Uniwersytet Śląski – Instytut Chemii – Zakład Krystalografii

Laboratorium z Krystalografii

2 godz.

Rodzina i pas płaszczyzn sieciowych

Cel ćwiczenia: kształtowanie umiejętności posługiwania się modelami komórek elementarnych i sieci przestrzennych w celu wyznaczania zbioru płaszczyzn należących do wspólnego pasa. Nabywanie umiejętności obliczania w oparciu o prawo pasowe symboli płaszczyzn sieciowych i prostych sieciowych oraz w oparciu o równania kwadratowe odległości międzypłaszczyznowych dla wybranych rodzin płaszczyzn sieciowych.
Pomoce naukowe: modele komórek elementarnych; model sieci przestrzennej chlorku sodu.

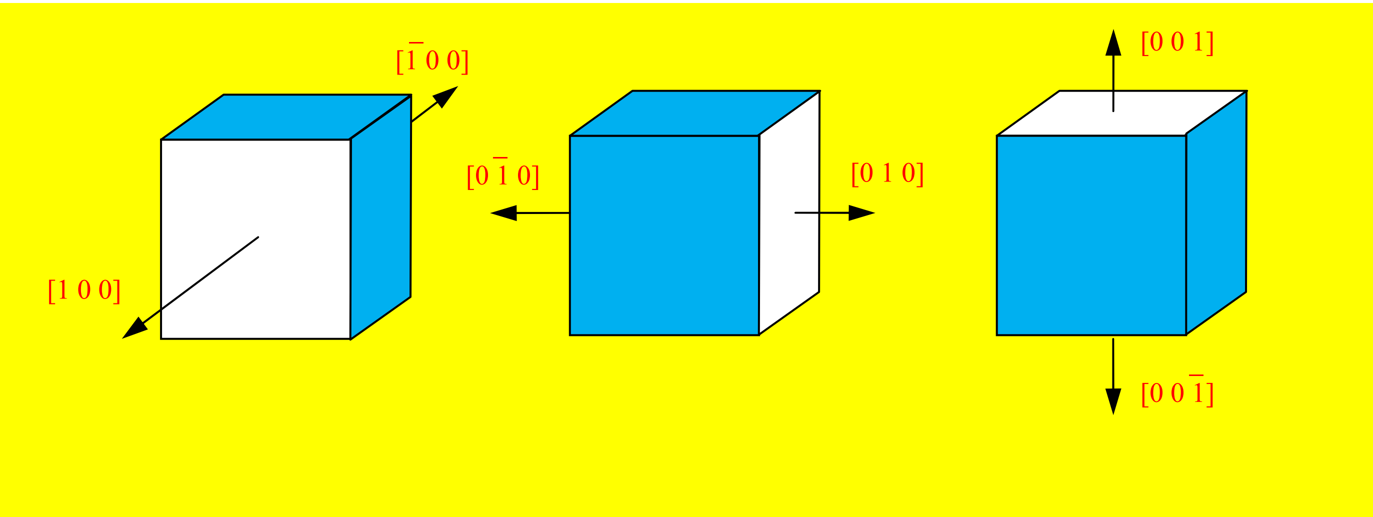
Część teoretyczna:

Zbiór płaszczyzn sieciowych równoległych do jednej prostej sieciowej (kierunku) nazywamy **pasem płaszczyzn sieciowych** *(pasem krystalograficznym)*. Prosta sieciowa w której przecinają się płaszczyzny sieciowe jest **osią tego pasa**, a jej symbol **[mnp]** jest nazwany **symbolem pasa.**
Prawo pasowe Weissa *mówi, że* ***każda ściana kryształu należy przynajmniej do dwóch pasów****, położenie każdej ze ścian jest określone przez dwie osie pasów do których ona należy.*
O tym, czy dana ściana o symbolu (hkl) należy do osi pasa [mnp] decyduje równanie pasowe:

$$\mathbf{h\,m + k\,n + l\,p = 0}$$

Prosta [mnp] należy do dwóch płaszczyzn o wskaźnikach (h_1 k_1 l_1) i (h_2 k_2 l_2), czyli jest krawędzią ich przecięcia i osią pasa jeżeli spełnia równocześnie dwa równania pasowe:

$$\mathbf{h_1\,m + k_1\,n + l_1\,p = 0 \qquad h_2\,m + k_2\,n + l_2\,p = 0}$$



Rys. 1. Pasy ścian w sześcianie

Znając wskaźniki przecinających się dwóch płaszczyzn sieciowych ($h_1k_1l_1$) i ($h_2k_2l_2$) możemy wyznaczyć kierunek osi pasa [mnp], do którego należą ściany o tych wskaźnikach. Praktyczne obliczenia przeprowadza się według schematu:

1. Należy napisać dwukrotnie, w jednym wierszu wskaźniki pierwszej płaszczyzny $h_1k_1l_1$, a pod spodem, w taki sam sposób wskaźniki drugiej płaszczyzny $h_2k_2l_2$.
2. Odrzucamy z każdego wiersza pierwszy i ostatni wskaźnik. Z pozostałych wskaźników tworzymy iloczyny (mnożenie wykonujemy zgodnie z kierunkiem strzałek) i ich odpowiednie różnice, których wartości są równe wskaźnikom kierunku m, n, p.

$$
\begin{array}{c|cccc|c}
h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\
 & & & & & \\
h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \\
\hline
 & \multicolumn{4}{c|}{[mnp]} &
\end{array}
$$

$$\mathbf{m} = k_1\, l_2 - k_2\, l_1$$
$$\mathbf{n} = l_1\, h_2 - l_2\, h_1$$
$$\mathbf{p} = h_1\, k_2 - h_2\, k_1$$

Symbol płaszczyzny (hkl) należącej do dwóch pasów o osiach [$m_1n_1p_1$] i [$m_2n_2p_2$] obliczamy podobnie, jak w powyższym schemacie.

$$
\begin{array}{c|cccc|c}
m_1 & n_1 & p_1 & m_1 & n_1 & p_1 \\
 & & & & & \\
m_2 & n_2 & p_2 & m_2 & n_2 & p_2 \\
\hline
 & \multicolumn{4}{c|}{(hkl)} &
\end{array}
$$

$$\mathbf{h} = n_1\, p_2 - n_2\, p_1$$
$$\mathbf{k} = p_1\, m_2 - p_2\, m_1$$
$$\mathbf{l} = m_1\, n_2 - m_2\, n_1$$

Trzy ściany o symbolach ($h_1k_1l_1$) ($h_2k_2l_2$) ($h_3k_3l_3$) są równoległe do tej samej osi pasa, jeżeli wyznacznik utworzony z ich wskaźników <u>jest równy zeru</u>.

Odległość międzypłaszczyznowa d $_{\mathbf{hkl}}$ jest to odległość między sąsiednimi płaszczyznami w zbiorze równoległych płaszczyzn sieciowych (Rys. 2). Znając parametry sieci przestrzennej możemy przeprowadzić obliczenia odległości międzypłaszczyznowych dla dowolnej rodziny płaszczyzn sieciowych o wskaźnikach (hkl) korzystając ***tzw. równań kwadratowych.***

Równania kwadratowe są charakterystyczne dla każdego układu krystalograficznego w przypadku układu trójskośnego o najniższej symetrii równanie ma postać:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{A}{v^2}$$

gdzie:

$$A = [h^2 b_0^2 c_0^2 \sin^2\alpha + k^2 a_0^2 c_0^2 \sin^2\beta + l^2 a_0^2 b_0^2 \sin^2\gamma + 2hla_0 b_0^2 c_0(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta) + 2hkb_0 c_0^2(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) + 2kla_0^2 b_0 c_0(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha)]$$

