

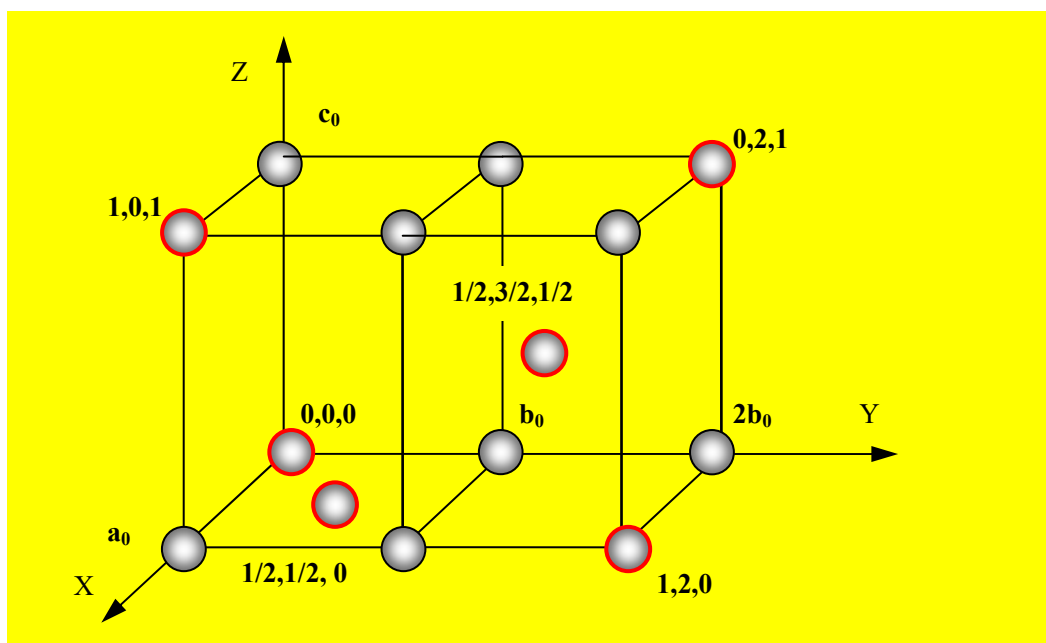
Podstawowe pojęcia opisujące sieć przestrzenną

Cel ćwiczenia: kształtowanie umiejętności posługiwania się modelami sieci przestrzennych w celu określania współrzędnych węzłów, symboli kierunków oraz wskaźników płaszczyzn sieci.

Pomoce naukowe: modele komórek elementarnych: wolframu, magnezu, fluorytu, perowskitu, rutylu; model sieci przestrzennej chlorku sodu, grafitu, diamentu.

Część teoretyczna:

Ustalaniu położenia atomów w ciele krystalicznym służą modele matematyczne, w których atomy lub ich ugrupowania czyli jony i cząsteczki są przedstawiane jako punkty (**węzły**). **Sieć przestrzenna** stanowi zbiór takich punktów, które powtarzają się regularnie w trzech wymiarach przestrzeni. **Sieć krystaliczna** jest rzeczywistym odpowiednikiem sieci przestrzennej i składa się z realnych elementów budujących kryształ. Zewnętrzny kształt kryształu jest odzwierciedleniem jego budowy wewnętrznej. Krawędzie kryształu w sieci przestrzennej odpowiadają prostym sieciowym natomiast ściany płaszczyznom sieciowym.



Rys. 1. Współrzędne wybranych węzłów w sieci przestrzennej

Jednostkami pomiarowymi określającymi **współrzędne węzła** są jednostki osiowe a_0 , b_0 , c_0 odpowiednio wzdłuż osi X, Y, Z (Rysunek 1). Jeśli jeden z węzłów wybierzemy za początek

