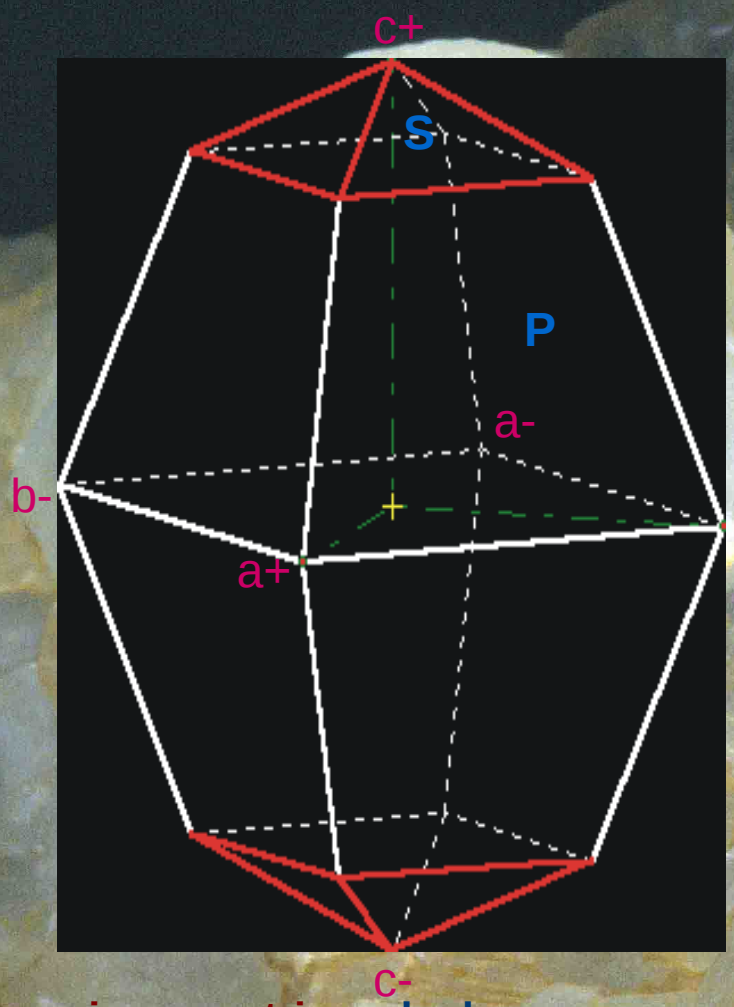
Gradivo dostopno na naslovu:

