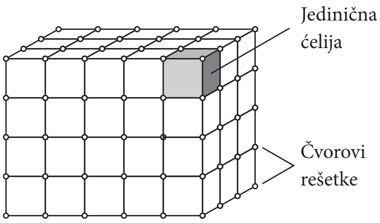
Matka 27 (2016./2017.) br. 101

GEOMETRIJA I KRISTAL

Mara Kresić, Dubrovnik



Prostorna rešetka sa naznačenom jediničnom ćelijom

Slika 1.

Mnoge tvari u prirodi imaju kristalnu strukturu koja je vidljiva po vanjskim pravilnim plohama i na prijelomima. No ta pravilnost ne ostaje samo na površini jer kristalne strukture imaju pravilan raspored atoma i ta se pravilnost prostorno ponavlja.

Kristal možemo predočiti tako da u njegovoj unutrašnjosti zamislimo koordinatni sustav, a duž svake osi nanizane atome. Spajajući linijama sva središta atoma unutar kristala, dolazimo do prostornih rešetki. Radi preglednijeg prikazivanja crtamo samo jedan element koji dobivamo spajanjem međusobno najbližih atoma. Takav se element naziva jedinična ili elementarna ćelija. Za većinu kristalnih struktura one su paralelepipedi ili prizme, pa nam je za bolje razumijevanje svijeta oko nas potrebna geometrija.

Nizanjem jediničnih ćelija u prostoru nastaje kristal. Broj mogućih različitih kombinacija je ograničen, tako da postoji samo sedam kristalnih sustava – kubni, tetragonski, ortorompski, romboedarski, heksagonski, monoklinski i triklinski – u koje je podijeljeno četrnaest mogućih rešetki. Mi ćemo razmotriti jedan od tih sustava.

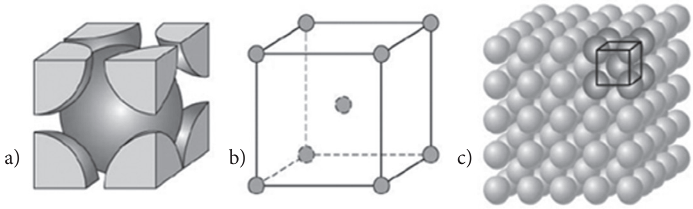
Kubni sustav

Najjednostavniju kristalnu strukturu imaju metali, najčešće kubni sustav. Kod većine metala ne može se golim okom primijetiti postojanje kristala jer su metali sastavljeni od velikog broja sitnih kristala. Kod kubnog sustava jedinična ćelija je kocka duljine brida a koji je reda veličine 10^{-10} m.

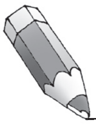
Prostorno centrirana kubna struktura (BCC)

Atomi su raspoređeni po vrhovima kocke, a jedan atom nalazi se u središtu, tj. na presjeku prostornih dijagonala. Kraći naziv za ovu strukturu dolazi od engleskog izraza *body centered cubic* (BCC).

Na Slici 2.a prikazana je jedinična ćelija. Na Slici 2.b centri atoma prikazani su kao mali krugovi kako bismo imali bolji uvid u raspored atoma. Slika 2.c predstavlja dio kristala koji se sastoji od niza takvih jediničnih ćelija.



Slika 2.

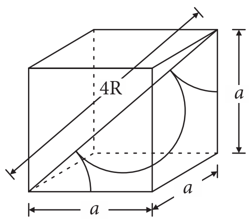


Broj atoma koji pripadaju jediničnoj ćeliji određuje se zbrajanjem dijelova atoma koji joj pripadaju. U ovom slučaju svaki vrh kocke sadrži atom koji je podijeljen između osam jediničnih ćelija, što znači da se u jednoj ćeliji nalazi $\frac{1}{8}$ atoma, a za svih osam atoma u vrhovima daje 1 cijeli atom. Pribrojimo li i središnji atom, u BCC jediničnoj ćeliji nalaze se dva atoma.

$$\text{broj atoma} = \frac{1}{8} \cdot 8 + 1 = 2$$

Ako s a označimo duljinu brida kocke, a s R polumjer atoma, možemo doći do odnosa tih dviju veličina. Sa Slike 3. vidimo da je duljina prostorne dijagonale kocke jednaka $4R$.

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



Slika 3.

Možemo izračunati i koliki dio prostora popunjavaju atomi unutar jedinične ćelije. To zovemo faktorom pakiranja, a označavamo ga s *APF*.

$$APF = \frac{\text{volumen atoma unutar ćelije}}{\text{volumen ćelije}}$$

Volumen kocke je a^3. Za BCC strukturu dobili smo da se unutar jedne ćelije nalaze točno dva atoma. Budući da smo ih zamislili kao kugle polumjera R, njihov volumen je:

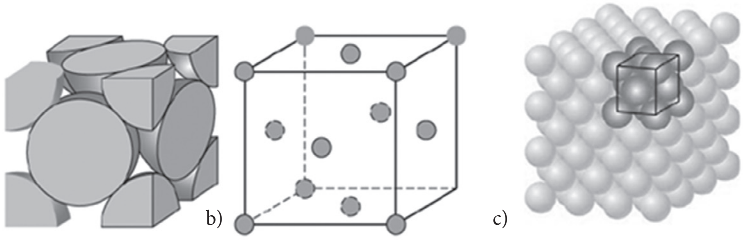
$$V = 2 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{8}{3}\pi R^3$$

$$APF = \frac{\frac{8}{3}\pi R^3}{a^3} = \frac{\frac{8}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4\sqrt{3}}{3}R\right)^3} = \frac{\frac{8}{3}\pi R^3}{\frac{64\sqrt{3}}{9}R^3} \approx 0.68$$

Dobili smo da atomi zauzimaju 68 % prostora u jediničnoj ćeliji. Ostalih 32 % je prazan prostor.

