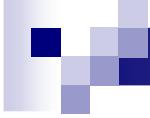


Fizika čvrstog stanja

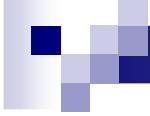
Uvodno predavanje

- Predmet proučavanja
- Amorfna i kristalna čvrsta tijela
- Osnove kristalografske (idealni kristal, Bravaisove rešetke, operacije simetrije, Millerovi indeksi)



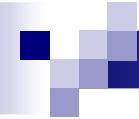
Šta je fizika čvrstog stanja?

- Fizika čvrstog stanja je grana fizike čiji početak leži u kristalografiji, ali je s obzirom na veliki razvoj u ovom području i veliku "disperziju" (ova grana fizike, pored ostalog, bavi se poluvodičima, supravodljivošću, opisom amorfnih materijala, stakla, uz primjena kvantne i statističke fizike) umjesto kristalografije prihvaćen pogodniji naziv.
- **Fizika čvrstog stanja (FČS)** – obuhvaća fiziku čvrstih (krutih) kondenziranih tvari (materije)
- **Fizika kondenzirane materije-** nešto općenitija grana fizike koja se bavi i krutim i tekućim odnosno mekanim stvarima



Šta je čvrsto tijelo?

- **Čvrsto tijelo-** sastoji se od ogromnog broja struktturnih elemenata koje međusobno tjesno upakovane drži određeni tip veze u čijoj je osnovi kulonovska interakcija atomskih jona i elektrona.
- Strukturni elemenat- jedan atom, grupa atoma jedne ili više različitih elemenata

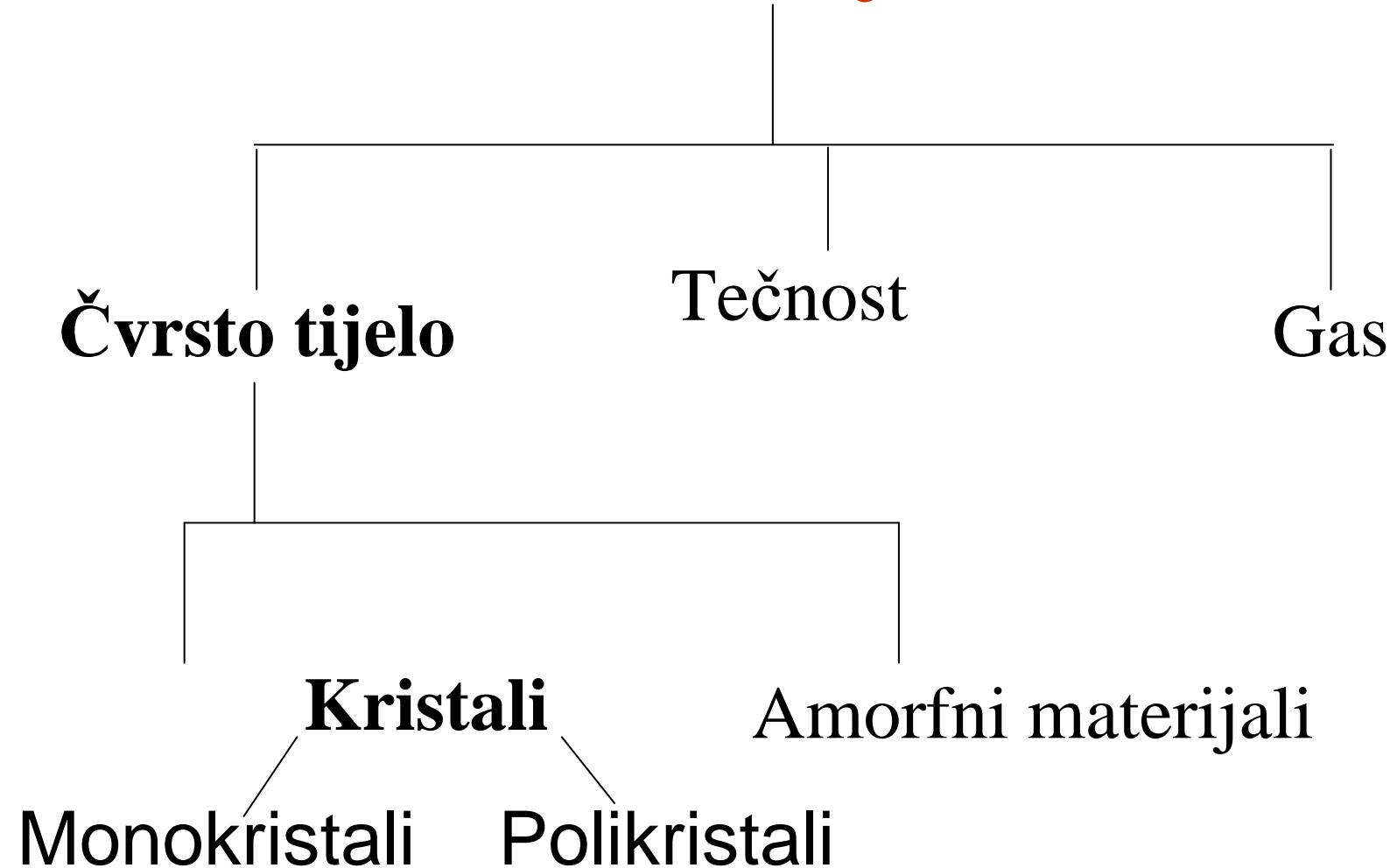


Šta je fizika čvrstog stanja?

- Dosadašnja fizika- tretira pojedinačne atome, molekule tj. čestice
- FČS- tretira mnoštvo čestica koje su u interakciji u čvrstom tijelu
- Problem mnoštva čestica- služimo se konceptima statističke fizike i fizike mnoštva čestica
- Čestice u ČT su u interakciji i od njih zavise osobine ČT kao npr: mehaničke (tvrdoća i elastičnost), termalne, električne, magnetne i optičke



Materija



- Davno su u prirodi uočeni prekrasni simetrični oblici mnogih minerala (nazvanih kristalima)
- Ukazivali su na pravilno unutrašnje uređenje iako su detalji bili nepoznati
- Isti mineral- uvijek isti geometrijski oblik bez obzira ne veličinu i nalazište
- Pravilnost u pojavljivanju i obliku uvjerila je istraživače da su kristali obrazovani od identičnih izgračivačkih dijelova koji se pravilno ponavljaju



kalcit



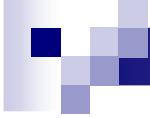
kvarz



topaz



ametist



Kristali

- Većina tvari koje se pojavljuju u prirodi u čvrstom stanju su kristali.
- **Osnovno svojstvo kristala je pravilnost rasporeda strukturnih elemenata u simetričnu trodimenzionalnu formu koja se periodično ponavlja u prostoru.**
- **Idealan kristal-** obrazuje se beskonačnim pravilnim ponavljanjem u prostoru identične strukturne forme. Kaže se da posjeduje dugodosežno uređenje
- **Amorfni materijali (amorfno-bez oblika)-** čvrsta tijela koja nemaju pravilan dugodosežni raspored čestica kao što je slučaj u kristalu. Odlikuje ih kratkodosežna uređenost



Kristali i amorfna tijela

- Kristali:

metali(bakar, željezo...)

Šećer (kristalni) i kuhinjska so

Dijamanti i dragi kamenje

Kristali i iminerali

Pahulje snijega, led

- Amorfna tijela:

obično staklo

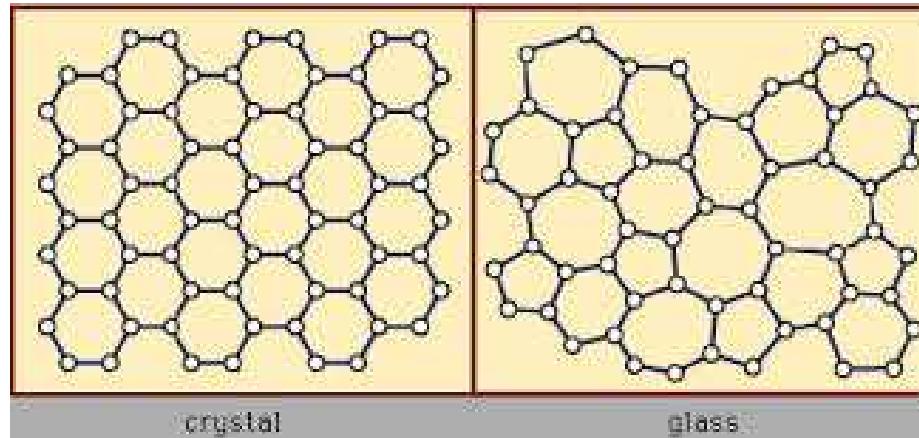
plastike i ostali polimeri

smole, guma

med

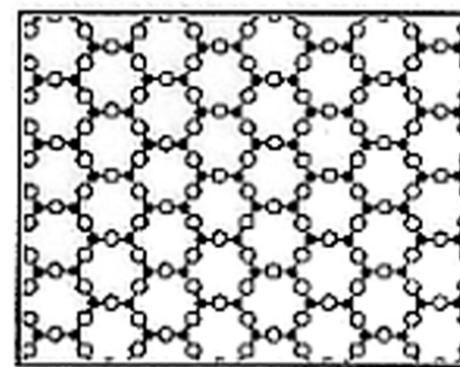
- Razlika: kristali se odlikuju visokim stepenom regularnosti svoje strukture

Dugodosežno vs. kratkodosežno uređenje

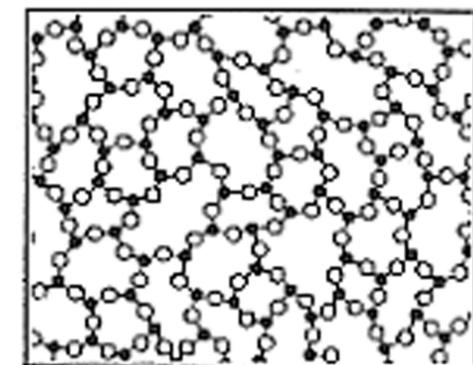


Kratkodosežno uređenje-

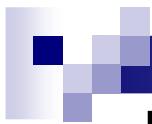
Sa porastom rastojanja od neke čestice uređenost rasporeda ostalih čestica prestaje



quartz



glass



Uređenje

- Plinovi- nema uređenja (no order)
- Tekućine, amorfna tijela kratkodosežno uređenje (short range order)- samo na malim rastojanjima
- Kristali dugodosežno uređenje (long range order)

