

Základní pojmy teorie struktury ideálního krystalu

Ideální krystal

- nekonečná velikost a zcela pravidelná struktura
- 3D skupina elementů = **motiv**
- pravidelným opakováním motivu v prostoru (3D translační periodicitu) vznikne **periodický vzor**

Motiv

- víceatomový
- obecně asymetrický objekt
- asymetrický objekt má pravou a levou formu (př. pravá a levá bota)



Teorie opakování

- 3D periodický vzor vytvoříme z *motiv* **operacemi opakování**

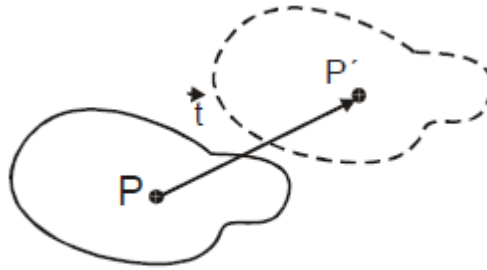
Čtyři základní transformace

- translace, otáčení, zrcadlení, inverze (tj. středová souměrnost), příp. kombinací těchto operací

Základní transformace

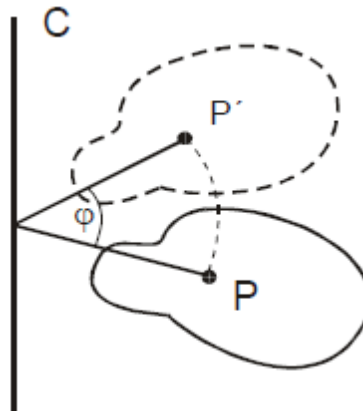
(A) Translace

- translace všech bodů objektu v prostoru o stejný vektor $\mathbf{t}$



(B) Otáčení

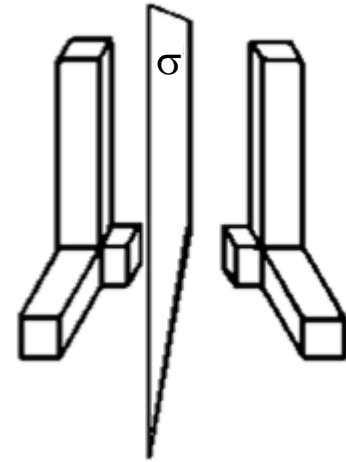
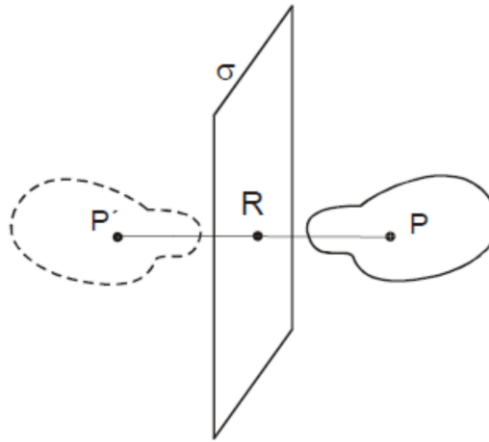
- otočení objektu kolem osy $\mathbf{C}$ o úhel φ
- z každého bodu objektu je spuštěn kolmý průvodič na osu otáčení $\mathbf{C}$
- při otáčení opíše průvodič v rovině kolmé k $\mathbf{C}$ úhel φ
- kladná hodnota φ - otočení proti směru hodinových ručiček



Základní transformace

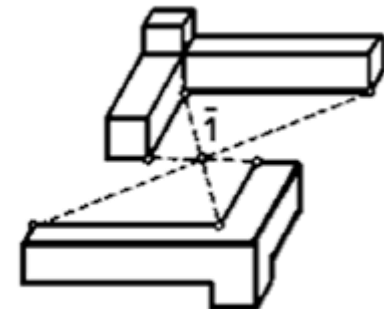
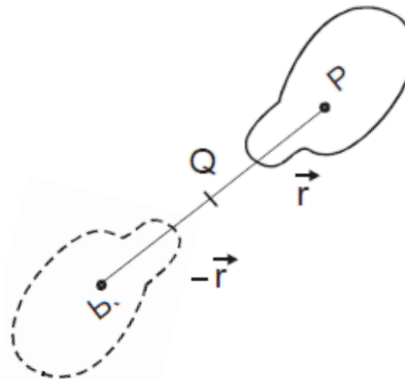
(C) Zrcadlení v rovině σ

- z každého bodu objektu P spustíme kolmici na rovinu σ
- vzdálenost od paty kolmice R k P nanese na opačnou polopřímku $\Rightarrow$ bod P'
- převádí pravé objekty na levé



(D) Zobrazení podle středu inverze Q

- Q – pevný bod – střed inverze
- nechť polohový vektor P vůči Q je $\vec{r} \Rightarrow$ polohový vektor P' vůči Q je $(-\vec{r})$
- převádí pravé objekty na levé



Základní vlastnosti transformací a vznik periodického vzoru

Vlastnosti transformací

- nezávislá je operace translace a rotace
- nezávislá je jedna z transformací zrcadlení nebo inverze
- zrcadlení a inverze převádí pravé objekty na levé (a naopak)
- translace a otáčení nemění podobu objektu
- všechny pravé (nebo všechny levé) objekty jsou mezi sebou shodné – **kongruentní**
- pravé a levé objekty jsou vůči sobě protitvaré – **enantiomorfní**
- **inverzi** lze složit pomocí zrcadlení a otočení (příp. translace)
- **zrcadlení** lze složit pomocí inverze a otáčení (příp. translace)

Vznik periodického vzoru

- nutné opakovaně aplikovat skupinu výchozích transformací A, B, C, ... nebo složených vícenásobných transformací (AA, AB, AC, AAA, ...) na daný motiv
- **vytvořený** periodický vzor je **symetrický** vůči určitým **prvkům symetrie** $\Rightarrow$ přechází v sám sebe **operacemi symetrie** (objekt je nerozlišitelný od původního objektu)
- **prvek symetrie** – je množina bodů, které se při operaci symetrie **nepohybují**
 - prvky symetrie jsou střed symetrie, rovina symetrie, n-četná osa otáčení (rotace o $2\pi/n$), inverzní osy, zrcadlové osy, šroubové osy a skluzné roviny, vůči které se operace symetrie provádí (viz dále)
 - **translace** nemá **prvek symetrie** $\Rightarrow$ pohybují se všechny body

Základní vlastnosti transformací a vznik periodického vzoru

Vznik periodického vzoru

- na motiv aplikujeme soubor transformací $\Rightarrow$ ve skupině transformací je definována **operace skládání transformací**
- ve skupině transformací existuje identická transformace (**jednotkový prvek**), opačná transformace (**inverzní prvek**) a pro skládání transformací platí **asociativní zákon**.
- **tyto 3 vlastnosti** splňují definici **grupy** $\Rightarrow$ **množina** všech transformací tvoří **grupu**

Definice grupy

- množinu G nazýváme grupou je-li definována grupová operace, tj. předpis, který každé uspořádané dvojici prvků $z G$ přiřazuje právě jeden prvek $G \Rightarrow$ množina G je tzv. *uzavřená* vůči grupové operaci „ $\circ$ “ (výsledek grupové operace náleží grupě G)

$$a, b \in G, a \circ b = c \in G$$

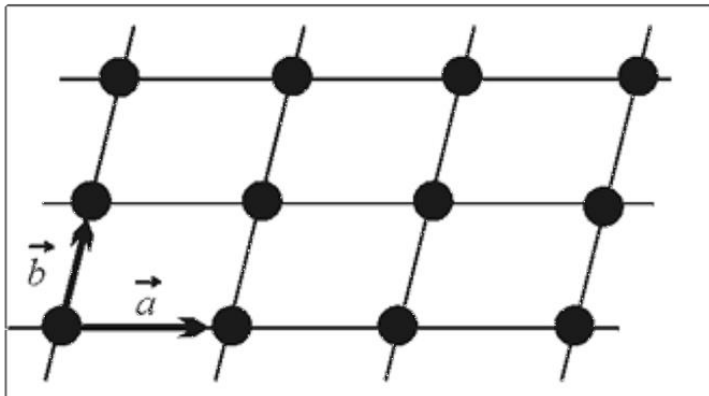
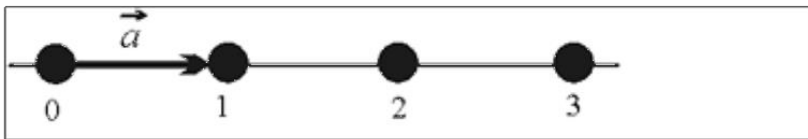
- pro grupu platí **asociativní zákon**: pro každé $a, b, c \in G$ platí: $a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$ (platí i pro transformace)
- existence **jednotkového prvku**: $e \in G$ a $a \in G$, že platí: $a \circ e = e \circ a = a$
- existence **inverzního prvku**: ke každému $a \in G$ existuje inverzní prvek $a^{-1} \in G$, takový, že
$$a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e$$
- pro transformace platí **komutativní zákon** $\Rightarrow$ platí i pro **grupové operace** $\Rightarrow$ grupa Abelova