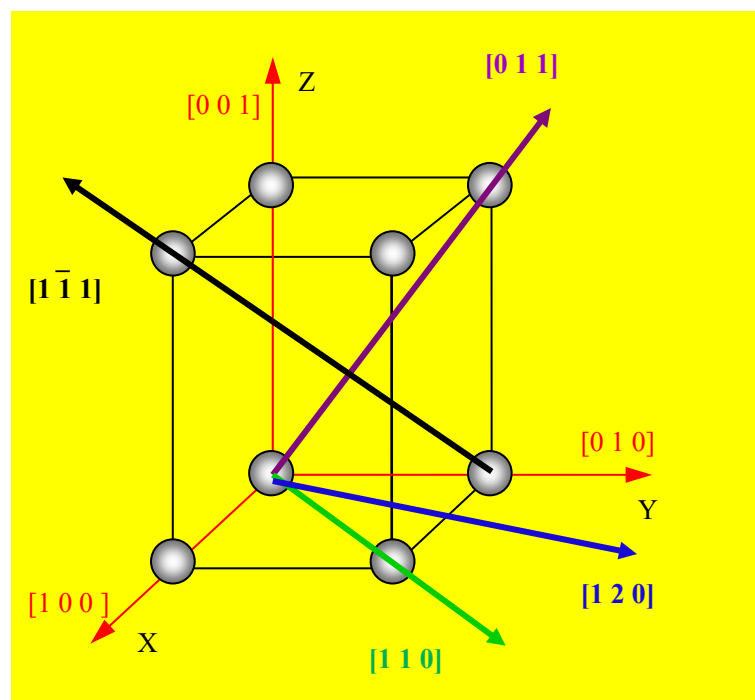
układu współrzędnych, to odległość od początku układu do dowolnego węzła sieci może być przedstawiona, jako wektor wypadkowy:

$$R = xa_0 + yb_0 + zc_0,$$

gdzie: x , y , z to liczby numerujące węzły w kierunkach osi współrzędnych, zwane **wskaźnikami węzła (symbolem węzła)**.

Symbole węzłów leżących wewnątrz komórki elementarnej są wyrażone ułamkami jednostek osiowych. Współrzędne ujemne węzłów mają nad odpowiednim wskaźnikiem znak minus.

Wskaźniki kierunków prostych sieciowej w sieci przestrzennej określają *trzy liczby całkowite m , n , p względem siebie pierwsze, które zapisane w nawiasach kwadratowych stanowią symbol prostej sieciowej $[mnp]$* . Wszystkie proste sieciowe równoległe do siebie mają takie same wskaźniki i tworzą tzw. **rodzinę prostych sieciowych**. Każda rodzina prostych sieciowych charakteryzuje się gęstością obsadzenia przez węzły i kierunkiem. Wskaźniki prostej sieciowej przechodzącej przez węzeł 0,0,0 i dany węzeł są takie same, jak wskaźniki danego węzła (Rysunek 2). Wskaźnik dowolnej prostej sieciowej przechodzącej przez dwa węzły leżące na tej prostej otrzymujemy w ten sposób, że odejmujemy od siebie współrzędne tych węzłów, otrzymane liczby sprowadzamy do liczb całkowitych względem siebie pierwszych i zapisujemy w nawiasie kwadratowym. Każdej prostej sieciowej możemy przypisać dwa przeciwne zwroty.



Rys. 2. Położenie wybranych kierunków i ich symbole w komórce elementarnej.

Położenie płaszczyzny sieciowej w sieci przestrzennej określają tzw. **wskaźniki Millera**. **Symbolem Millera płaszczyzny** są trzy liczby całkowite h , k , l , względem siebie pierwsze, ujęte w nawias okrągły (hkl).

Wskaźniki Millera określają, ile razy odcinki odcięte na osiach przez pierwszą z równoległych płaszczyzn, najbliższą początku układu mieszczą się w jednostkach osiowych a_0 , b_0 , c_0 . Płaszczyzna o wskaźnikach (hkl) dzieli krawędź a_0 komórki (wzdłuż osi X) na h części, krawędź b_0 komórki (wzdłuż osi Y) na k części, krawędź c_0 komórki (wzdłuż osi Z) na l części (Rysunek 3). Jeżeli płaszczyzna jest równoległa do danej osi krystalograficznej, wówczas jej wskaźnik wynosi 0.

Płaszczyzna równoległa do osi Z ma wskaźnik (hk0), równoległa do osi X (0kl), równoległa do osi i Y (h0l). Płaszczyzna równoległa do osi X i Y ma wskaźnik (00l).

Jeśli płaszczyzna przecina ujemne zwroty osi, symbol zapisujemy umieszczając znak minus nad danym wskaźnikiem np. ($\bar{1}11$).

Aby wyznaczyć wskaźniki Millera płaszczyzny z pomiarów odcinków odciętych przez nią na osiach krystalograficznych należy (1) podzielić odcinki odcięte przez ścianę jednostkową na każdej osi przez odpowiedni parametr ściany; (2) sprowadzić otrzymane wyniki do liczb całkowitych względem siebie pierwszych; (3) zapisać otrzymane liczby w nawiasie okrągłym.