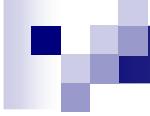
Analogija tečnosti i amorfnih tijela

-Ultrabrzim hlađenjem nekih tečnosti vjerovatnoća nastanka amorfног tijela je veća nego nastanka kristala

-Metastabilno stanje- zamrznuta tekućina

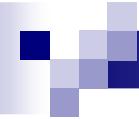
-Amorfna tijela- nemaju tačno određenu tačku topljenja, zagrijavanjem postepeno razmekšavaju, viskoznost im se smanjuje i ponašaju se poput tečnosti- posljedica nedostatka dugodosežne uređenosti

Tokom vremena mogu kristalizirati



Svojstvo anizotropije kristala

- Kristali pokazuju svojstvo anizotropije- zavisnost veličine ,neke fizičke osobine (mehaničke, toplotne, električne...) od pravca posmatranja
- Anizotropija se ne mora iskazivati u svim svojstvima kristala, npr. kristal može biti mehanički izotropan, a električki anizotropan
- Zbog nedovoljne mikroskopske pravilnosti amorfnih tijela i tekućina u njima će razmještaj čestica prema svim smjerovima biti podjednako nepravilan. U tim tijelima ne postoji istaknuti smjerovi promatranja.
- To vrijedi takođe i za gasove zbog haotičnog rasporeda molekula



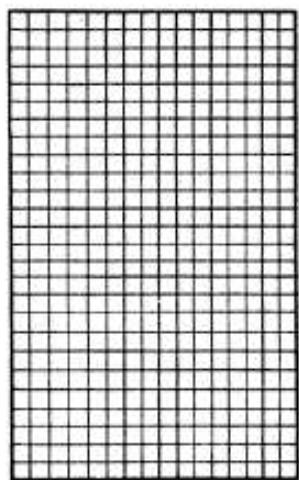
Šta je kristalno, a šta amorfno tijelo?

- Šta su kristali, a šta amorfni materijali?
- Da li možemo zaključiti na osnovu vanjskog izgleda?
- Uglavnom ne
- Trebamo poznavati strukturu materijala što je bilo omogućeno otkrićem X- zraka i primjenom difrakcije X-zraka na kristale o čemu će biti govora kasnije

Kristalna rešetka i kristalna struktura

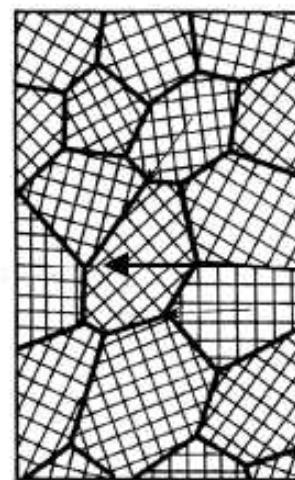
- Model- **idealni kristal**- zamišljamo kao prostornu tvorevinu dobivenu beskonačnim ponavljanjem jednakih strukturnih jedinica
- Kristali su građeni od manjih strukturnih jedinica pravilno raspoređenih u 3D mrežu ili kristalnu rešetku
- **Idealan kristal ne može postojati**- prisustvo defekata i sama njegova površina (ne može biti beskonačan)
- U svakoj strukturnoj jedinici se nalazi jedan atom ili više njih, ili čak molekule ili grupe molekula
- Fundamentalno svojstvo kristala- translaciona invarijantnost koja ima veliki uticaj na sva važna svojstva kristala

Kristali



(a)

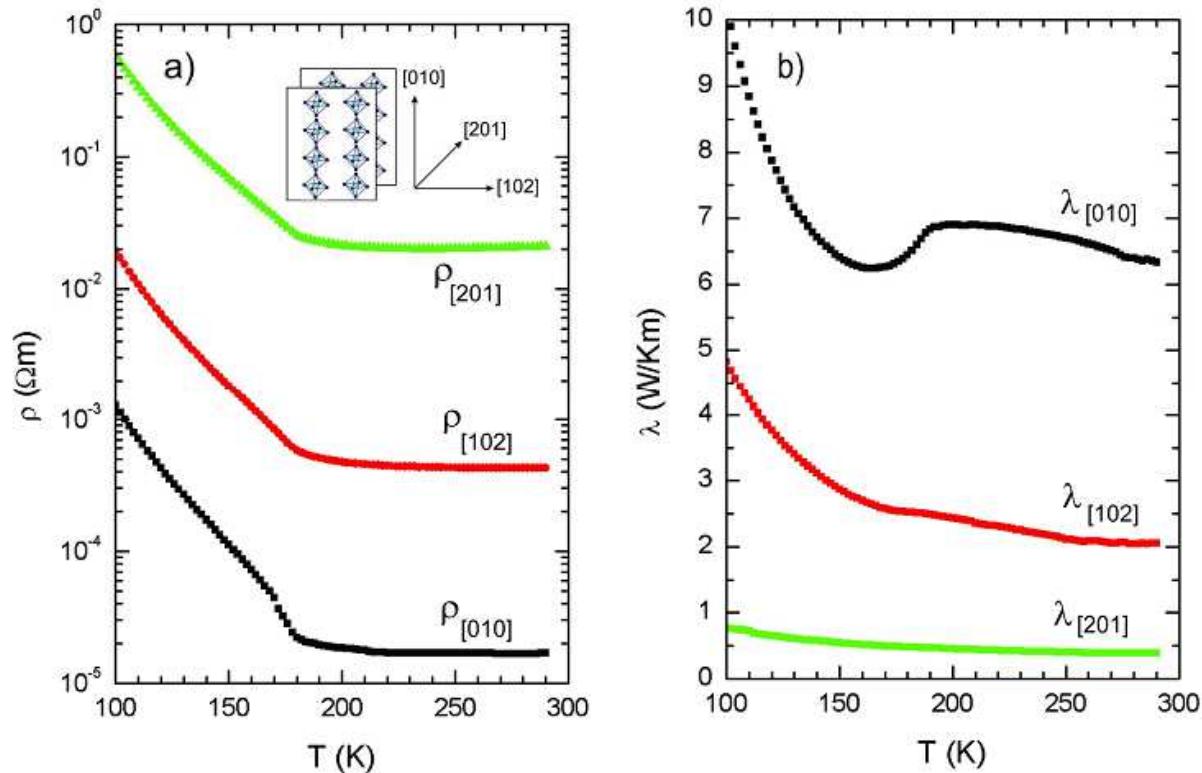
monokristal



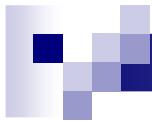
(b)

polikristal

Anizotropija kristala



Slika 11. Anizotropija u a) električnoj otpornosti i b) termalnoj vodljivosti u zavisnosti od temperature na uzorcima KBB. Preuzeto iz [27]. Vidljiva je jaka anizotropija obje veličine: razlika



Kristal

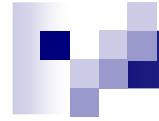
Trodimenzionalni
translacioni
periodični
aranžman

atoma

Rešetka

Trodimenzionalni
translacioni
periodični
aranžman

tačaka



Kakav je odnos između rešetke i kristala?

Kristal = Rešetka + Motiv

Motiv ili baza: atom ili grupa
atoma koji su pridruženi svakom
čvoru (tački) rešetke