Grupa = množina prvků + pravidla skládání těchto prvků

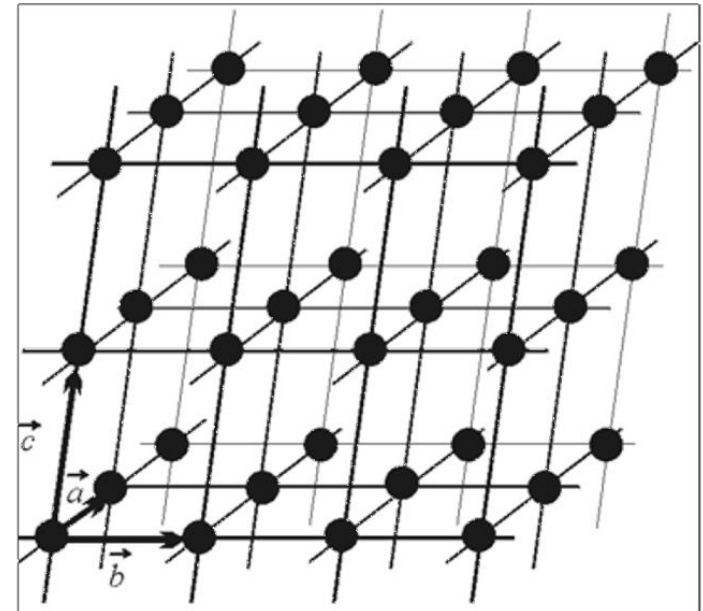
Translační grupa symetrie krystalu

- *pro následující úvahy nahradíme motiv mřížovým bodem*
- **translace** jako operace symetrie **nemá prvek symetrie** (pohybují se všechny body)
- translační operace symetrie se vyskytuje u všech periodických vzorů (ideálních krystalů)
- libovolný 3D periodický vzor lze ze základního motivu vytvořit pomocí translací
- uvažujeme všechny kombinace celých čísel u, v, w při tvorbě vektoru $\vec{t}$

$$\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}, \quad \text{vektory } a, b, c - \text{translační vektory (krystalografické osy)}$$



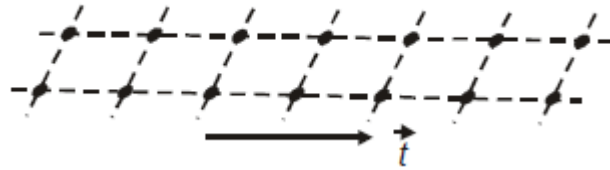
rovinná mřížka



prostorová mřížka

Translační grupa symetrie krystalu

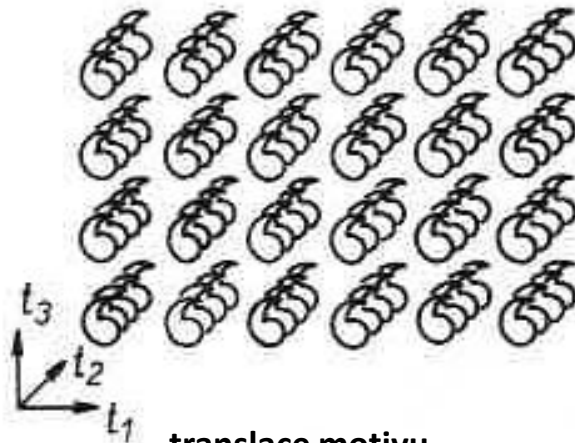
- translace prostorové mříže



- při translaci o $\vec{t}$ splyne mříž sama se sebou $\Rightarrow$ prostorová mříž je **translačně symetrická** a vektory

$\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ jsou **prvky translační grupy symetrie krystalu**

Příklad – translace motivu do 3d periodického vzoru



translace motivu

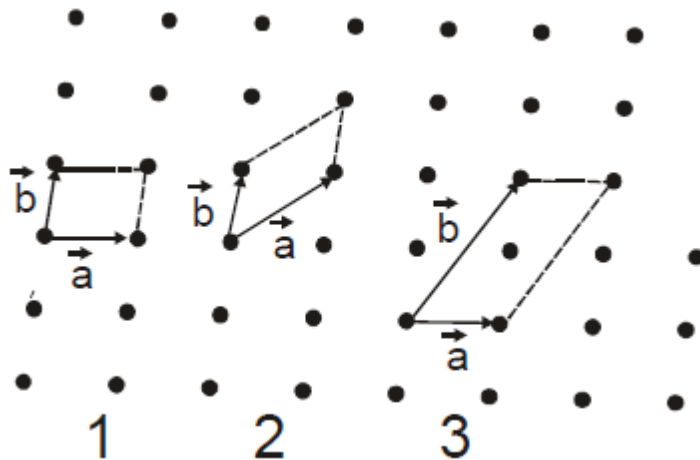


trojrozměrná mříž vzoru

Elementární buňka prostorové mříže

- je-li dána prostorová mříž, pak volba elementární buňky **není jednoznačná**

Příklad:



1 a 2 - primitivní buňky

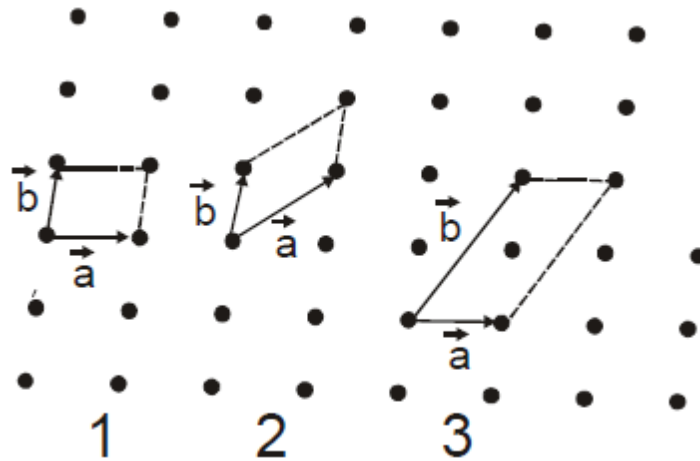
3 – neprimitivní (centrovaná) buňka

- primitivní buňky** mají stejný objem – **minimální objem**, jaký může buňka dané mříže mít
- centrované buňky** – objem je celistvým násobkem objemu primitivní buňky
 - v mřížích s centrovanými buňkami mají některé translace $\vec{t}$ neceločíselné hodnoty u, v, w . Takové translace se nazývají **subtranslace**.

Elementární buňka prostorové mříže

- je-li dána prostorová mříž, pak volba elementární buňky **není jednoznačná**

Příklad:



1 a 2 - primitivní buňky

3 – neprimitivní (centrovaná) buňka

- primitivní buňky** mají stejný objem – **minimální objem**, jaký může buňka dané mříže mít
- centrované buňky** – objem je celistvým násobkem objemu primitivní buňky
 - v mřížích s centrovanými buňkami mají některé translace $\vec{t}$ neceločíselné hodnoty u, v, w . Takové translace se nazývají **subtranslace**.

Rovinné mříže

- pro ***správné určení elementární buňky*** je nutné správně ***určit typ rovinné mříže*** krystalu

Určení typu rovinné mříže:

- nutné identifikovat prvek symetrie – musí platit, že ***prvek symetrie*** přítomný v krystalu musí vyhovovat ***symetrickému uspořádání mřížových bodů***, které je dáno ***translační periodicitou mříže***
- ***nalezený prvek symetrie*** krystalu pak ***určuje***, jaký ***druh mříže*** může tento krystal mít (druh mříže nelze jednoznačně určit jen z hodnot mřížových parametrů a vzájemných úhlů)
- ***rozbor rovinných mříží*** ukazuje, že ***existuje pouze pět různých typů rovinných mříží***, které vyhovují operacím symetrie prvků (n-četná osa rotace – ***1,2,3,4,6***, rovina symetrie – zrcadlení ***m***)

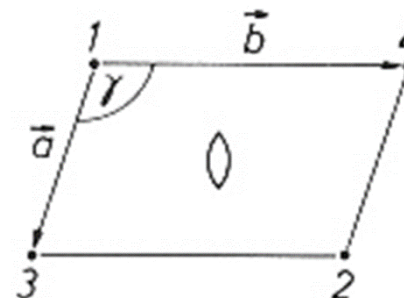
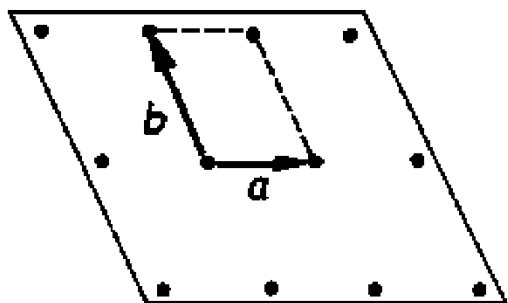
Proč pět typů?

