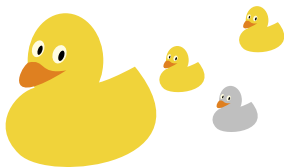


# Primjene klasične algebre vektora i analitičke geometrija prostora u kristalografiji

*Franka Miriam Brückler*

---




# Kristalografske koordinate

Podsjetimo se: **Kristalografska baza** je desna baza prostora, zadana svojim parametrima  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ ; uz odabir ishodišta ona određuje **kristalografski koordinatni sustav**. Bazni vektori razapinju paralelepiped koji se naziva **jediničnom ćelijom** i njegov volumen se označava s  $V$ .<sup>1</sup>

## Zadatak

*Koje su koordinate središta jedinične ćelije? Ovisi li Vaš odgovor o kristalografskim parametrima?*

---

<sup>1</sup>Jedinična ćelija se sastoji od točaka čije su sve koordinate između 0 i 1. 

# Kristalografske koordinate

Podsjetimo se: **Kristalografska baza** je desna baza prostora, zadana svojim parametrima  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ ; uz odabir ishodišta ona određuje **kristalografski koordinatni sustav**. Bazni vektori razapinju paralelepiped koji se naziva **jediničnom ćelijom** i njegov volumen se označava s  $V$ .<sup>1</sup>

## Zadatak

*Koje su koordinate središta jedinične ćelije? Ovisi li Vaš odgovor o kristalografskim parametrima? Uvijek  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ .*

## Zadatak

*Mineral malahit kristalizira u monoklinskom sustavu,  $a = 9,502 \text{ \AA}$ ,  $b = 11,974 \text{ \AA}$ ,  $c = 3,240 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \gamma = 90^\circ$ ,  $\beta = 98,75^\circ$ . Izračunajte  $\vec{a} \times \vec{a}$ ,  $\vec{b} \cdot \vec{c}$  i  $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}$ .*

<sup>1</sup>Jedinična ćelija se sastoji od točaka čije su sve koordinate između 0 i 1. 

# Kristalografske koordinate

Podsjetimo se: **Kristalografska baza** je desna baza prostora, zadana svojim parametrima  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ ; uz odabir ishodišta ona određuje **kristalografski koordinatni sustav**. Bazni vektori razapinju paralelepiped koji se naziva **jediničnom ćelijom** i njegov volumen se označava s  $V$ .<sup>1</sup>

## Zadatak

*Koje su koordinate središta jedinične ćelije? Ovisi li Vaš odgovor o kristalografskim parametrima? Uvijek  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ .*

## Zadatak

*Mineral malahit kristalizira u monoklinskom sustavu,  $a = 9,502 \text{ \AA}$ ,  $b = 11,974 \text{ \AA}$ ,  $c = 3,240 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \gamma = 90^\circ$ ,  $\beta = 98,75^\circ$ . Izračunajte  $\vec{a} \times \vec{a}$ ,  $\vec{b} \cdot \vec{c}$  i  $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}$ . Rezultati su redom  $\vec{0}$ ,  $38,80 \text{ pm}^2$  i  $364,3 \text{ pm}^3$ .*

<sup>1</sup>Jedinična ćelija se sastoji od točaka čije su sve koordinate između 0 i 1. 

# Mrežne ravnine

(Primitivna, direktna) rešetka je skup svih točaka prostora koje u (kristalografskom) koordinatnom sustavu imaju cjelobrojne koordinate. Recipročna rešetka: Analogno, ali u recipročnom sustavu.

# Mrežne ravnine

(**Primitivna, direktna**) **rešetka** je skup svih točaka prostora koje u (kristalografskom) koordinatnom sustavu imaju cjelobrojne koordinate. **Recipročna rešetka**: Analogno, ali u recipročnom sustavu.

**Mrežne ravnine** su ravnine koje prolaze kroz tri (i stoga beskonačno mnogo) točaka direktne rešetke (ali ne kroz ishodište). Pritom se međusobno paralelne mrežne ravnine smatraju ekvivalentnim (u smislu rasta kristala) ukoliko se nalaze s iste strane ishodišta.