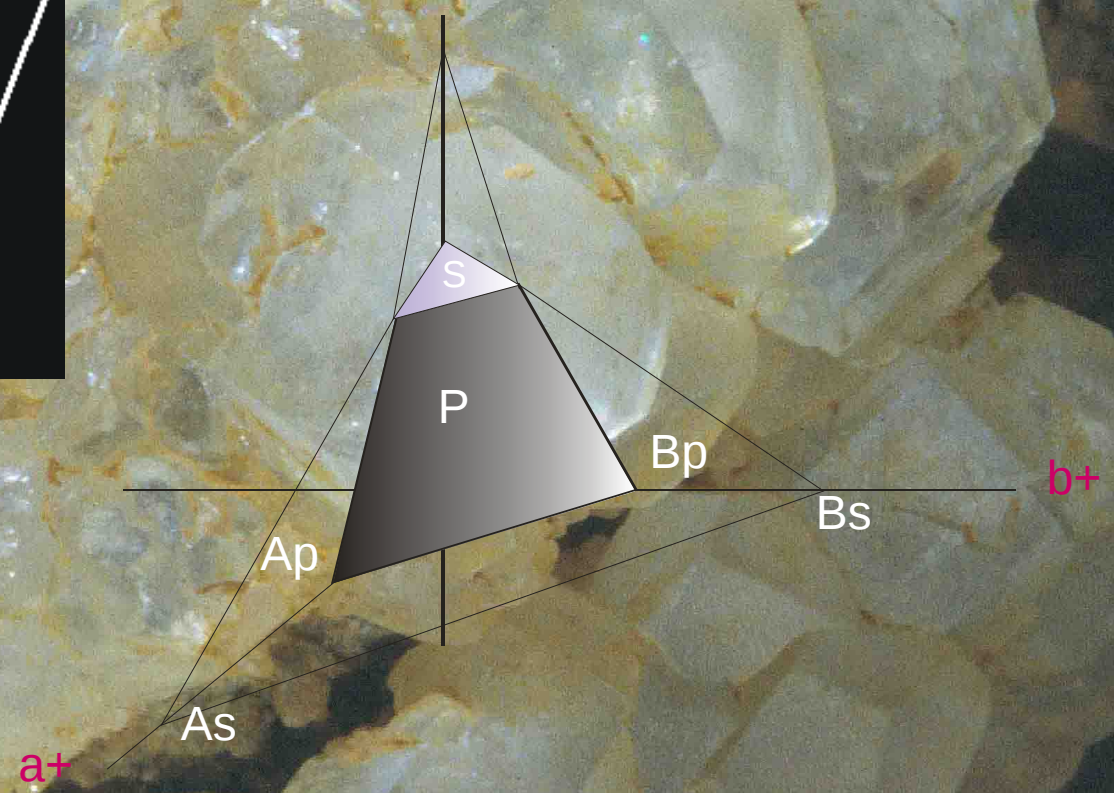
http://www.ntfgeo.uni-lj.si/mdobnikar/

Mail: meta.dobnikar@ntfgeo.uni-lj.si



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:

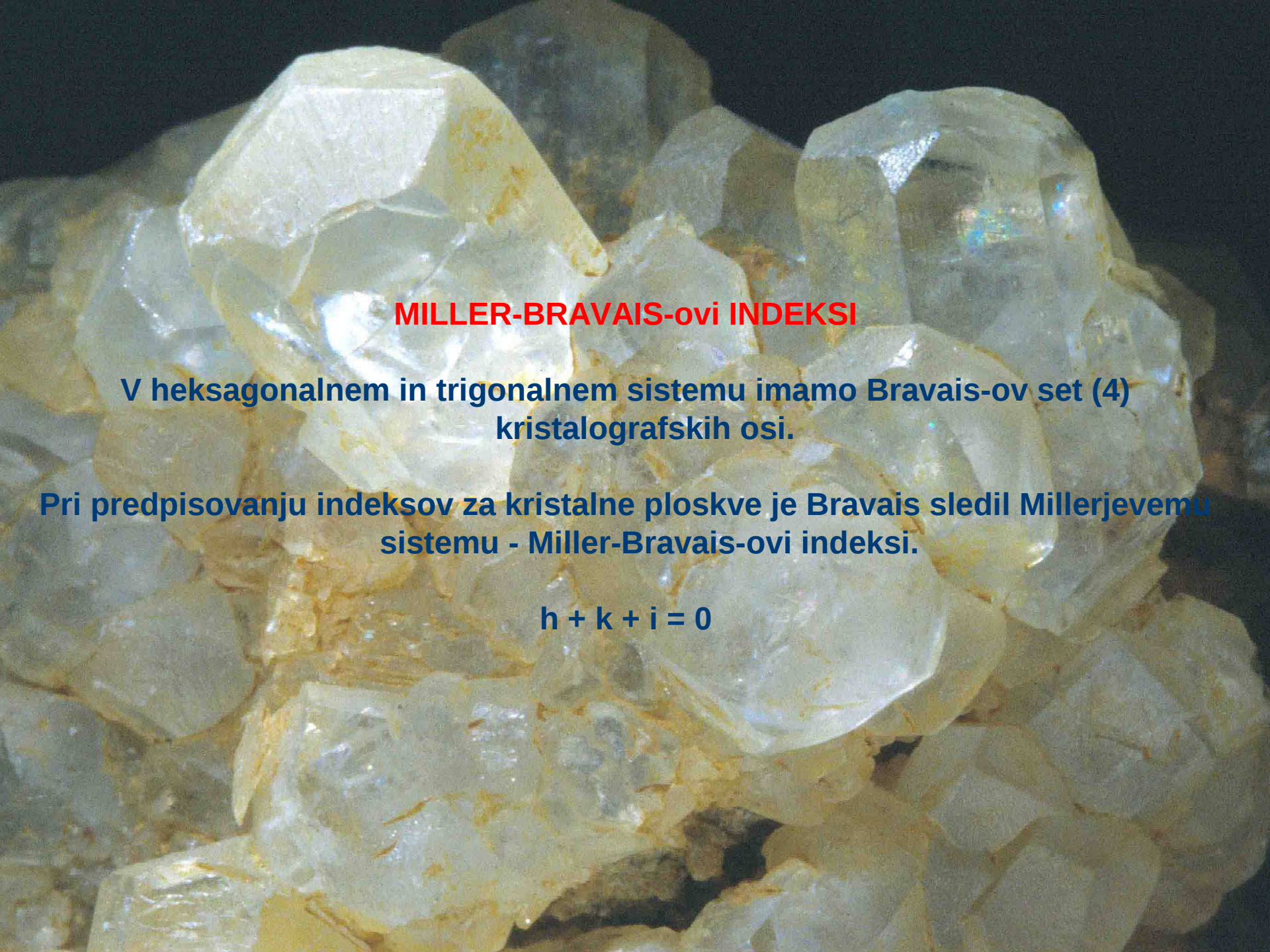
1) delimo vrednosti presečišč enotne ploskve z vrednostmi dane kristalne ploskve