- rovinná ***mřížka*** je jednoznačně ***určena dvojicí*** nekolineárních mřížkových ***vektorů***
- v obecném případě mají tyto vektory libovolnou délku a svírají libovolný úhel (tyto tři parametry jednoznačně určují trojúhelník – dvě strany o známé délce a známý úhel) $\Rightarrow$ ***počet typů rovinných mřížek je shodný s počtem druhů trojúhelníků***
- existuje ***pět typů trojúhelníků*** (obecný, rovnoramenný, rovnostranný, pravoúhlý nerovnoramenný a pravoúhlý rovnoramenný) $\Rightarrow$ existuje i ***pět typů rovinných mřížek*** (Bravaisových mřížek)

Rovinné mříže

1. Rovnoběžníková (obecná) rovinná mřížka

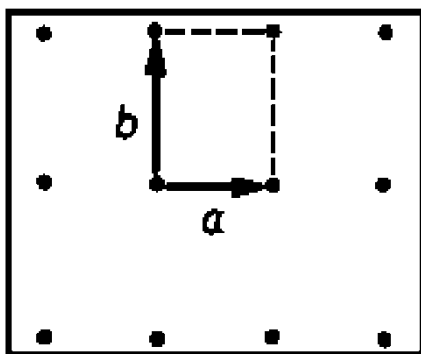
- základní buňka ve tvaru rovnoběžníku, kde $a \neq b$, $\gamma \neq 90^\circ$
- prvek symetrie je dvojitá osa otáčení (2) – vrcholy buňky pootočené o 180° jsou v pozici mřížových bodů



Prvek symetrie

2. Pravoúhlá rovinná mřížka

- mřížové body tvoří vrcholy pravoúhlého trojúhelníku, kde $a \neq b$, $\gamma = 90^\circ$
- prvky symetrie jsou dvojitá osa (2) a dvě vzájemně kolmé roviny symetrie m

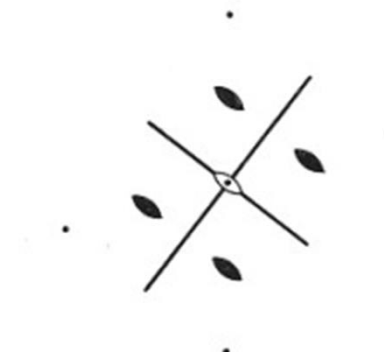
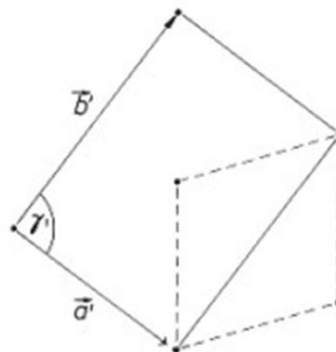
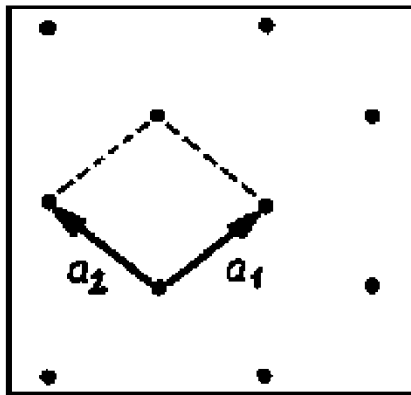


Prvky symetrie

Rovinné mříže

3. Romboedrická (diamantová) rovinná mřížka

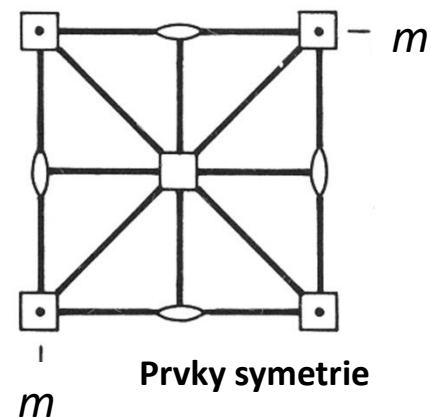
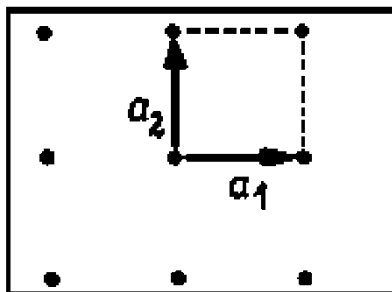
- tři mřížové body tvoří rovnoramenný trojúhelník, kde $a = b$, $\gamma \neq 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$
- protažením hran základní buňky vzniká pravoúhlá centrovaná buňka
- prvky symetrie jsou dvě roviny symetrie m a pět dvojitých os otáčení



Prvky symetrie

4. Tetragonální (čtvercová) rovinná mřížka

- tři mřížové body tvoří rovnoramenný trojúhelník, kde $a = b$, $\gamma = 90^\circ$
- vzniká čtvercová síť
- prvky symetrie jsou čtyřčetná osa a čtyři roviny symetrie m

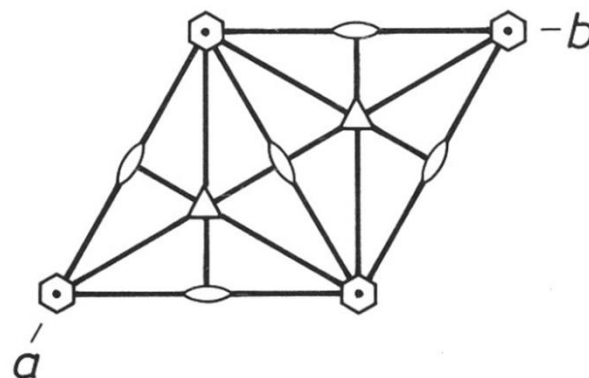
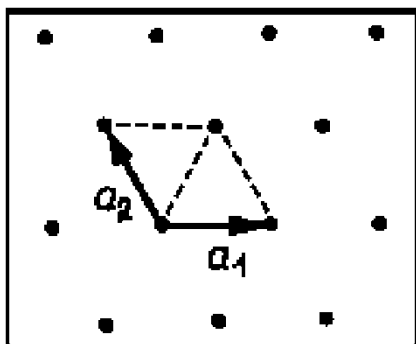


Prvky symetrie

Rovinné mříže

5. Hexagonální (trojúhelníková) rovinná mřížka

- mřížové body tvoří rovnostranný trojúhelník, základní buňka ve tvaru kosočtverce, kde $a = b$, $\gamma = 120^\circ$
- v celkové symetrii uvažujeme čtyři základní buňky – prvky symetrie jsou šestičetné, trojčetné osy otáčení a roviny symetrie
- v rámci jedné základní buňky je prvkem symetrie dvojčetná osa otáčení



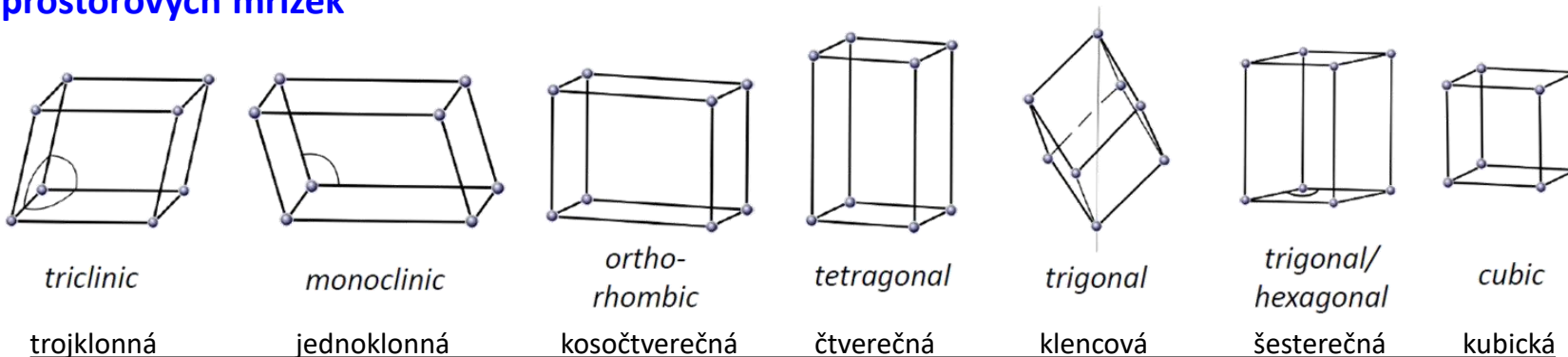
Prvky symetrie

-  - dvojčetná osa otáčení
-  - trojčetná osa otáčení
-  - čtyřčetná osa otáčení
-  - šestičetná osa otáčení