# Mrežne ravnine

(Primitivna, direktna) rešetka je skup svih točaka prostora koje u (kristalografskom) koordinatnom sustavu imaju cjelobrojne koordinate. Recipročna rešetka: Analogno, ali u recipročnom sustavu.

Mrežne ravnine su ravnine koje prolaze kroz tri (i stoga beskonačno mnogo) točaka direktne rešetke (ali ne kroz ishodište). Pritom se međusobno paralelne mrežne ravnine smatraju ekvivalentnim (u smislu rasta kristala) ukoliko se nalaze s iste strane ishodišta. Stoga u jednadžbama mrežnih ravnina slobodni član nije relevantan, a koeficijenti uz koordinate su nam relevantni do na proporcionalnost s *pozitivnim* koeficijentom proporcionalnosti.

## Mrežne ravnine

(Primitivna, direktna) rešetka je skup svih točaka prostora koje u (kristalografskom) koordinatnom sustavu imaju cjelobrojne koordinate. Recipročna rešetka: Analogno, ali u recipročnom sustavu.

Mrežne ravnine su ravnine koje prolaze kroz tri (i stoga beskonačno mnogo) točaka direktne rešetke (ali ne kroz ishodište). Pritom se međusobno paralelne mrežne ravnine smatraju ekvivalentnim (u smislu rasta kristala) ukoliko se nalaze s iste strane ishodišta. Stoga u jednadžbama mrežnih ravnina slobodni član nije relevantan, a koeficijenti uz koordinate su nam relevantni do na proporcionalnost s pozitivnim koeficijentom proporcionalnosti.

### Zadatak

Odredite jednadžbe svih mrežnih ravnina po smjeru ekvivalentnih ravnini kroz točke rešetke  $(1, 2, 10)$ ,  $(25, 0, 0)$  i  $(0, 0, 10)$ .



# Mrežne ravnine

(Primitivna, direktna) rešetka je skup svih točaka prostora koje u (kristalografskom) koordinatnom sustavu imaju cjelobrojne koordinate. Recipročna rešetka: Analogno, ali u recipročnom sustavu.

Mrežne ravnine su ravnine koje prolaze kroz tri (i stoga beskonačno mnogo) točaka direktne rešetke (ali ne kroz ishodište). Pritom se međusobno paralelne mrežne ravnine smatraju ekvivalentnim (u smislu rasta kristala) ukoliko se nalaze s iste strane ishodišta. Stoga u jednadžbama mrežnih ravnina slobodni član nije relevantan, a koeficijenti uz koordinate su nam relevantni do na proporcionalnost s pozitivnim koeficijentom proporcionalnosti.

## Zadatak

Odredite jednadžbe svih mrežnih ravnina po smjeru ekvivalentnih ravnini kroz točke rešetke  $(1, 2, 10)$ ,  $(25, 0, 0)$  i  $(0, 0, 10)$ .

$$2x - y + 5z = D \in \mathbb{N}.$$

## Millerovi indeksi

Svaka mrežna ravnina ima jednadžbu oblika  $Ax + By + Cz = D$  u kojoj su  $A$ ,  $B$ ,  $C$  i  $D$  cijeli brojevi. Pritom ne gledamo ravnine danog smjera koje prolaze kroz ishodište, dakle je uvijek  $D \neq 0$ . Smjer mrežnih ravnina je potpuno određen vektorom normale  $\vec{n} = [A, B, C]^*$  (ili s  $\lambda [A, B, C]^*$ , gdje je  $\lambda > 0$  jer ne želimo mijenjati stranu s koje se u odnosu na ishodište nalazi promatrani smjer).

# Millerovi indeksi

Svaka mrežna ravnina ima jednadžbu oblika  $Ax + By + Cz = D$  u kojoj su  $A$ ,  $B$ ,  $C$  i  $D$  cijeli brojevi. Pritom ne gledamo ravnine danog smjera koje prolaze kroz ishodište, dakle je uvijek  $D \neq 0$ . Smjer mrežnih ravnina je potpuno određen vektorom normale  $\vec{n} = [A, B, C]^*$  (ili s  $\lambda [A, B, C]^*$ , gdje je  $\lambda > 0$  jer ne želimo mijenjati stranu s koje se u odnosu na ishodište nalazi promatrani smjer).

