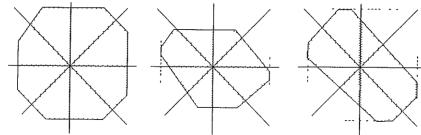
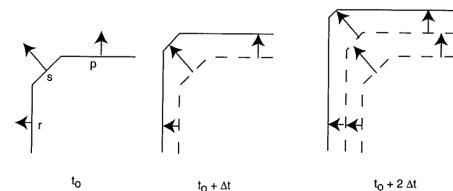


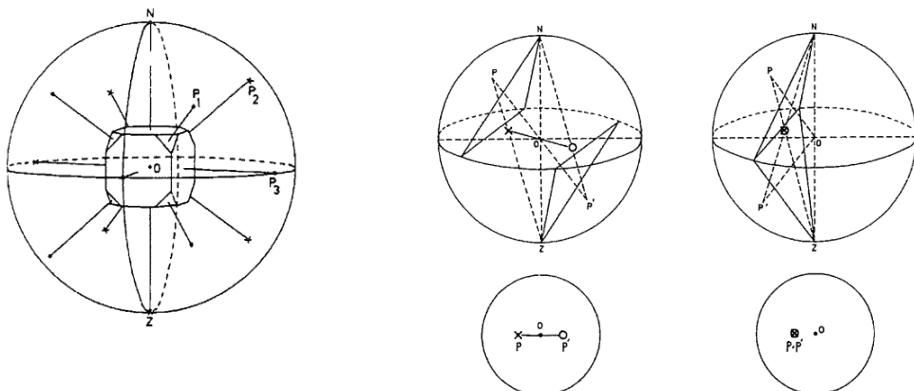
## H2: kristallijne materialen

### 2.1 basiswetten van de geometrische kristallografie

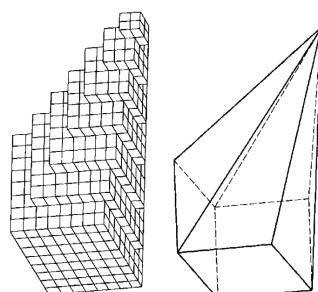
#### 2.1.1 wet van Steno

wet der constanteitheid der hoeken	= bij eenzelfde kristalsoort zijn de hoeken tss gelijkaardige vlakken steeds dezelfde > gevolg: 1) tijdens groei ve kristal verplaatsen de vlakken zich evenwijdig aan zichzelf > bekijk de normalen op de vlakken als de groeirichting: 
	2) tijdens groei verdwijnen er vlakken > voor elk vlak kan een groeisnelheid $v_n$ gedefinieerd worden > verschillend van vlak tot vlak > vorm van kristal wordt bepaald door het traagst groeiend vlak: 

- 3) stereografische projectie  
> nl: beschouw een bol rond het kristal  
> bekijk de punten op de bol waar de normalen de bol snijden, de *vlakpolen*  
> projecteer deze vlakpolen op een vlak, en je krijgt de stereografische proj.:



#### 2.1.2 de tweede basiswet van de geometrische kristallografie

observaties van Haüy	wanneer een kristal gebroken word, voldoen zijn fragmenten aan de wet van steno ie: de fragmenten hebben gelijke hoeken voor gelijke vlakken >> we kunnen kristallen opbreken tot een basiseenheid > kristallen zijn opgebouwd uit deze basiseenheid: > afhankelijk van de atomaire structuur 
wet der rationale parameters	Met drie niet-evenwijdige ribben van een kristal als referentie-assen geldt dat de afgesneden stukken $A_s$ , $B_s$ en $C_s$ en $A_p$ , $B_p$ en $C_p$ door elk paar kristalvlakken $s$ en $p$ , de parameters genoemd, zich verhouden als gehele getallen: $\frac{A_s}{A_p} \cdot \frac{B_s}{B_p} \cdot \frac{C_s}{C_p} = H \cdot K \cdot L$

indices van Miller	<p>1: neem drie niet-evenwijdige ribben      2: het referentievak ABC snijdt de stukken a=OA b=OB en c=OC af          &gt; gebruik deze assen als een eenheid van lengte          &gt; dan geldt voor dit referentievak:</p> $\frac{a}{a} \cdot \frac{b}{b} \cdot \frac{c}{c} = 1 \cdot 1 \cdot 1$ <p>&gt;&gt; referentievak is altijd (111)</p> <p>3: voor een willekeurig kristalvlak geldt dan:</p> $\frac{a}{A_p} \cdot \frac{b}{B_p} \cdot \frac{c}{C_p} = h : k : l$ <p>&gt; we kunnen dit vlak kenmerken via (hkl)</p> <p>&gt;&gt; deze indices zijn onafhankelijk van druk en temperatuur      nl: de vlakken zullen relatief tot het referentievak niet uitzetten</p>
--------------------	--

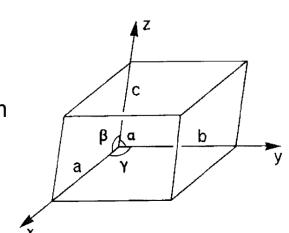
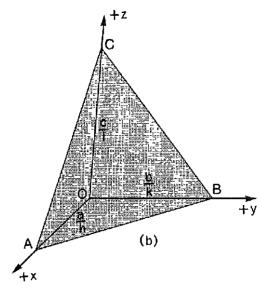
## 2.2 translatiesymmetrie

kristallijne stof	<p>= vastestof waarbinnen de atomen driedimensionaal periodiek gerangschikt zijn          &gt; elk atoom bezit thermische energie en vibreert rondom zijn gemiddelde positie          &gt; regelmatige schikking heeft betrekking tot deze gem. positie</p>
Eénkristallen	<p>= kristallijne vastestof waarvan de posities van alle atomen met één driedimensionale matrix van punten gerelateerd kan worden</p>
polykristallijne stoffen	<p>= kristallen van vele willekeurig georiënteerde kristallen met versch. vorm en grootte</p>

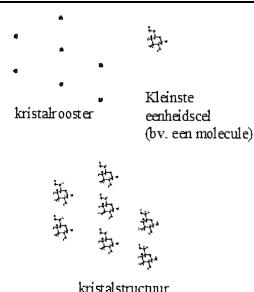
### 2.2.1 de kleinste eenheidscel

eenheidscel	<p>= eenheid waaruit een éénkristal is opgebouwd          &gt; vb: bekijk een grafietlaag:</p> <p>de zwarte puntjes zijn C-atomen          &gt; kan als oneindig vlak beschouwd worden              nl: C ligt zo dicht bij elkaar dat in een kleine laag grafiet al heel veel atomen zitten</p> <p>een eenheidscel is aangeduid door de parallelle assen x en y          &gt; bevat de punten A en B          &gt; door translatie vd parallelogram kan de volledige laag grafiet gebouwd worden</p> <p>de vorm vd eenheidscel wordt volledig gedef. door:          - de twee zijden als referentieassen x en y te kiezen          - de hoek tss de assen te geven          - de lengte vd zijde vd eenheidscel parallel aan de gekozen assen te noteren          &gt; conventie: lengte langs de x-as = a              lengte langs de y-as = b              hoek tss de assen = γ</p> <p>neem de linkerbovenhoek als de oorsprong van het assenstelsel          vb: bekijk de figuur              &gt; volledige laag grafiet gedefinieerd via de coords: (a=b=0,246nm, γ=120°) en (2/3,1/3)</p>
-------------	---

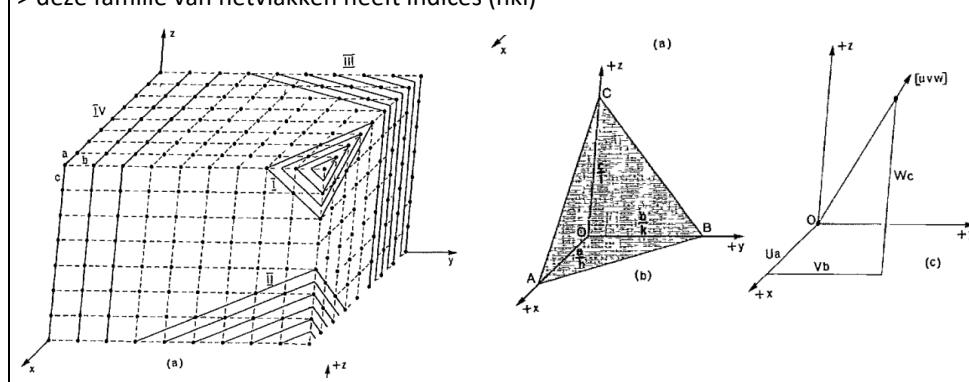
eenheidscel in 3D	<p>we kunnen dit concept uitbreiden tot 3D          &gt; elke eenheidscel zal kunnen voorgesteld worden door een parallellepipedum</p> <p>neem lengtes van de assen a,b,c zo klein mogelijk          &gt; noteer de hoeken α,β,γ tussen de assen          &gt; bekijk de positie van de atomen binnen deze parallellepipedum</p>
-------------------	--



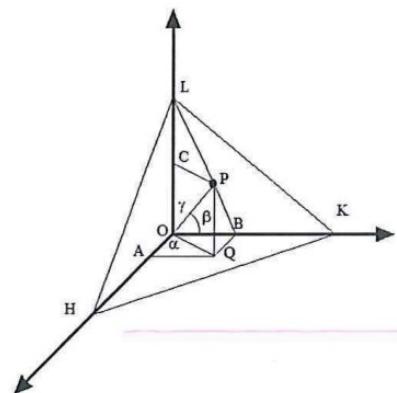
## 2.2.2 het kristalrooster

roostervoorwaarde	= kristalrooster is een denkbeeldig 3D ordening van punten waarbij elk punt exact dezelfde omringing heeft in dezelfde richting ie: het zicht in een bepaalde richting vanuit een bepaald punt vh kristalrooster is identiek aan het zicht in dezelfde richting vanuit gelijk welk ander punt van het kristalrooster
kristalrooster	= opbouw van punten die de kristalstructuur moet voorstellen:  > zij $p(r)$ = het kristalrooster $q(r)$ = de eenheidscel > dan is de convolutie ervan de kristalstructuur: $h(r) = p(r) \otimes q(r) = \int p(r - r') q(r') dr'$  

