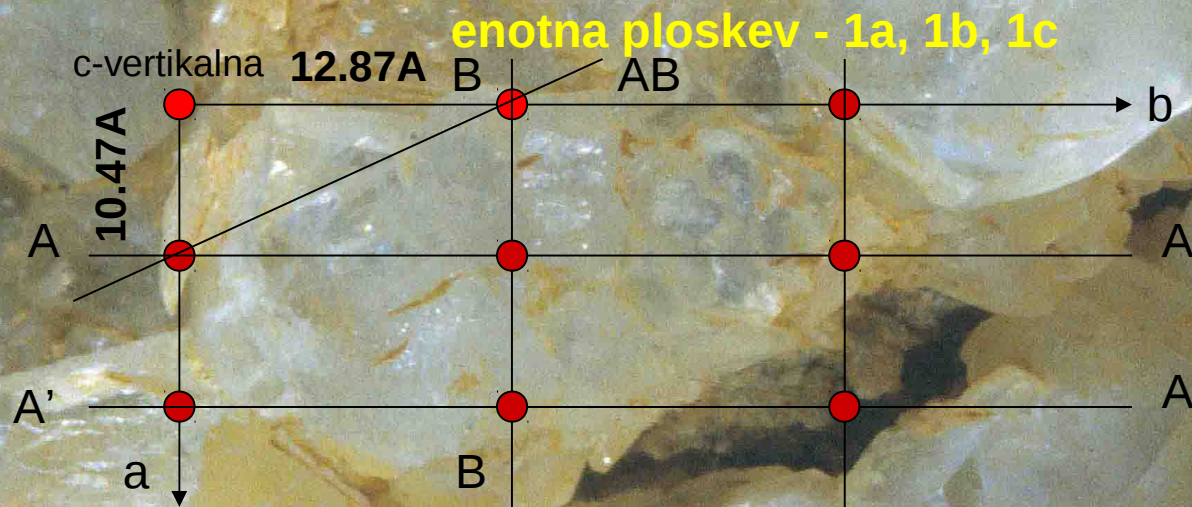
Kristalne ploskve so vzporedne družini možnih mrežnih ravnin!!

AA - vzporedna b in c osi ($1a, \infty b, \infty c$)

A'A' - $2a, \infty b, \infty c$

BB - vzporedna a in c osi ($\infty a, 1b, \infty c$)

AB - $1a, 1b, \infty c$





WEISS-ovi PARAMETRI

Weiss-ovi parametri predstavljajo relativne vrednosti odsekov, ki jih kristalna ploskev odseče na kristalografskih oseh.

Weissove parametre kristalne ploskve dobimo tako, da delimo absolutno vrednost odseka na kristalografski osi z vrednostjo enote za to os.

Parametre za vse tri osi delimo z najnižjim parametrom.

