

MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

Računske vežbe

2. MILEROVI INDEKSI

TEORIJSKI PREGLED

Milerovi indeksi se koriste za označavanje ravni i pravaca u kristalu i obeležavaju se sa $(h k l)$. Za ravan koja na koordinatnim osama odseca odsečke x, y, z Milerovi indeksi se određuju sledećim postupkom: Odsečki se izraze preko ivica elementarne ćelije: $\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c}$, a zatim nađu

recipročne vrednosti ovih izraza: $\frac{a}{x}, \frac{b}{y}, \frac{c}{z}$. Nalaženjem zajedničkog sadržaoća $n = NZS\left(\frac{a}{x}, \frac{b}{y}, \frac{c}{z}\right)$

Milerovi indeksi se odrede kao celi brojevi pri čemu se zadržava proporcija odsečaka: $h = n \cdot \frac{a}{x}, k = n \cdot \frac{b}{y}, l = n \cdot \frac{c}{z}$. Ravan koja **ne seče** neku od koordinatnih osa ima odgovarajući **indeks**

0. Ako ravan seče osu u negativnom delu, indeks je **negativan** i označava se **crticom iznad** indeksa, npr. $(h \bar{k} l)$. Sve ravni koje su paralelne i fizički ekvivalentne datoj ravni imaju iste Milerove indekse i takva familija ravni se označava sa $\{h k l\}$. Ako su **poznati Milerovi indeksi** određuju se odsečki na koordinatnim osama za ravan koja je najbliža koordinatnom početku ($n=1$): $h = \frac{a}{x} \Rightarrow x = \frac{a}{h}, k = \frac{b}{y} \Rightarrow y = \frac{b}{k}, l = \frac{c}{z} \Rightarrow z = \frac{c}{l}$.

Presek dve kristalografske ravni $(h_1 k_1 l_1)$ i $(h_2 k_2 l_2)$ označava se simbolima pravca preseka ovih ravni $[r s t]$, gde je:

$$r = k_1 l_2 - k_2 l_1, \quad s = l_1 h_2 - l_2 h_1, \quad t = h_1 k_2 - h_2 k_1,$$

i određuje se po sledećoj šemi:

$$\begin{array}{c} h_1 | k_1 \quad l_1 \\ h_2 | k_2 \quad l_2 \end{array} \quad \begin{array}{c} h_1 \quad l_1 \\ h_2 \quad l_2 \end{array} \quad \begin{array}{c} h_1 \quad k_1 \quad l_1 \\ h_2 \quad k_2 \quad l_2 \end{array}.$$

U kubnom kristalnom sistemu pravac dat Milerovim indeksima $[h k l]$ normalan je na ravan sa istim Milerovim indeksima $(h k l)$.

Rastojanje između paralelnih ravni označenih Milerovim indeksima $(h k l)$ za prostu kubnu rešetku je:

$$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

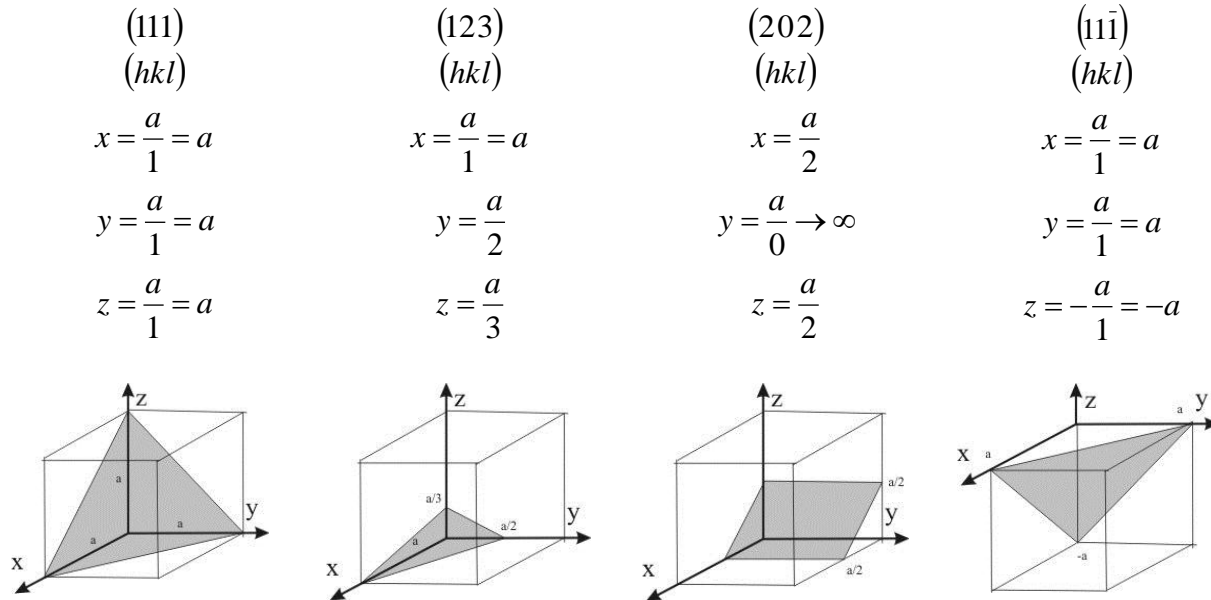
gde je a konstanta rešetke.

MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

Računske vežbe

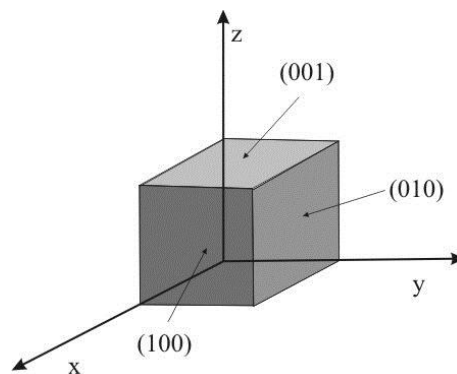
ZADATAK 1. Nacrtati ravni čiji su Milerovi indeksi $(1\ 1\ 1)$, $(1\ 2\ 3)$, $(2\ 0\ 2)$, $(1\ 1\ \bar{1})$.

Rešenje:



ZADATAK 2. Odrediti Milerove indekse ravni kubne elementarne ćelije.

Rešenje: Ostale tri ravni su paralelne obeleženim i imaju iste indekse.



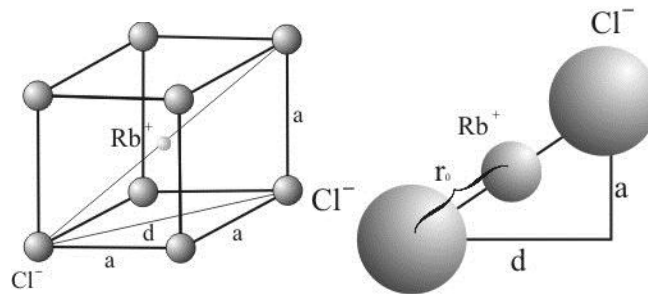
MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

Računske vežbe

ZADATAK 3. RbCl (Rubidijum Hlorid) kristališe u obliku ZCK rešetke tako da je Rb^+ jon okružen sa 8 Cl^- jona. Ravnotežno rastojanje između susjednih jona je $r_0=0.33nm$, a molarna masa RbCl je $M_{RbCl}=120.92$.

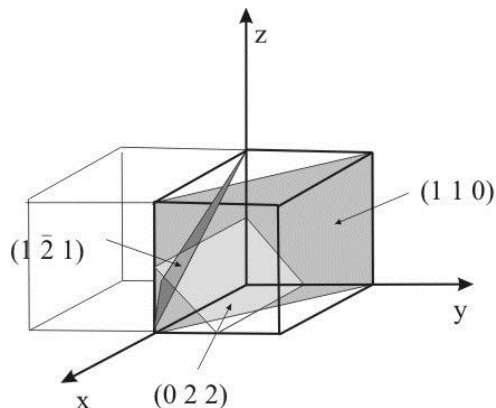
- Skicirati jediničnu ćeliju i označiti ravni sa Milerovim indeksima $(1\ 1\ 0)$, $(0\ 2\ 2)$ i $(1\ \bar{2}\ 1)$. Odrediti rastojanja između ravni.
- Odrediti simbole pravca preseka kristalografskih ravni datih Milerovim indeksima $(1\ 1\ 0)$ i $(0\ 2\ 2)$
- Izračunati gustinu kristala.

Rešenje:



$$a) \quad r_0 = r_{Cl^-} + r_{Rb^+}$$

$$2 \cdot r_0 = a\sqrt{3} \Rightarrow a = \frac{2r_0}{\sqrt{3}} = \frac{2 \cdot 3.3 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{3}} = 3.81 \cdot 10^{-10} m$$



odsecci na koordinatnim osama:

$$x = \frac{a}{h}, y = \frac{a}{k}, z = \frac{a}{l}$$

$$(110) \Rightarrow x = a, y = a, z = \infty$$

$$(022) \Rightarrow x = \infty, y = \frac{a}{2}, z = \frac{a}{2}$$

$$(1\bar{2}1) \Rightarrow x = a, y = -\frac{a}{2}, z = a$$

MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

Računske vežbe

$$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$d_{(110)} = \frac{a}{\sqrt{1+1}} = \frac{3.81 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{2}} = 2.69 \cdot 10^{-10} m$$

$$d_{(022)} = \frac{a}{\sqrt{4+4}} = \frac{3.81 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{8}} = 1.35 \cdot 10^{-10} m$$

$$d_{(1\bar{2}1)} = \frac{a}{\sqrt{1+4+1}} = \frac{3.81 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{6}} = 1.56 \cdot 10^{-10} m$$

b)

$$\begin{array}{lll} h_1=1 & k_1=1 & l_1=0 \\ h_2=0 & k_2=2 & l_2=2 \end{array}$$

$$\left. \begin{array}{l} h_1 | k_1 | l_1 \\ h_2 | k_2 | l_2 \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} 1 | 1 | 0 \\ 0 | 2 | 2 \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} r = k_1 l_2 - k_2 l_1 = 2 \\ s = l_1 h_2 - l_2 h_1 = -2 \\ t = h_1 k_2 - k_1 h_2 = 2 \end{array} \right\}$$

pravac preseka $[r \ s \ t] = [2 \ \bar{2} \ 2]$

c)

$$d = \frac{n_{iRbCl} \cdot M_{RbCl}}{V \cdot N_A}, \quad \text{gde su } M_{RbCl} = A_{Rb} + A_{Cl}, \quad V = a^3$$

$$n_{iRb} = 1$$

$$n_{iCl} = 8 \cdot \frac{1}{8} = 1, \Rightarrow n_{iRbCl} = 1$$

$$d = \frac{1 \cdot 120.92 \frac{kg}{kmol}}{\left(3.81 \cdot 10^{-10} m\right)^3 \cdot 6.02 \cdot 10^{26} \frac{1}{kmol}} = 3631.84 \frac{kg}{m^3}$$