## 2.2.3 eigenschappen van het kristalrooster

netrechte	= rechte doorheen twee punten van het kristalrooster > punten zijn regelmatig gespatieerd op de netrechte > er zijn een dubbele oneindigheid rechten evenwijdig aan elke netrechte >> noem deze de familie van netrechten
netvlak	= een vlak doorheen drie niet-collinaire punten van het rooster > er zijn oneindig veel netvlakken evenwijdig aan dit netvlak >> noem deze de familie van netvlakken
vergelijking van een netvlak	1: kies een willekeurig punt en 3 netrechten als coördinaat-assen 2: de coördinaat ve knooppunt P is dan: $P(u_a, v_b, w_c)$ , met $u, v$ , en $w$ gehele getallen, en $a, b$ en $c$ perioden langs de gekozen $x$ -, $y$ -, en $z$ -as 3: de algemene vgl vh vlak door P is dan: $x/A + y/B + z/C = 1$ >> als nu het vlak door de punten $P_1, P_2, P_3$ gaat: $P_1(u_{1a}, v_{1b}, w_{1c}), P_2(u_{2a}, v_{2b}, w_{2c}), \text{ en } P_3(u_{3a}, v_{3b}, w_{3c})$ dan volgt: $\begin{cases} u_{1a}/A + v_{1b}/B + w_{1c}/C = 1 \\ u_{2a}/A + v_{2b}/B + w_{2c}/C = 1 \\ u_{3a}/A + v_{3b}/B + w_{3c}/C = 1 \end{cases}$ met $A=na/h$ , $B=nb/k$ en $C=nc/l$ met $n, h, k, l$ gehele getallen >> de vgl vh vlak door $P_1, P_2, P_3$ is dan: $x/(a/h) + y/(b/k) + z/(c/l) = n$ > deze familie van netvlakken heeft indices $(hkl)$ 
indiceren ve familie netvlakken	1: bekijk het netvlak dichts bij de gekozen oorsprong 2: deze snijdt op de $x$ -, $y$ -, $z$ -as respectievelijk de stukken $a/h$ , $b/k$ en $c/l$ af 3: de indices zijn dan $(h, k, l)$

vergelijking van een netrechte	twee netvlakken ( $h_1k_1l_1$ ) en ( $h_2k_2l_2$ ) bepalen een netrechte > deze maken het stelsel: $\begin{cases} \frac{h_1x}{a} + \frac{k_1y}{b} + \frac{l_1z}{c} = 0 \\ \frac{h_2x}{a} + \frac{k_2y}{b} + \frac{l_2z}{c} = 0 \end{cases}$ De oplossingen zijn $\left\{ \begin{array}{l} x/a = y/b = z/c = 0 \\ \frac{x}{a} \cdot \frac{y}{b} \cdot \frac{z}{c} = \underbrace{\begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix}}_u \cdot \underbrace{\begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix}}_v \cdot \underbrace{\begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}}_w \end{array} \right.$ dit is dus een rechte die de oorsprong verbindt met een punt > de cartesische coord verhouden zich als $au:bu:cw$ > als het assenkruis bepaald is, is ze dus volledig bepaald door $u:v:w$ > beschrijf de netrechte door: $[uvw]$
trucje netrechte bepalen	twee netvlakken ( $h_1k_1l_1$ ) en ( $h_2k_2l_2$ ) bepalen een netrechte > schrijf deze als: $h_1 \begin{bmatrix} k_1 & l_1 & h_1 & k_1 \\ k_2 & l_2 & h_2 & k_2 \end{bmatrix} l_1$ $h_2 \begin{bmatrix} k_1 & l_1 & h_1 & k_1 \\ k_2 & l_2 & h_2 & k_2 \end{bmatrix} l_2$ $\underbrace{u}_{\text{---}} \quad \underbrace{v}_{\text{---}} \quad \underbrace{w}_{\text{---}}$ >> bereken de determinant van de matrices gevormd door dit trucje
trucje netvlak bepalen	twee netrechten $[u_1v_1w_1]$ en $[u_2v_2w_2]$ bepalen een netvlak > schrijf deze als: $u_1 \begin{bmatrix} v_1 & w_1 & u_1 & v_1 \\ v_2 & w_2 & u_2 & v_2 \end{bmatrix} w_1$ $u_2 \begin{bmatrix} v_1 & w_1 & u_1 & v_1 \\ v_2 & w_2 & u_2 & v_2 \end{bmatrix} w_2$ $\underbrace{h}_{\text{---}} \quad \underbrace{k}_{\text{---}} \quad \underbrace{l}_{\text{---}}$
<b>2.2.4 het begrip <math>d_{hkl}</math></b>	
kortste afstand $d_{hkl}$	= kortste afstand tss twee naburige vlakken horende tot dezelfde familie netvlakken ( $hkl$ )
formule $d_{hkl}$	$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}}$
opstellen formule $d_{hkl}$	beschouw twee naburige vlakken waarvan één door de oorsprong gaat: $x/(a/h) + y/(b/k) + z/(c/l) = 0$ het andere vlak is $HKL$ en we zoeken dus $d_{hkl} = OP$ > $OP$ maakt de hoeken $\alpha, \beta$ en $\gamma$ > dan volgt: $OP = d_{hkl} = (a/h) \cos\alpha = (b/k) \cos\beta = (c/l) \cos\gamma$ dus: $\cos^2\alpha = d_{hkl}^2 (h/a)^2$ $\cos^2\beta = d_{hkl}^2 (k/b)^2$ $\cos^2\gamma = d_{hkl}^2 (l/c)^2$ beschouw vervolgens driehoeken $OQA$ , $OPC$ en $BPQ$ en gebruik Pythagoras om te vinden: $\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$ . dus: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}}$
$d_{hkl}$ bij $\gamma=120^\circ$	als de hoek tss de $x$ - en $y$ -as $120^\circ$ is hebben we echter: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \left( \frac{h^2 - hk + l^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}}}$



## 2.2.5 voorstelling van een driedimensionale kristalstructuur

voorstelling 3D kristalstructuur	= projecteer volgens één van de referentieassen op het vlak gedef. door de 2 andere assen > zet bij elk punt de coördinaat van de geprojecteerde as: vb: graafiet

## 2.3 de inwendige kristalstructuur en de uitwendige vorm

netvlakken in kristallen	kristalvlakken groeien evenwijdig aan netvlakken van het kristalrooster > voornamelijk die netvlakken met een groot aantal roosterpunten per opp. eenheid ie: voornamelijk netvlakken waarvoor de indices $h, k, l$ klein zijn > experimenteel: meestal niet groter dan 6 >> gevolg: gem. grote afstand $d_{hkl}$ tss vlakken
--------------------------	---

### 2.3.1 de wet van steno

hoek tss netvlakken	$\cos \theta = \frac{\frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\sqrt{\frac{h_1^2}{a^2} + \frac{k_1^2}{b^2} + \frac{l_1^2}{c^2} \sqrt{\frac{h_2^2}{a^2} + \frac{k_2^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2}}}}$
---------------------	---

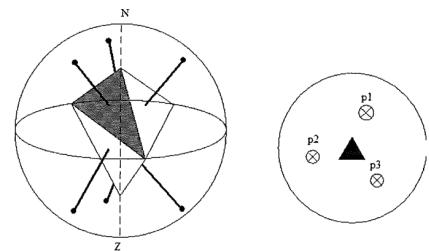
### 2.3.2 wet der rationale parameters

rationele parameters	de afgesneden stukken op de x-, y- en z-as bedragen voor vlak $(h_1 k_1 l_1)$ : $a/h_1$ , $b/k_1$ en $c/l_1$ en voor $(h_2 k_2 l_2)$ : $a/h_2$ , $b/k_2$ en $c/l_2$ >> hierdoor hebben we gehele getallen $H:K:L = h_1/h_2 : k_1/k_2 : l_1/l_2$
----------------------	---

## 2.4 kristalsymmetrie

### 2.4.1 symmetrieassen

symmetrieas	= laat een object in de ruimte op zichzelf samenvallen na een aantal opeenvolgende rotaties over een hoek $\alpha$ > dit moet gebeuren na $n$ opeenvolgende rotaties, dus $n=2\pi/\alpha$ moet geheel getal zijn > hierbij is $n$ de talligheid van de as > voorstellen met een $n$ -hoekige figuur
talligheid van een as	= $2\pi/n$ > voorgesteld door een $n$ -hoek > $n$ kan enkel 1,2,3,4 of 6 zijn bij kristallen
>> bewijs talligheid as	zie p35



### 2.4.2 spiegelvlakken

spiegelvlak	= een helft vh voorwerp wordt op de andere gespiegeld > voorgesteld door letter $m$

### 2.4.3 het inversiecentrum

inversie	= tweetallige rotatie na een spiegeling > genoteerd met door $\bar{1}$ > inversiecentrum genoteerd door een *	
----------	---	--

### 2.4.4 rotatie-inversieassen

rotatie-inversie	= opeenvolging van een n-tallige rotatie na een inversie > notatie: $\bar{n}$ .	
------------------	--	--

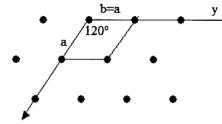
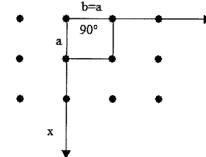
### 2.4.5 kristallografische puntgroepen

puntgroep	= een groep van symmetrie-elementen waarvan de toepassing ten minste één punt onveranderd in de ruimte laten														
notatie puntgroepen	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Notatie</th> <th>Beschrijving</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>nm</td> <td>een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak (en dus in het totaal n) doorgaat</td> </tr> <tr> <td><math>\bar{n}m</math></td> <td>een <math>\bar{n}</math> inversieas waar een spiegelvlak doorgaat. Wanneer <math>\bar{n}</math> even is, dan gaat er n/2 spiegelvlakken door. Wanneer <math>\bar{n}</math> oneven is, dan gaan er n spiegelvlakken door.</td> </tr> <tr> <td>n/m</td> <td>een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak loodrecht op staat</td> </tr> <tr> <td>n/mm</td> <td>een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak loodrecht op staat, en een ander spiegelvlak erdoor gaat</td> </tr> <tr> <td>nn'</td> <td>twee rotatieassen met verschillende talligheid. De as die als c-as fungeert, wordt eerst geschreven</td> </tr> <tr> <td>n2 of <math>\bar{n}2</math></td> <td>een n- of <math>\bar{n}</math>-tallige as waarop een tweetallige as loodrecht op staat. Hier geldt dezelfde opmerking als voor de notatie nm en <math>\bar{n}m</math></td> </tr> </tbody> </table>	Notatie	Beschrijving	nm	een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak (en dus in het totaal n) doorgaat	$\bar{n}m$	een $\bar{n}$ inversieas waar een spiegelvlak doorgaat. Wanneer $\bar{n}$ even is, dan gaat er n/2 spiegelvlakken door. Wanneer $\bar{n}$ oneven is, dan gaan er n spiegelvlakken door.	n/m	een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak loodrecht op staat	n/mm	een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak loodrecht op staat, en een ander spiegelvlak erdoor gaat	nn'	twee rotatieassen met verschillende talligheid. De as die als c-as fungeert, wordt eerst geschreven	n2 of $\bar{n}2$	een n- of $\bar{n}$ -tallige as waarop een tweetallige as loodrecht op staat. Hier geldt dezelfde opmerking als voor de notatie nm en $\bar{n}m$
Notatie	Beschrijving														
nm	een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak (en dus in het totaal n) doorgaat														
$\bar{n}m$	een $\bar{n}$ inversieas waar een spiegelvlak doorgaat. Wanneer $\bar{n}$ even is, dan gaat er n/2 spiegelvlakken door. Wanneer $\bar{n}$ oneven is, dan gaan er n spiegelvlakken door.														
n/m	een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak loodrecht op staat														
n/mm	een n-tallige rotatieas waar een spiegelvlak loodrecht op staat, en een ander spiegelvlak erdoor gaat														
nn'	twee rotatieassen met verschillende talligheid. De as die als c-as fungeert, wordt eerst geschreven														
n2 of $\bar{n}2$	een n- of $\bar{n}$ -tallige as waarop een tweetallige as loodrecht op staat. Hier geldt dezelfde opmerking als voor de notatie nm en $\bar{n}m$														

tabel puntgroepen	Nummer	Hermann-Maugain	Schoenflies	Kristalstelsel
	1	1	$C_1$	Triklien
	2	$\bar{1}$	$C_1$	
	3	m	$C_s$	Monoklien
	4	2	$C_2$	
	5	2/m	$C_{2h}$	
	6	mm	$C_{2v}$	Orthorombisch
	7	222	$D_2$	
	8	mmm	$D_{2h}$	
	9	4	$C_4$	Tetragonaal
	10	$\bar{4}$	$S_4$	
	11	4/m	$C_{4h}$	
	12	4mm	$C_{4v}$	
	13	$\bar{4}2m$	$D_{2d}$	
	14	422	$D_4$	
	15	4/mmm	$D_{4h}$	
	16	3	$C_3$	Trigonaal
	17	$\bar{3}$	$S_6$	
	18	3m	$C_{3v}$	
	19	32	$D_3$	
	20	$\bar{3}m$	$D_{3d}$	
	21	$\bar{6}$	$C_{3h}$	
	22	6	$C_6$	Hexagonaal
	23	6/m	$C_{6h}$	
	24	$\bar{6}m2$	$D_{3h}$	
	25	6mm	$C_{6v}$	
	26	622	$D_6$	
	27	6/mmm	$D_{6h}$	
	28	23	T	Kubisch
	29	$m\bar{3}$	$T_h$	
	30	$\bar{4}3m$	$T_d$	
	31	432	O	
	32	$m\bar{3}m$	$O_h$	