## Definicija

*Ako su koeficijenti  $A$ ,  $B$  i  $C$  maksimalno skraćeni (poz. brojem), nazivamo ih **Millerovim indeksima** promatranog smjera  $i$  označavamo s  $(hkl)$ .<sup>a</sup>*

<sup>a</sup>Negativni Millerovi indeksi označavaju se natcrtavanjem umjesto predznaka minus:  $\bar{1} = -1$ .

## Primjer

*Mrežne ravnine iz prethodnog zadatka imaju Millerove indekse  $(2\bar{1}5)$*

## Primjer

*Mrežne ravnine iz prethodnog zadatka imaju Millerove indekse  $(2\bar{1}5)$*

## Zadatak

*Kakve ravnine opisuju Millerovi indeksi  $(hk0)$ ? A  $(010)$ ?*

## Primjer

*Mrežne ravnine iz prethodnog zadatka imaju Millerove indekse  $(2\bar{1}5)$*

## Zadatak

*Kakve ravnine opisuju Millerovi indeksi  $(hk0)$ ? A  $(010)$ ?*

Ako su Millerovi indeksi promatranog smjera  $(hkl)$ , odgovarajući vektor normale je  $\vec{n}^* = [h, k, l]^*$ , a ako je neki Millerov indeks jednak 0 to znači paralelnost ravnina tog smjera s odgovarajućom koordinatnom osi.

## Primjer

Mrežne ravnine iz prethodnog zadatka imaju Millerove indekse  $(2\bar{1}5)$

## Zadatak

Kakve ravnine opisuju Millerovi indeksi  $(hkl)$ ? A  $(010)$ ?

Ako su Millerovi indeksi promatranog smjera  $(hkl)$ , odgovarajući vektor normale je  $\vec{n}^* = [h, k, l]^*$ , a ako je neki Millerov indeks jednak 0 to znači paralelnost ravnina tog smjera s odgovarajućom koordinatnom osi.

Za smjer  $(hkl)$  kao reprezentativnu možemo uzeti bilo koju ravninu

$$hx + ky + lz = D \in \mathbb{N}$$

Za  $D = 1$  dobijemo ravninu smjera  $(hkl)$  najbližu ishodištu. No, ona ne mora koordinatne osi sjeći u točkama rešetke (zapravo, to neće nikad biti slučaj osim ako su  $h, k, l = \pm 1$ ).

## Primjer

*Ravnina  $2x + 3y - z = 1$  koordinatne osi siječe redom u točkama  $P = (\frac{1}{2}, 0, 0)$ ,  $Q = (0, \frac{1}{3}, 0)$ ,  $R = (0, 0, -1)$ , od njih je samo  $R$  točka rešetke. Koja ravnina istog smjera je najbliža ishodištu među onima koje sve tri osi sijeku u točkama rešetke?*



## Primjer

Ravnina  $2x + 3y - z = 1$  koordinatne osi siječe redom u točkama  $P = (\frac{1}{2}, 0, 0)$ ,  $Q = (0, \frac{1}{3}, 0)$ ,  $R = (0, 0, -1)$ , od njih je samo  $R$  točka rešetke. Koja ravnina istog smjera je najbliža ishodištu među onima koje sve tri osi sijeku u točkama rešetke? To je  $2x + 3y - z = 6$ .

Ako je  $v$  najmanji pozitivni zajednički višekratnik Millerovih indeksa, jednadžba  $hx + ky + lz = v$  predstavlja ravninu smjera  $(hkl)$  koja je najbliža ishodištu, a da pritom nijednu os ne siječe u točki koja nije točka rešetke.

## Primjer

Ravnina  $2x + 3y - z = 1$  koordinatne osi siječe redom u točkama  $P = (\frac{1}{2}, 0, 0)$ ,  $Q = (0, \frac{1}{3}, 0)$ ,  $R = (0, 0, -1)$ , od njih je samo  $R$  točka rešetke. Koja ravnina istog smjera je najbliža ishodištu među onima koje sve tri osi sijeku u točkama rešetke? To je  $2x + 3y - z = 6$ .