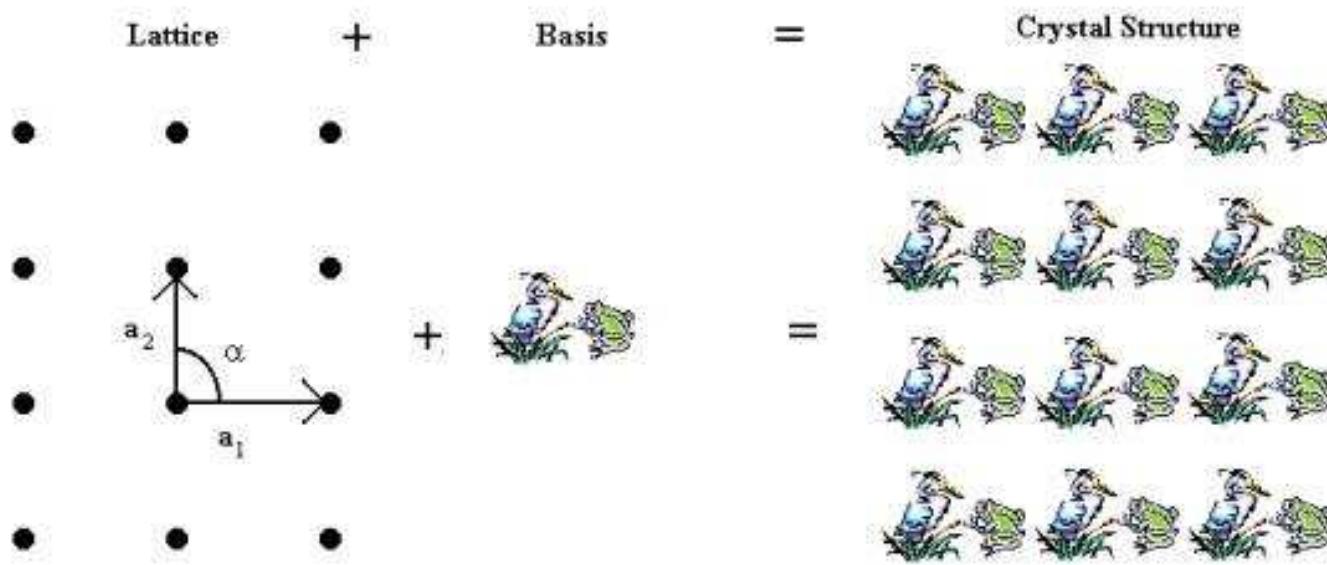
Kristal=rešetka+osnova

Rešetka: podloga periodičnosti kristala,

Baza: atom ili grupa atoma koji se pridružuju svakom čvoru rešetke

Rešetka: kako se nešto ponavlja

Motiv: šta se ponavlja

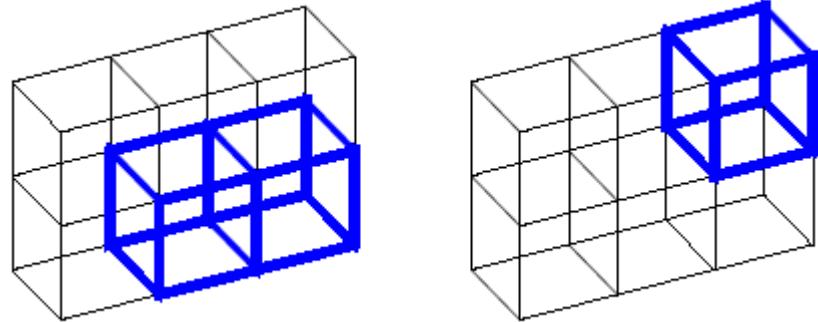


Kristalna rešetka i kristalna struktura

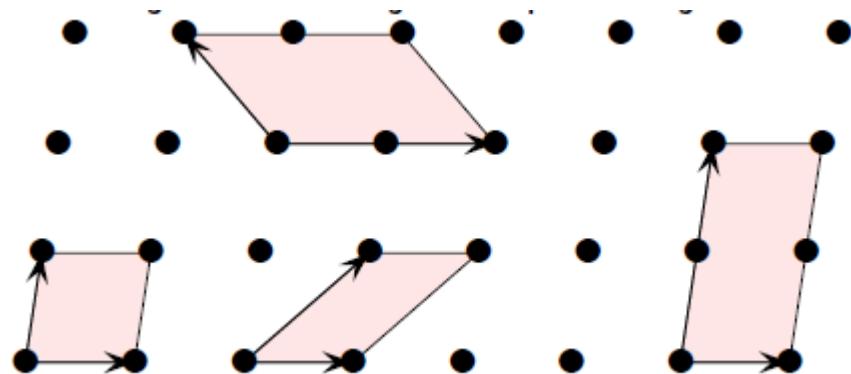
- Osnovni koncept u FČS- translaciona simetrija čije je najznačajnije svojstvo ponavljanje 3D modela izabranog za jedinicu ponavljanja
- Jedinica ponavljanja- elementarna ćelija ili jedinična ćelija
- Izbor elementarne ćelije nije jednoznačan
- Najmanja jedinična ćelija: primitivna ćelija
- Bilo kakva: elementarna (jedinična) ćelija
- Svaka primitivna ćelija je ujedno i elementarna, obrnuto ne vrijedi !!!

Proizvoljnost u odabiru elementarne ćelije

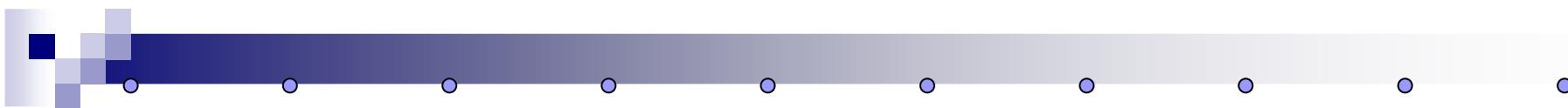
■ 3D



2D



Elementarna ćelija se bira tako da ondje gdje jedna završava počinje druga.
Nema praznog prostora između elementarnih ćelija



Primitivna
ćelija

Primitivna
ćelija

Primitivna
ćelija

Neprimitivna
ćelija

Translaciona invarijantnost

- Položaji elemenarnih čelija zadani su nizom radijus vektora koji se općenito mogu prikazati kao linearna kombinacija tri osnovna, nezavisna vektori $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

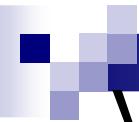
$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{a}_i$$

\vec{R} vektor translacije rešetke

n_i $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$

\vec{a}_i primitivni (jednostavni) vektori

- Za proizvoljno odabrani vektor \vec{r} , u idealnom kristalu tačke sa radijus- vektorima \vec{r} i $\vec{r} + \vec{R}$ su ekvivalentne. Pri tom translacijski vektor \vec{R} možemo konstruisati sa različitim izborom vektora $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$
- Beskonačan sistem tačaka opisan gornjom relacijom definiše tzv. **Bravaisovu rešetku**.



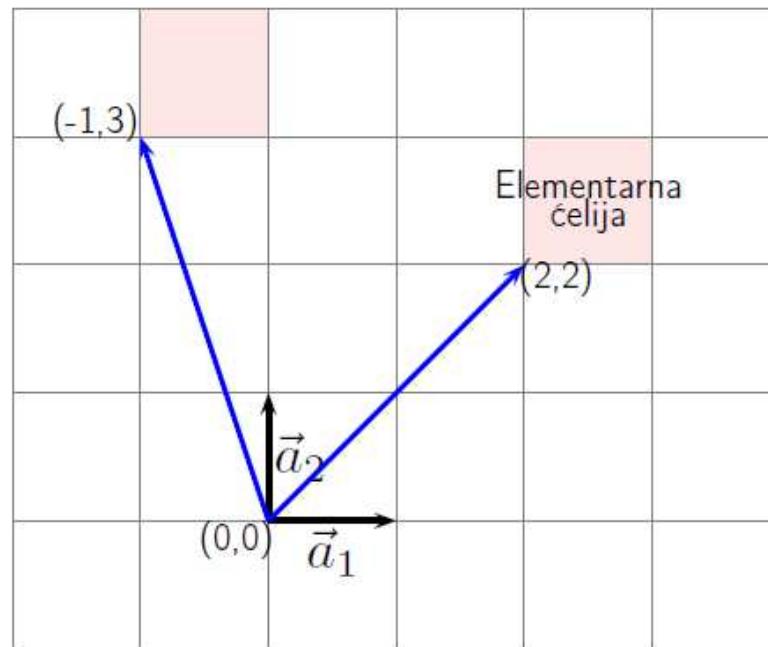
Volumen primitivne ćelije

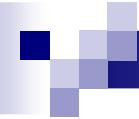
- Ona nastaje translacijom za vektor translacije pa je zovemo i translacijskom rešetkom.
- Svako čvorište definisano je sa tri cijela broja
- Susjedna čvorišta međusobno su povezana primitivnim translacijskim vektorima
- Primitivni translacijski vektori čine bridove elementarne ćelije
- Strukturalna jedinica sa minimalnim volumenom od koje je izgrađena Bravaisova rešetka zove se primitivna (jednostavna) ćelija. Ona je određena primitivnim vektorima i njen volumen je

$$V = \vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

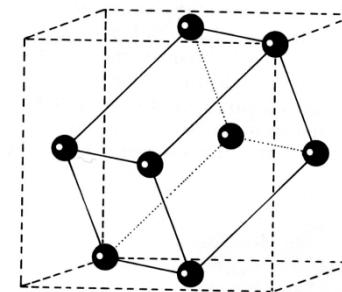
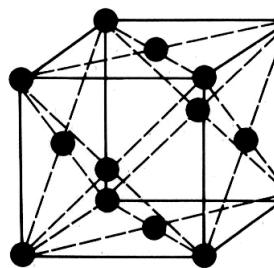
- Izbor oblika primitivne ćelije nije jednoznačan
- Smjerovi zadani primitivnim translacijskim vektorima zovu se **kristalografske ose**

Jednostavni primjer za 2D rešetku





U praksi se češće koristi jedinična umjesto primitivne čelije



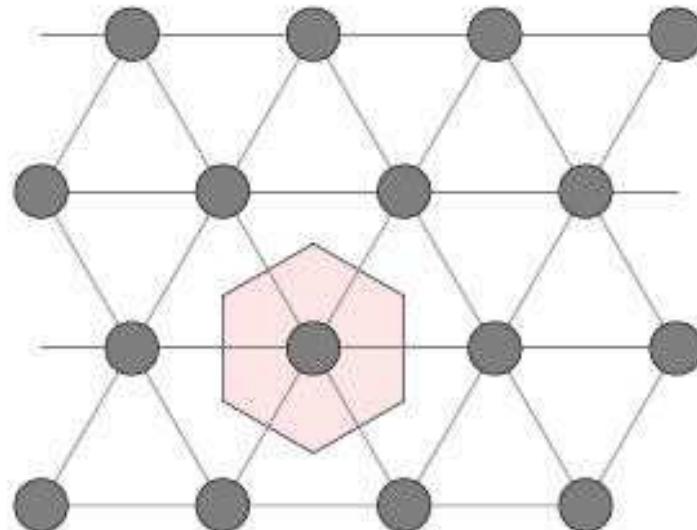
Odabir primitivne čelije ima taj nedostatak što se njome u principu ne uočava potpuna simetrija kristalne rešetke te je u praksi prikladnije koristiti jediničnu čeliju koja ima maksimalnu moguću simetriju.

Prikazan je primjer kubične jedinične čelije, dok je odgovarajuća primitivna čelija Romboedar i po volumenu je 4 puta manja

Broj prvih susjeda jednake udaljenosti od nekog elementa se zove **koordinacioni broj**

Wigner- Seitzova čelija

- ▷ Elementarna čelija se može definirati tako da se u njenom središtu nalazi čvorište.

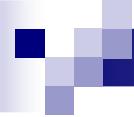


Spojnice centralnog čvorišta sa susjednim čvorištima se prepoljavaju s okomitim ravninama, a dobiveni poliedar čini elementarnu čeliju koju zovemo **Wiegner-Seitzova čelija**



Simetrija kristala

- Zahvaljujući pravilnom rasporedu čvorova kristali se odlikuju određenim svojstvima simetrije
- Koje transformacije vraćaju kristal u početni položaj?
- Translacija- translacijom za vektor **R** kristal se transformiše u samog sebe- transacijski je invarijantan
- Osim translacije, druge važne operacije su refleksija i rotacija
- Refleksija- ogledanje na nekoj ravnini
- Ravnina koja dijeli kristal na dva dijela pri čemu je jedan slika u ogledaju drugog dijela zove se ravnnom simetrije kristala
- Inverzija- rotacija za 180 stepeni i refleksija u ravnini koja je okomita na osu rotacije. Rezultat: vektor **r** prelazi u **-r**



Operacije simetrije

- Rotacija kristala oko neke osi za određeni ugao.
- Ako je kristal invarijantan u odnosu na rotacije za ugao $\frac{360^\circ}{p}$ oko osi rotacije, tada tu osu nazivamo osi p-tog reda

U kristalu mogu postojati samo osi prvog, drugog, trećeg, četvrtog i šestog reda.