W przypadku gdy znana jest liczba jednostek osiowych, jakie odcina dana ściana na osiach krystalograficznych wskaźniki Millera wyznaczamy tworząc odwrotności liczb jednostek osiowych, odciętych na osiach X, Y, Z, następnie sprowadzamy uzyskane wartości do liczb całkowitych względem siebie pierwszych i zapisujemy otrzymane liczby w nawiasie okrągłym.

W układzie heksagonalnym ze względu na przyjęte cztery osie współrzędnych występują czterowskaźnikowe symbole płaszczyzn sieciowych tzw. symbole Millera-Bravais'go (**hkil**) oraz czterowskaźnikowe symbole kierunku [**MNOP**]. Wskaźniki h, k, i, l odnoszą się odpowiednio do osi X, Y, U i Z (Rysunek 4). Pomiędzy wskaźnikami ścian zachodzi zależność:

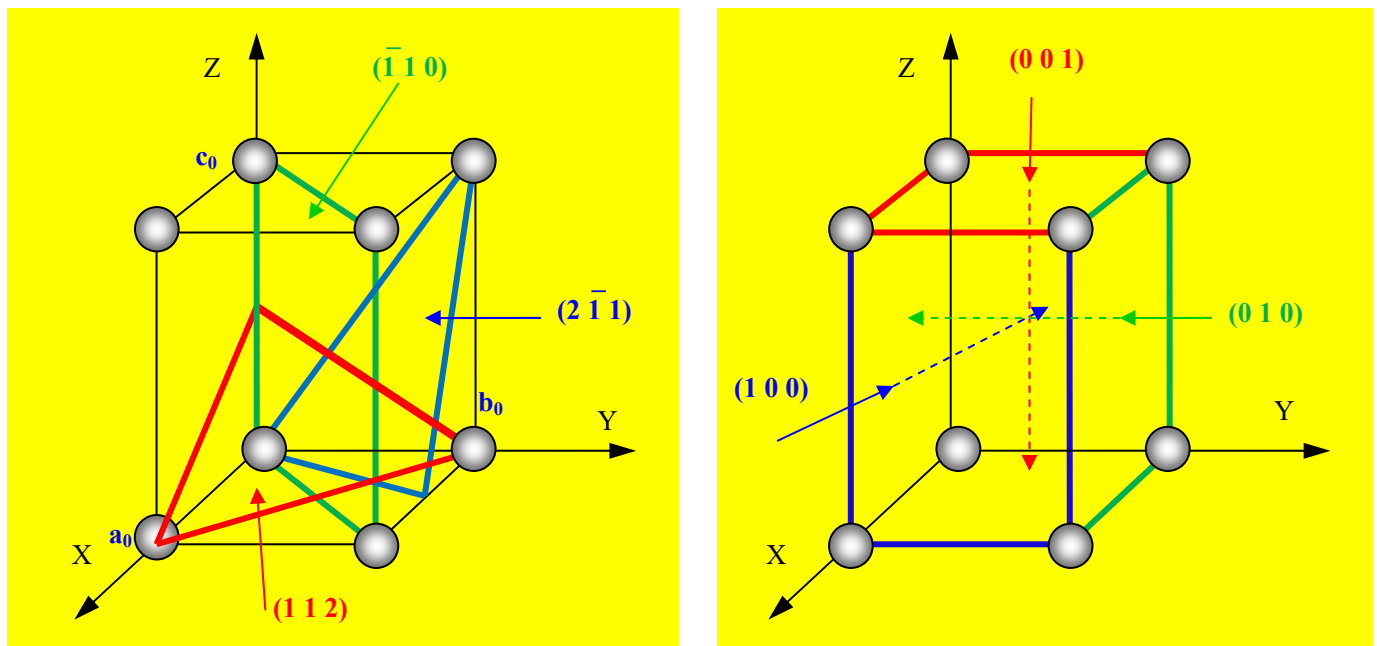
skąd
$$h + k + i = 0$$

$$i = -(h+k)$$

W przypadku symbolu kierunku [**MNOP**] spełnione jest równanie:

skąd
$$M + N + O = 0$$

$$O = -(M + N)$$



Rys. 3. Położenie wybranych płaszczyzn sieciowych w komórce elementarnej

Wykonanie ćwiczeń:

Ćwiczenie 1

Korzystając z modeli komórek elementarnych wolframu, diamentu, magnezu, fluorytu, perowskitu, rutylu podać współrzędne węzłów w nich występujące.

Ćwiczenie 2

Zapoznać się z modelem sieci przestrzennej NaCl, wyznaczyć sześć dowolnych prostych sieciowych i podać ich symbole.

Ćwiczenie 3

Wskazać w wybranej komórce elementarnej płaszczyzny Millera o symbolach: (111), (001), (100), (010), (110), (221), ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}0$).