Površinski centrirana kubna kristalna struktura (FCC)

Kraći naziv dolazi od engleskog *Face Centered Cubic* (FCC). Atomi se nalaze u svakome od osam vrhova kocke i na presjeku dijagonala svih strana kocke. Na Slici 4.a prikazana je jedinična ćelija. Na Slici 4.b centri atoma prikazani su kao mali krugovi kako bismo imali bolji uvid u raspored atoma. Slika 4.c predstavlja dio kristala koji se sastoji od niza takvih jediničnih ćelija.



a) b) c) *Slika 4.*

Broj atoma koji pripadaju površinski centriranoj kubnoj jediničnoj ćeliji dobivamo na sličan način kao i za prethodnu strukturu. U svakome od osam vrhova kocke nalazi se $\frac{1}{8}$ atoma, te na sjecištu dijagonala svake strane po $\frac{1}{2}$ atoma.

$$\text{broj atoma} = \frac{1}{8}\cdot 8+\frac{1}{2}\cdot 6=4$$

U jediničnoj ćeliji ove strukture nalaze se 4 atoma.

Zadatak 1. Na Slici 4.a uočite da se atomi u vrhovima dodiruju s atomima na stranama kocke. Izvedite relaciju za odnos duljine brida *a* i polumjera *R*. Odredite i faktor pakiranja pa ga usporedite s onim dobivenim za BCC strukturu.

Rješenje: Sa Slike 4.a vidimo da je duljina dijagonale strane kocke jednaka 4*R*.

$$a\sqrt{2}=4R \Leftrightarrow a=\frac{4R}{\sqrt{2}} \Leftrightarrow a=\frac{4\sqrt{2}}{2}R \Leftrightarrow a=2\sqrt{2}R$$

Unutar pojedine jedinične ćelije nalaze se 4 atoma, pa je njihov volumen:

$$V=4\cdot\frac{4}{3}\pi R^3=\frac{16}{3}\pi R^3$$

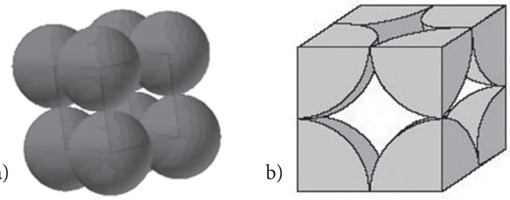
Dobiveno uvrstimo u formulu za faktor pakiranja:

$$APF=\frac{\frac{16}{3}\pi R^3}{a^3}=\frac{\frac{16}{3}\pi R^3}{\left(2\sqrt{2}R\right)^3}=\frac{\frac{16}{3}\pi R^3}{16\sqrt{2}R^3}\approx 0.74$$

Dobili smo da atomi u površinski centriranoj kubnoj kristalnoj strukturi zauzimaju 74 % prostora, što je veće od onoga za prostorno centriranu. Dakle, atomi su gušće poredani unutar ćelije.

Jednostavni kubni sustav (SCC)

Kraći naziv za jednostavni kubni sustav je SCC, što dolazi od engleskog *Simple Cubic Cristal*. To je najjednostavniji oblik, ali i vrlo rijedak zbog lošeg pakiranja. U prirodi samo polonij ima ovu strukturu. U svakome od vrhova kocke nalazi se po jedan atom.



Slika 5.

Zadatak 2. Odredite koliko se atoma polonija nalazi u jednoj jediničnoj ćeliji. Koliki je faktor pakiranja? Što možete zaključiti?

Rješenje: U svakome od osam vrhova kocke nalazi se $\frac{1}{8}$ atoma.

$$\text{broj atoma} = \frac{1}{8} \cdot 8 = 1$$

Na Slici 5.b vidimo da je duljina brida kocke jednaka $2R$:

$$a = 2R.$$

Volumen atoma u ćeliji je:

$$V = 1 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi R^3$$

Tada je faktor pakiranja:

$$APF = \frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{(2R)^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{8R^3} \approx 0.52$$

Faktor pakiranja približno je 0.52, što znači da polonij zauzima 52 % jedinične ćelije, a ostalih 48 % prazan je prostor. Velik dio prostora je nepopunjen.

Literatura:

1. Materijali 1, dostupno na: https://bib.irb.hr/datoteka/665498.MATERIJALI_1_skripta_listopad_2013.pdf (12. 10. 2015.)
2. Kristalne rešetke, dostupno na: http://documents.tips/documents/materijali-kristalne-resetke.html (13. 10. 2015.)
3. Osnove kristalne strukture, dostupno na: http://www.phy.pmf.unizg.hr/~atonejc/2%20Osnove%20kristalne%20strukutreNANO.pdf (13. 10. 2015.)