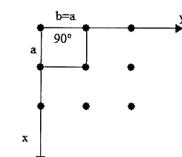
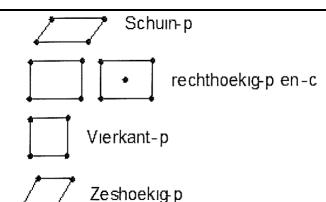
!!!opletten bij puntgroepen	<p>Normaal gezien staan de assen loodrecht op elkaar bij puntgroepen      &gt; niet bij: 23 en 432      &gt; !!!er is een verschil tss 23 en 32!!!</p> <p>KUBISCHE kristalstelsels kunnen niet-loodrechte assen hebben      &gt;&gt; alle andere kristalstelsels staan loodrecht</p>
gevolgen uit symmetrie	<p>we kunnen een kristalrooster als oneindig uitgestrekt beschouwen, wat als gevolg heeft:</p> <p>1: kleinste eenheidscel heeft zelfde puntgroep als kristal      &gt; op elk roosterpunt bevindt zich dezelfde puntgroep als het kristal      ie: een verzameling van oneindig aantal gelijk gespatieerde symmetrie-elementen      &gt; noem dit in 2D <i>vlakgroep</i> of 3D <i>ruimtegroep</i></p> <p>2: er zijn steeds symmetriecentra aanwezig</p> <p>3: symmetrieassen en symmetrievlakken kunnen geen willekeurige orientatie hebben:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Elk rooster heeft symmetriecentra</li> <li>Elke rechte evenwijdig aan een symmetrieas van een rooster die door een knooppunt gaat, is ook een symmetrieas met dezelfde talligheid.</li> <li>Elk vlak dat door een knooppunt gaat, en evenwijdig is aan een symmetrievlak van het rooster, is ook een symmetrievlak.</li> <li>Een symmetrieas van het rooster die door een knooppunt gaat is een netrechte</li> <li>Een symmetrievlak dat door een knooppunt gaat en loodrecht op een symmetrieas staat, is een netvlak.</li> <li>Wanneer een rooster een as met talligheid n groter dan twee heeft, dan staan er n tweetallige assen loodrecht op</li> </ol>

#### 2.4.6 de vorm van de roostercel

roostercel in 2D	<p>roostercel vorm wordt volledig bepaald door symmetrie-elementen in 2D      vb: zeshoekig rooster: <math>a=b</math> en <math>\gamma=120^\circ</math></p>  <p>vierkant rooster: <math>a=b</math> en <math>\gamma=90^\circ</math></p> 																					
roostercel in 3D	<p>symmetrie-elementen vd puntgroep bepalen de vorm vd 3D roostercel:</p> <table style="margin-left: 20px;"> <tbody> <tr> <td>Triklien</td> <td><math>a \neq b \neq c</math></td> <td>Alle hoeken willekeurig</td> </tr> <tr> <td>Monoklien</td> <td><math>a \neq b \neq c</math></td> <td><math>\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta</math></td> </tr> <tr> <td>Orthorombisch</td> <td><math>a \neq b \neq c</math></td> <td><math>\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ</math></td> </tr> <tr> <td>Trigonaal</td> <td><math>a = b = c</math></td> <td><math>\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ</math></td> </tr> <tr> <td>Tetragonaal</td> <td><math>a = b \neq c</math></td> <td><math>\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ</math></td> </tr> <tr> <td>Hexagonaal</td> <td><math>a = b \neq c</math></td> <td><math>\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ</math></td> </tr> <tr> <td>Kubisch</td> <td><math>a = b = c</math></td> <td><math>\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ</math></td> </tr> </tbody> </table>	Triklien	$a \neq b \neq c$	Alle hoeken willekeurig	Monoklien	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Orthorombisch	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Trigonaal	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Tetragonaal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Hexagonaal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Kubisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Triklien	$a \neq b \neq c$	Alle hoeken willekeurig																				
Monoklien	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$																				
Orthorombisch	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$																				
Trigonaal	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$																				
Tetragonaal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$																				
Hexagonaal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$																				
Kubisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$																				

#### 2.4.7 type roosters

##### in 2D

P-rooster	<p>= roosters waarbij roosterpunten worden gedeeld      Zie figuur: roosterpunten liggen op de hoekpunten van de roostercel      &gt; het gewicht van één roosterpunt is daarom maar 1/4</p> 
C-rooster	<p>= rooster met roosterpunten die niet gedeeld worden      &gt; hebben een gecentreerd roosterpunt</p>
2D roostertypes	<p>In 2D zijn er slechts 5 roosters beschikbaar:</p> 

## 3D roostertypes

Er zijn slechts 14 mogelijkheden:

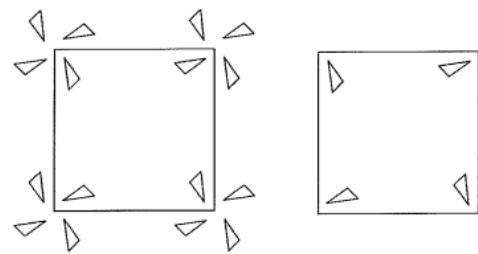
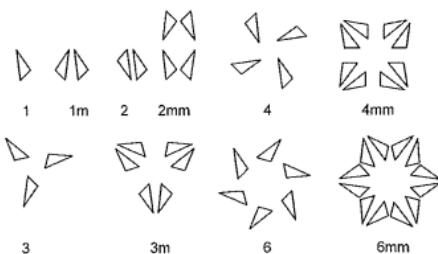
Kristalstelsel	Type	Nr	Eigenschappen	Voorstelling
Kubisch	P	1	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
	I	2		
	F	3		
Tetragonaal	P	4	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
	I	5		
Orthorombisch	P	6	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
	I	7		
	F	8		
	C	9		
Monoklien	P	10	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
	C	11		
Triklien	P	12	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	
Trigonaal	R	13	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Hexagonaal	P	14	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	

## 2.4.8 vlak- en ruimtegroepen

### vlakgroepen

vlakgroep = verzameling van gelijk gespatteerde symmetrie-elementen  
 > beschouw het rooster en pas op elk roosterpunt de symmetrie-elementen toe  
 > deze beschrijven dus de symmetrie van het kristal

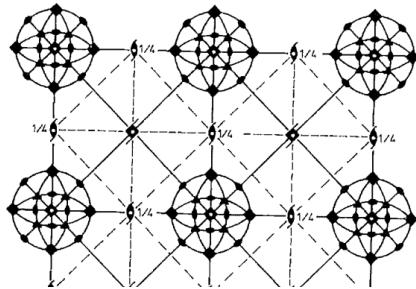
voorbeeld vlakgroep  
 kristal van puntgroep 4 -> vierkant-P rooster  
 > eenheidscel bestaat uit een geheel aantal keer de asymmetrische eenheidscel  
 > deze kleinste eenheid is het *structureel motief*



## ruimtegroepen

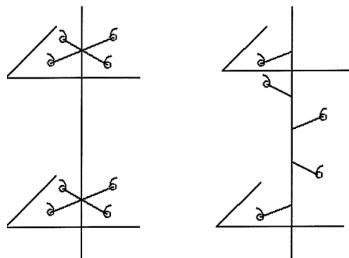
### ruimtegroepen

op zelfde wijze als puntvlakgroepen kunnen we ruimtevlakgroepen opstellen  
vb: combinatie van F rooster met  $m\bar{3}m$  maakt  $Fm\bar{3}m$



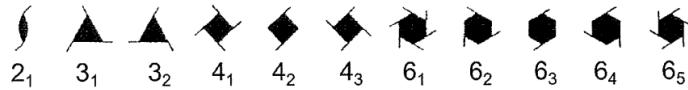
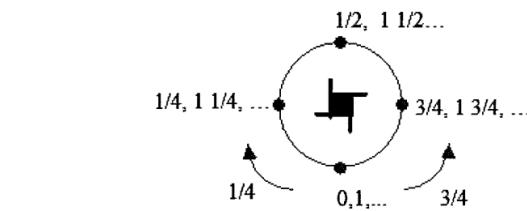
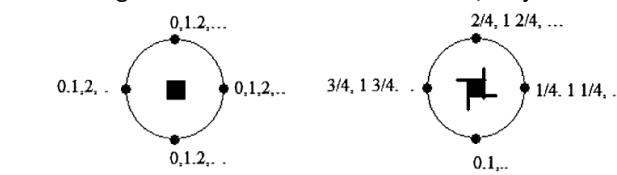
## translatie bevattende symmetrie-elementen

### schroefassen

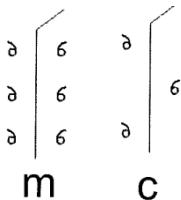


= rotatie gecombineerd met translatie evenwijdig aan beschouwde symmetrie-as  
> door periodicitet moet translatie gelijk zijn aan afstand tss de netvlakken na een rotatie van  $360^\circ$   
ie: bvb voor een 4tallige rotatie-as moet de translatie  $1/4$  zijn

we hebben:



### glijspiegellassen



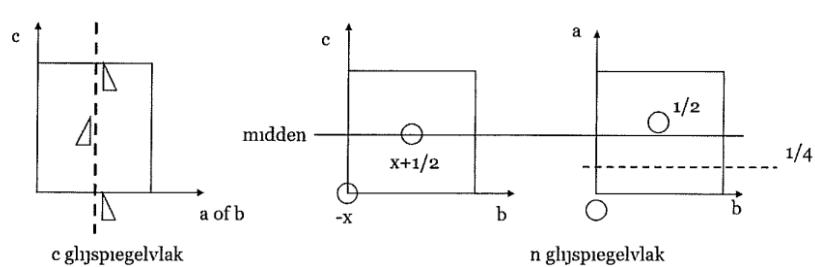
= combinatie van translatie en spiegeling  
> translatie en spiegeling moeten evenwijdig zijn en translatie de helft vd periode

3 types:

1: verplaatsing van  $a/2$  of  $b/2$  of  $c/2$   
> notatie: a, b of c

2: verplaatsing over  $(a+b)/2$  of  $(b+c)/2$  of  $(a+c)/2$   
> notatie: n  
> dit n glijspiegelvlak snijdt ofwel de c-as of a-as of b-as

3: verplaatsing over  $(a+b)/4$  of  $(b+c)/4$  of  $(a+c)/4$   
> notatie: d  
> komt enkel voor bij F-rooster