Ako je  $v$  najmanji pozitivni zajednički višekratnik Millerovih indeksa, jednadžba  $hx + ky + lz = v$  predstavlja ravninu smjera  $(hkl)$  koja je najbliža ishodištu, a da pritom nijednu os ne siječe u točki koja nije točka rešetke.

## Napomena

Kad smo već kod odsječaka: Ravnina  $2x + 3y - z = 6$  ima segmentni oblik

$$\frac{x}{3} + \frac{y}{2} + \frac{z}{-6} = 1.$$

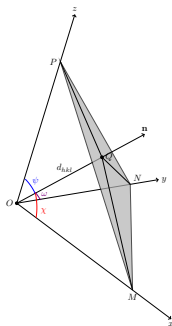
Stvarni iznosi odsječaka su  $3a$ ,  $2b$ ,  $\bar{6}c$ . Razmjer  $3a : 2b : \bar{6}c$  naziva se **Weißovim parametrima** smjera  $(2\bar{3}1)$ .

## Međumrežni razmak

Razmak među susjednim mrežnim ravninama istog smjera ( $hkl$ ) naziva se **međumrežnim razmakom**  $d_{hkl}$  tog smjera. On je jednak udaljenosti ishodišta do njemu najbliže mrežne ravnine promatranog smjera, dakle do ravnine  $hx + ky + lz = 1$ .

# Međumrežni razmak

Razmak među susjednim mrežnim ravninama istog smjera ( $hkl$ ) naziva se **međumrežnim razmakom**  $d_{hkl}$  tog smjera. On je jednak udaljenosti ishodišta do njemu najbliže mrežne ravnine promatranog smjera, dakle do ravnine  $hx + ky + lz = 1$ . Stoga je  $d_{hkl} = |OQ|$  ako je  $Q$  projekcija  $O$  na ravninu.



Odsječci ravnine  $hx + ky + lz = 1$  na osima, ako postoje, su redom  $\frac{1}{h}$ ,  $\frac{1}{k}$  und  $\frac{1}{l}$ . Ako su odgovarajuća probodišta označena s  $M$ ,  $N$  i  $P$  imamo

$$\overrightarrow{OM} = \frac{1}{h}\vec{a}, \quad \overrightarrow{ON} = \frac{1}{k}\vec{b}, \quad \overrightarrow{OP} = \frac{1}{l}\vec{c}.$$

Odsječci ravnine  $hx + ky + lz = 1$  na osima, ako postoje, su redom  $\frac{1}{h}$ ,  $\frac{1}{k}$  und  $\frac{1}{l}$ . Ako su odgovarajuća probodišta označena s  $M$ ,  $N$  i  $P$  imamo

$$\overrightarrow{OM} = \frac{1}{h}\vec{a}, \overrightarrow{ON} = \frac{1}{k}\vec{b}, \overrightarrow{OP} = \frac{1}{l}\vec{c}.$$

Nadalje, znamo:  $\angle OQM = \angle OQN = \angle OQP = 90^\circ$ ,  $\angle NOP = \alpha$ ,  $\angle MOP = \beta$ ,  $\angle MON = \gamma$ . Ako ravnina siječe sve tri osi, međumrežni razmak je visina  $d_{hkl} = |OQ|$  piramide  $OMNP$ .

Odsječci ravnine  $hx + ky + lz = 1$  na osima, ako postoje, su redom  $\frac{1}{h}$ ,  $\frac{1}{k}$  und  $\frac{1}{l}$ . Ako su odgovarajuća probodišta označena s  $M$ ,  $N$  i  $P$  imamo

$$\overrightarrow{OM} = \frac{1}{h}\vec{a}, \overrightarrow{ON} = \frac{1}{k}\vec{b}, \overrightarrow{OP} = \frac{1}{l}\vec{c}.$$