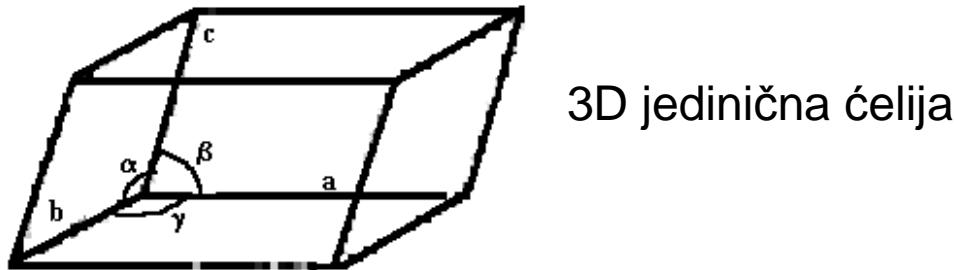
Kristal je invarijantan u odnosu na rotacije za (360, 180, 120, 90 i 60 stepeni).

To ograničenje proizilazi iz translacijske simetrije idealnog kristala tj. nije moguće imati translacijsku invarijantnost i rotaciju 5.og reda

Kvazikristali- imaju i rotaciju 5.og reda jer za njih ne važi translaciona simetrija (nađeni 1982. godine)

Kristali su napravljeni od beskonačnog broja jediničnih čelija

Jedinična čelija je najmanja jedinica u kristalu koja se ponavlja i koja tako pravi cijeli kristal.



Dimenzije jedinične čelije kristala su definisane sa 6 parametara, dužinama tri ose, a, b, i c, i sa tri ugla među osama, α , β i γ .

Okolina svakog čvora je potpuno identična. U 3D definiramo Bravaisovu rešetku na dva načina:

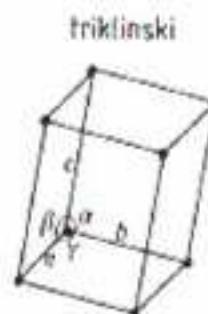
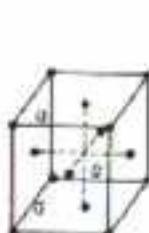
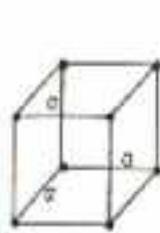
- 1. Bravaisova rešetka je beskonačni raspored čvorova sa takvim međusobnim rasporedom i orijentacijom da okolina bilo koje tačke izgleda potpuno jednak bez obzira iz kojeg čvora se posmatra**
- 2. Bravaisova rešetka je sastavljena od čvorova čiji se položaj u prostoru može opisati pomoću vektora translacije R**

Bravaisovi kristalografski sistemi

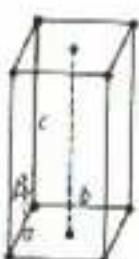
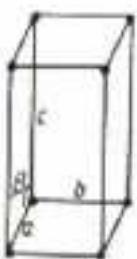
Auguste Bravais (1811-1863) je opisao sve moguće 3D prostorne rešetke i prvi došao do zaključka da postoji 14 mogućih kombinacija rešetki koje su svrstane u 7 kristalografskih sistema.

KRISTALOGRAFSKI SUSTAVI	OSI I KUTOVI ELEMENTARNE ĆELIJE	OZNAKE REŠETKI
Kubni	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I, F
Tetragonski	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I
Ortorompski	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, C, I, F
Trigonski	$a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	R
Heksagonski	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$	P
Monoklinski	$a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	P, C
Triklinski	$a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	P

Tablica 2.1. Sedam kristalografskih sistema

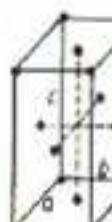
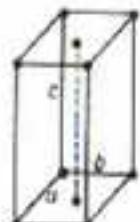
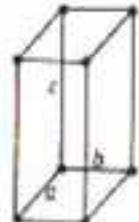


monoklinski

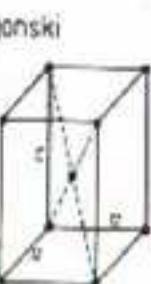
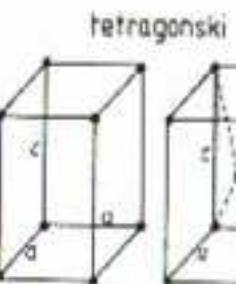


trigonski

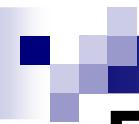
heksagonalski



ortorompski

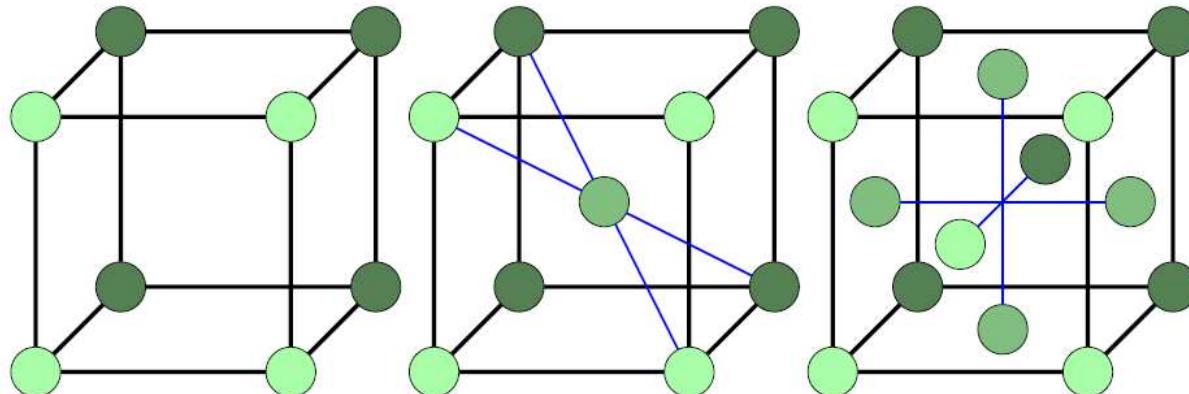


tetragonski



Bravaisove rešetke

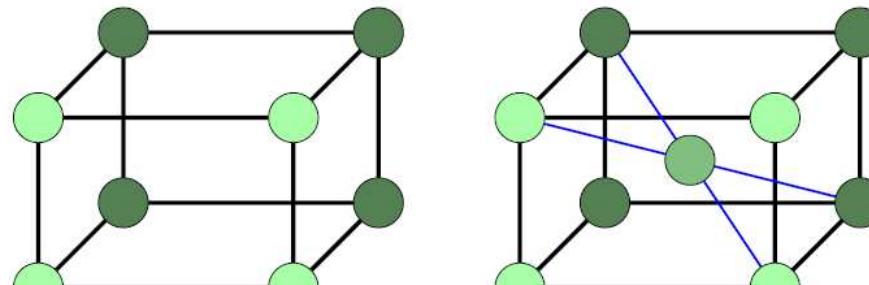
SCC- simple cubic
Jednostavna kubična



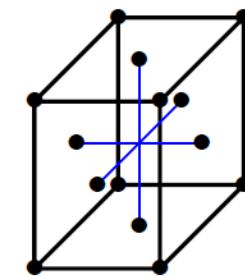
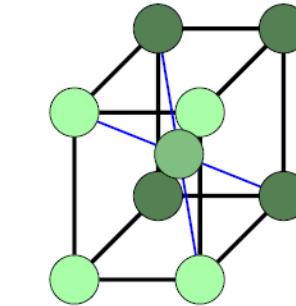
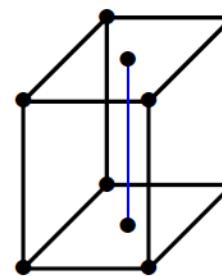
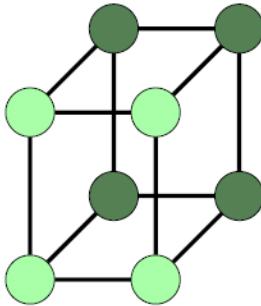
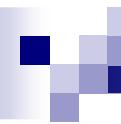
BCC- body centered cubic
Prostorno (volumno) centrirana