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.

$$\frac{4.60}{8.28} : \frac{5.66}{10.18} : \frac{10.77}{6.46}$$

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.

$$h + k + i = 0$$

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.

KRISTALOGRAFSKI IZRAČUNI

Izračun simbola cone za dve nevzporedni ploskvi

Dve nevzporedni ploskvi (h1k1l1) in (h2k2l2) se sekata v premici.

Indekse [uvw] za premico v kateri se ploskvi sekata izračunamo po sledečem postopku:

h1	**k1**	**u**	**l1**	**v**	**h1**	**w**	**k1**	l1
h2	**k2**		**l2**		**h2**		**k2**	l2

u = k1l2 - k2l1 **v = l1h2 - l2h1** **w = h1k2 - h2k1**

Izračun Millerjevih indeksov ploskve vzporedne dvema premicama

Poljubni dve premici [u1 v1 w1] in [u2 v2 w2], ki nista vzporedni in se sekata, določata ravnino.

Millerjeve indekse (hkl) za ploskev, ki jo določata ti dve premici lahko izračunamo po sledečem postopku:

u1	**v1**	**h**	**w1**	**k**	**u1**	**l**	**v1**	w1
u2	**v2**		**w2**		**u2**		**v2**	w2

h = v1w2 - v2w1 **k = w1u2 - w2u1** **l = u1v2 - u2v1**

Test tavtoconalnosti kristalnih ploskev

Tri kristalne ploskve so **tavtoconalne**, t.j. ležijo v isti coni in so torej vzporedne isti conski osi, kadar je determinanta iz njihovih Millerjevih indeksov enaka 0:

$$\begin{vmatrix} h1 & k1 & l1 \\ h2 & k2 & l2 \\ h3 & k3 & l3 \end{vmatrix} = 0$$

Test koplanarnosti smeri v kristalu

Če so tri smeri v kristalu [u1 v1 w1] , [u2 v2 w2] in [u3 v3 w3] koplanarne, t.j. da ležijo v, ali so vzporedne isti ploskvi v kristalu, potem je determinanta:

$$\begin{vmatrix} u1 & v1 & w1 \\ u2 & v2 & w2 \\ u3 & v3 & w3 \end{vmatrix} = 0$$

Dana ploskev (h1k1l1) leži v coni [u1 v1 w1], če je izpolnjen pogoj:

$$u_1h_1 + v_1k_1 + w_1l_1 = 0$$

Indekse dodatnih ploskev, ki ležijo v isti coni, kot ploskvi (h1k1l1) in (h2k2l2), dobimo s seštevanjem (ali odštevanjem) le teh, ali njihovih celoštevilčnih faktorjev.