Nadalje, znamo:  $\angle OQM = \angle OQN = \angle OQP = 90^\circ$ ,  $\angle NOP = \alpha$ ,  $\angle MOP = \beta$ ,  $\angle MON = \gamma$ . Ako ravnina siječe sve tri osi, međumrežni razmak je visina  $d_{hkl} = |OQ|$  piramide  $OMNP$ . Njezin je volumen

$$\frac{1}{3}d_{hkl}P_{\triangle MNP} = V_{OMNP} = \frac{1}{3}\overrightarrow{OM} \cdot \overrightarrow{ON} \times \overrightarrow{OP} = \frac{1}{3|hkl|}V,$$

dakle

$$h, k, l \neq 0 \Rightarrow d_{hkl} = \frac{V}{|hkl|P_{\triangle MNP}}.$$

## Zadatak

*Uzmimo kristalografsku bazu iz drugog zadatka u ovoj prezentaciji. Odredite međumrežni razmak za smjer ravnina određen u trećem zadatku.*



## Zadatak

*Uzmimo kristalografsku bazu iz drugog zadatka u ovoj prezentaciji. Odredite međumrežni razmak za smjer ravnina određen u trećem zadatku.*

$$2x - y + 5z = 1 \Rightarrow M = \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right), N = (0, -1, 0), P = \left(0, 0, \frac{1}{5}\right) \Rightarrow$$

## Zadatak

*Uzmimo kristalografsku bazu iz drugog zadatka u ovoj prezentaciji. Odredite međumrežni razmak za smjer ravnina određen u trećem zadatku.*

$$2x - y + 5z = 1 \Rightarrow M = \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right), N = (0, -1, 0), P = \left(0, 0, \frac{1}{5}\right) \Rightarrow$$

$$|OM| = \frac{1}{2}a = 4,751 \text{ \AA}, |ON| = b = 11,974 \text{ \AA}, |OP| = \frac{1}{5}c = 0,648 \text{ \AA}$$

Kosinusov poučak za trokute  $\triangle OMN$  i  $\triangle ONP$  se svodi na Pitagorin pa je  $|MN| = 12,8821 \dots \text{Å}$  i  $|NP| = 11,9915 \dots \text{Å}$ . Za  $\triangle OMP$  primijenimo opći kosinusov poučak:

$$|NP| = \sqrt{|OM|^2 + |OP|^2 - 2|OM| \cdot |OP| \cdot \cos \beta} = 4,843577 \dots \text{Å}.$$

Kosinusov poučak za trokute  $\triangle OMN$  i  $\triangle ONP$  se svodi na Pitagorin pa je  $|MN| = 12,8821 \dots \text{Å}$  i  $|NP| = 11,9915 \dots \text{Å}$ . Za  $\triangle OMP$  primijenimo opći kosinusov poučak:

$$|NP| = \sqrt{|OM|^2 + |OP|^2 - 2|OM| \cdot |OP| \cdot \cos \beta} = 4,843577 \dots \text{Å}.$$

Heronova formula daje

$$P_{\triangle MNP} = 29,039 \dots \text{Å}^2.$$

Stoga je

$$d_{2\bar{1}5} = \frac{V}{10P_{\triangle MNP}} = 1,255 \text{Å}.$$

# Ortogonalni sustavi

Ako je koordinatni sustav ortogonalan, lako se izvodi sljedeća formula za međumrežni razmak u ortogonalnim sustavima

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}.$$

Ona vrijedi za sve  $h$ ,  $k$ ,  $l$ .

## Zadatak

*Neka je tetragonska jedinična ćelija zadana parametrima  $a = 4,820 \text{ \AA}$ ,  $c = 6,288 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . Koliki je međumrežni razmak ravnina koje imaju isti smjer kao i ravnina koja koordinatne osi siječe u točkama  $(-2, 0, 0)$ ,  $(0, 3, 0)$  i paralelna je sa  $z$ -osi?*

## Primjer

Očigledno u ortogonalnim sustavima vrijedi  $d_{100} = a$ ,  $d_{010} = b$ ,  $d_{001} = c$ .