## uitbreiding vlakgroepen

### 17 vlakgroepen

Door combinatie van symmetrie-elementen kunnen we 17 vlakgroepen afleiden

notatie: 1: type rooster: P of C

2: as met hoogste talligheid: 1,2,3,4, of 6

> staat loodrecht op het vlak van het blad

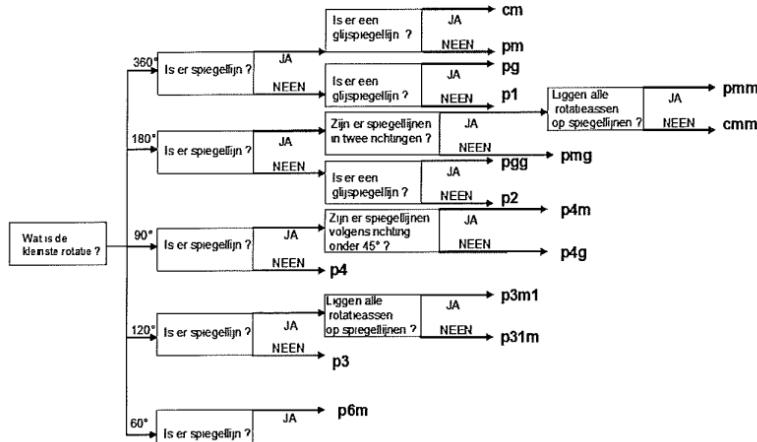
3: spiegellijn of glijspiegellijn: m of g

> snijdt de x-as

4: spiegellijn of glijspiegellijn: m of g

> snijdt een as die een hoek maakt met de x-as

als er geen letter of het cijfer 1 vermeld wordt is er geen symmetrie-element die de x-as snijdt



zie p61

## uitbreiding ruimtegroepen

### ruimtegroepen

we kunnen 230 groepen vinden door combinatie van:

- de veertien Bravaisroosters,
- de symmetrie-elementen 1,2,3,4,6,m, $\bar{1}$ , $\bar{4}$ ,
- de schroefassen,
- de glijspiegelvlakken

### vb: Pca<sub>2</sub><sub>1</sub>

1: puntgroep vh kristal is mm2

nl: laat de P vallen en c en a worden vervangen door m

> orthorombisch kristalstelsel

> orothorombisch primitieve roostercel

2: schroefas 2<sub>1</sub> is georiënteerd volgens de z-as

> de verplaatsing bedraagt c/2

> c glijspiegelvlak snijdt de x-as

dus in totaal: spiegeling loodrecht op x-as en glijrichting parallel met z-as over afstand c/2

3: glijspiegeling gebeurt volgens vlak loodrecht op de y-as en glijrichting is parallel met de x-as over een afstand a/2

### vb: Pnma

1: puntgroep is mmm

> orthorombisch en primitief

2: n glijspiegelvlak loodrecht op de x-as

> verplaatsing over (b+c)/2

3: loodrecht op y-as een spiegelvlak

4: loodrecht op z-as een a glijspiegelvlak

> verplaatsing volgens x-as over een afstand a/2

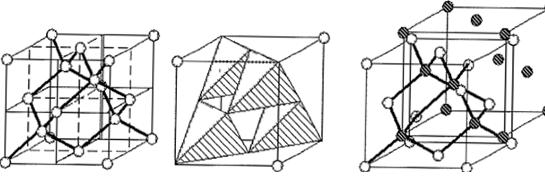
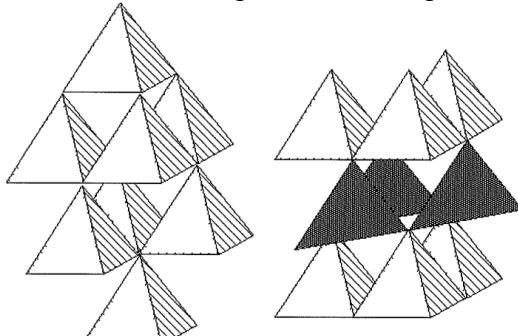
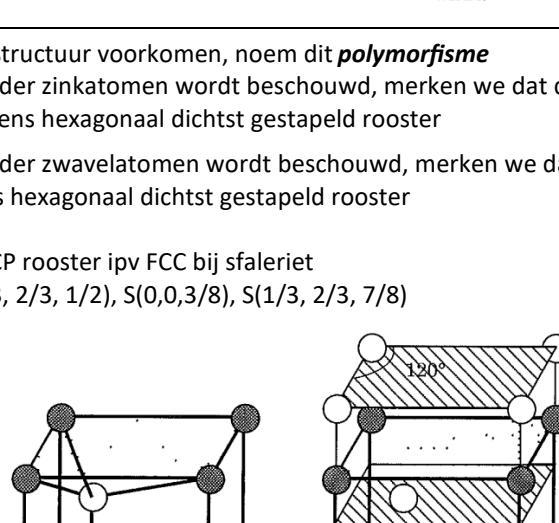
>> figuren: zie p69

## 2.4.9 de beschrijving van een kristalstructuur: werkmethoden en voorbeelden

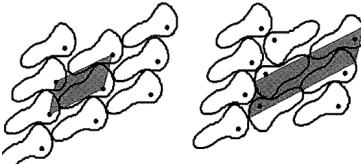
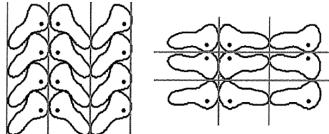
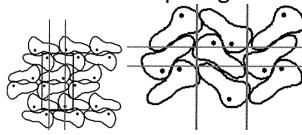
<b>tenoriet CuO</b>	<p>ruimtegroep C2/c  &gt; monokline structuur met <math>a \neq b \neq c</math>, <math>\alpha = \gamma</math>, en <math>\beta &gt; 90^\circ</math>.</p> <p>er zijn 8 equivalente posities:</p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="text-align: center;">8 f 1</td><td style="text-align: center;"><math>x, y, z</math></td><td style="text-align: center;"><math>\bar{x}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}</math></td><td style="text-align: center;"><math>x, \bar{y}, z + \frac{1}{2}</math></td></tr> <tr> <td style="text-align: center;">4 e 2</td><td style="text-align: center;"><math>0, y, \frac{1}{4}</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, \bar{y}, \frac{3}{4}</math></td><td></td><td></td></tr> <tr> <td style="text-align: center;">4 d 1</td><td style="text-align: center;"><math>\bar{1}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0</math></td><td></td></tr> <tr> <td style="text-align: center;">4 c 1</td><td style="text-align: center;"><math>\bar{1}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}</math></td><td></td></tr> <tr> <td style="text-align: center;">4 b 1</td><td style="text-align: center;"><math>\bar{1}</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, \frac{1}{2}, 0</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}</math></td><td></td></tr> <tr> <td style="text-align: center;">4 a 1</td><td style="text-align: center;"><math>\bar{1}</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, 0, 0</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, 0, \frac{1}{2}</math></td><td></td></tr> </table>	8 f 1	$x, y, z$	$\bar{x}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	$x, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	4 e 2	$0, y, \frac{1}{4}$	$0, \bar{y}, \frac{3}{4}$			4 d 1	$\bar{1}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0$		4 c 1	$\bar{1}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$		4 b 1	$\bar{1}$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		4 a 1	$\bar{1}$	$0, 0, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$																	
8 f 1	$x, y, z$	$\bar{x}, y, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	$x, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$																																											
4 e 2	$0, y, \frac{1}{4}$	$0, \bar{y}, \frac{3}{4}$																																													
4 d 1	$\bar{1}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0$																																												
4 c 1	$\bar{1}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$																																												
4 b 1	$\bar{1}$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$																																												
4 a 1	$\bar{1}$	$0, 0, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$																																												
<b>Pyriet</b>	<p>ruimtegroep <math>\text{Pa}\bar{3}</math>  &gt; kubisch met <math>a = b = c = 0,541 \text{ nm}</math> en <math>\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ</math></p> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="text-align: center;">24 d 1</td><td style="text-align: center;"><math>x, y, z</math> <math>\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z</math> <math>\frac{1}{2} + x, y, \frac{1}{2} + \bar{z}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}</math> <math>\frac{1}{2} + \bar{y}, \frac{1}{2} + z, x</math></td><td style="text-align: center;"><math>\bar{z}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{y}</math> <math>z, \frac{1}{2} + \bar{x}, \frac{1}{2} + y</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z</math> <math>\frac{1}{2} + y, \bar{z}, \frac{1}{2} + x</math></td><td style="text-align: center;"><math>\bar{y}, \frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} + x</math> <math>y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \frac{1}{2} + x</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}</math> <math>\frac{1}{2} + \bar{y}, z, \frac{1}{2} + \bar{x}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\bar{z}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{y}</math> <math>\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + z, x, \frac{1}{2} + \bar{y}</math> <math>\frac{1}{2} + \bar{z}, x, \frac{1}{2} + y</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + z, y, \frac{1}{2} + \bar{x}</math> <math>\frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}, y</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} + x, \bar{y}</math> <math>\frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}, \bar{y}</math></td></tr> <tr> <td style="text-align: center;">8 c 3</td><td style="text-align: center;"><math>x, x, x</math> <math>\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2} + x</math> <math>\frac{1}{2} + x, x, \frac{1}{2} + \bar{x}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\bar{x}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}</math> <math>x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \frac{1}{2} + x</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}</math> <math>\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, x</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}</math> <math>\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, x</math></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr> <td style="text-align: center;">4 b 3</td><td style="text-align: center;"><math>\bar{3}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, \frac{1}{2}, 0</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2}, 0, 0</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, 0, \frac{1}{2}</math></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr> <td style="text-align: center;">4 a 3</td><td style="text-align: center;"><math>\bar{3}</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, 0, 0</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}</math></td><td style="text-align: center;"><math>0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}</math></td><td style="text-align: center;"><math>\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0</math></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> </table>	24 d 1	$x, y, z$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	$\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$ $\frac{1}{2} + x, y, \frac{1}{2} + \bar{z}$	$\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{y}, \frac{1}{2} + z, x$	$\bar{z}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{y}$ $z, \frac{1}{2} + \bar{x}, \frac{1}{2} + y$	$\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$ $\frac{1}{2} + y, \bar{z}, \frac{1}{2} + x$	$\bar{y}, \frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} + x$ $y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \frac{1}{2} + x$	$\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{y}, z, \frac{1}{2} + \bar{x}$	$\bar{z}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{y}$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$	$\frac{1}{2} + z, x, \frac{1}{2} + \bar{y}$ $\frac{1}{2} + \bar{z}, x, \frac{1}{2} + y$	$\frac{1}{2} + z, y, \frac{1}{2} + \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}, y$	$\frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} + x, \bar{y}$ $\frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$	8 c 3	$x, x, x$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$	$\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2} + x$ $\frac{1}{2} + x, x, \frac{1}{2} + \bar{x}$	$\bar{x}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}$ $x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \frac{1}{2} + x$	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, x$	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, x$						4 b 3	$\bar{3}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$						4 a 3	$\bar{3}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$						
24 d 1	$x, y, z$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	$\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$ $\frac{1}{2} + x, y, \frac{1}{2} + \bar{z}$	$\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{y}, \frac{1}{2} + z, x$	$\bar{z}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{y}$ $z, \frac{1}{2} + \bar{x}, \frac{1}{2} + y$	$\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$ $\frac{1}{2} + y, \bar{z}, \frac{1}{2} + x$	$\bar{y}, \frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} + x$ $y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \frac{1}{2} + x$	$\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{y}, z, \frac{1}{2} + \bar{x}$	$\bar{z}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{y}$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$	$\frac{1}{2} + z, x, \frac{1}{2} + \bar{y}$ $\frac{1}{2} + \bar{z}, x, \frac{1}{2} + y$	$\frac{1}{2} + z, y, \frac{1}{2} + \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}, y$	$\frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} + x, \bar{y}$ $\frac{1}{2} + \bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$																																				
8 c 3	$x, x, x$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$	$\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2} + x$ $\frac{1}{2} + x, x, \frac{1}{2} + \bar{x}$	$\bar{x}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}$ $x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \frac{1}{2} + x$	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, x$	$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}$ $\frac{1}{2} + \bar{x}, \bar{x}, x$																																										
4 b 3	$\bar{3}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$																																										
4 a 3	$\bar{3}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$																																										