FCC- face centered cubic
plošno centrirana

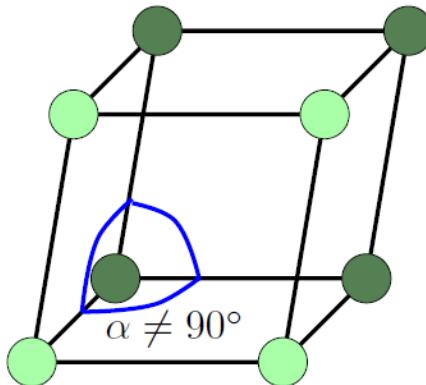
kubni sustavi



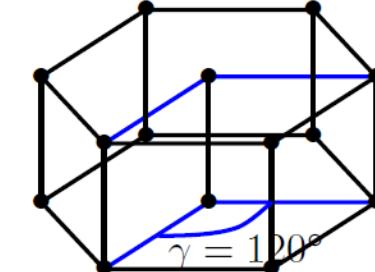
tetragonski sustavi



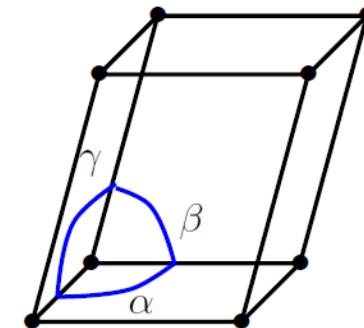
ortoromski sustavi



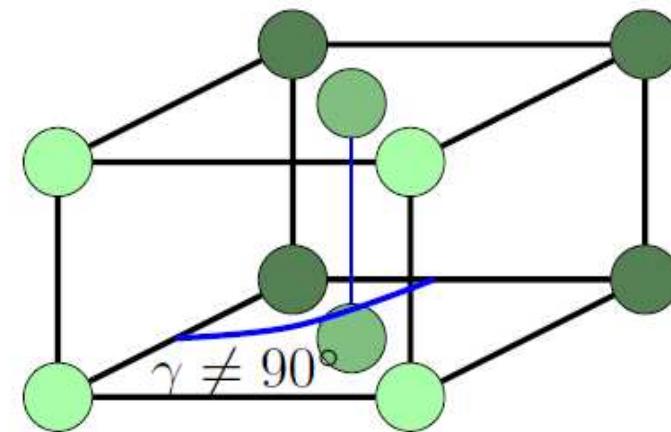
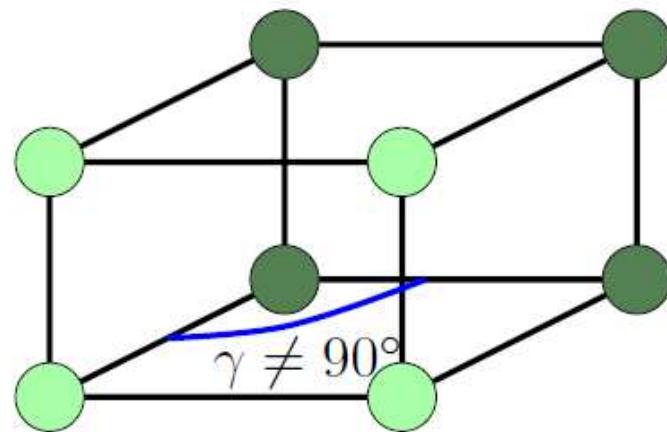
trigonski sustav



heksagonski sustav



triklinski sustav



monoklinski sustavi

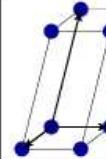
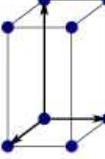
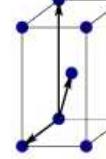
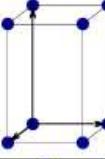
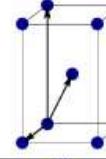
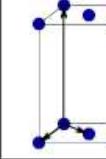
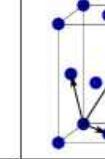
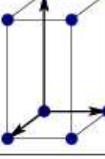
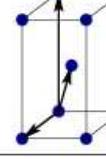
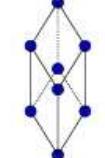
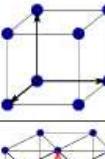
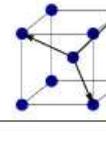
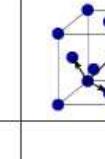
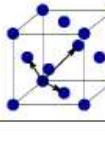
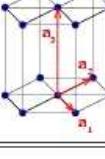
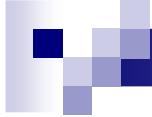
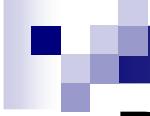
Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				

Table 1.1: Bravais lattices in three-dimensions.



Da rezimiramo Bravaisove rešetke

- Najopćenitiji sistem je triklinski
- Najveći stepen simetrije ima kubični sistem jer su u njemu sva tri ugla prava i sve tri stranice iste
- Kristalografski sistem se može granati u najviše 4 Bravaisove (translacijske) rešetke. One se razlikuju prema rasporedu čvorova u paralelopipedu.
- Jednostavna rešetka sadrži čvorove samo u vrhovima paralelopipeda.
- U složenijim rešetkama čvorovi su smješteni takođe u neke dodatne tačke. Ako su one središta svih ploha govorimo o plošno centriranoj rešeci, ako su središta gornje i donje baze – bazno centriranoj, ili središta paralelopipeda- prostorno centriranoj rešeci.
- Ukupno postoji 14 Bravaisovih rešetki



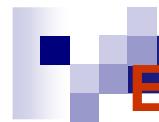
Polimorfizam

- U procesima u kojima su temperatura i pritisak konstantni, stabilno stanje TD sistema karakteriše minimalna vrijednost Gibsovog potencijala:

$$G=U+pV-TS$$

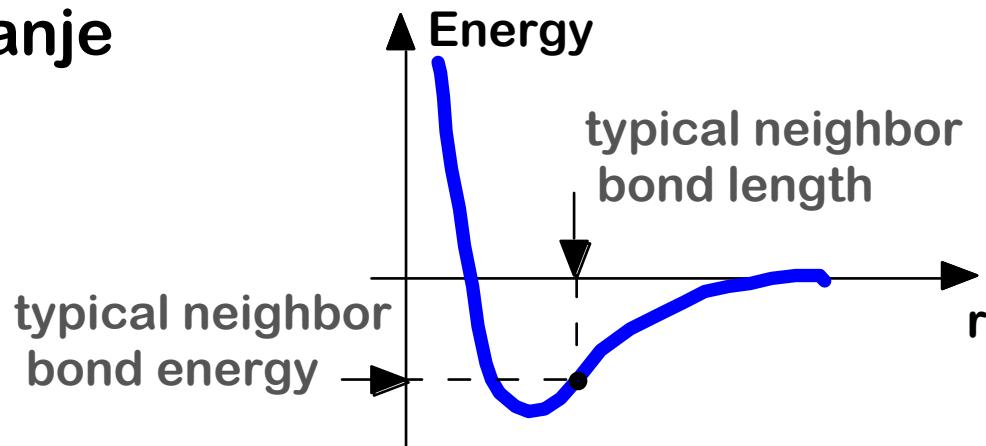
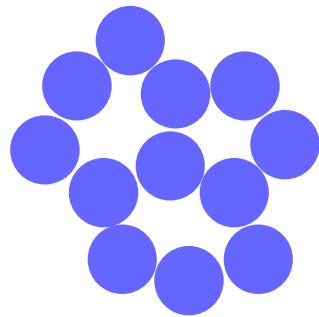
Dakle pri izotermno-izobarnim procesima Gibsov potencijal se ne može povećavati i time je određena kristalna struktura

Pojava da kristal mijenja strukturu pri promjeni temperature ili pritiska naziva se **polimorfizam**. Različite modifikacije kristala od nižih prema višim temperaturama obilježavaju se redom slovima α, β, γ itd.

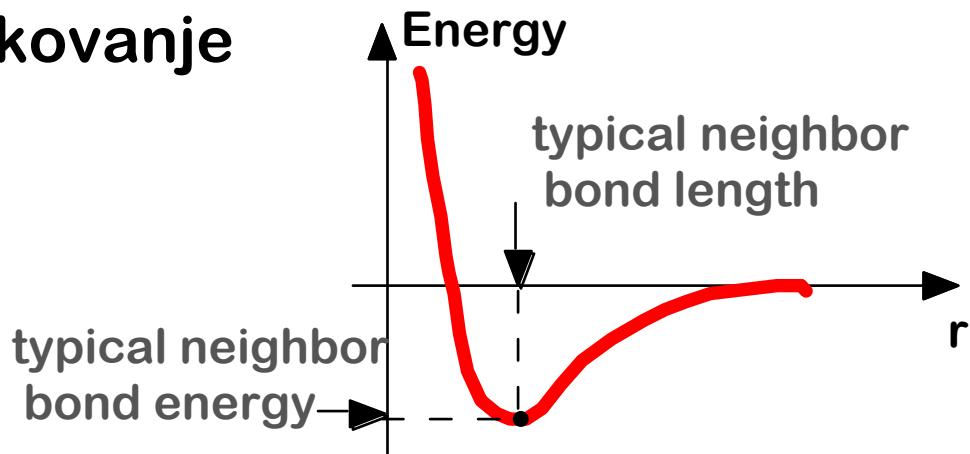
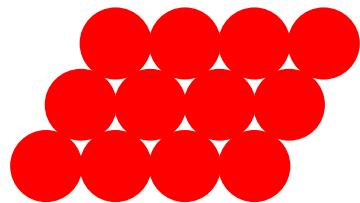


ENERGIJA I PAKOVANJE

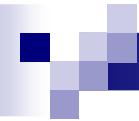
- Nasumično pakovanje



- Gusto, pravilno pakovanje



Guste, pravilno pakovane strukture imaju manje energije.



FAKTOR ATOMSKOG PAKOVANJA – APF je

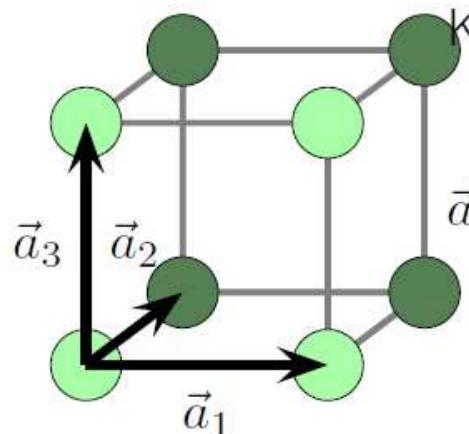
- zapremina popunjena atomima u jediničnoj ćeliji
- zapremina jedinične ćelije
- Pod pretpostavkom da se radi o modelu čvrstih sfera

$$APF = \frac{N_A V_A}{V_{\text{jedinične ćelije}}}$$



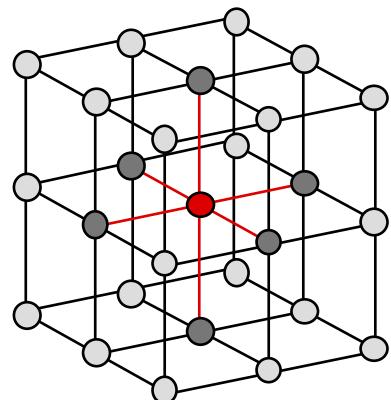
■ Primjeri kristalnih struktura

Jednostavna kubna rešetka

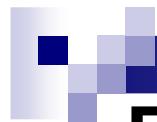


Kartezijeve komponente jednostavnih vektora:

$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

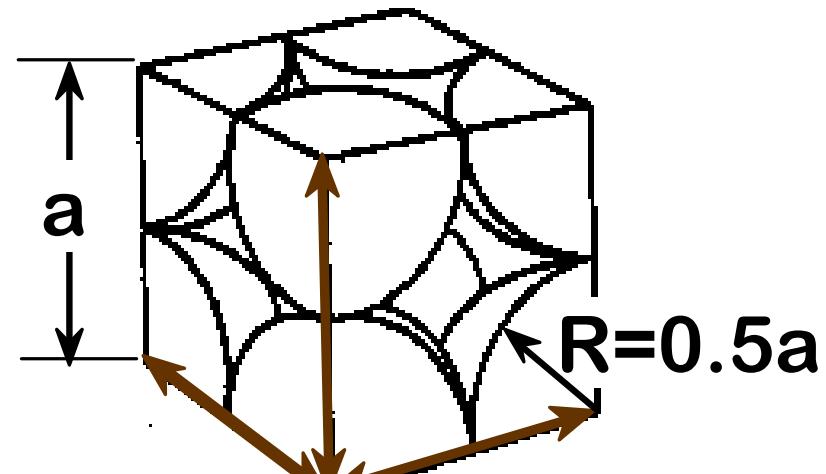


Konstanta rešetke: a
Koordinacioni broj: 6
Volumen: a^3
Kocki pripada 1 atom
Poznati materijal: α -Po



FAKTOR ATOMSKOG PAKOVANJA

- APF za jednostavnu kubnu strukturu = 0.52



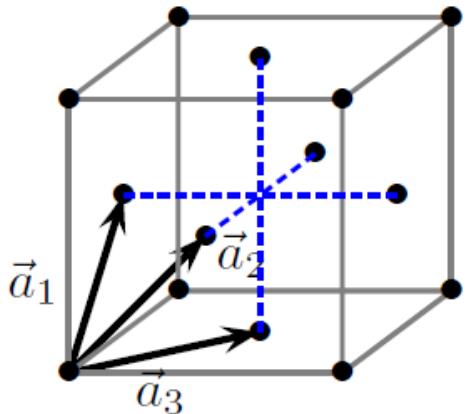
close-packed directions

contains $8 \times 1/8 =$
1 atom/unit cell

$$APF = \frac{\frac{atoms}{unit\ cell} \cdot \frac{volume}{atom}}{\frac{volume}{unit\ cell}}$$

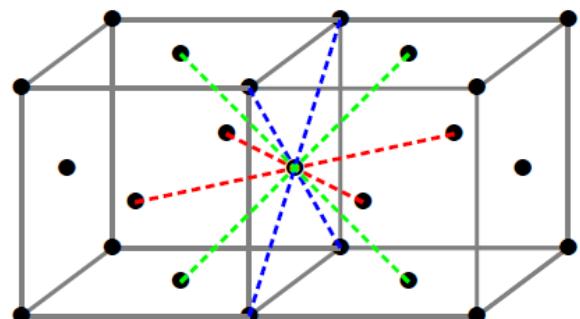
The equation for the packing factor (APF) is shown. The numerator consists of a green box labeled "atoms/unit cell" multiplied by an orange box labeled "volume/atom". The denominator is a blue box labeled "volume/unit cell".

Plošno centrirana kubna rešetka



Kartezijeve komponente jednostavnih vektorâ:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Kocki pripadju 4 atoma
Volumen je $a^3/4$
Koordinacijski broj je 12
Udaljenost prvih susjeda je polovina
plošne dijagonale $a/\sqrt{2}$

Poznati materijali: Ag, Au, Cu, Sr, α -Ca, β -La, γ -Fe, . . .



bakar



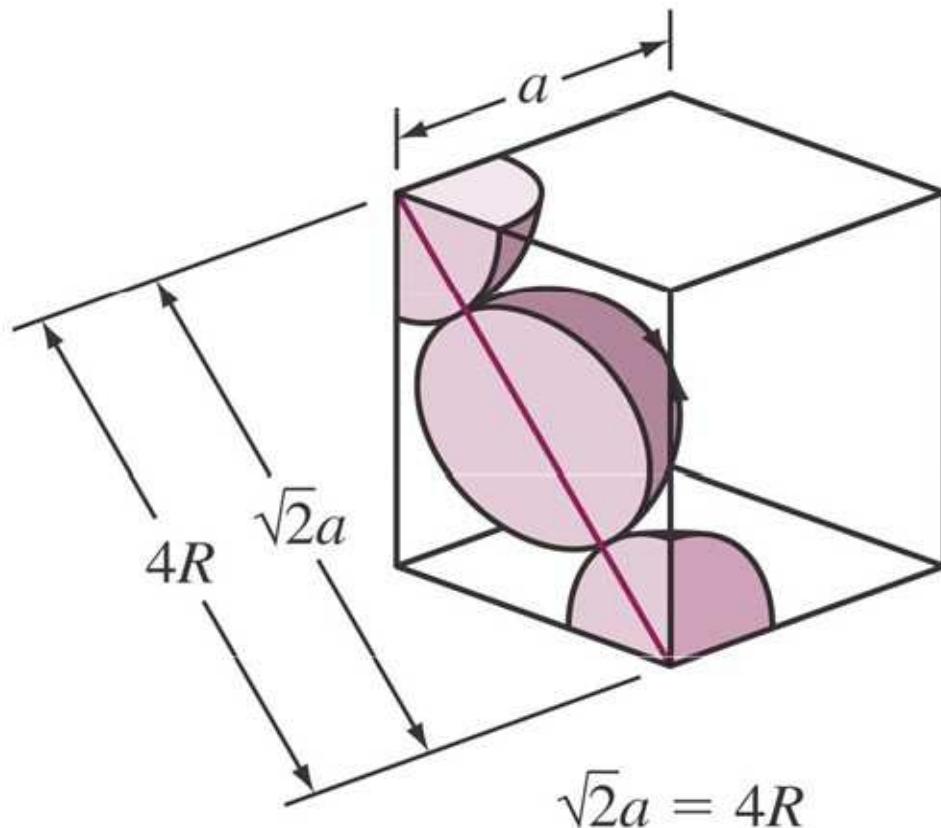
zlato

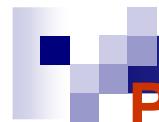


srebro



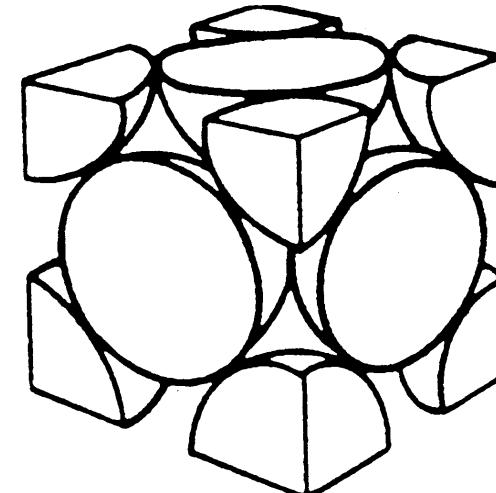
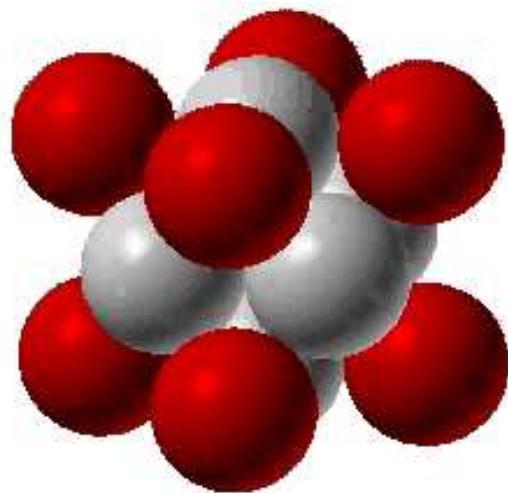
Geometrija FCC Structure

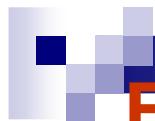




POVRŠINSKI CENTRIRANA KUBNA STRUKTURA FACE CENTERED CUBIC STRUCTURE (FCC)

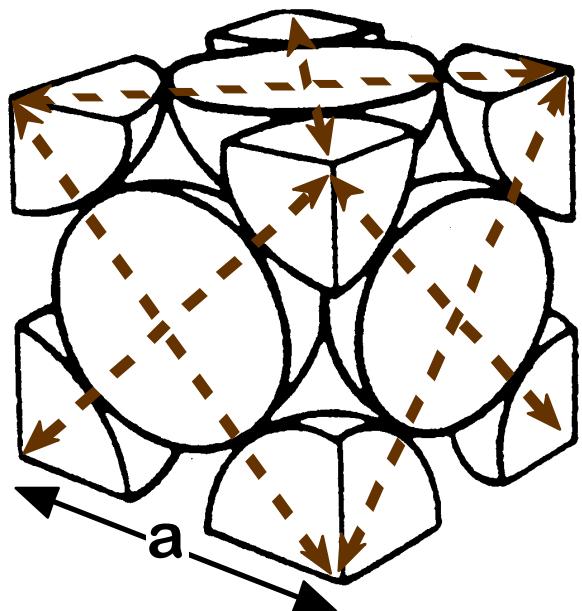
- Gusto pakovani pravci su dijagonale stranica.
 - Napomena: svi atomi su isti; atomi na presjeku površinskih dijagonalala Su drugačije boje (bijeli) da bismo ih lakše uočili.
 - koordinacioni broj = 12





