

## Laboratorium z Krystalografii

2 godz.

### Komórki Bravais'go

**Cel ćwiczenia:** kształtowanie umiejętności: przyporządkowywania komórek translacyjnych Bravais'go do poszczególnych układów krystalograficznych, wyznaczania bazy komórek oraz korzystania z podstawowych zależności geometrycznych mających na celu obliczenia odległości międzyatomowych w poszczególnych typach komórek oraz wyznaczania gęstość wybranych kryształów.

**Pomoce naukowe:** modele komórek translacyjnych; modele komórek elementarnych: diamentu i fluorytu; model sieci przestrzennej NaCl.

#### Wstęp teoretyczny

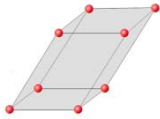
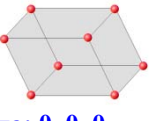
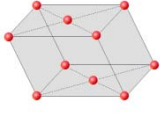
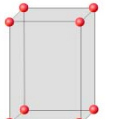
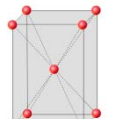
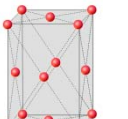
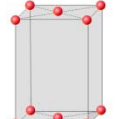
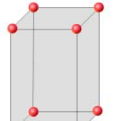
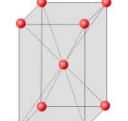
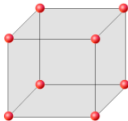
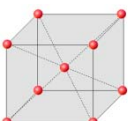
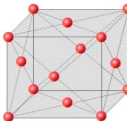
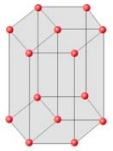
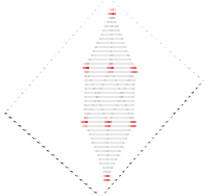
Sieć translacyjna Bravais'go określa charakter okresowego uporządkowania w przestrzeni powtarzających się elementów strukturalnych kryształu. Stanowi nieskończony zbiór punktów przestrzeni uporządkowanych w ten sposób, że przy obserwacji układu z dowolnego należącego doń punktu wzajemne rozmieszczenie punktów układu i jego orientacja są zawsze takie same.

Biorąc pod uwagę możliwe centrowanie komórki elementarnej, w przestrzeni trójwymiarowej jest możliwych tylko 14 typów translacyjnych sieci przestrzennych zwanych sieciami Bravais'go. Każdy z 14 typów sieci przestrzennych Bravais'go ma swoją charakterystyczną komórkę elementarną, która ze względu na parametry sieci przestrzennej jest podporządkowana jednemu z 7 układów krystalograficznych (Tablica 1).

Komórki elementarne mogą zawierać węzły tylko w narożach, zawierać dodatkowe węzły w środku geometrycznym, na środkach dwóch przeciwległych ścian lub na środkach wszystkich ścian. Komórki zawierające węzły tylko w narożach nazywamy prymitywnymi, natomiast komórki z dodatkowymi węzłami komórkami złożonymi.

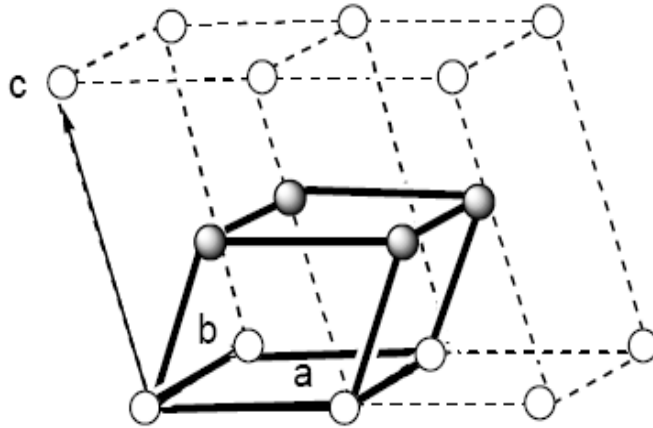
Jeżeli węzeł występuje w środku geometrycznym komórki wówczas komórkę tą nazywamy wewnątrznie (przestrzennie) centrowaną i oznaczamy symbolem **I**. Jeżeli dodatkowe węzły występują na środkach wszystkich ścian komórki nazywamy ją przestrzennie centrowaną i oznaczamy literą **F**. Komórki o centrowanych dwóch przeciwległych ścianach (001) oznaczamy literą **C**, natomiast komórki o centrowanych dwóch przeciwległych ścianach (100) i (010) oznaczamy odpowiednio literami **A i B**.