## 2.5 enkele belangrijke kristalstructuren

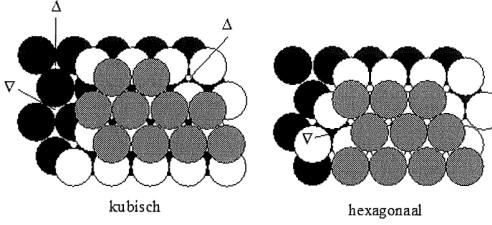
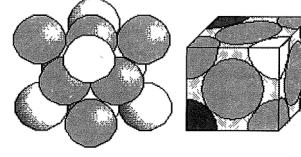
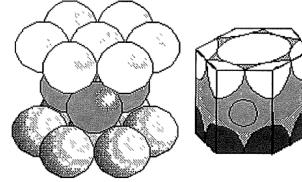
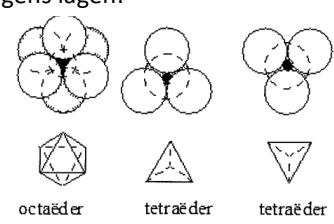
## 2.5.1 covalente kristallen

coördinatiegetal	= aantal atomen rondom een bepaald atoom
diamantstructuur	<p>elke C atoom is met 4 andere C atomen covalent verbonden, ie coordgetal=4  &gt; noemt men een tetraëderstructuur of coördinatiepolyeder  &gt; geeft aanleiding tot een kubische eenheidscel  nl: op de hoekpunten, in het midden van elk zijvlak en de centra van de deelkubussen:</p>  <p>OF</p> <p>we kunnen ook de structuur indelen als twee identieke kubische F-roosters die over 1/4 van de lichaamsdiagonaal verschoven zijn</p> <p>eigenschappen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- ijle structuur: 34% vd beschikbare ruimte wordt opgenomen</li> <li>- verwant aan grafiet, nl grafiet heeft <math>sp^2</math> structuur  &gt; onder extreem hoge druk kan grafiet omgezet worden naar diamand</li> <li>- stabiel tot drukken van 150kbar en temp tot 3000K</li> </ul>
sfalerietstructuur (zinkblende)  => ZnS	<p>zelfde structuur als diamant, echter het ene element is omringt door 4 atomen vh andere  &gt; vat de samenstelling op samenstelling ve vlakkengecentreerd kubisch rooster van Zn en een vlakkengecentreerd kubisch rooster van S, verschoven langs de lichaamsdiagonaal van het Zn rooster</p> 
wuzietstructuur => ZnS	<p>ZnS kan ook in een andere kristalstructuur voorkomen, noem dit <b>polymorfisme</b>  &gt; wanneer de kristalstructuur zonder zinkatomen wordt beschouwd, merken we dat de zwavelatomen geschikt zijn volgens hexagonaal dichtst gestapeld rooster  &gt; wanneer de kristalstructuur zonder zwavelatomen wordt beschouwd, merken we dat de zinkatomen geschikt zijn volgens hexagonaal dichtst gestapeld rooster</p> <p>&gt;&gt; echter, hier hebben we een HCP rooster ipv FCC bij sfaleriet  &gt; atoomcoords: Zn(0,0,0), Zn(1/3, 2/3, 1/2), S(0,0,3/8), S(1/3, 2/3, 7/8)</p> 

## 2.5.2 de dichtste stapeling

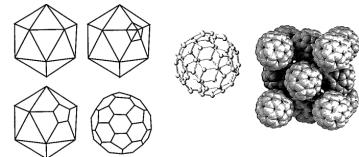
principe van dichtste stapeling	<p>potentiële energie wordt minimaal bij bepaalde evenwichtsafstand tss twee atomen          &gt; het aantal atomen per volume-eenheid zal bij dichtste stapeling maximaal zijn          &gt; definieer de stapelcoëfficient q: <math>\frac{\sum_i V_i}{\Omega} = q</math>          met <math>\Omega</math>=volume vd eenheidscel en <math>V_i</math>=volume vh atoom in de eenheidscel          &gt;&gt; !dit principe geldt niet voor covalente kristallen!</p>																																				
dichtste stapeling en symmetrie																																					
dichtste stapeling vs symm.	<p>Dichtste stapeling is niet altijd compatibel met de symmetrie vd ruimtegroep          vb: bekijk een willekeurige vorm en de bekomen kristalstructuur          &gt; de laag is <b>dicht gestapeld</b> als de 6-coördinatie in de laag bereikt wordt          ie: de 6-coördinatie wordt bereikt in elke laag zonder de dimensies vd eenheidscel te veranderen          &gt; de laag is <b>maximaal dichtst gestapeld</b> als de 6-coördinatie voor elke oriëntatie wordt bereikt zonder de dimensies vd eenheidscel te veranderen en waarbij de symmetrie van de vlakgroep behouden blijft</p> 																																				
dichtste stapeling concreet	<p>bekijk nu voor elke vlakgroep de dichtste stapeling:</p> <p><u>p1 en p2</u>: dichtste stapeling kan behaald worden voor elke molecule indien de eenheidsceigenschappen op geschikte wijze gekozen worden</p> <p><u>pm en pmm</u>: niet mogelijk om dichtst te stapelen          &gt; nl: er zal altijd vrije ruimte zijn:</p>  <p><u>pg en pgg</u>: 6-coördinatie mogelijk, maar geen maximale dichtste stapeling</p>  <p><u>cm, cmm en pmg</u>: 6-coördinatie niet mogelijk</p> <p><u>vlakgroepen met hogere symmetrie</u>: voor vlakgroepen met hogere symmetrie waarbij de eenheidscelribben gelijk zijn, zoals p4 en p6, is de stapeling van willekeurig gevormde moleculen niet mogelijk zonder overlap</p> <p>&gt;&gt; echter: als de molec. een symmetrievlak bezit          &gt; dan kan ze met 6-coördinatie gestapeld worden volgens tenminste 1 van de volgende vlakgroepen: pm, pmg en cm</p>																																				
distributie van ruimtegroepen	<p>op basis van de mogelijkheid tot dichtste stapeling kunnen we nu bekijken welke ruimtegroepen het vaakst zullen voorkomen in de natuur</p> <p>&gt; nl: kristallen willen een zo laag mogelijke energie          ie: een zo dicht mogelijkste stapeling:</p> <table border="1" data-bbox="1108 1769 1441 2073"> <thead> <tr> <th>Ruimtegroep</th> <th>Aantal structuren</th> <th>%</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>P2<sub>1</sub>/c</td> <td>1897</td> <td>37.9</td> </tr> <tr> <td>P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>/c</td> <td>839</td> <td>16.8</td> </tr> <tr> <td>P<sub>1</sub></td> <td>449</td> <td>9.0</td> </tr> <tr> <td>P2<sub>1</sub></td> <td>418</td> <td>8.4</td> </tr> <tr> <td>C2/c</td> <td>310</td> <td>6.2</td> </tr> <tr> <td>Pbcn</td> <td>247</td> <td>4.9</td> </tr> <tr> <td>Pna2<sub>1</sub></td> <td>120</td> <td>2.4</td> </tr> <tr> <td>Pnma</td> <td>94</td> <td>1.9</td> </tr> <tr> <td>Pbcn</td> <td>58</td> <td>1.2</td> </tr> <tr> <td>andere</td> <td>568</td> <td>11.3</td> </tr> <tr> <td>totaal</td> <td>5000</td> <td>100</td> </tr> </tbody> </table>	Ruimtegroep	Aantal structuren	%	P2 <sub>1</sub> /c	1897	37.9	P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> /c	839	16.8	P <sub>1</sub>	449	9.0	P2 <sub>1</sub>	418	8.4	C2/c	310	6.2	Pbcn	247	4.9	Pna2 <sub>1</sub>	120	2.4	Pnma	94	1.9	Pbcn	58	1.2	andere	568	11.3	totaal	5000	100
Ruimtegroep	Aantal structuren	%																																			
P2 <sub>1</sub> /c	1897	37.9																																			
P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> /c	839	16.8																																			
P <sub>1</sub>	449	9.0																																			
P2 <sub>1</sub>	418	8.4																																			
C2/c	310	6.2																																			
Pbcn	247	4.9																																			
Pna2 <sub>1</sub>	120	2.4																																			
Pnma	94	1.9																																			
Pbcn	58	1.2																																			
andere	568	11.3																																			
totaal	5000	100																																			

### 2.5.3 metallische kristallen

stapeling van metallische kristallen	<p>Metallische kristallen zijn opgebouwd volgens dichtste stapeling</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; beschouw de atomen van een metallische binding als sferen</li> <li>&gt; als we één laag sferen op een andere leggen kunnen we dit op 2 manieren doen: nl: een laag sferen heeft <math>\Delta</math> en <math>\nabla</math> holtes</li> </ul> <p>notatie: noem de eerste laag A, tweede B, enz...</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p><b>*kubische stapeling:</b> volgende laag wordt op de <math>\Delta</math>-holtes gelegd</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; ABCABCABC... stapeling of dus een drielaagstapeling</li> <li>nl: na drie lagen zitten de atomen weer op dezelfde positie</li> <li>&gt; geeft aanleiding tot een vlakkegecentreerd kubisch rooster</li> <li>&gt; noem dit FCC (face centered cubic) of CCP (cubic closest packing)</li> </ul> <div style="text-align: center;">  </div> <p><b>*hexagonale stapeling:</b> volgende laag wordt op de <math>\nabla</math>-holtes gelegd</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; ABABAB... stapeling of dus een tweelaagstapeling</li> <li>nl: na twee lagen zitten de atomen weer op dezelfde positie</li> <li>&gt; aanleiding tot een hexagonale dichtste bolstapeling of HCP</li> <li>&gt; sferen op <math>(0,0,0)</math> en <math>(1/3, 1/3, 1/2)</math></li> <li>&gt; ideaal is de verhouding <math>c/a = (8/3)^{1/2}</math></li> </ul> <div style="text-align: center;">  </div>										
n-laagstapeling	<p>we kunnen het idee uit het vorige deel verder uitbreiden naar n-laagstapeling</p> <p>notatie: <math>h</math> als de laag zich tss twee gelijke lagen bevindt (ABA)</p> <p style="margin-left: 40px;"><math>c</math> als de laag zich tss twee verschillende lagen bevindt (ABC)</p> <p>&gt;&gt; we kunnen zo elke laag in een bolstapeling noteren:</p> <table style="margin-left: 100px; margin-bottom: 10px;"> <tr> <td>A   B   A   B   A   B   A   B   A</td> <td style="padding: 0 10px;">en</td> <td>A   B   C   A   B   C   A   B   C</td> </tr> <tr> <td>h   h   h   h   h   h   h</td> <td style="padding: 0 10px;"></td> <td>c   c   c   c   c   c   c</td> </tr> </table> <p>voor een bepaalde <math>n</math> zijn er maar een bepaald aantal mogelijke stapelingen:</p> <table style="margin-left: 100px; margin-bottom: 10px;"> <tr> <td>aantal lagen <math>n</math></td> <td>2   3   4   5   6   7   8   9   10</td> </tr> <tr> <td>mogelijke stapelingen</td> <td>1   1   1   1   2   3   6   7   16</td> </tr> </table>	A   B   A   B   A   B   A   B   A	en	A   B   C   A   B   C   A   B   C	h   h   h   h   h   h   h		c   c   c   c   c   c   c	aantal lagen $n$	2   3   4   5   6   7   8   9   10	mogelijke stapelingen	1   1   1   1   2   3   6   7   16
A   B   A   B   A   B   A   B   A	en	A   B   C   A   B   C   A   B   C									
h   h   h   h   h   h   h		c   c   c   c   c   c   c									
aantal lagen $n$	2   3   4   5   6   7   8   9   10										
mogelijke stapelingen	1   1   1   1   2   3   6   7   16										
stapelcoëfficient van dichtste bolstapeling	<p>Voor alle dichtste bolstapelingen is de stapelcoëfficiënt 0,74</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; we vinden in de natuur voornamelijk tweelaag hcp en drielaag fcc</li> </ul>										
bcc stapeling	<p>= body centred cubic</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; atoom op elk hoekpunt en in het midden van de kubus</li> <li>&gt; is echter geen <i>dichtste</i> bolstapeling</li> </ul>										
dichtste stapeling bij polyatomische stapelingen	<p>bij metallische bindingen bestaande uit meerdere elementen vinden we nog steeds dichtste bolstapeling terug</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; we kunnen kleinere atomen in de interstitiële holten van de andere atoomsoort steken</li> </ul>										
> classificatie van interstitiële holten	<p>de holten tss atomen kunnen geklassificeerd worden volgens lagen:</p> <div style="text-align: center; margin-top: 20px;">  </div>										