(h1+ h2, k1+ k2, l1 + l2)

(mh1+ nh2, mk1 + nk2, ml1 + nl2)

Transformacijske matrike

Kadar izberemo kristalografske osi v drugi smeri, kot so jih izbrali prejšnji raziskovalci, Millerjevi indeksi za kristalne ploskve niso več pravilni za nov set kristalografskih osi.

Zato je potrebno oblikovati transformacijsko matriko, s pomočjo katere indekse (hkl) za prejšnji sistem kristalografskih osi pretvorimo v (HKL) za nov sistem kristalografskih osi.

$$\begin{bmatrix} u1 & v1 & w1 \\ u2 & v2 & w2 \\ u3 & v3 & w3 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H \\ K \\ L \end{bmatrix}$$

$$H = hu1 + kv1 + lw1$$

$$K = hu2 + kv2 + lw2$$

$$L = hu3 + kv3 + lw3$$

Izračuni za Bravais-ove indekse

Vse izračune lahko izvedemo tudi za štirištevilčne Bravaisove indekse tako, da nadomestimo tretji indeks z zvezdico (*).

Simbol cone, v kateri ležita ploskvi (10*1) in (21*1) je $[\bar{1}1{*}1]$

Simboli con v heksagonalnem in trigonalnem sistemu

$[u\ v\ {*}\ w] \neq [U\ V\ T\ W]$

$u + v + {*} \neq 0$

$U + V + T = 0$

$u = U - T$ $\quad$ $v = V - T$ $\quad$ $w = W$

Izračun kota med ploskvama

V monoklinskem sistemu lahko izračunamo kot θ med ploskvama (h1k1l1) in (h2k2l2) v primeru, da poznamo osna razmerja a:b:c in kot β, po enačbi:

$$\cos\theta = \frac{h_1h_2c^2 + k_1k_2a^2c^2\sin^2\beta + l_1l_2a^2 - (h_1l_2 + h_2l_1)\,ac\cos\beta}{\sqrt{n_1n_2}}$$

$$n_1 = h_1^2c^2 + k_1a^2c^2\sin^2\beta + l_1a^2 - 2h_1l_1\,ac\cos\beta$$

$$n_2 = h_2^2c^2 + k_2a^2c^2\sin^2\beta + l_2a^2 - 2h_2l_2\,ac\cos\beta$$

Za triklinski sistem je formula še bolj zapletena, v višje simetrijskih razredih pa se poenostavi, ker je v

ortorombskem razredu sin β = 1 in cos β = 0,

v tetragonalnem sistemu je sin β = 1 in cos β = 0, a = 1 in

v kubičnem sistemu je sin β = 1 in cos β = 0, a = c = 1.

ENANTIOMORFNOST

Splošni in nekateri posebni liki v kristalnih razredih, ki nimajo ravnine, centra ali inverzne osi simetrije

(1, 2, 222, 4, 422, 3, 32, 6, 622, 23, 432)

se pojavljajo v dveh zrcalno enakih podobah, ki ju s sukanjem kristala ne moremo prekriti ali postaviti v identično lego.

Za taka dva lika pravimo, da sta enantiomorfna.

Na posameznih kristalih se lahko pojavlja le en (levi) ali drugi (desni) lik, nikoli oba hkrati.

Desni lik seka prvo in drugo kristalografsko os na pozitivnem delu,

levi lik seka prvo os na pozitivnem delu, drugo kristalografsko os pa na negativnem delu.