FAKTOR ATOMSKOG PAKOVANJA za FCC

- APF ZA POVRŠINSKI CENTRIRANU KUBNU = 0.74

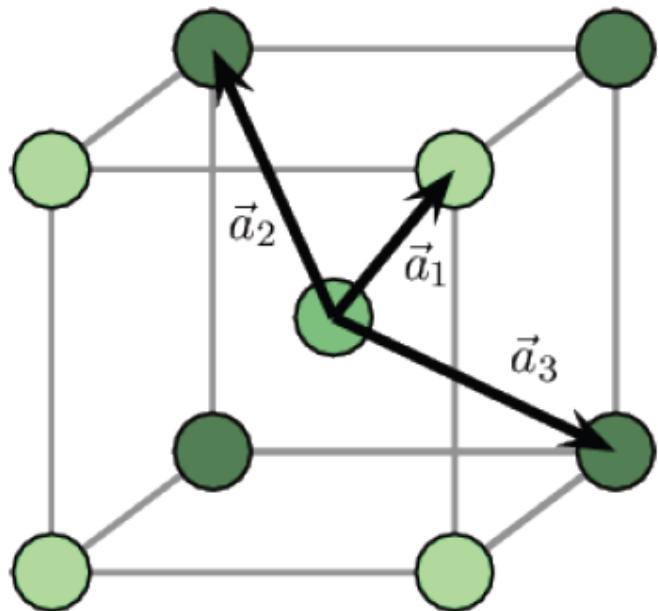


Close-packed directions:
length = $4R$
 $= \sqrt{2} a$

Unit cell contains:
 $6 \times 1/2 + 8 \times 1/8$
 $= 4 \text{ atoms/unit cell}$

$$\text{APF} = \frac{\frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \cdot 4 \cdot \frac{4}{3} \pi (\sqrt{2}a/4)^3}{a^3 \cdot \frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}}$$

Prostorno centrirana kubna struktura



Kartezijske komponente primitivnih vektora:

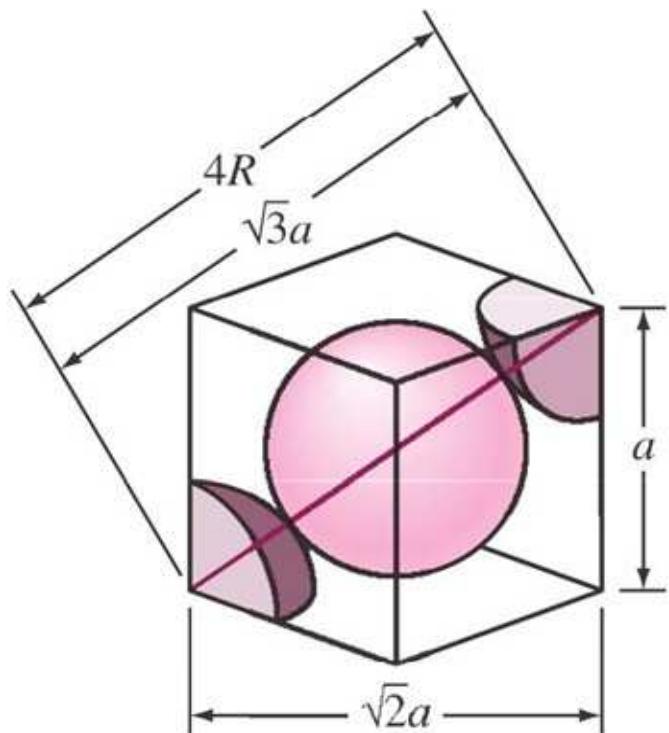
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

- Kocki pripadaju dva atoma
- Volumen je $a^3/2$
- Koordinacijski broj je 8
- Udaljenost između dva susjedna čvora je polovina prostorne dijagonale kocke $a\sqrt{3}/2$

Alkalijski metali imaju kristalnu strukturu BCC.



Geometrija BCC strukture

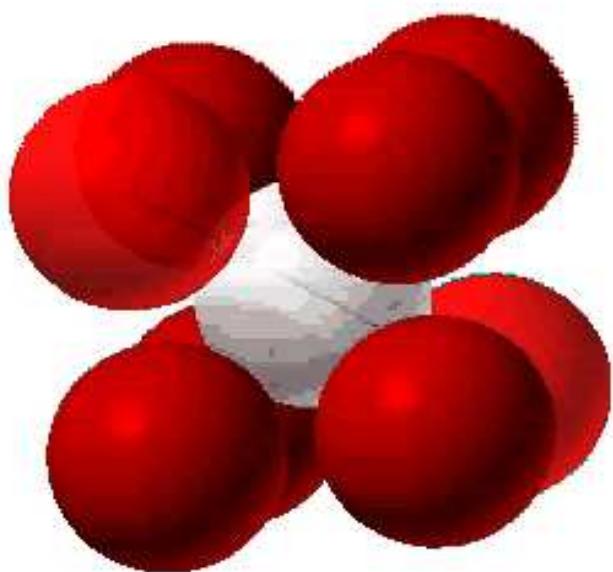


$$\sqrt{3}a = 4R$$

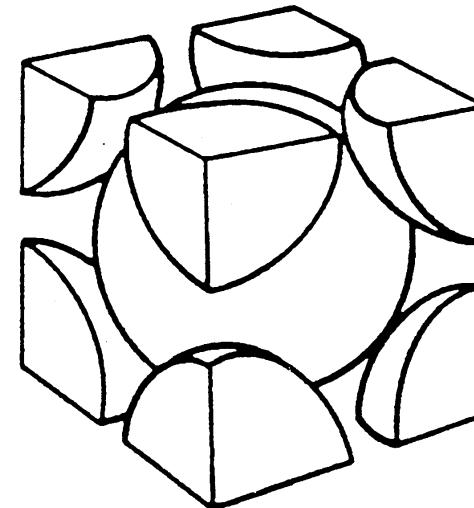
BODY CENTERED CUBIC STRUCTURE (BCC)

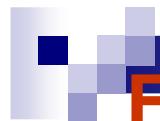
Prostorno centrirana kubna struktura

- Gusto pakovani pravci su dijagonale kocke.



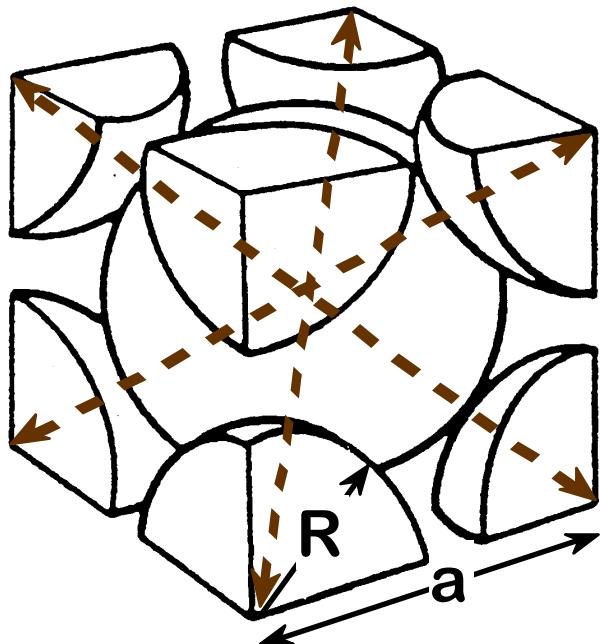
- koordinacioni broj = 8





FAKTOR ATOMSKOG PAKOVANJA za BCC

- APF za prostorno centriranu kubnu strukturu = 0.68



Close-packed directions:

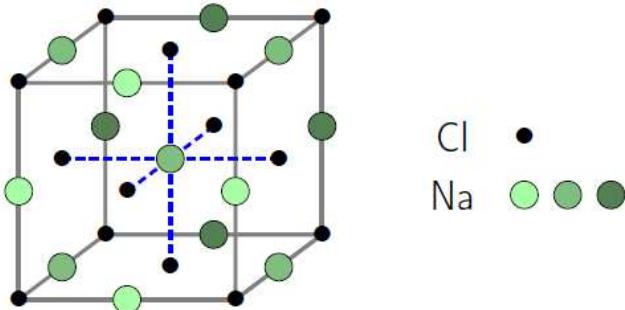
$$\begin{aligned}\text{length} &= 4R \\ &= \sqrt{3} a\end{aligned}$$

Unit cell contains:

$$\begin{aligned}1 + 8 \times 1/8 \\ = 2 \text{ atoms/unit cell}\end{aligned}$$

$$\text{APF} = \frac{\frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \cdot \frac{4}{3} \pi (\sqrt{3}a/4)^3}{\frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}} \cdot \frac{\text{volume}}{\text{atom}}$$

Struktura tipa NaCl



Rešetka je sastavljena od dvije plošno centrirane kubne rešetke

- ▷ Konstanta rešetke: a
- ▷ Volumen: $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{a^3}{4}$
- ▷ Broj Na iona u kocki: $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$
- Broj Cl iona u kocki: $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$
- ▷ Koordinacijski broj: 6 prvih susjeda (ioni druge vrste)
- ▷ Udaljenost do prvih susjeda: $a/2$
- ▷ Poznati materijali: LiH, MgO, MnO, NaCl, AgBr, KCl, ...



AgBr

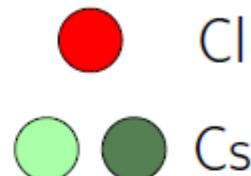
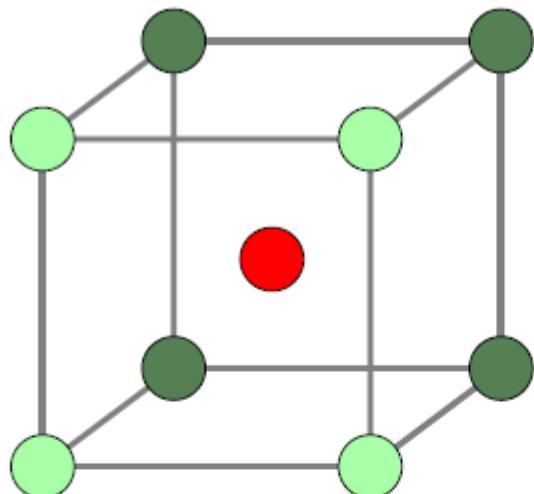


NaCl



MgO

Kristalna rešetka tipa CsCl

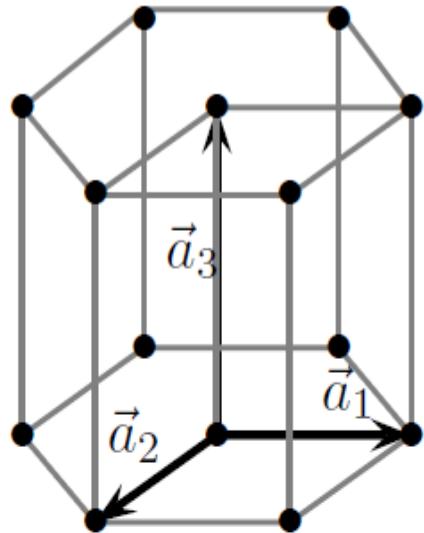


Radi se o dvije izprepletene jednostavne kubne rešetke.