## 2.5.4 organische kristallen

organische kristallen	= sterke covalente binding tussen atomen die een molecule vormen > zwakke Vanderwaalsbinding vormt kristal van moleculen  >> fragiel en zal sterk in volume toenemen bij temp.verhoging > smelten bij lage temperatuur
vb: C <sub>60</sub>	= koolstofmolecule in voetbalvorm / icosaëder met afgeknipte hoekpunten > vormt kristalstructuur met Vanderwaalskrachten  >> deel van de fullerenen
symmetrie in complexe molec.	Wanneer de molec complexer zijn, zal de symmetrie in het kristal bepaald worden door de manier waarop ze de lege ruimte vullen:



## 2.5.5 ionaire kristallen

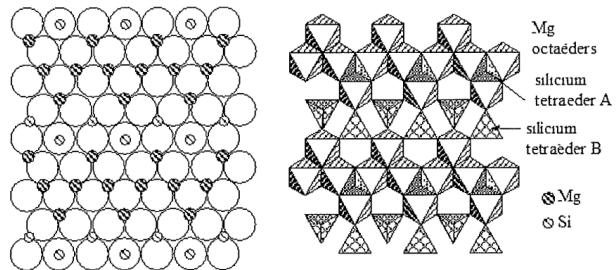
ionaire kristallen	ionaire kristallen worden met Goldschmidt model beschreven > steunt op principe van dichtste stapeling, rekening houdend met elektrische neutraliteit nl: het kristal moet elektrisch neutraal zijn, de ladingen heffen elkaar op > beschouw de bindingen als puur ionair en niet gericht  De vorming van ionaire kristallen wordt beschreven in de regels van Pauling > echter: dit is enkel voor puur ionaire kristallen > in werkelijkheid zullen er altijd imperfecties aanwezig zijn > kracht van deze regels niet overschatten
--------------------	---

### regels van Pauling

1e regel van Pauling	een coördinatiepolyeder van anionen wordt rond elk kation gevormd en vice-versa > vorm van de polyeder wordt door de verhouding tss de straal van kat- en anion bepaald > er kan enkel een stabiele structuur gevormd worden als het kation anionen raakt  afstand tss het kation en anion is gelijk aan de som van ionaire stralen
2e regel van Pauling	in een stabiele ionaire structuur is de totale strekte vd elektrostatische bindingen die een anion bereiken vanuit alle omringende kationen gelijk aan de lading vh anion > elektrostatische bindingssterkte ve kation definiëren we al de verhouding tss de kationlading en zijn coördinatiegetal
3e regel van Pauling	de stabiliteit van ionaire structuren waarbij de polyeders op een andere manier verbonden zijn, neemt af in de reeks: <i>hoekpuntverbinding &gt; ribbeverbinding &gt; vlakverbinding</i> > dit effect is grootst voor kationen met een hoge lading en laag coordinatiegetal > effect is zeer groot wanneer verhouding vd ionenstraal de lagere stabiliteitsgrens vd polyeder benaderd
4e regel van Pauling	wanneer een kristal verschillende kationen bevat > dan zullen de polyeders vd kationen met hoge valentie en laag coordinatiegetal geen gemeenschappelijke vlakken of ribben hebben
5e regel van Pauling	Het aantal essentieel verschillende samenstellende polyeders is zo klein mogelijk ie: indien mogelijk is de omringing voor chemisch identieke atomen gelijk

vb regels van Pauling:  $Mg_2SiO_4$

- 1: O-atomen vormen een hexagonale dichtste stapeling met Mg en Si ertussen  
 > kristal bestaat uit een netwerk van polyeders, met O-atomen op de hoekpunten:  
 \* octaëder met een Mg-atoom in het centrum  
 \* tetraëder met een Si-atoom in het centrum



- 2: \* Si heeft een +4 lading maar wordt gedeeld door 4 O-atomen

- > elk O-atoom ziet +1 lading
- \* Mg heeft +2 lading en wordt door 6 O-atomen omringd
- > elk O-atoom ziet +1/3 lading

> nu: elk O-atoom wordt gedeeld door één 1 tetraëder en 3 octaëders  
 > ziet dus een lading van +2, wat de lading van -2 vh atoom opheft

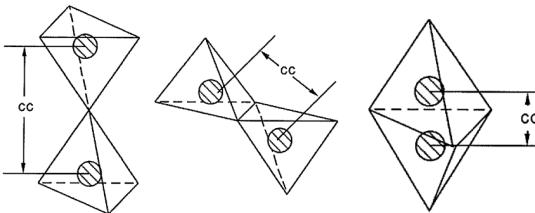
- 3: twee polyeders zijn op 3 manieren met elkaar verbonden:

a: gemeenschappelijk hoekpunt

b: gemeenschappelijke ribbe

c: gemeenschappelijk vlak

>> c zorgt ervoor dat de kationen dichter bij elkaar staan, dus een instabielere structuur



- 4: de tetraëders in de structuur zijn niet met elkaar verbonden

- 5: er zijn slechts 4 verschillende omringingen in de structuur

## coördinatiepolyeders

verhouding van atoomstralen  
 bepalen atoomstructuur

ionaire structuur is een netwerk van polyeders

- > op de hoekpunten anionen en in het midden een kation
- > deze kationen zitten dus in de holtes gevormd door de anionen
- > pot.energie stijft wanneer afstand anion-kation groter word
- => dus: polyeders waarbij kation en anion raken zijn meest stabiel

echter: plaats rond kation is beperkt

- > niet alle anionen kunnen rond een kation raken

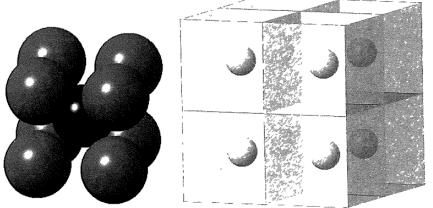
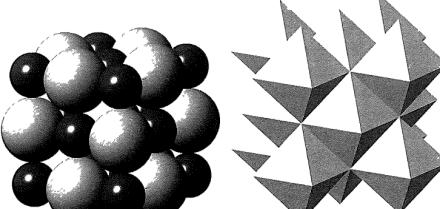
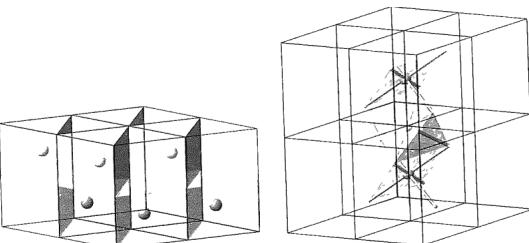
> verhouding tss straal anion-kation zal configuratie vh kristal bepalen:

verhouding	maximum aantal X ionen rond A	coördinatie van X rond A
ongeveer 1	12	als bij fcc of als bij hcp
$0,73 \leq R_A/R_X < 1$	8	kubus
$0,41 \leq R_A/R_X < 0,73$	6	octaëder
	4	vierkant
$0,22 \leq R_A/R_X < 0,41$	4	tetraëder
$0,15 \leq R_A/R_X < 0,22$	3	driehoek
$R_A/R_X < 0,15$	2	linear

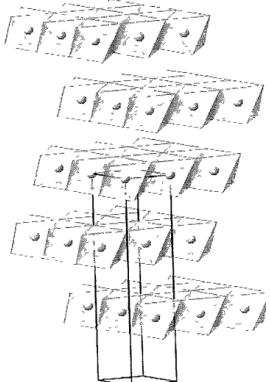
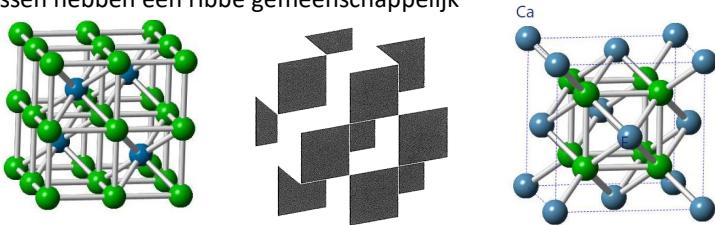
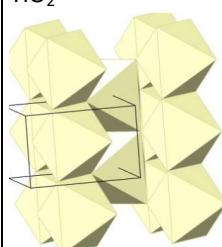
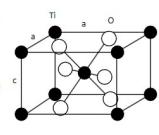
>> dit samen met de regels van Pauling bepalen de kristalstructuur van ionaire kristallen

## 2.5.6 enkele belangrijke ionaire kristalstructuren

### AX structuren

CsCl	<p>elk Cl ion wordt door 8 Cs ionen omringd          &gt; coordinatie: 8:8          nl: 1e 8 voor het coordinatiegetal vd kationen          2e 8 voor het coordinatiegetal vd anionen</p> <p>echter: de polyeders (kubussen) hebben gemeenschappelijke vlakken          &gt; structuur treedt zelfde op voor kationen met hoge lading</p> <p>&gt;&gt; typische structuur voor verhouding tss stralen groter dan 0,73</p> 
NaCl	<p>algemeen: indien stralenverhouding tss 0,41 en 0,73 ligt hebben we een octaëdrische omringing van 6 X ionen rond het A ion          &gt; kubische stapeling van X ionen waarbij A ionen de octaëdrische holtes vullen          &gt; coordinatie van 6:6</p> <p>nu: stralenverhouding van NaCl is iets groter dan 0,41          &gt; X ionen kunnen elkaar niet meer raken          &gt; NaCl heeft slechts ongeveer een kubische stapeling</p> <p>NaCl voldoet mooi aan de 3e regel van Pauling          nl: <math>\text{Na}^+</math> ion heeft elektrostatische bindingssterkte van +1/6 en Cl heeft -1          &gt; Cl ion wordt netjes door 6 Na ionen omringd</p> <p>Als er sterke druk op het kristal wordt uitgeoefend kan ze omgezet worden naar een CsCl kristalstructuur</p> 
NiAs	<p>hexagonaal dichtgestapelde As atomen waarbij Ni atomen de octaëdrische holtes vullen          &gt; 6 As atomen omringen 1 Ni atoom          &gt; 6 Ni atomen bevinden zich op hoekpunten ve trigonaal prisma met As atoom in midden</p> <p>&gt;&gt; voldoet de regels van Pauling niet          nl: verbinding is behoorlijk metallisch, en delen daarom een vlak</p> 