D (2$\bar{1}$31)

L ($\bar{3}\bar{1}$21)

DOLOČEVANJE SIMETRIJSKIH RAZREDOV

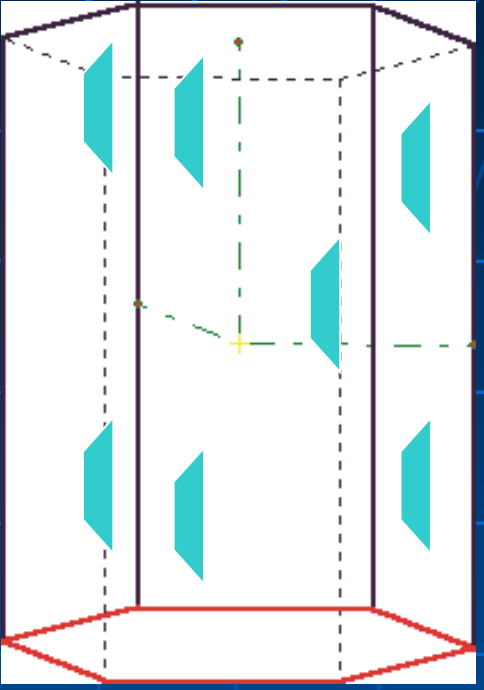
Enoznačna določitev simetrijskega razreda nekega kristala na osnovi njegove morfologije ni vedno mogoča. To se lahko primeri, če so na kristalu prisotni le posebni liki (kocka se pojavlja v vseh razredih kubičnega sistema), ali kadar je splošni lik v določenem razredu podoben posebnemu liku v višjesimetrijskih razredih (tetragonalna piramida).

Za določitev pravega simetrijskega razreda si pomagamo s sledečimi testi:

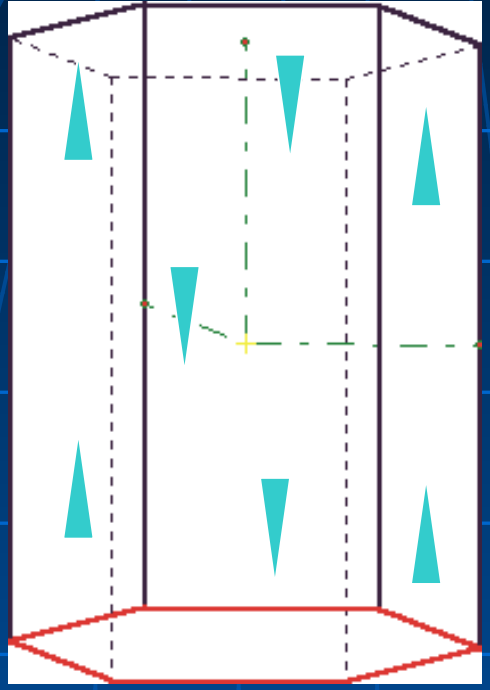
Jedkanje

Če kristal prekrijemo s tekočino v kateri je topen, se začne raztapljati v posameznih točkah na kristalnih ploskvah, raztapljanje pa se nadaljuje v različnih smereh različno hitro v odvisnosti od simetrije v kristalu.

