PRESEK
List za mlade matematike, fizike, astronome in računalnikarje

ISSN 0351-6652
Letnik **29** (2001/2002)
Številka 5
Strani 264–269

Peter Legiša:

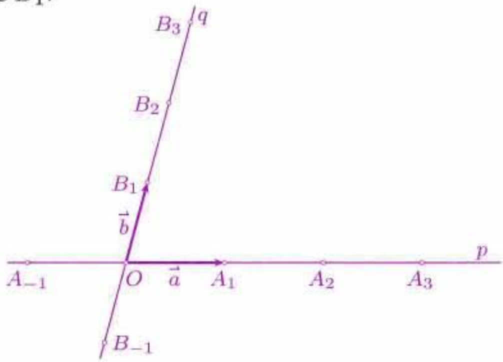
KRISTALNE MREŽE – 1. del

Ključne besede: matematika, geometrija, mreže, tlakovanje ravnine, razdelitve prostora, enostavni kubični sklad.

Elektronska verzija: http://www.presek.si/29/1483-Legisa.pdf

KRISTALNE MREŽE – 1. del

V ravnini imamo nekolinearna vektorja $\vec{a}$ in $\vec{b}$. Izberemo ju tako, da je njuno izhodišče tudi izhodišče koordinatnega sistema (slika 1), torej $\vec{a} = \overrightarrow{OA_1}$ in $\vec{b} = \overrightarrow{OB_1}$.



Slika 1.

Na premici p skozi O in A_1 izberemo še točke A_{-1}, A_2, A_{-2}, A_3, $A_{-3}, \ldots$ tako, da je za vsako celo število k

$$\overrightarrow{OA_k} = k\vec{a}\,.$$

Prav tako na premici q skozi O in B_1 izberemo še točke B_{-1}, B_2, B_{-2}, $B_3, \ldots$ tako, da je za vsako celo število n

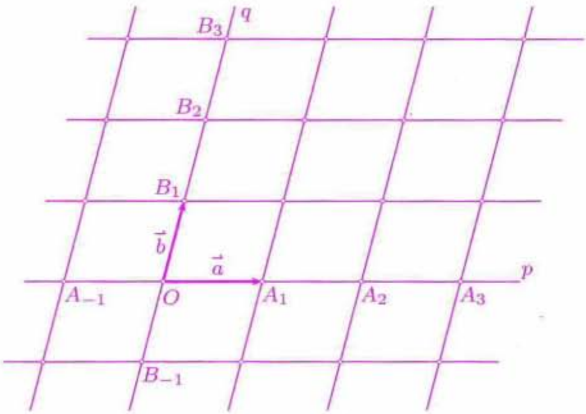
$$\overrightarrow{OB_n} = n\vec{b}\,.$$

Skozi točke A_k konstruiramo vzporednice premici q, skozi točke B_n vzporednice premici p. Te premice razrežejo ravnino na skladne paralelograme (slika 2). Dobili smo *tlakovanje* ravnine s skladnimi paralelogrami.

Presečišča dobljenih premic sestavljajo neskončno *mrežo* točk v ravnini. Krajevni vektorji točk v mreži so natančno vektorji

$$k\vec{a} + n\vec{b}\,, \qquad (k, n \in \mathbb{Z})\,.$$

(Seveda *mreža* tu pomeni nekaj drugega kot mreža poliedra, ki je površje poliedra, razgrnjeno v ravnino.)

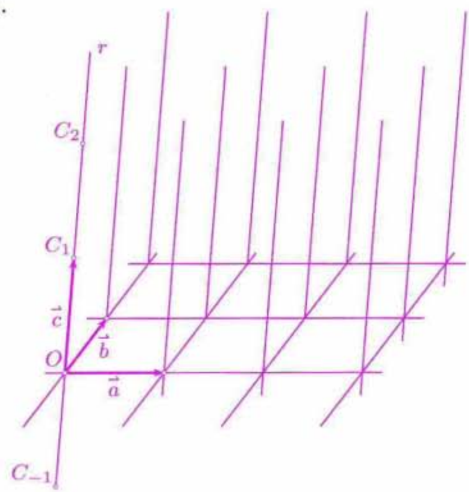


Slika 2. Del dvorazsežne mreže. Dobimo jo z zlaganjem skladnih paralelogramov.

Vzemimo še vektor $\vec{c}$, ki ne leži v ravnini Π vektorjev $\vec{a}$ in $\vec{b}$. Naj bo $\vec{c} = \overrightarrow{OC_1}$. Na premici r skozi O in C_1 izberemo še točke C_{-1}, C_2, C_{-2}, C_3, $C_{-3}, \ldots$ tako, da je za vsako celo število p

$$\overrightarrow{OC_p} = p\vec{c}\,.$$

Skozi vse točke prej dobljene ravninske mreže konstruiramo vzporednice premici r (slika 3).