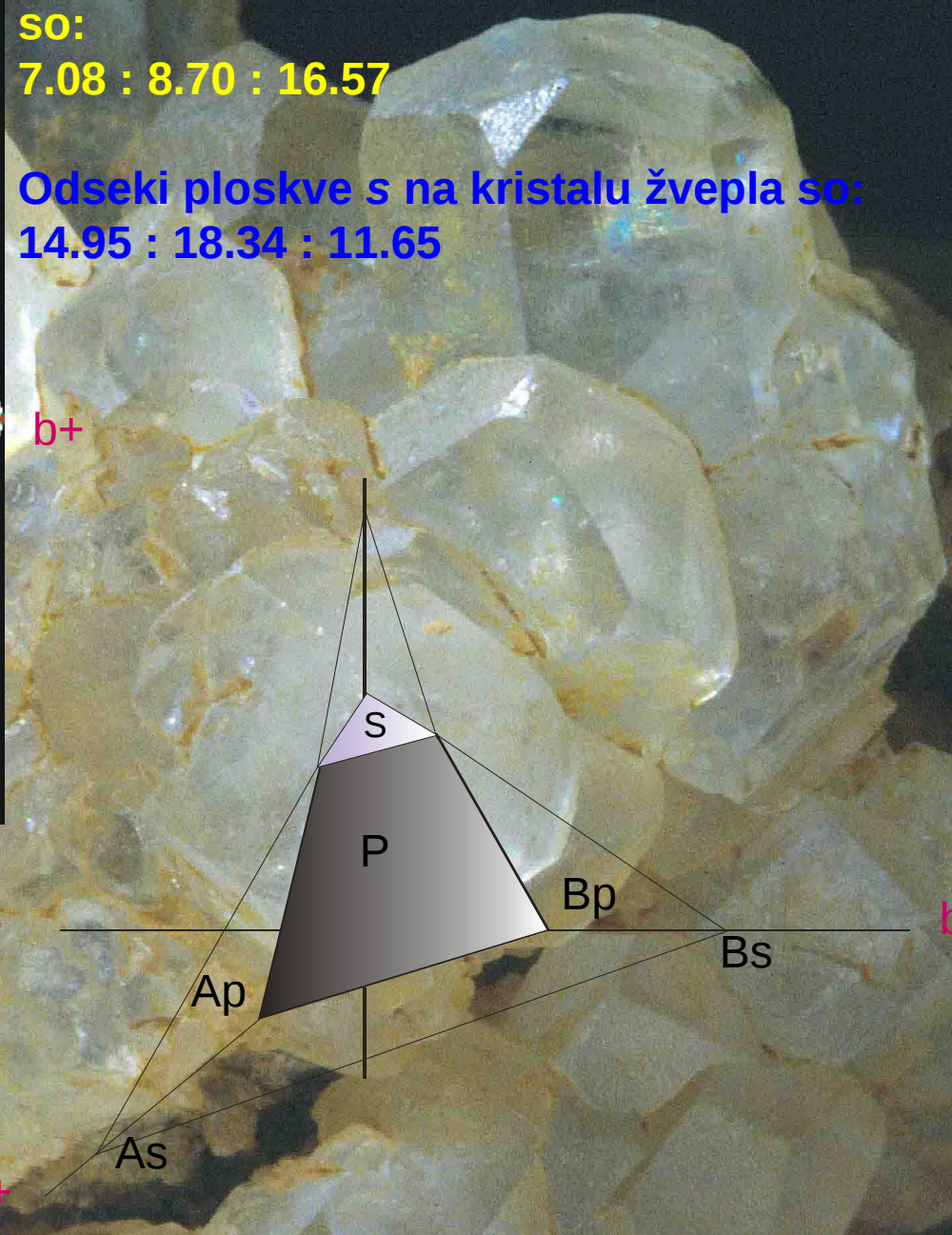
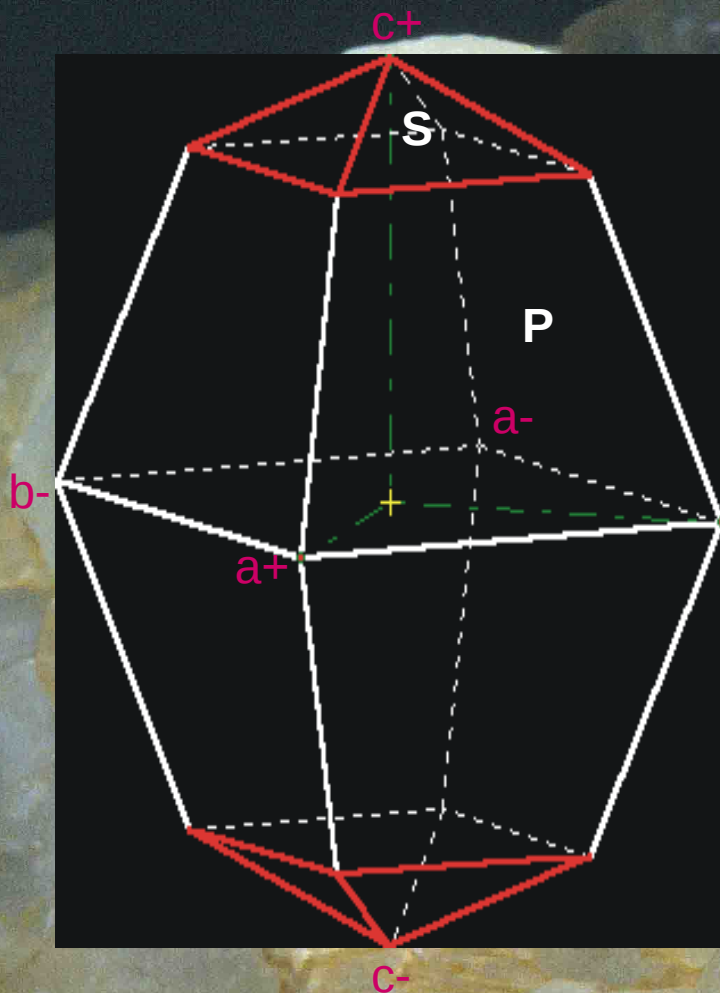
N.pr: odseki enotne ploskve (p) za žveplo

so:

7.08 : 8.70 : 16.57

Odseki ploskve s na kristalu žvepla so:

14.95 : 18.34 : 11.65



Weissovi parametri za ploskev s so:

14.95 18.34 11.65

----- a : ----- b : ----- c

7.08 8.70 16.67

ali 2.111a : 2.108 b : 0.703 c

oz.: 3a : 3b : 1c ,če delimo z

najmanjšim parametrom

MILLER-jevi INDEKSI

Miller-jevi indeksi ploskve sestojijo iz serije celih števil pridobljenih z recipročenjem vrednosti odsekov (Weissovih parametrov) in (če je potrebno) odpravo ulomkov.

Miller-jevi indeksi ne vsebujejo ulomkov, niti skupnega delitelja!

Miller-jeve indekse kristalne ploskve dobimo tako, da:

1) delimo vrednosti presečišč enotne ploskve z vrednostmi dane kristalne ploskve

2) delimo dobljene vrednosti z najmanjšo izmed treh

3) Dobljena števila lahko (če je potrebno) še delimo ali množimo z istim številom, da odpravimo ulomke ali skupne delitelje.

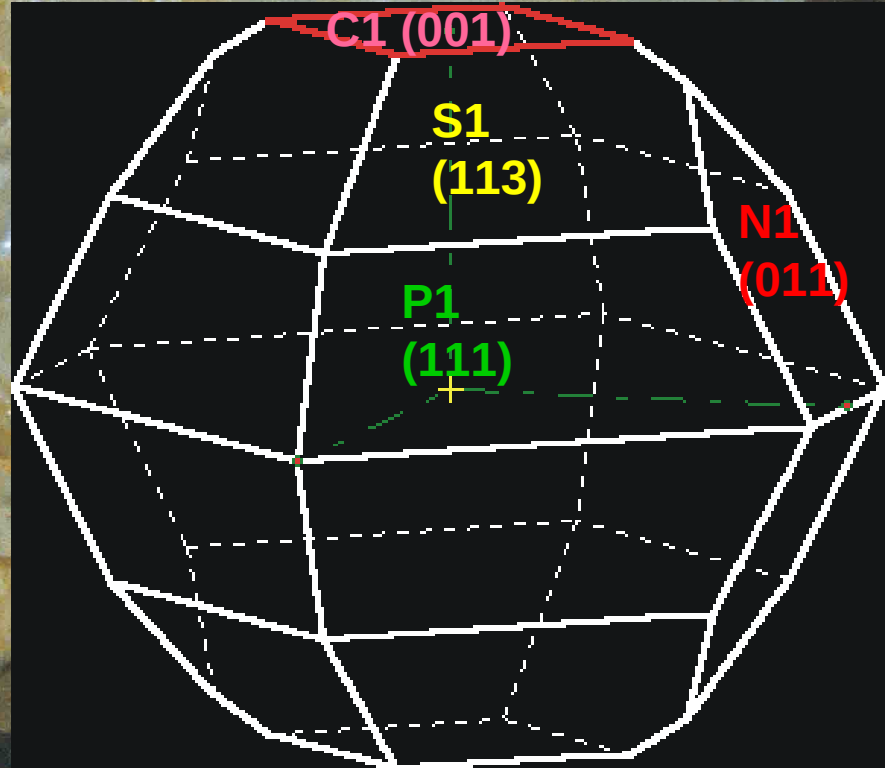
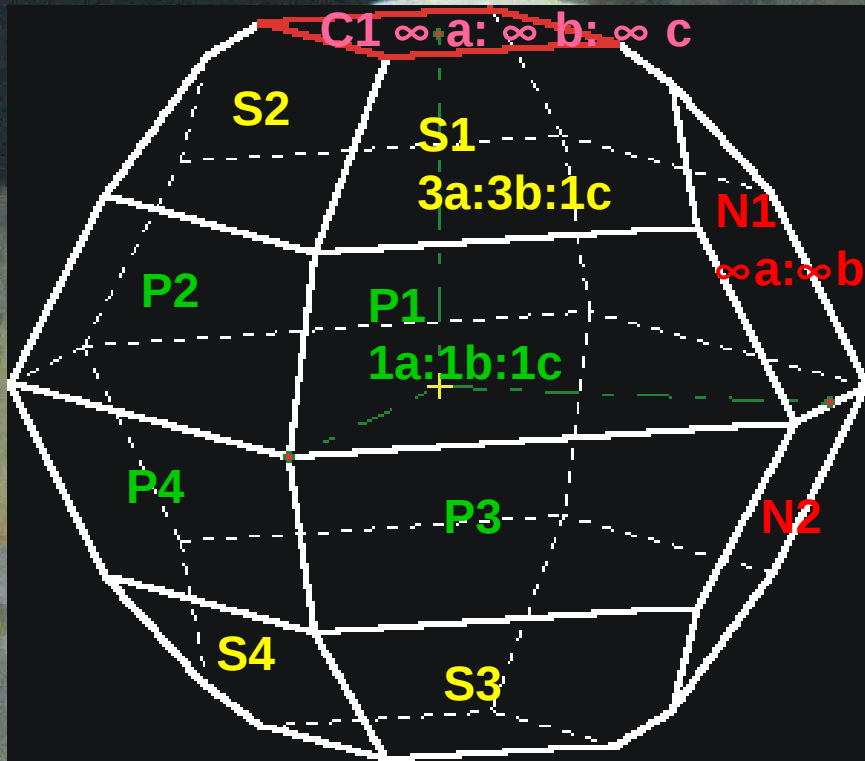
N. pr.: Millerjevi indeksi za ploskev s_1 so:

4.60 5.66 10.77

----- : ----- : -----

8.28 10.18 6.46

ali 0.556 : 0.556 : 1.667, oz. po deljenju z 0.556: 1 : 1 : 3 = (1 1 3)





MILLER-BRAVAIS-ovi INDEKSI

V heksagonalnem in trigonalnem sistemu imamo Bravais-ov set (4) kristalografskih osi.

Pri predpisovanju indeksov za kristalne ploskve je Bravais sledil Millerjevemu sistemu - Miller-Bravais-ovi indeksi.

$$h + k + i = 0$$

$$\Delta MOT = \Delta MOX + \Delta XOT$$



$$2ma_0 \cdot na_0 \cdot \sin 120^\circ$$

$$2ma_0 \cdot xa_0 \cdot \sin 60^\circ$$

$$2na_0 \cdot xa_0 \cdot \sin 60^\circ$$

$$----- = ----- + -----$$

2

2

2

ker je $\sin 60^\circ = \sin 120^\circ$, lahko enačbo delimo z $1/2 a_0^2 \sin 60^\circ$



mn

$$x = \frac{m+n}{m+n}$$

+c

R

ploskev P

0

na₀

T

+a2

60°

60°

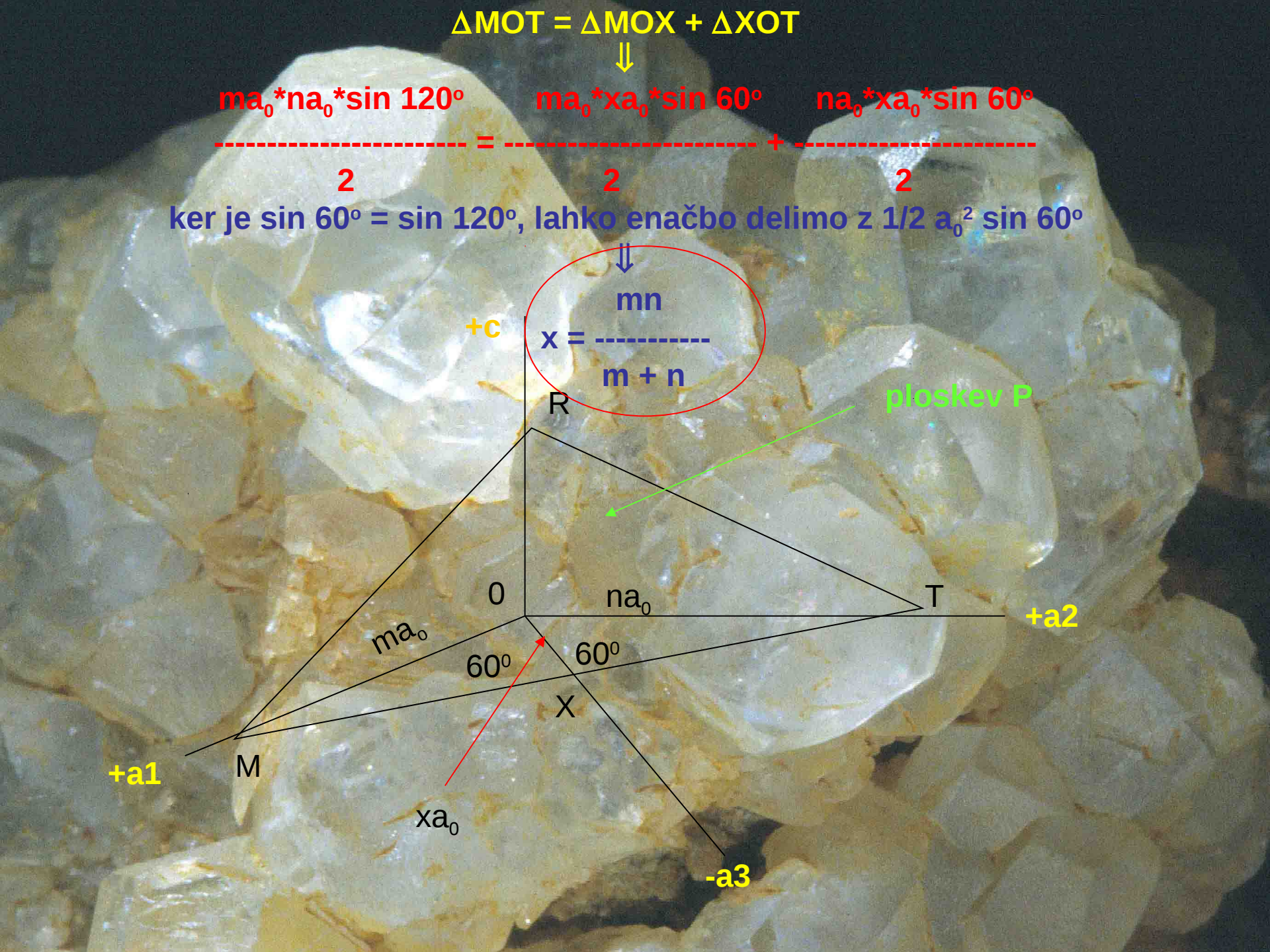
X

+a1

M

xa₀

-a3



$$x = \frac{mn}{m+n}$$