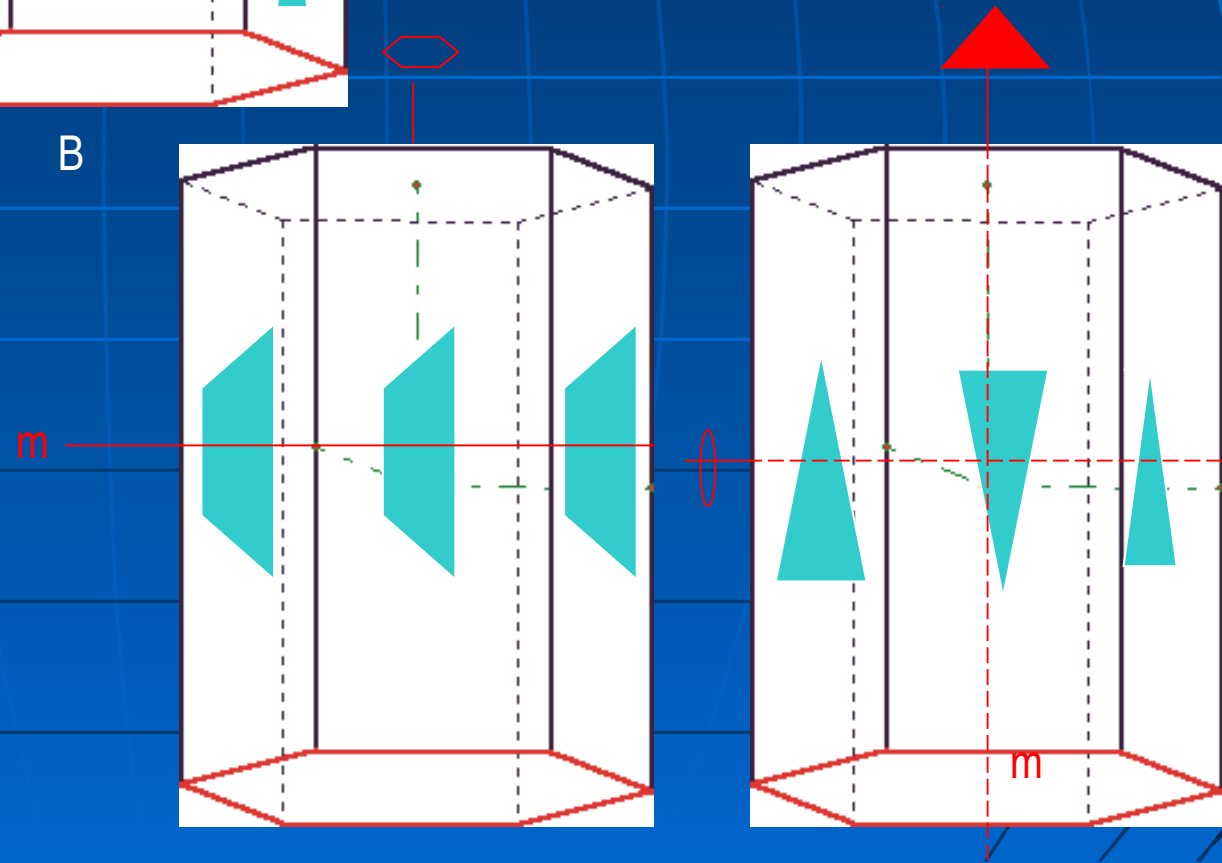
(za jedkanje najpogosteje uporabljamo: vodo, razredčene kisline, aceton, alkohol, benzen, ogljikov disulfid,..)



A



B



A – apatit (6/m)

B – kalcit ($\bar{3}2/m$), jedkana s HCl.

Test piroelektričnosti in piezoelektričnosti za ugotavljanje centra simetrije

Kristalografska smer [uvw] v kristalu je nepolarna, kadar je s simetrijskimi elementi povezana z diametralno nasprotno smerjo

$[\bar{u}\,\bar{v}\,\bar{w}]$.

Kadar simetrijski elementi take povezave ne pogojujejo, je smer polarna.

Kadar je kristal segrevan in ohlajan ali izpostavljen neposrednemu pritisku, se lahko pozitivno nabiti ioni v kristalu rahlo premaknejo glede na negativne ione.

Za nepolarno smer [uvw] je ta premik enak kot za njeno nasprotno

smer $[\bar{u}\,\bar{v}\,\bar{w}]$.

Za polarno smer [uvw] take izenačitve naboja v nasprotni smeri ni, zato lahko kristal razvije na nasprotnih koncih smeri statični električni naboj nasprotnega predznaka,

po segrevanju in ohlajanju (piroelektričnost)

ali naraščanju in popuščanju tlaka (piezoelektričnost).

Če sta efekta piro- in piezoelektričnosti močna, lahko prisotnost polarnih osi in s tem necentrosimetričnost dokažemo s Kundt-ovo metodo:
(fino uprašena mešanica:

Pb_3O_4 –pozitivni naboj in

žveplo – negativni naboj, presejana skozi fino sito) .