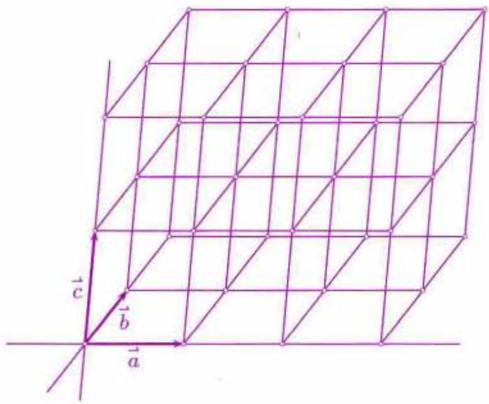
Slika 3.

Skozi točke C_p pa izberemo ravnine, vzporedne ravnini Π. Presečišča teh ravnin in narisanih vzporednic premici r sestavljajo neskončno *trirazsežno mrežo* točk v prostoru (slika 4).

Krajevni vektorji točk v mreži so natančno vektorji

$$k\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}\,,$$

kjer so k, n, p cela števila. Pravimo, da je ta mreža *napeta* na vektorje $\vec{a}$, $\vec{b}$ in $\vec{c}$.

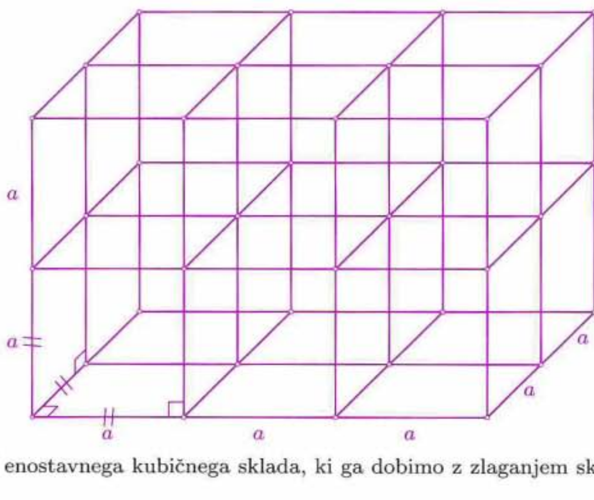


Slika 4. Del trirazsežne mreže, napete na vektorje $\vec{a}$, $\vec{b}$ in $\vec{c}$. Dobimo jo z zlaganjem skladnih paralelepipedov.

Obenem smo dobili razdelitev prostora na *skladne paralelepipede*.

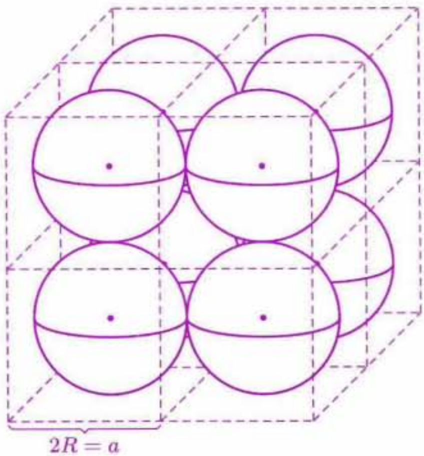
Mreže ste srečali pri pouku kemije in fizike. Točke mreže so npr. središča atomov ali ionov v kristalu.

Če so vektorji $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ enako dolgi ($a = b = c$) in paroma pravokotni, je ustrezna mreža *enostavni kubični sklad*. Temu ustreza razdelitev prostora na skladne kocke (slika 5).



Slika 5. Del enostavnega kubičnega sklada, ki ga dobimo z zlaganjem skladnih kock z robom a.

Vsaka točka te mreže naj bo središče krogle s premerom $2R = a$. Vsaka krogla se dotika šestih sosednjih krogel. Tak sestav skladnih krogel prav tako imenujemo *enostavni* (primitivni) kubični sklad (slika 6).



Slika 6. Krogle, zložene v enostavni kubični sklad.

Do tega sklada lahko pridemo tudi takole: Vsaki krogli očrtamo (namišljeno) škatlo v obliki kocke. Nato te škatle tesno zlagamo, tako da se sosednji ploskvi povsem prekrivata. Na sliki 6 so škatle narisane črtkano.