- ▷ Konstanta rešetke: a
- ▷ Volumen: $\Omega = a^3$.
- ▷ Broj Cs iona u kocki: 1
Broj Cl iona u kocki: $8 \times \frac{1}{8} = 1$
- ▷ Koordinacijski broj: 8 prvih susjeda (ioni druge vrste)
- ▷ Udaljenost do prvih susjeda: $a\sqrt{3}/2$
- ▷ Poznati materijali: BeCu, AlNi, AgMg, CsCl, TlBr, LiHg

Heksagonska rešetka

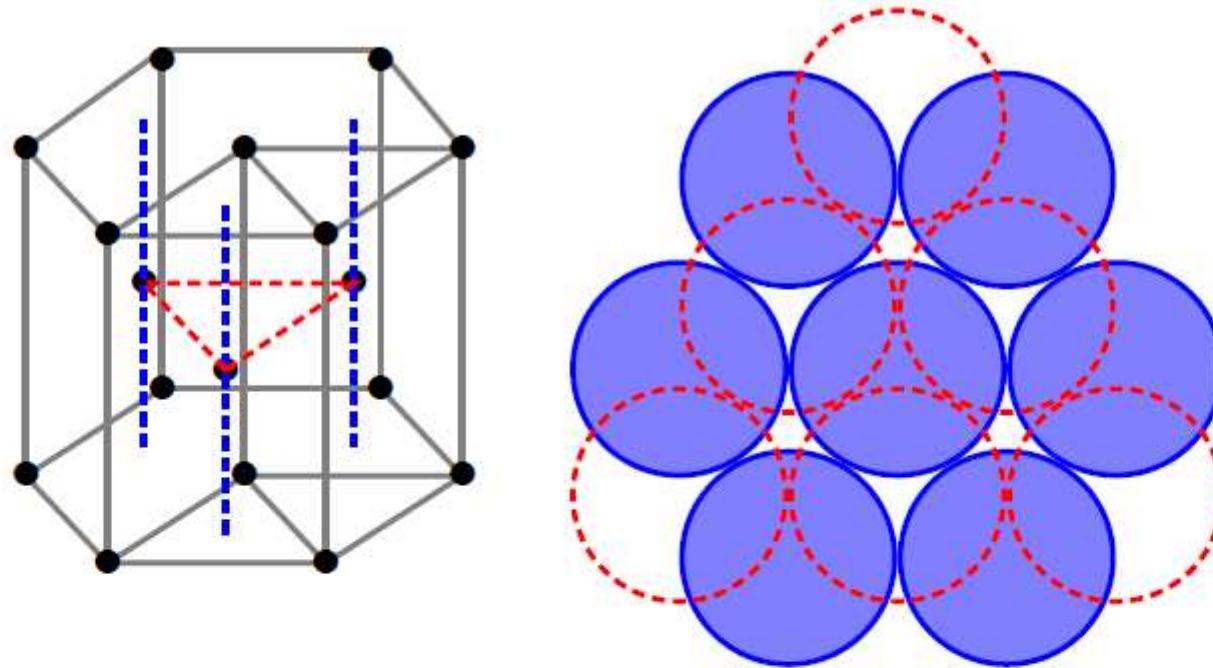
Kartezijeve komponente jednostavnih vektora:



$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = c \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- ▷ Konstante rešetke: a i c
- ▷ Volumen: $\Omega = \frac{a^2}{2}c\sqrt{3}$
- ▷ Broj atoma u ćeliji: $4 \times \frac{1}{12} + 4 \times \frac{1}{6} = 1$
- ▷ Koordinacijski broj: 6 ($a < c$) ili 2 ($a > c$)
- ▷ Udaljenost do prvih susjeda: a ili c

Heksagonska gusto slagana rešetka



Radi se o dvije izprepletene jednostavne heksagonske rešetke

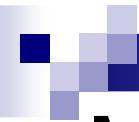
- ▷ Konstante rešetke: a i c
- ▷ Volumen: $\Omega = \frac{a^2}{2}c\sqrt{3}$
- ▷ Broj atoma u ćeliji: $4 \times \frac{1}{12} + 4 \times \frac{1}{6} + 1 = 2$

Millerovi indeksi

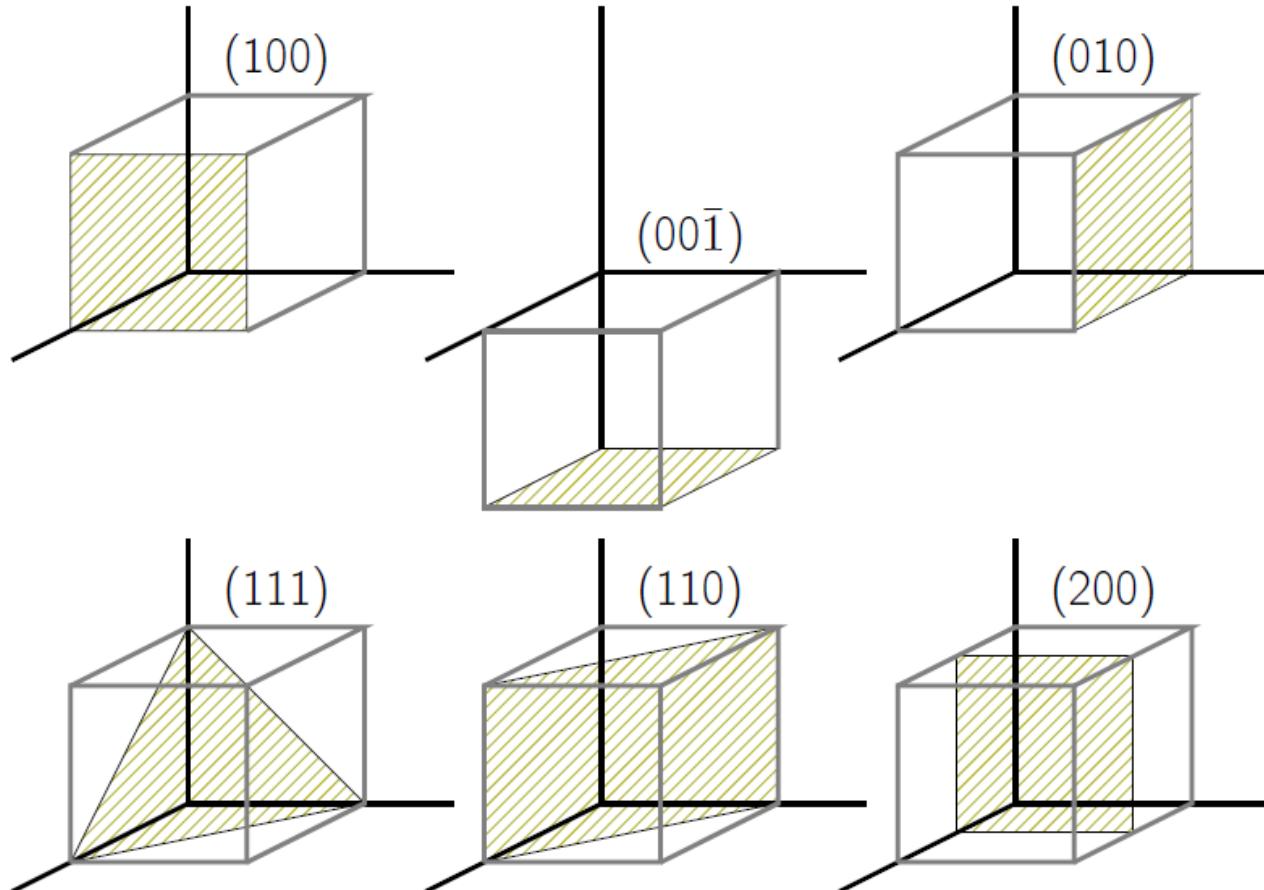
- Da bismo proučavali kristalnu anizotropiju moramo označiti pojedine ravni i smjerove u kristalu
- Za to nam služe Millerovi indeksi
- Zamislimo ravan kojoj su odresci na prvoj, drugoj i trećoj kristalografskoj osi redom s_1a_1 , s_2a_2 i s_3a_3 .
- Definišimo tri najmanja cijela broja h , k il kojima je omjer jednak omjeru recipročnih vrijednosti brojeva s_1 , s_2 i s_3 .

$$\frac{1}{s_1} : \frac{1}{s_2} : \frac{1}{s_3} = h : k : l$$

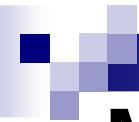
- (hkl) su Millerovi indeksi koji označavaju orijentaciju kristalografskih ravnina
- Kad je odsječak na osi negativan piše se crtica iznad



Millerovi indeksi

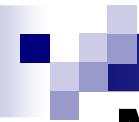


Millerovi indeksi za neke ravnine u kubnim kristalima



Millerovi indeksi

- Zbog kristalne simetrije veći broj kristalnih ravnih može biti ravноправан
- Skup ekvivalentnih ravnih označava se simbolom $\{hkl\}$
- Primjer. U kristalima sa kubnom simetrijom ravnine $(100), (\bar{1}00), (010), (0\bar{1}0), (001), (00\bar{1})$
- su ravноправне i označavaju se simbolom $\{100\}$



Millerovi indeksi

- Analognim postupkom definišu se i smjerovi u kristalu
- Smjer radijus vektora:

$$r_1 \vec{a}_1 + r_2 \vec{a}_2 + r_3 \vec{a}_3$$

- Određen je sa tri broja r_1 , r_2 i r_3 . Taj smjer se označava Millerovim indeksima $[uvw]$
- Gdje su u , v i w najmanji cijeli brojevi koji se međusobno odnose kao $r_1:r_2:r_3$

$$r_1 : r_2 : r_3 = u : v : w$$

- Zbog toga što u kristalu neki smjerovi mogu biti ravnopravni, definira se simbol $\langle uvw \rangle$ koji označava skup ekvivalentnih smjerova kristala