**Tablica 1.** Typy komórek Bravais'go w poszczególnych układach

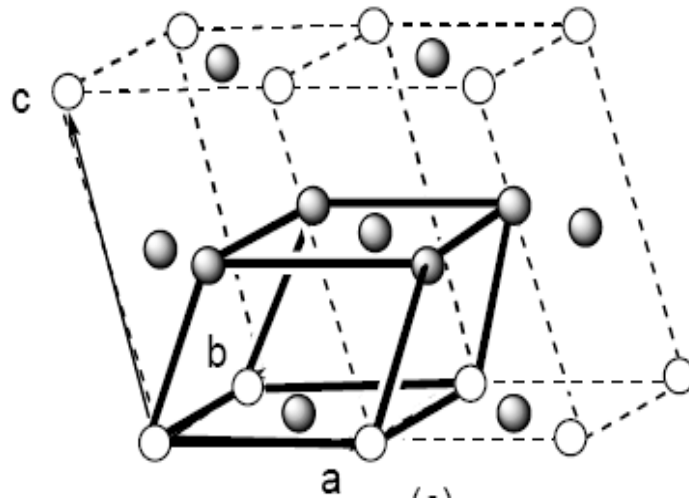
Układ krystalograficzny	Prymitywna P	Wewnętrznie centrowana I	Przestrzennie Centrowana F	Centrowana na podstawach C (001)
Trójskośny	 baza: 0, 0, 0			
Jednoskośny	 baza: 0, 0, 0			 baza: 0, 0, 0 $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
Rombowy	 baza: 0, 0, 0	 baza: 0, 0, 0; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	 baza: 0, 0, 0; 0, $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ ; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	 baza: 0, 0, 0; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
Tetragonalny	 baza: 0, 0, 0	 baza: 0, 0, 0; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		
Regularny	 baza: 0, 0, 0	 baza: 0, 0, 0; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	 baza: 0, 0, 0; 0, $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ ; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	
Heksagonalny z trygonalnym	 baza: 0, 0, 0			
Romboedryczny	 baza: 0, 0, 0			

**Baza komórki** – współrzędne węzłów komórki elementarnej.

We wszystkich układach krystalograficznych występują komórki prymitywne (P). Tylko w układzie rombowym występują wszystkie typy sieci brawesowskich, w pozostałych obok sieci prymitywnej występują jedna lub dwie sieci centrowane. Powodem jest możliwość sprowadzania sieci centrowanych do prymitywnej (o najmniejszej objętości) lub sieci centrowanej w inny sposób.