Neka je  $h$  jedna visina jedinične ćelije, npr. ona koju ima ako paralelogram određen s  $\vec{a}$  i  $\vec{b}$  gledamo kao osnovicu. Tada je  $h = d_{001}$  i  $V = h \cdot |\vec{a} \times \vec{b}|$  pa imamo

$$c^* = \frac{1}{V} \cdot |\vec{a} \times \vec{b}| = \frac{1}{h} = \frac{1}{d_{001}}.$$

Iz definicije recipročne baze i vektorskog produkta sad slijedi

$$d_{001} = \frac{1}{c^*} = \frac{V}{ab \sin \gamma}$$

i analogno

$$d_{010} = \frac{1}{a^*} = \frac{V}{bc \sin \alpha}, \quad d_{100} = \frac{1}{b^*} = \frac{V}{ac \sin \beta}.$$

## Temeljni zakon recipročne rešetke

Neka je  $M$  probodište ravnine  $hx + ky + lz = 1$  s  $x$ -osi:<sup>2</sup>

$$M = \left(\frac{1}{h}, 0, 0\right).$$

Označimo  $|\vec{n}^*|$  vektora  $\vec{n}^* = [h, k, l]^*$  s  $\mathcal{N}_{hkl}$ .

---

<sup>2</sup>Ako ga nema, uzmemo sjecište s jednom od druge dvije koordinatne osi.

<sup>3</sup>Podsjećamo: Jedinice iznosa u recipročnom prostoru su recipročne jedinica u direktnom prostoru.

## Temeljni zakon recipročne rešetke

Neka je  $M$  probodište ravnine  $hx + ky + lz = 1$  s  $x$ -osi:<sup>2</sup>

$$M = \left(\frac{1}{h}, 0, 0\right).$$

Označimo  $|\vec{n}^*|$  vektora  $\vec{n}^* = [h, k, l]^*$  s  $\mathcal{N}_{hkl}$ .

Iznos  $d_{hkl}$  jednaka je duljini ortogonalne projekcije  $\overrightarrow{OM}$  na vektor  $\vec{n}^*$ :<sup>3</sup>

$$d_{hkl} = \left| \frac{\overrightarrow{OM} \cdot \vec{n}^*}{\mathcal{N}_{hkl}} \right| = \frac{\frac{1}{h} \cdot h + 0 \cdot k + 0 \cdot l}{\mathcal{N}_{hkl}} = \frac{1}{\mathcal{N}_{hkl}},$$

tj. dokazali smo

**Teorem (Temeljni zakon recipročne rešetke)**

$$d_{hkl} \mathcal{N}_{hkl} = 1.$$

<sup>2</sup>Ako ga nema, uzmemo sjecište s jednom od druge dvije koordinatne osi.

<sup>3</sup>Podsjećamo: Jedinice iznosa u recipročnom prostoru su recipročne jedinicama u direktnom prostoru.



## Zadatak

Odredite kut  $\varphi$  između  $y$ -osi i normale smjera (123) ako je  $a = 100 \text{ \AA}$ ,  $b = 150 \text{ \AA}$ ,  $c = 180 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . Imamo prvo  $\vec{n} = [1, 2, 3]^*$ , a smjer  $y$ -osi je  $\vec{b} = [0, 1, 0]$  pa je

$$\cos \varphi = \frac{[1, 2, 3]^* \cdot [0, 1, 0]}{|\vec{n}| \cdot b} = \frac{2d_{123}}{b} \Rightarrow \varphi = \arccos \frac{2d_{123}}{b} \approx 55^\circ 33'.$$

## Zadatak

Odredite kut  $\varphi$  između  $y$ -osi i normale smjera (123) ako je  $a = 100 \text{ \AA}$ ,  $b = 150 \text{ \AA}$ ,  $c = 180 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . Imamo prvo  $\vec{n} = [1, 2, 3]^*$ , a smjer  $y$ -osi je  $\vec{b} = [0, 1, 0]$  pa je

$$\cos \varphi = \frac{[1, 2, 3]^* \cdot [0, 1, 0]}{|\vec{n}| \cdot b} = \frac{2d_{123}}{b} \Rightarrow \varphi = \arccos \frac{2d_{123}}{b} \approx 55^\circ 33'.$$

## Zadatak

Neka je kristalografska baza zadana s  $a = b = c = 100 \text{ pm}$ ,  $\alpha = \gamma = 90^\circ$ ,  $\beta = 60^\circ$ . Izračunajte kut  $\psi$  kojeg zatvaraju normale smjera (501) s  $x$ -osi?