Delež prostora, ki ga zavzemajo krogle v tem skladu, je enak količniku med prostornino krogle in prostornino njej očrtane škatle, torej

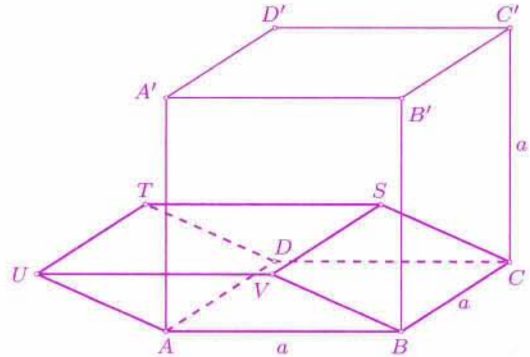
$$\frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{(2R)^3} = \frac{\pi}{6} \doteq 52{,}4\,\%\,.$$

Če moramo zlagati pomaranče, verjetno ne bomo uporabili zgoraj opisanega načina. Tudi v naravi je enostavni kubični sklad izredno redek. Radioaktivni element polonij lahko kristalizira v tej obliki.

Spet vzamemo kocko $ABCDA'B'C'D'$ z robom a in s središčem S (slika 7). Paralelepiped $ABCDUVST$ ima za osnovno ploskev kvadrat $ABCD$, stranski rob je SC. Pri tem je

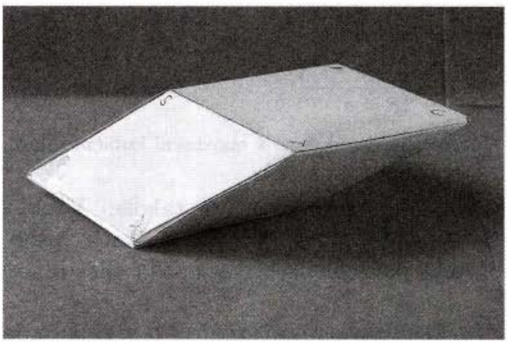
$$|CS| = \frac{1}{2}|CA'| = \frac{1}{2}a\sqrt{3}$$

polovica telesne diagonale kocke.



Slika 7.

Naredite iz papirja model paralelepipeda $ABCDUVST$ (slika 8)!



Slika 8.

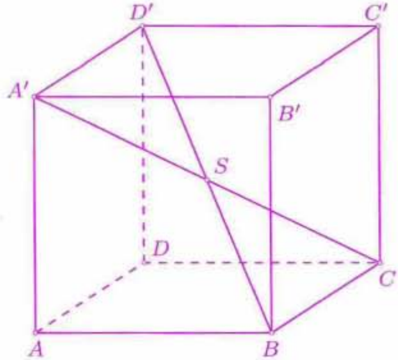
Trirazsežno mrežo, napeto na vektorje $\overrightarrow{CB}$, $\overrightarrow{CD}$ in $\overrightarrow{CS}$, dobimo tudi z zlaganjem skladnih kopij paralelepipeda $ABCDUVST$.

Takoj vidimo, da je A' točka naše mreže. Z nekaj risanja, računanja ali z zlaganjem modelov ugotovimo, da ta mreža vsebuje tudi točke B', C' in D' in da jo lahko dobimo tudi tako, da zlagamo skladne kopije *osnovne celice* na sliki 9. V tej osnovni celici je 9 točk mreže: A, B, C, D, A', B', C', D' in središče S kocke. Pravimo, da je osnovna celica *telesno centrirana kocka*.

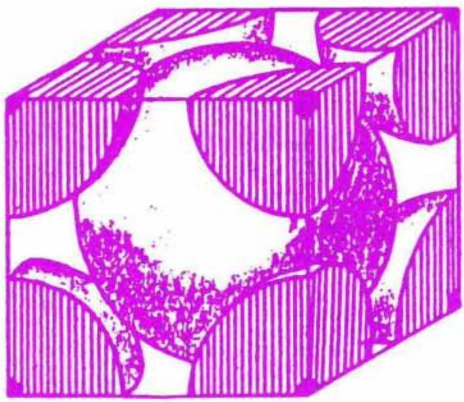
Vsaka točka naše mreže naj bo središče krogle s polmerom

$$R = \frac{1}{4}a\sqrt{3}\,.$$

Potem se krogla s središčem v S dotika krogel s središči v preostalih točkah osnovne celice (slika 10).



Slika 9. Telesno centrirana kocka.



Slika 10.

Delež prostornine, ki jo zavzemajo krogle v tem skladu, lahko izračunamo kar v osnovni celici. V vsakem oglišču je osmina krogle in še ena cela krogla v središču. Skupaj imamo prostornino dveh krogel s polmerom R, to je $2 \cdot \frac{4\pi R^3}{3}$. To moramo deliti z $a^3 = \frac{64}{3\sqrt{3}}R^3$ in dobimo

$$\frac{\pi\sqrt{3}}{8} \doteq 68{,}0\,\%.$$

V tej obliki kristalizirata natrij in kalij.

Peter Legiša