**Rys. 1.** Przekształcenie komórki jednoskośnej typu *B* (010) w komórkę typu *P*.



**Rys. 2.** Przekształcenie komórki jednoskośnej z typu *F* w komórkę typu *C*.

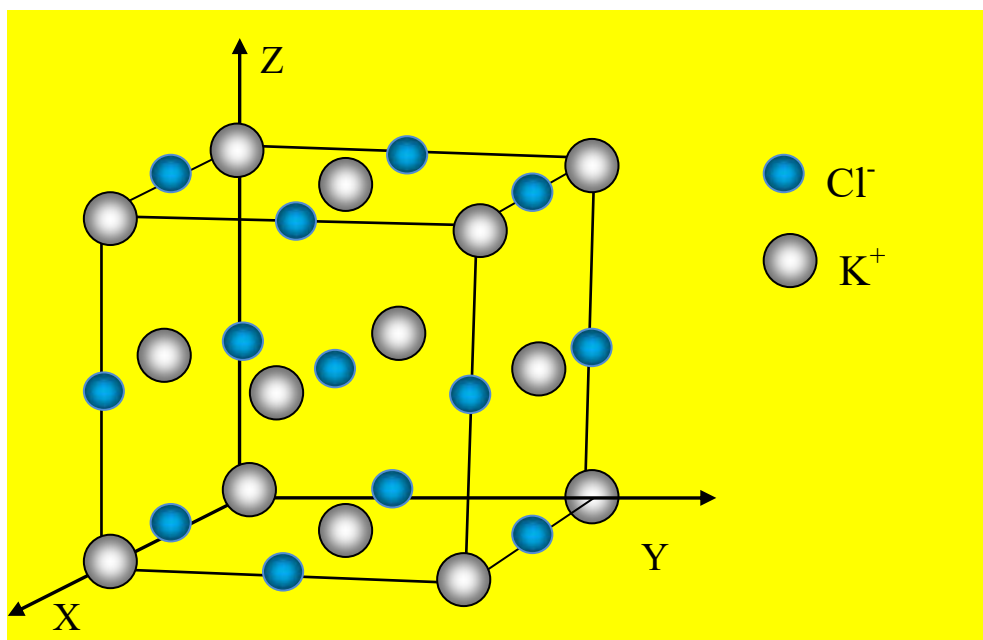
**Gęstość kryształu** - w odniesieniu do jednej komórki elementarnej gęstość kryształu określa zależność:

$$d = \frac{Z m}{N_A V}$$

gdzie:  $Z$  – liczba cząsteczek (atomów) w komórce elementarnej,  $m$  - masa molowa,  $V$  – objętość komórki elementarnej,  $N_A$  – liczba Avogadro ( $6,023 \cdot 10^{23}$  molekuł/mol)

### Przykład

Obliczyć gęstość kryształu KCl



$Z = 4$  dla K<sup>+</sup> i 4 dla Cl<sup>-</sup>

$V = a^3$  (układ regularny) dla KCl  $a = 6.293 \text{ \AA}$  ( $6,293 \times 10^{-8} \text{ cm}$ )

$$d = \frac{Z(m_K + m_{Cl})}{N_A V}$$

$$d = \frac{(4 \times 39,1 \frac{g}{mol} + 4 \times 35,5 \frac{g}{mol})}{[6,023 \times 10^{23} mol^{-1} \times (6,293 \times 10^{-8} \text{ cm})^3]} = 1,988 \text{ g/cm}^3$$

## **Wykonanie ćwiczeń:**

### **Ćwiczenie 1**

Przyporządkować podane modele komórek translacyjnych Bravais'go do poszczególnych układów krystalograficznych.

### **Ćwiczenie 2**

Korzystając z modeli komórek translacyjnych podać liczbę węzłów przypadających na jedną komórkę oraz wyznaczyć bazę komórki.

### **Ćwiczenie 3**

Korzystając z modeli komórek translacyjnych wykazać, że w układzie regularnym nie występują komórki typu *C*, a w układzie jednoskośnym nie mogą występować komórki typu *F* i typu *I*.

### **Ćwiczenie 4**

Korzystając z modelu komórki elementarnej diamentu i grafitu oznaczyć gęstość teoretyczną obu odmian alotropowych węgla.

### **Ćwiczenie 5**

Posługując się modelem sieci przestrzennej NaCl, podać typ komórki translacyjnej tego związku i wyznaczyć gęstość kryształu. Parametr sieci NaCl wynosi  $a_0 = 5,6402 \text{ \AA}$

### **Ćwiczenie 7**

Korzystając z modelu fluorytu, znając gęstość kryształu  $\text{CaF}_2$   $\rho = 3,184 \text{ g/cm}^3$ , obliczyć parametr sieci  $a_0$ .

---

## ***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.