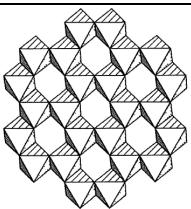
## AX<sub>2</sub> structuren

algemene structuur	<p>De lading van A ion is dubbel zo groot als X ion          &gt; er zijn dubbel zoveel X ionen aanwezig          &gt; als de X ionen dichtst gestapeld zijn kan evenwicht bekomen worden door slechts 50% van de octaëdrische holtes te vullen of 25% van de tetraëdrische holtes          &gt; 4 mogelijkheden: <math>A^oX_2^k</math>, <math>A^oX_2^h</math>, <math>A^tX_2^k</math> en <math>A^tX_2^h</math></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>* <math>A^o</math> en <math>A^t</math> staan voor resp octaëdrische en tetraëdrische holtes</li> <li>* <math>X^k</math> en <math>X^h</math> staan voor resp kubische en hexagonale dichtste pakking van X</li> </ul>
CdCl <sub>2</sub>	 <p>Cl ionen kubisch dichtst gestapeld          &gt; kleinere Cd ionen bezetten 50% van de octaëdrische holtes, dus type <math>A^oX_2^k</math>          &gt; Cd ionen vormen lagen loodrecht op drietallige inversie-as vh vlakkengecentreerd rooster          &gt; parallel met deze lagen zijn er lagen met lege octaëdrische holtes</p> <p>coordinatie: 6:3          nl: 6 X ionen raken alk een A ion en 3 A ionen raken elk een X ion</p> <p>Cd en Cl ionen vormen sterke binding met covalent karakter          &gt; bindingsafstand is kleiner dan de som vd ionaire stralen</p> <p>tss Cl atomen van 1 laag en de Cl atomen van de volgende bestaan er vanderwaalsbindingen          &gt; zorgt voor een preferentiële kliefrichting vh kristal en anisotrope thermische expansie</p>
CdI <sub>2</sub>	<p>X ionen hexagonaal gestapeld met 50% vd de bezetting vd octaëdrische holtes door A ionen          &gt; net als CdCl<sub>2</sub> is deze structuur gelaagd          &gt; binding in de laag is ionair en tss de lagen is er vanderwaalskracht          &gt; resulteert in preferentiële kliefrichting en anisotrope expansie</p>
Fluoriet structuur vb: CaF <sub>2</sub>	<p>R<sub>A</sub>/R<sub>X</sub> is groter dan 0,73          &gt; coordinatie van 8 X ionen rond 1 A ion          &gt; de helft van de kubussen wordt door een A ion gevuld          &gt; kubussen hebben één ribbe gemeenschappelijk</p> 
rutiel structuur TiO <sub>2</sub>	  <p>R<sub>A</sub>/R<sub>X</sub> tss 0,41 en 0,73          &gt; A ionen worden door 6 X ionen octaëdrisch omringd          &gt; structuur is tetragonaal</p> <p>6 O-atomen bevinden zich op een octaëder rondom elk Ti-atoom          &gt; elk O-atoom is met 3 Ti-atomen verbonden          &gt; 6:3 coordinatie</p> <p>Rutiel bestaat uit kettingen van octaëders met een gemeenschappelijke ribbe          &gt; lopen parallel met de c-as</p>

## A<sub>2</sub>X structuren

A <sub>2</sub> X structuren	er zijn twee mogelijke stapelingen: A <sup>t</sup> <sub>2</sub> X <sup>c</sup> of A <sup>t</sup> <sub>2</sub> X <sup>h</sup> ie: kubische dichtste stapeling van X ionen met volledig gevulde tetraëdische holtes of hexagonale dichtste stapeling van X ionen met volledig gevulde tetraëdische holtes > deze laatste wordt bij ionaire binden niet vastgesteld > nl door de 3e regel van Pauling  >> we vinden dus voornamelijk A <sup>t</sup> <sub>2</sub> X <sup>c</sup> aangezien ze slechts gemeensch. ribben hebben
-----------------------------	--

## A<sub>2</sub>X<sub>3</sub> structuur

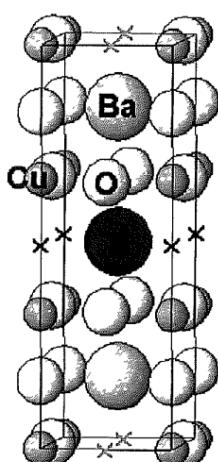
A <sub>2</sub> X <sub>3</sub> structuur	vb: Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> : O-atomen hexagonaal dichtst gestapeld > Al-atomen vullen 2/3 van de holtes	
---	--	---

## A<sub>m</sub>B<sub>n</sub>X<sub>z</sub> structuren

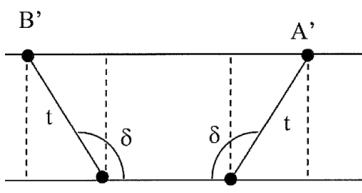
Perovskiet structuur ABX <sub>3</sub> >> vb: CaTiO <sub>3</sub>	dichtste stapeling van O en Ca-ionen > bevat 1/4 Ca en 3/4 O > Ti bezet 1/4 van de octaëdrische holtes > door +lading van Ti en Ca bezet Ti enkel de holtes gemaakt door O  coördinatie van Ca ionen door O is 12 van Ti ionen door O is 6  >> is volledig in overeenstemming met regels van Pauling (zie p94)
---	--

> eigenschappen Perovskiet	1: bij hoge temp zijn ze kubisch, bij lage temp worden ze tetragonaal/orthorombisch > dit komt door kleine verplaatsing van Ca en Ti tov de O ionen > dit geeft aanleiding tot een dipoolmoment echter: deze dipoolmomenten wijzen niet in dezelfde richting in het kristal > bij aanleggen ve elek. veld aligneren de dipolen, dus het kristal wordt gepolariseerd  >> noem metalen met dit effect <i>ferroëlektrische metalen</i>  2: <i>piëzoelektrisch gedrag</i> > kristal wordt elektrisch geladen wanneer er druk op wordt uitgeoefend in bep richting <> er treedt volumeverandering op wanneer er een elek. veld wordt op aangesloten  (figuren zie p95)
----------------------------	---

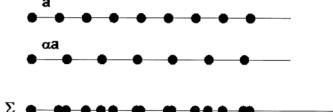
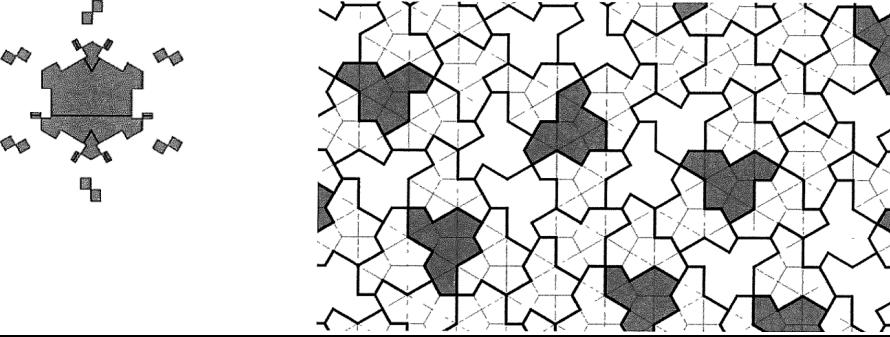
vb: YBa <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>7-x</sub>	gelijkaardig aan perovskiet > is een supergeleider bij 92K, nl verliest als zijn weerstand  eenheidscel bestaat uit 3 perovskiet eenheidscellen waarbij de middelste subcel een Y subcel bevat en de buitenste subcellen een Ba atoom > op sommige plaatsen is O afwezig > resulteert in Cu-O rijen en vlakken > elektrische stroom loopt door deze Cu-O wat zorgt voor supergeleiding
---	--



spinel structuur $AB_2O_4$ >> vb: $MgAl_2O_4$	O ionen kubisch dichtst gestapeld > metaal kationen vullen 1/8 tetraëdrische en 1/2 vd octaëdrische holtes																		
<b>intermezzo: symmetrie van een kristalstructuur</b>																			
symmetrie van het rooster	<p>kristalstructuur is een convolutie vd kleinste eenheidscel en het kristalrooster &gt; heeft enkele gevolgen:</p> <p>1: notie van puntgroep vervalt nl: kleinste eenheidscel heeft zelfde puntgroep als het kristal &gt; op elk roosterpunt bevindt zich de symmetrie-elementen van de puntgroep ie: een verzameling ve oneindig aantal gelijk gespatieerde symmetrie-elementen &gt; noem dit in 2D <b>vlakgroep</b> en in 3D <b>ruimtegroep</b></p> <p>2: uit definitie vh rooster volgt dat er steeds symmetriecentra aanwezig zijn</p> <p>3: combinatie van symmetrie-elementen geeft ons schroefassen en glijspiegelvlakken</p> <p>4: symmetrie-assen en -vlakken kunnen geen willekeurige oriëntatie opnemen tov de netrechten en netvlakken ve kristal door volgende stellingen:        a) Elk rooster heeft symmetriecentra        b) Elke rechte evenwijdig aan een symmetrieas van een rooster die door een knooppunt gaat, is ook een symmetrieas met dezelfde talligheid.        c) Elk vlak dat door een knooppunt gaat, en evenwijdig is aan een symmetriegelak van het rooster, is ook een symmetriegelak.        d) Een symmetrieas van het rooster die door een knooppunt gaat is een netrechte        e) Een symmetriegelak dat door een knooppunt gaat en loodrecht op een symmetrieas staat, is een netvlak.        f) Wanneer een rooster een as met talligheid n groter dan twee heeft, dan staan er n tweetallige assen loodrecht op</p> <p>5: een rooster kan met zichzelf tot dekking gebracht worden door translaties die in grootte overeenkomen met de periode in de beschouwde richting ie: een rooster is invariant tov translaties:  <math>\vec{r} = l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}</math>        met <b>a</b>, <b>b</b>, en <b>c</b> basisvectoren en l,m,n gehele getallen &gt; dit heeft als gevolg dat er enkel 1,2,3,4 en 6-tallige assen toegelaten zijn</p>																		
> bewijs puntje 5	<p>beschouw een netrechte met spatiëring t &gt; A en B zijn twee roosterpunten waar een n-tallige rotatieas doorgaat &gt; deze zal (n-1) B punten genereren waarbij geldt:</p> $AB' = AB = t$ $\widehat{BAB'} = \delta = 2\pi/n$ <p>analoog een n-tallige as door B zal (n-1) A punten genereren:  <math display="block">A'B = AB = t</math> <math display="block">\widehat{ABA'} = \delta = 2\pi/n</math></p> <p>als de punten A,B,A' en B' tot een kristalrooster horen &gt; dan moet de spatiëring vd punten vd netrechte gaande door A' en B' gelijk zijn aan deze in de parallelle rechte door A en B &gt; hieraan wordt voldaan als:</p> $B'A' = kt$ <p>met k een geheel getal Nu geldt</p> $B'A' = AB + AB' \cos(180^\circ - \delta) + A'B \cos(180^\circ - \delta)$ <p>of nog</p> $B'A' = t(1 - 2 \cos \delta)$ <p>Aangezien <math>B'A'</math> gelijk moet zijn aan <math>kt</math>, komt er</p> $\cos \delta = (1 - k)/2$ <p>door deze cos moet gelden <math>-3 &lt; 1-k &lt; 3</math> en dus is <math>n=1,2,3,4,6</math></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>1-k</th> <th>hoek</th> <th>Talligheid van de as</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>-2</td> <td><math>\pi</math></td> <td>2</td> </tr> <tr> <td>-1</td> <td><math>2\pi/3</math></td> <td>3</td> </tr> <tr> <td>0</td> <td><math>\pi/2</math></td> <td>4</td> </tr> <tr> <td>+1</td> <td><math>\pi/3</math></td> <td>6</td> </tr> <tr> <td>+2</td> <td><math>2\pi</math></td> <td>1</td> </tr> </tbody> </table>	1-k	hoek	Talligheid van de as	-2	$\pi$	2	-1	$2\pi/3$	3	0	$\pi/2$	4	+1	$\pi/3$	6	+2	$2\pi$	1
1-k	hoek	Talligheid van de as																	
-2	$\pi$	2																	
-1	$2\pi/3$	3																	
0	$\pi/2$	4																	
+1	$\pi/3$	6																	
+2	$2\pi$	1																	