## Zadatak

Odredite kut  $\varphi$  između  $y$ -osi i normale smjera (123) ako je  $a = 100 \text{ \AA}$ ,  $b = 150 \text{ \AA}$ ,  $c = 180 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . Imamo prvo  $\vec{n} = [1, 2, 3]^*$ , a smjer  $y$ -osi je  $\vec{b} = [0, 1, 0]$  pa je

$$\cos \varphi = \frac{[1, 2, 3]^* \cdot [0, 1, 0]}{|\vec{n}| \cdot b} = \frac{2d_{123}}{b} \Rightarrow \varphi = \arccos \frac{2d_{123}}{b} \approx 55^\circ 33'.$$

## Zadatak

Neka je kristalografska baza zadana s  $a = b = c = 100 \text{ pm}$ ,  $\alpha = \gamma = 90^\circ$ ,  $\beta = 60^\circ$ . Izračunajte kut  $\psi$  kojeg zatvaraju normale smjera (501) s  $x$ -osi?

$$\cos \psi = \frac{[5, 0, 1]^* \cdot [1, 0, 0]}{\mathcal{N}_{501} \cdot a} = \frac{5}{a \mathcal{N}_{501}} = \frac{5}{a \sqrt{[5, 0, 1]^* \cdot [5, 0, 1]^*}} = \heartsuit$$

$$[5, 0, 1]^* \cdot [5, 0, 1]^* = 25(a^*)^2 + 10a^*c^* \cos \beta^* + (c^*)^2 = \spadesuit$$

$$V = abc \sin \beta, a^* = \frac{bc \sin \alpha}{V}, c^* = \frac{ab \sin \gamma}{V} \Rightarrow a^* = c^* = \frac{2}{a\sqrt{3}};$$

$$[5, 0, 1]^* \cdot [5, 0, 1]^* = 25(a^*)^2 + 10a^*c^* \cos \beta^* + (c^*)^2 = \spadesuit$$

$$V = abc \sin \beta, a^* = \frac{bc \sin \alpha}{V}, c^* = \frac{ab \sin \gamma}{V} \Rightarrow a^* = c^* = \frac{2}{a\sqrt{3}};$$

$$\begin{aligned} \cos \beta^* &= \frac{\vec{a}^* \cdot \vec{c}^*}{a^* c^*} = \frac{V^2}{ab^2c \sin \alpha \sin \gamma} \frac{1}{V^2} (\vec{b} \times \vec{c}) \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) = \\ &= \frac{1}{a^4} \vec{a} \cdot (\vec{b} \times (\vec{b} \times \vec{c})) = \frac{1}{a^4} \vec{a} \cdot ((\vec{b} \cdot \vec{c}) \vec{b} - (\vec{b} \cdot \vec{b}) \vec{c}) = -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$[5, 0, 1]^* \cdot [5, 0, 1]^* = 25(a^*)^2 + 10a^*c^* \cos \beta^* + (c^*)^2 = \spadesuit$$

$$V = abc \sin \beta, a^* = \frac{bc \sin \alpha}{V}, c^* = \frac{ab \sin \gamma}{V} \Rightarrow a^* = c^* = \frac{2}{a\sqrt{3}};$$

$$\begin{aligned} \cos \beta^* &= \frac{\vec{a}^* \cdot \vec{c}^*}{a^* c^*} = \frac{V^2}{ab^2c \sin \alpha \sin \gamma} \frac{1}{V^2} (\vec{b} \times \vec{c}) \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) = \\ &= \frac{1}{a^4} \vec{a} \cdot (\vec{b} \times (\vec{b} \times \vec{c})) = \frac{1}{a^4} \vec{a} \cdot ((\vec{b} \cdot \vec{c}) \vec{b} - (\vec{b} \cdot \vec{b}) \vec{c}) = -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \spadesuit = \frac{104}{3a^2} - \frac{40}{3a^2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{84}{3a^2} \Rightarrow \mathcal{N}_{501} = \frac{2\sqrt{7}}{a} \Rightarrow \psi \approx 19^\circ 6' 24''$$