Zadania

Zadanie 1

Student poprowadził prostą sieciową przez węzły A i B o współrzędnych:

- dla węzła A: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
- dla węzła B: $\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}$

Podać symbol prostej sieciowej A-B i B-A

Zadanie 2

Wiedząc, że płaszczyzny M i P odcinają na osiach krystalograficznych X, Y i Z odcinki, wyrażone w jednostkach osiowych:

- Płaszczyzna M: $\frac{2}{3} a_0, \frac{1}{3} b_0, \frac{1}{6} c_0$
- Płaszczyzna P: $\frac{1}{4} a_0, \frac{1}{2} b_0, \infty c_0$

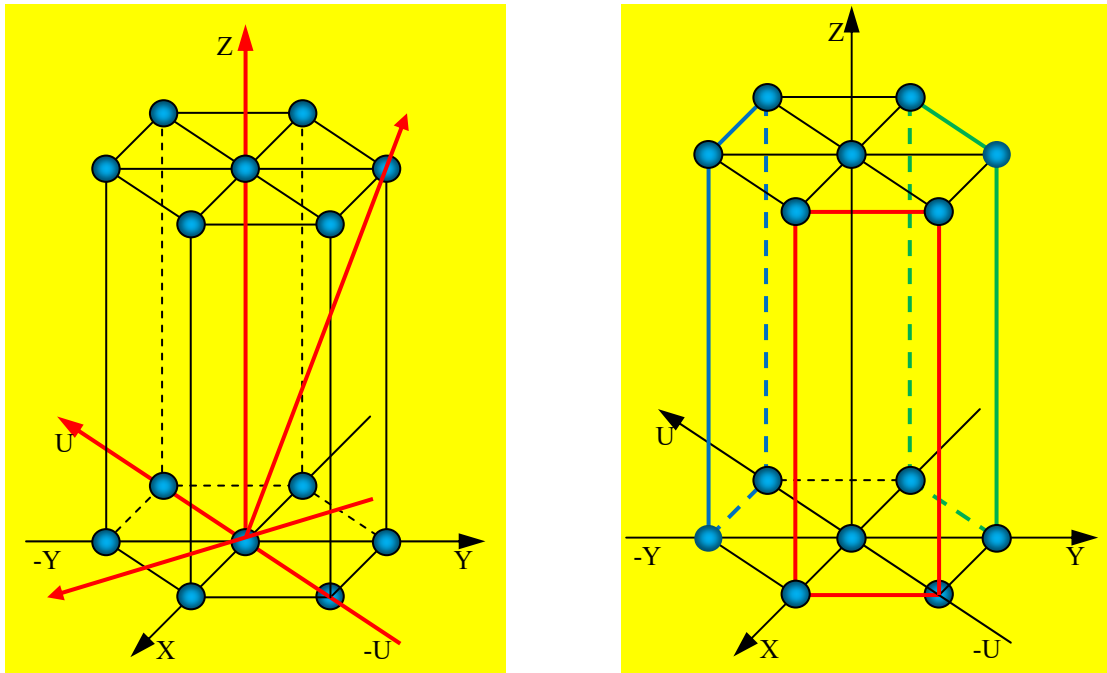
Opisać płaszczyzny M i P symbolami Millera.

Zadanie 3

Parametry komórki elementarnej kryształu rombowego wynoszą $a_0=12,5\text{Å}$, $b_0=10,4\text{Å}$ i $c_0=8,2\text{Å}$. Płaszczyzna A przecina się z osiami krystalograficznymi X, Y i Z odpowiednio w punktach $6,25\text{Å}$, $2,6\text{Å}$ i $4,1\text{Å}$. Wyznaczyć millerowski symbol tej płaszczyzny.

Zadanie 4

W przedstawionej komórce heksagonalnej opisać zaznaczone kierunki za pomocą czterowskaźnikowych symboli [MNOP] oraz opisać zaznaczone kolorem ściany symbolami Millera-Bravais'go (hkil).



Rys. 4. Zaznaczone kierunki i płaszczyzny sieciowe w komórce heksagonalnej.

Literatura:

1. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż i M. Surowiec, *Krystalografia. Podręcznik wspomagany komputerowo*, PWN, Warszawa 2001.
2. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż i M. Surowiec, *Krystalografia*, PWN, Warszawa 2007.
3. Z. Kosturkiewicz, *Metody krystalografii*, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2004.
4. Z. Trzaska-Durski i H. Trzaska-Durska, *Podstawy krystalografii*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2003.