Prostorové Bravaisovy mřížky

Vytvoření prostorové mříže

- opakování 5 základních motivů rovinné mřížky ve třetím nekoplanárním směru $\Rightarrow$ **7 primitivních prostorových mřížek**



krystalová soustava	omezení na rozměry základní buňky	omezení na úhly základní buňky	symetrie krystalové mříže
triclinic	none	none	$\bar{1}$
monoclinic	none	$\alpha = \gamma = 90^\circ$	$2/m$
orthorhombic	none	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	mmm
tetragonal	$a = b$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$4/mmm$
trigonal	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$	$\bar{3}m$
hexagonal	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$	$6/mmm$
cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\bar{m}3m$

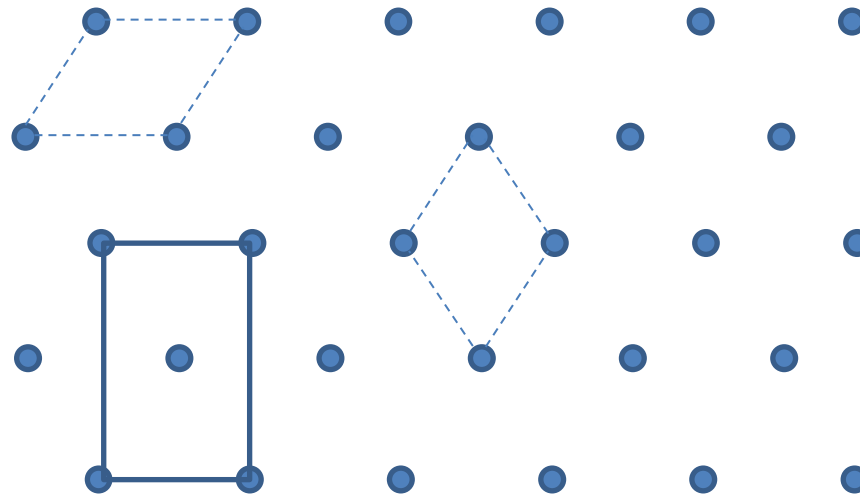
Typ prostorové mříže lze jednoznačně určit podle její **symetrie** (viz dále)

Prostorové Bravaisovy mřížky

PRAVIDLA pro jednoznačné určení elementární buňky (Bravaisova pravidla)

- musí mít co možná nejvyšší počet pravých úhlů nebo stejných úhlů
- symetrie elementární buňky musí být shodná se symetrií celé mřížky
- při splnění výše uvedených požadavků má mít co nejmenší objem
- v nejednoznačných případech se vybírá základní buňka s co nejkratšími hranami

Tyto pravidla někdy nesplňuje jeden z 5 typů primitivní rovinné mříže, ale centrovaná buňka!



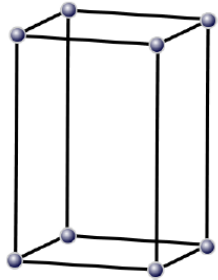
Proto není pouze 7, ale **14 typů prostorových mřížek**, jak ukázal Bravais

Nesmírné množství krystalových struktur je možné popsat pomocí pouhých **14 typů prostorových mřížek**.

Důkaz podal francouzský krystalograf **A. Bravais** (1811-1863), proto 14 typů mřížek nazýváme **Bravaisovy mřížky**.

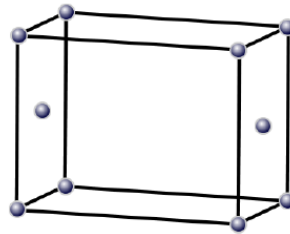
Proč máme 14 Bravaisových mřížek?

- u každé ze 7 primitivních prostorových mříží můžeme mít případ centrované mřížky



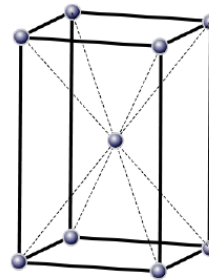
*primitive
unit cell*

P



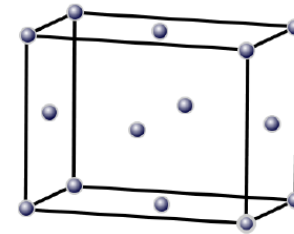
*single-side face-centered
unit cell*

C(AB)



*body-centered
unit cell*

I



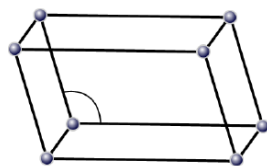
*all-side face-centered
unit cell*

F

- díky duplicitě prostorových mříží jich není $7 \times 4 = 28$, ale pouze 14

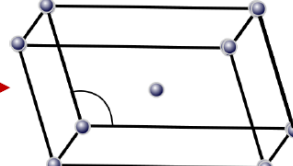
Příklad duplicity

monoclinic



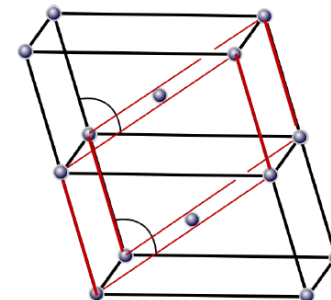
P

?



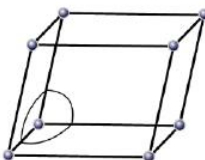
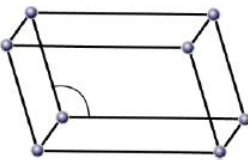
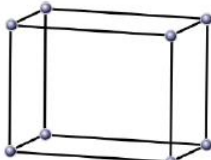
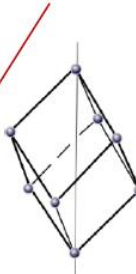
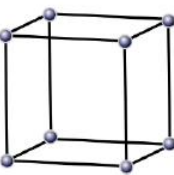
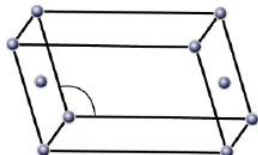
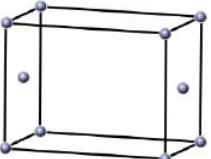
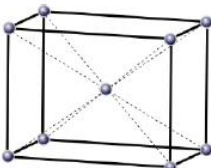
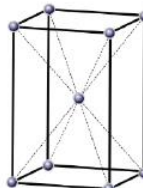
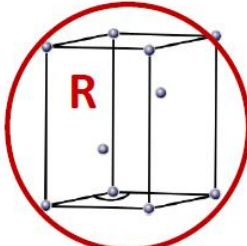
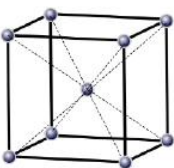
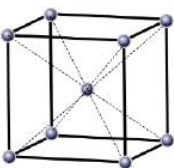
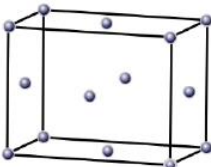
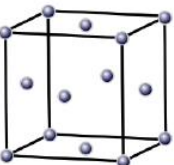
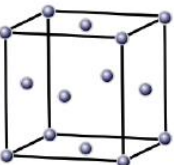
I

!



monoclinic **C**

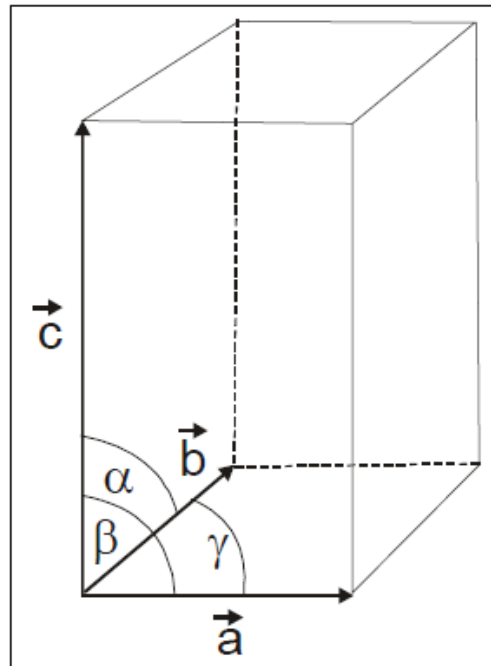
14 typů Bravaisových prostorových mřížek

	trojklonná	jednoklonná	kosočtverečná	čtverečná	klencová	šesterečná	kubická
	<i>triclinic</i>	<i>monoclinic</i>	<i>ortho-rhombic</i>	<i>tetragonal</i>	<i>trigonal</i>	<i>trigonal/hexagonal</i>	<i>cubic</i>
P							
C(AB)							
I							
F							