## 2.6 Quasikristallen

bouw van quasikristallen	<p>Uit periodiciteit kristallen geldt dat men enkel 1,2,3,4,6-tallige rotatieassen kan hebben          &gt; nu: <i>quasikristallen</i> zijn kristallen met een symmetrie afwijkend hiervan          vb: 5,8,10 of 12-tallige symmetrieën</p>												
<b>2.6.1 quasi-periodiciteit: een ander voorbeeld van een geordende schikking</b>													
periodiciteit en quasikristallen	<p>Quasikristallen bezitten geen periodiciteit          &gt; dit is geen noodzakelijke voorwaarde voor lange-afstandsorde           vb: Penrose tiling: met twee specifieke parallelogrammen kan men niet-periodiek de hele ruimte vullen</p>												
vb: niet-periodieke sequence in 1D	<p>Gebruik een procedure om posities van atomen te genereren en zo een structuur met lange-afstandsorde te maken          nl: transleer een eenheidscel/atoom volgens een netrechte          &gt; neem twee van die procedé, één met een translatieafstand van <math>a</math> en andere van <math>\alpha a</math> met <math>\alpha</math> irrationaal          &gt; combineer deze</p> 												
vb: random sequencing	<p>Men kan echter ook een Lang en Kort segment definieren          &gt; laat deze segmenten random op elkaar volgen:</p> <table style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <tr> <td>L</td> <td>•</td> </tr> <tr> <td>LK</td> <td>••</td> </tr> <tr> <td>LKL</td> <td>•••</td> </tr> <tr> <td>LKLLK</td> <td>••••</td> </tr> <tr> <td>LKLLKLKL</td> <td>•••••</td> </tr> <tr> <td>LKLLKLKLKLK</td> <td>••••••</td> </tr> </table>	L	•	LK	••	LKL	•••	LKLLK	••••	LKLLKLKL	•••••	LKLLKLKLKLK	••••••
L	•												
LK	••												
LKL	•••												
LKLLK	••••												
LKLLKLKL	•••••												
LKLLKLKLKLK	••••••												
<b>2.6.2 projectie uit hogere dimensionale ruimte</b>													
quasikristallen in nD	<p>enkel 1,2,3,4,6-tallige symmetrie is compatibel met translatie in 2D en 3D          &gt; beperking tot 14 Bravaisroosters</p> <p>Nu: om 5-tallige symmetrie waar te maken in 2D moet de roostercel een regelmatige vijfhoek zijn          &gt; kan enkel adhv 4 vectoren          &gt; we moeten in 4 dimensies werken om 5-tallige symmetrie in 2D te maken</p> <p>&gt;&gt; op zelfde manier is voor 3D 5-tallige symm. 5D og 6D nodig          &gt; een quasi-periodieke structuur kan als periodieke structuur beschreven worden in een hogere dimensionale ruimte</p> <p>(vb zie p101)</p>												
<b>2.6.3 tilings</b>													
Tiling	<p>= volledig betegelen van de 2D ruimte          &gt; kunnen we dit ook niet-periodiek doen?          &gt; ja: gebruik irreguliere vormen, vb Penrose tiling          &gt; echter: deze heeft 2 figuren nodig          &gt; 1 tegel: Socolar-Taylor tegel of Einstein tegel:</p> 												

## 2.7 kristalsynthese

### 2.7.1 groei uit oplossing

#### groei uit oplossing

Er moet vermeden worden dat er meerdere kiemen ontstaan in de oplossing  
 > breng een kiem aan in de oplossing  
 nl: een stukje éénkristal waarop het kristal kan verdergroeien

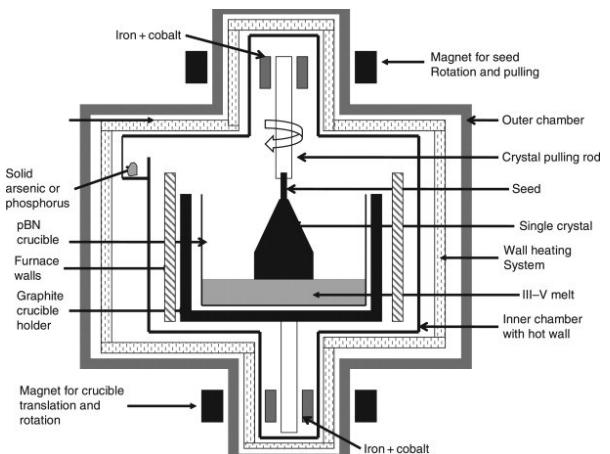
men moet ook opletten voor andere stoffen opgelost in de oplossing  
 > kan volgen tot parasitaire kiemvorming

Voor stoffen die enkel oplossen bij hoge temp of druk gebruikt men een drukvat  
 vb: kwartzkristallen

### 2.7.2 groei uit smelt

#### Czochralski methode

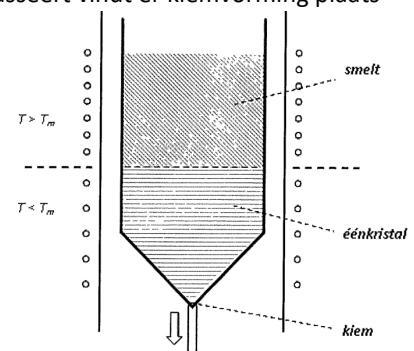
- werkt enkel op materialen die smelten waarbij geen fasetransities optreden tijdens het afkoelen  
 > vb: groeien van silicium in wafers
- bekijk de figuur
  - 1: zuiver Si worden gesmolten in een kroes bij 1420°C in een vacuum of inert gas
  - 2: kiem op lagere temp wordt in contact gebracht met opp van de smelt tot het uiteinde begint te smelten
  - 3: kiem wordt langzaam omhoog getrokken
    - > er groeit vaste fase aan het uiteinde, wegens temp.condities aan het stolfront
    - > groeiend kristal wordt uit het bad 'getrokken'
- tijdens groei wordt de kiem rondgedraaid
  - > zorgt voor cilindrische uniformiteit
- door thermische schok zullen er dislocaties in het kristal ontstaan
  - > oplossing: groei eerst een smalle nek met een diameter van enkele mm
  - > doe dit door een hoge streksnelheid aan te houden
  - > vertraag daarna de treksnelheid tot je de gewenste diameter hebt

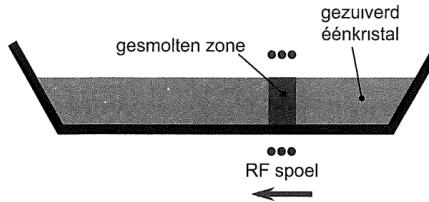
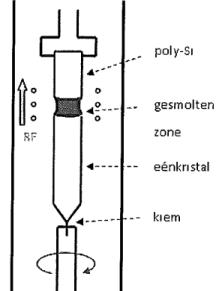


>> dit vindt plaats in een vacuum / inert gas

#### Bridgman methode

- Gebruik een kroes met cilindrische bodem
- > laat kristallisatie in het onderste deel aanvangen en laat één kiem uitgroeien
  - > in bovenste deel is temp enkele graden boven het smeltpunt  
 onderste deel is temp lager
  - > wanneer de punt door de temp.gradiënt passeert vindt er kiemvorming plaats



zonesmelten / 'zone refining'	<p>materiaal bevindt zich in een bootvormige kroes</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; materiaal wordt in smalle zone gesmolten, te beginnen aan een uiteinde vd boot</li> <li>&gt; verplaats de warmtebron</li> <li>&gt; de gesmolten zone wordt als het ware door het materiaal getrokken</li> <li>&gt; één kant stolt terwijl aan de andere kant wordt gesmolten</li> <li>&gt; aan de stollende kant wordt een georiënteerd eenkristal gevormd</li> </ul>  <p>&gt;&gt; methode wordt voornamelijk gebruikt om onzuiverheden uit een materiaal te halen voor de eigenlijke kristalgroei nl: de onzuiverheden bewegen mee met de gesmolten zone &gt; na het proces zitten de onzuiverheden aan het einde vh kristal</p>
> zonesmelten wiskundig	<p>de methode steunt op het verschil in oplosbaarheid ve onzuiverheid in gesmolten fase en de vaste fase</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; geeft aanleiding tot segregatie</li> <li>&gt; <i>segregatiecoëfficiënt</i> = verhouding vd oplosbaarheid ve onzuiverheid A in vaste fase tov vloeibare fase</li> </ul> $k_0 = \frac{(C_A)_S}{(C_A)_L}$ <p>voor meeste onzuiverheden geldt <math>k_0 &lt; 1</math></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; voor grootste onzuiverheden is <math>k_0</math> het kleinst ie: ze blijven het liefst in de vloeibare fase</li> </ul> <p>echter: in praktijk moeten we rekening houden met de effectieve segregatiecoeff:</p> $k_{eff} = \frac{k_0}{k_0 + (1 - k_0) \exp(-R\delta/D)}$ <p>met <math>\delta</math> de diepte in de smelt D de diffusiviteit van de onzuiverheid R de groeisnelheid van de vastestof</p>
> variant: float zone refining	<p>gesmolten zone wordt doorheen een verticaal geplaatste staaf vh materiaal getrokken</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; onderaan een georiënteerde kiem in een houder</li> <li>&gt; hoogfrequentielus zorgt voor een gesmolten zone</li> <li>&gt; gesmolten zone wordt naar boven verplaatst</li> </ul>  <p>&gt;&gt; rotatie en overgang van kleine-&gt;grote diameter zorgt voor uniformiteit</p>

### 2.7.3 groei uit dampfase

groei uit dampfase	uit dampfase kunnen ook kristallen gegroeid worden
--------------------	--