Weissovi parametri za ploskev P:

ma1 : na2 : -xa3 ⇒ Miller-Bravaisovi indeksi:

$$h = \frac{1}{m} \quad k = \frac{1}{n} \quad i = -\frac{1}{x} = -\frac{m+n}{mn}$$

z odpravo ulomkov (množenje z mn)

$$h = n \quad k = m \quad i = -(m+n) = -(h+k)$$

OZNAČEVANJE SMERI

Cono v kristalu predstavljajo ploskve, ki so vzporedne premici v prostoru. To premico imenujemo os cone. Ploskve, ki leže v coni se sečejo v robovih, ki so vzporedni osi cone.

Simbol cone je oznaka smeri, ki se podaja v oglatem oklepaju in predstavlja koordinate središču najbližje točke na premici.

Simboli kristalografskih osi a , b in c v ortorombskem sistemu so:
[100], [010] in [001]

Oznaka $[u\ v\ w]$ pomeni os cone z nedoločeno orientacijo.

Ploskve $(0\ 1\ 0)$, $(1\ 1\ 0)$ in $(\bar{0}\ \bar{1}\ 0)$ vse ležijo v coni $[0\ 0\ 1]$
Ploskvi $(0\ 0\ 1)$ in $(0\ 1\ 0)$ ležita v coni $[1\ 0\ 0]$