V – objętość komórki elementarnej

W przypadku pozostałych układów krystalograficznych równania kwadratowe mają postać:

Układ regularny:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2+k^2+l^2}{a_0^2}$$

Układ tetragonalny:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2+k^2}{a_0^2} + \frac{l^2}{c_o^2}$$

Układ rombowy:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a_0^2} + \frac{k^2}{b_0^2} + \frac{l^2}{c_0^2}$$

Układ heksagonalny:

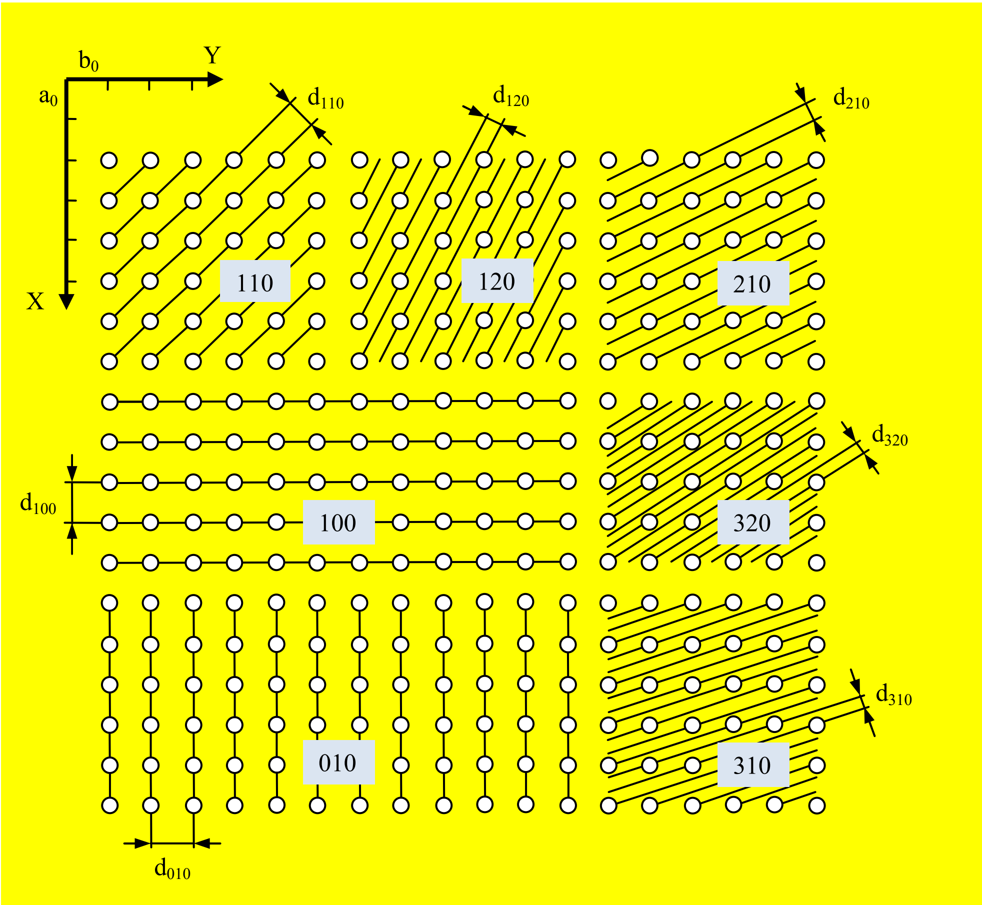
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3a_0^2}(h^2 + k^2 + hk) + \frac{l^2}{c_o^2}$$

Trygonalny:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{1}{a_0^2}\frac{(h^2+k^2+l^2)sin^2\alpha + 2(hk+hl+kl)(cos^2\alpha - cos\alpha)}{1+2cos^3\alpha - 3cos^2\alpha}$$

Jednoskośny:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a_0^2 sin^2\beta} + \frac{k^2}{b_o^2} + \frac{l^2}{c_0^2\, sin^2\beta} - \frac{2hlcos\beta}{a_0 c_0 sin^2\beta}$$



Rys. 2. Rodziny płaszczyzn sieciowych (hk0) i ich odległości międzypłaszczyznowe d_{hk0} w rzucie na płaszczyznę (001).

<u>Wykonanie ćwiczenia:</u>

Ćwiczenie 1
Korzystając z rysunku 2 przedstawiającego rzut sieci regularnej na płaszczyznę (001) z zaznaczonymi odległościami międzypłaszczyznowymi rodziny płaszczyzn (hk0) określić zależności pomiędzy odległościami międzypłaszczyznowymi, gęstością obsadzenia węzłami a wskaźnikami hkl.

Ćwiczenie 2
Korzystając z modelu sieci przestrzennej NaCl wskazać rodzinę płaszczyzn sieciowych należących do wspólnego pasa [001], [010], [100].

Ćwiczenie 3
Narysować fragment sieci prymitywnej, przestrzennie centrowanej i ściennie centrowanej dla układu rombowego. Określić rodziny płaszczyzn sieciowych o największych odstępach międzypłaszczyznowych. Podać ich wskaźniki Millera.

Zadania

Zadanie 1
Podać symbol prostej sieciowej, w której przecinają się płaszczyzny sieciowe $(3\bar{2}\bar{1})$ i $(\bar{2}11)$

Zadanie 2
Ściana kryształu należy równocześnie do dwóch pasów, ich osie są określone symbolami $[\bar{1}01]$ i $[\bar{1}20]$. Obliczyć wskaźniki Millera tej ściany.

Zadanie 3
Obliczyć wskaźniki *(hkl)* płaszczyzny należącej równocześnie do pasów o osiach [210] i [001]. Wskazać równaniem pasowym, że płaszczyzna ta może należeć również do pasa, którego osią jest prosta [211].

Zadanie 4
Jeżeli płaszczyzny o symbolach (412), (211) i (201) należą do wspólnego pasa, wyznaczyć symbol osi tego pasa.

Zadanie 5
Jaką płaszczyznę sieciowa wyznaczają proste sieciowe [120] i [001]. Rozwiązanie przedstawić na perspektywicznym rysunku komórki elementarnej;

Zadanie 6
Określić wskaźniki Millera płaszczyzny, która przechodzi przez punkty A, B i C o współrzędnych **A:** 1, ½, 0; **B:** ¾, 0, 0; **C:** 1, 0, ½. Rozwiązanie przedstawić na perspektywicznym rysunku komórki elementarnej.

Zadanie 7
Określić symbol Millera płaszczyzny przechodzącej przez prostą sieciową [001] i prostą sieciową, w której przecinają się płaszczyzny [(211)/(001)]. Wykonać obliczenia i rozwiązanie przedstawić graficznie.

Zadanie 8
Parametr sieciowy regularnej komórki krystalicznej AgBr wynosi a_0 = 5.7745 Å. Obliczyć odległość międzypłaszczyznową d_{hkl} dla rodziny płaszczyzn sieciowych: (200); (220); (331).

Zadanie 9
Obliczyć odległość międzypłaszczyznową d_{101} w heksagonalnej sieci krystalicznej selenu, wiedząc iż parametry sieciowe a_0 = 4.3662 Å i c_0 = 4.9536 Å.

Literatura:

1. Z. Kosturkiewicz, *Metody krystalografii*, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2004.
2. Z. Trzaska-Durski i H. Trzaska-Durska, *Podstawy krystalografii,* Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2003.
3. Z. Trzaska-Durski i H. Trzaska-Durska, *Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej*, PWN, Warszawa 1994.
4. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż i M. Surowiec, *Krystalografia. Podręcznik wspomagany komputerowo*, PWN, Warszawa 2001.
5. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż i M. Surowiec, *Krystalografia,* PWN, Warszawa 2007.