Elementární buňka prostorové mříže

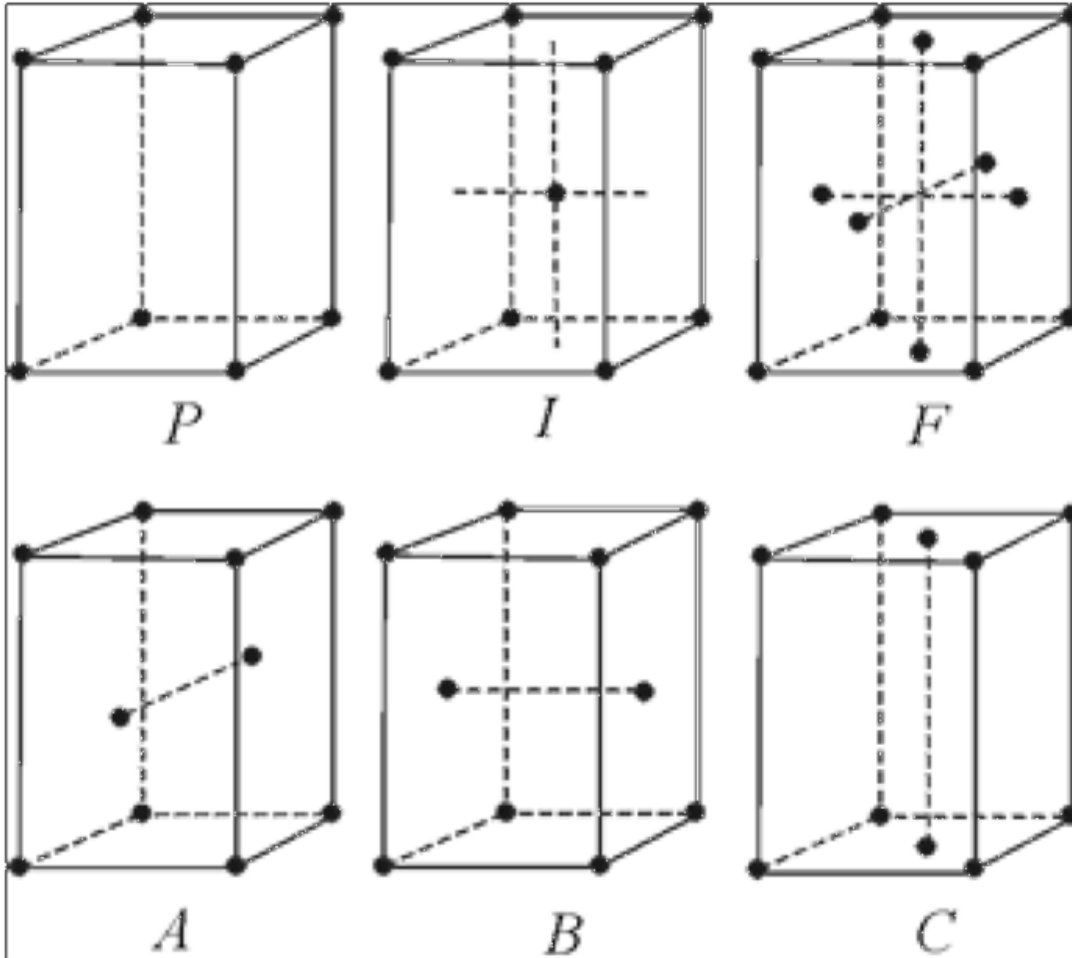
Charakterizace základní buňky

- **tvar základní buňky** závisí na vektorech prostorové mřížky $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ a jejich vzájemné orientaci
- vektory prostorové mřížky $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ a jejich směry určují **krystalografické osy krystalu**
- definice úhlů: $\alpha = \angle(\vec{b}, \vec{c}), \beta = \angle(\vec{c}, \vec{a}), \gamma = \angle(\vec{a}, \vec{b})$
- parametry základní buňky představují parametry krystalové mříže:
 α, β, γ
 $a(=|\vec{a}|), b(=|\vec{b}|), c(=|\vec{c}|)$
- **primitivní elementární buňka** má mřížové body jen ve vrcholech rovnoběžnostěnu



Elementární buňka prostorové mříže

- každý uzavřený rovnoběžnostěn, v jehož vrcholech se nacházejí mřížové body
- buňky rozlišujeme podle počtu mřížových bodů na objem jedné buňky
- tvar podstavy buňky záleží na typu rovinné mříže



P – primitivní buňka

I – prostorově centrovaná buňka

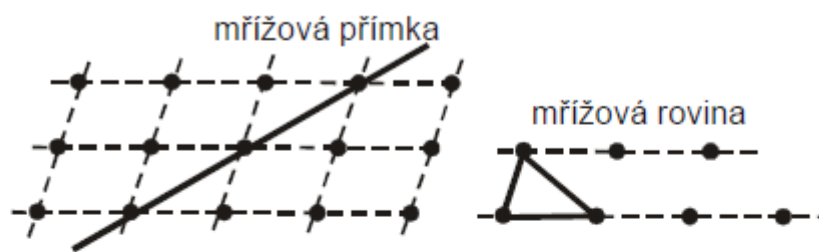
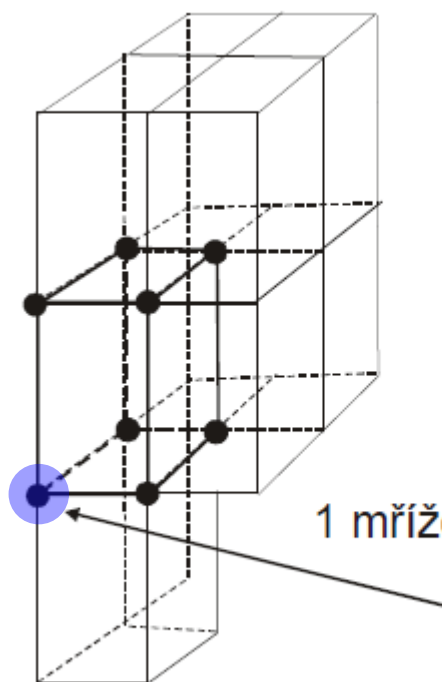
F – plošně centrovaná buňka

A, B, C – bazálně centrované buňky

Elementární buňka prostorové mříže

POZOR!

- v rámci 3D krystalové mříže připadá na jednu primitivní buňku jeden mřížový bod (levý, dolní, vpředu)
- definujeme termíny **mřížová přímka** a **mřížová rovina**
- existují přímky a roviny, které nejsou mřížové



mřížová přímka – leží na ní dva různé mřížové body (pak na ní leží ∞ mnoho bodů)

mřížová rovina – leží na ní alespoň 3 různé mřížové body neležící v jedné přímce

Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

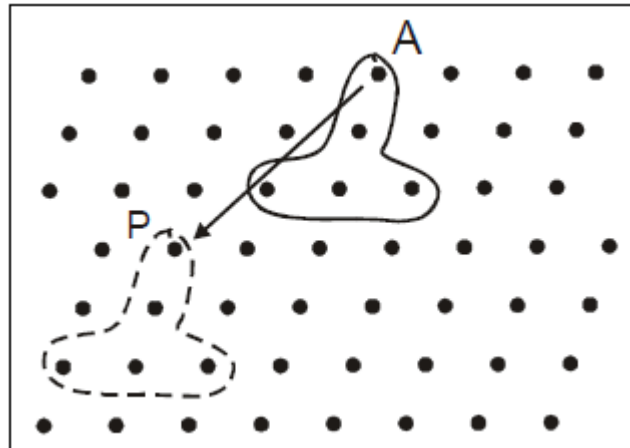
Značení bodů

- vektory mřížky $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ určují kosoúhlou souřadnou soustavu
- mřížový bod o poloze $u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ má souřadnice $\bullet u \ v \ w \bullet$ (nebo i bez teček)
(u záporných čísel: $(-1) \rightarrow \bar{1}$)

Platí věta:

Je dán *libovolný útvar z mřížových bodů* a zvolený **referenční bod P** . Pak lze útvar translačně posunout tak, že referenční bod splyne s libovolným bodem A útvaru.

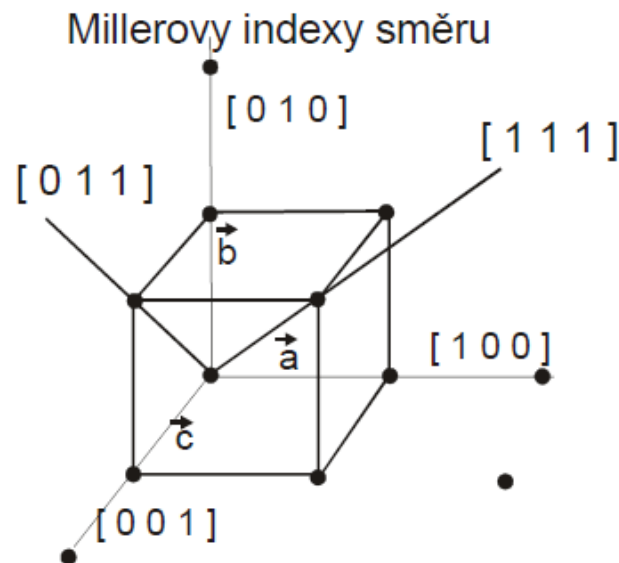
Původní a posunutý útvar jsou translačně identické.



Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

Značení krystalografických směrů

- krystalografické směry popisujeme symbolem $[u \ v \ w]$ – *mřížová přímka*
- $u \ v \ w$ jsou celá nesoudělná čísla, odpovídají složkám vektoru vedeného z počátku krystalografických os, do nejbližšího bodu v daném směru

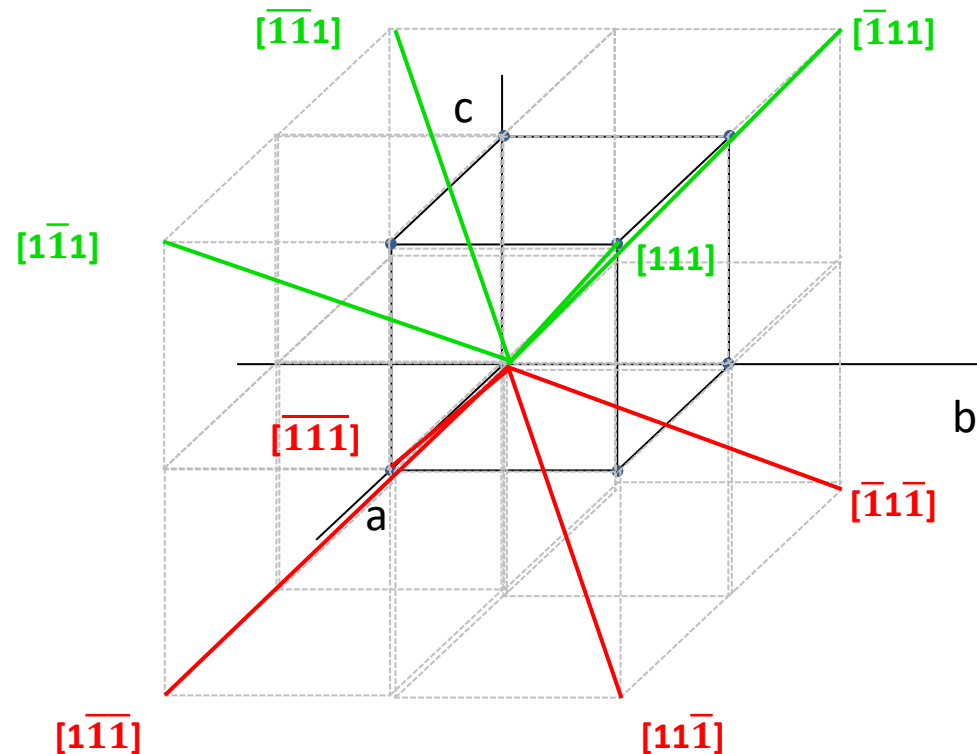


- v případě, že vektor nepochází z počátku souřadného systému, lze tento vektor rovnoběžně posunout tak, aby z počátku vycházel

Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

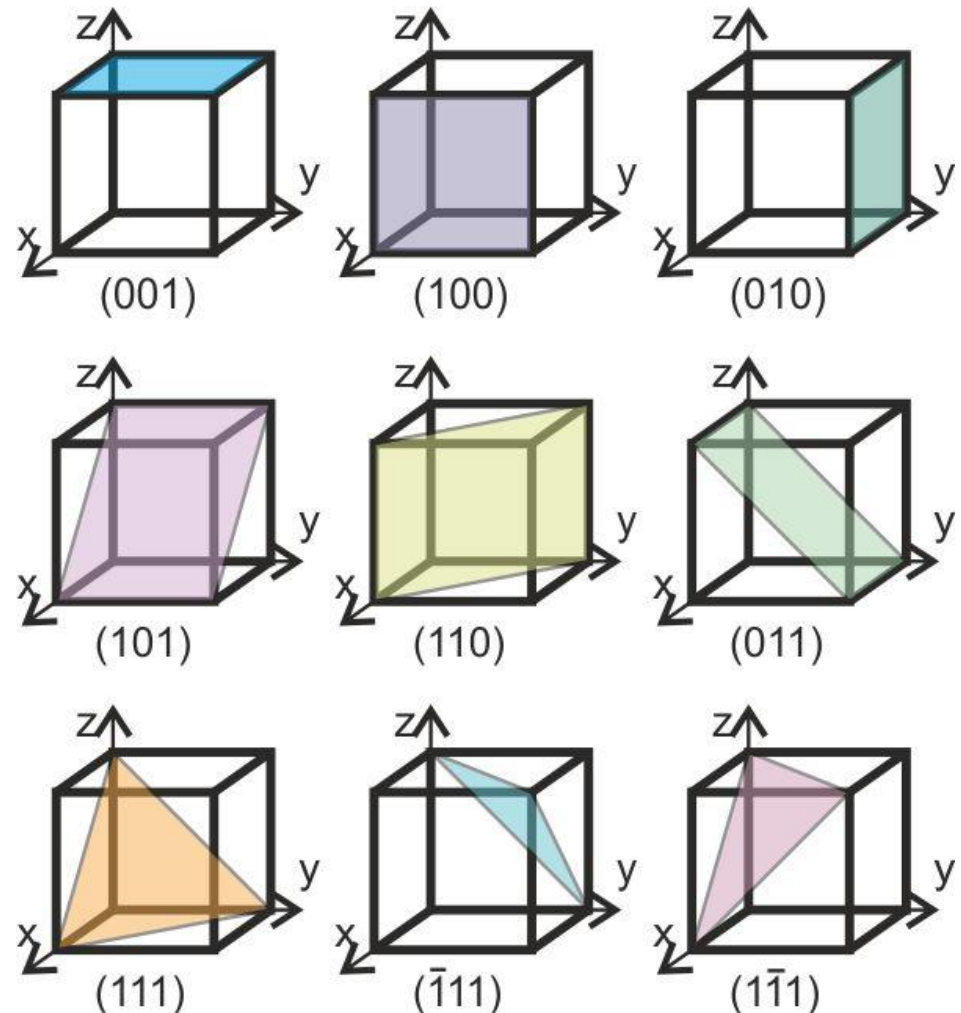
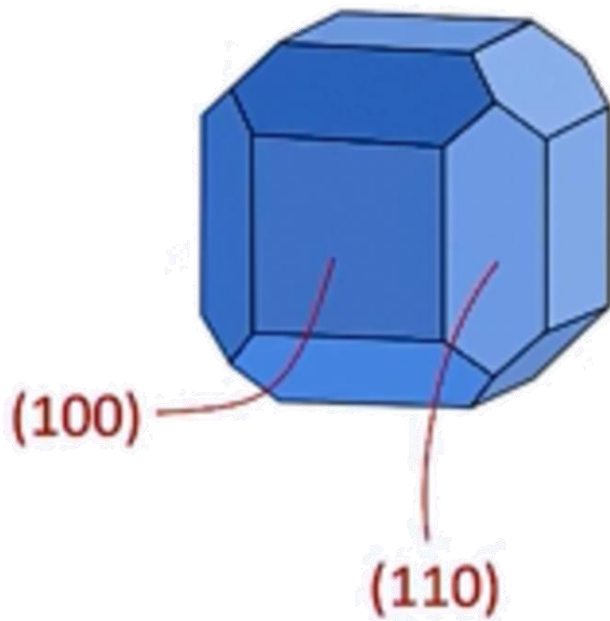
Značení krystalografických směrů

- skupina symetricky ekvivalentních směrů $\langle u \ v \ w \rangle$ - operace symetrie na mříži převádí jeden směr v druhý
- například tělesové uhlopříčky buněk – skupina ekvivalentních směrů $\langle 1 \ 1 \ 1 \rangle$ (zahrnuje in antiparalelní směry)



Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

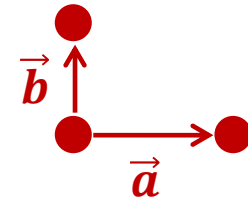
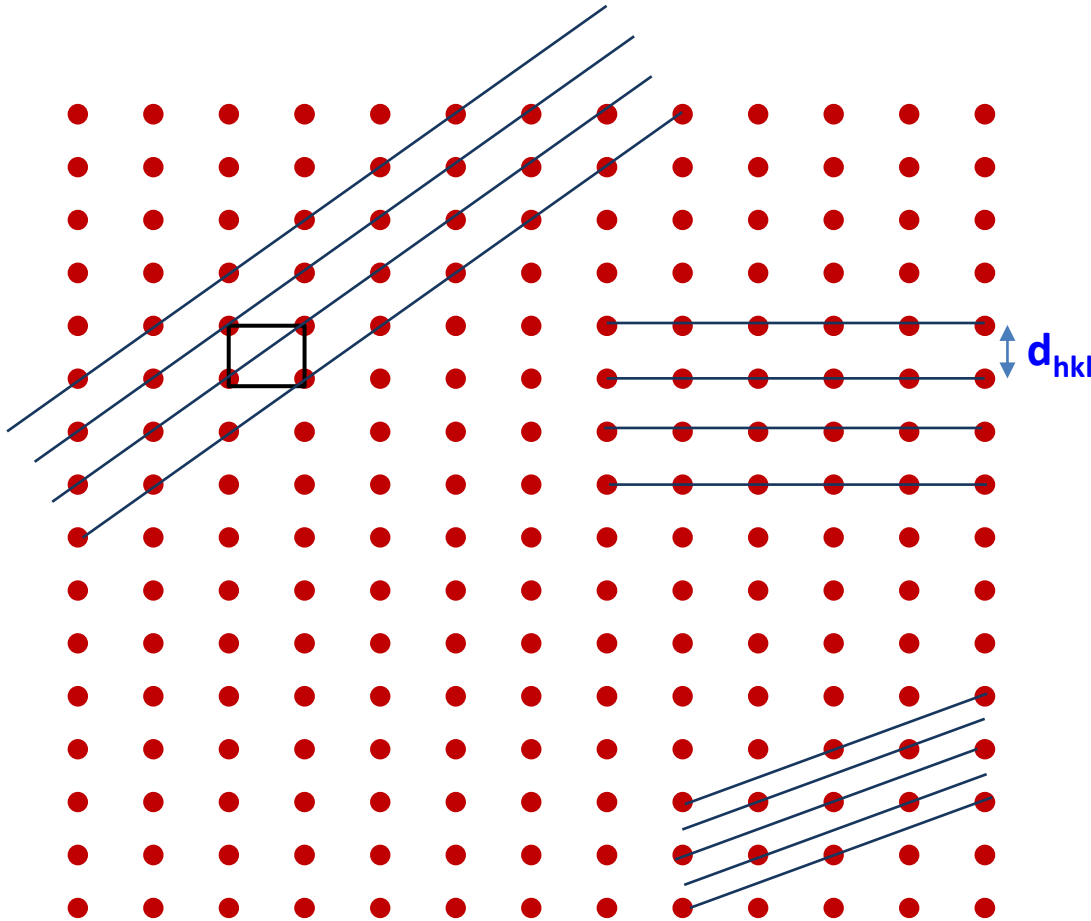
Značení rovin krystalu – pomocí tzv. **Millerových indexů** ($h\ k\ l$)



Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

Značení rovin krystalu - Millerovy indexy (h k l)

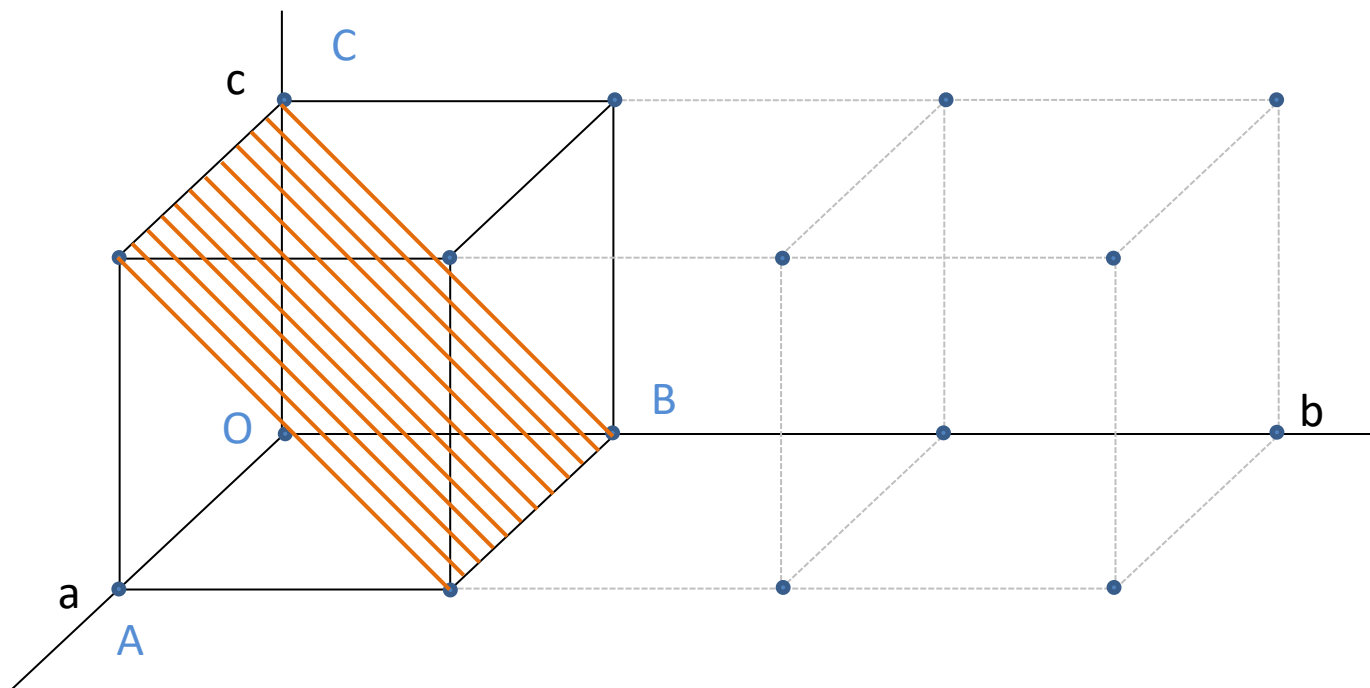
- v krystalu můžeme vytvořit paralelní imaginární krystalové roviny, které prochází mřížovými body
- směr rovin je jednoznačně určen Millerovými indexy, vzdáleností rovin d_{hkl}



Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

Značení rovin krystalu

- zavedení **Millerovy indexy** h, k, l pro určení **orientace** mřížové **roviny nejbližší k rovině procházející počátkem** krystalografických os $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \Rightarrow$ na osách vytkne úseky $a/h, b/k, c/l$
- indexy h, k, l jsou celá nesoudělná čísla, jejichž převrácené hodnoty **odpovídají poměrným úsekům**, které vytíná příslušná rovina na krystalografických osách a, b, c

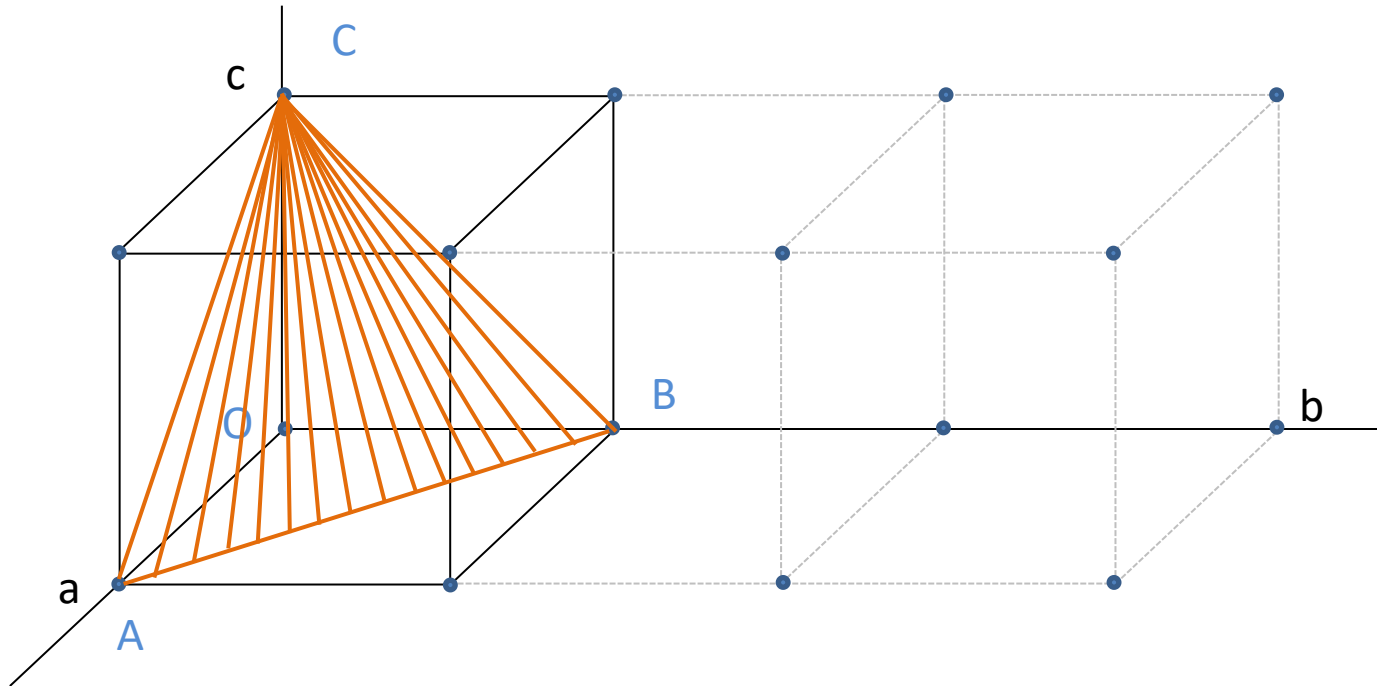


- mřížová rovina vytíná na osách úseky: $AO = \infty, OB = 1, OC = 1$
- převrácené hodnoty jsou: 0, 1, 1
- úprava na celá nesoudělná čísla: 0, 1, 1
- Millerovy indexy (0 1 1)

Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

Značení rovin krystalu

- zavedení **Millerovy indexy** h, k, l pro určení **orientace** mřížové **roviny nejbližší k rovině procházející počátkem** krystalografických os $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \Rightarrow$ na osách vytkne úseky $a/h, b/k, c/l$
- indexy h, k, l jsou celá nesoudělná čísla, jejichž převrácené hodnoty **odpovídají poměrným úsekům**, které vytíná příslušná rovina na krystalografických osách a, b, c

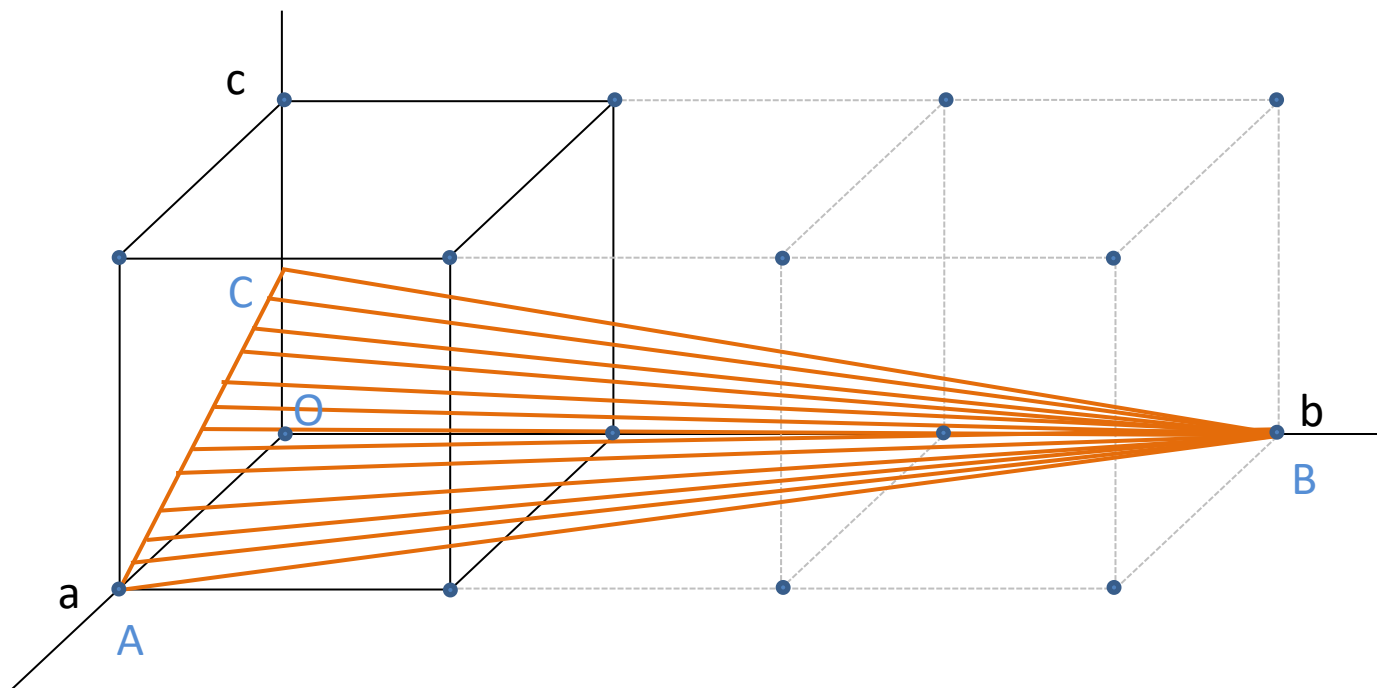


- mřížová rovina vytíná na osách úseky: $AO = 1, BO = 1, CO = 1$
- převrácené hodnoty jsou: $1, 1, 1$
- úprava na celá nesoudělná čísla: $1, 1, 1$
- Millerovy indexy $(1\ 1\ 1)$

Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

Značení rovin krystalu

- zavedení **Millerovy indexy** h, k, l pro určení **orientace** mřížové **roviny nejbližší k rovině procházející počátkem** krystalografických os $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \Rightarrow$ na osách vytkne úseky $a/h, b/k, c/l$
- indexy h, k, l jsou celá nesoudělná čísla, jejichž převrácené hodnoty **odpovídají poměrným úsekům**, které vytíná příslušná rovina na krystalografických osách a, b, c

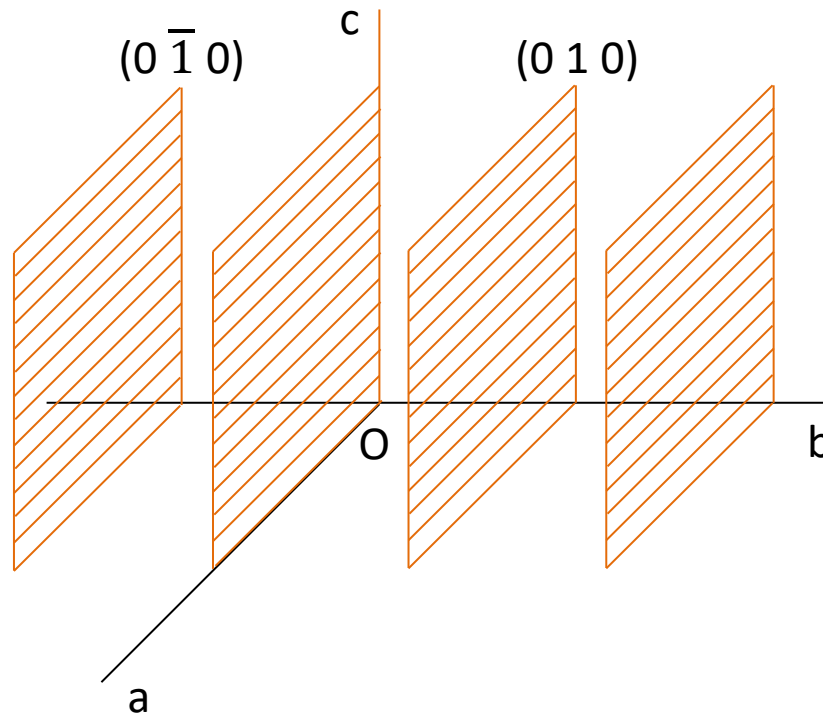


- mřížová rovina vytíná na osách úseky: $AO = 1, OB = 3, OC = 1/2$
- převrácené hodnoty jsou: $1, 1/3, 2$
- úprava na celá nesoudělná čísla: $3, 1, 6$
- Millerovy indexy $(3\ 1\ 6)$

Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

Značení souboru paralelních rovin krystalu

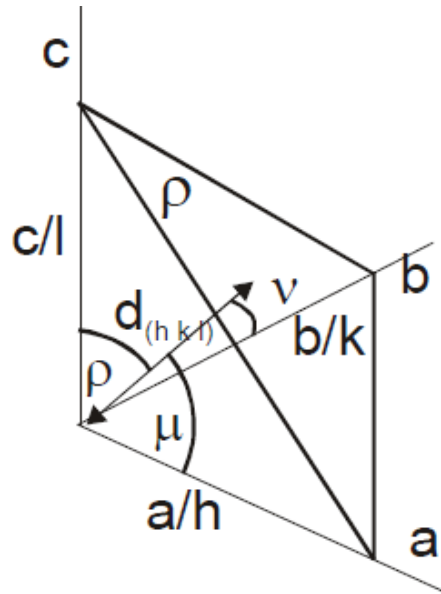
- paralelní roviny se označují Millerovými indexy jedné roviny neprocházející počátkem
- skupinu paralelních rovin se nazývá **osnova mřížových rovin**
- mezirovinná vzdálenost se označuje ***d*** – charakteristický parametr dané osnovy



Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

Vzdálenost sousedních rovin - d

- v pravoúhlé soustavě souřadné (např. kubická soustava) platí pro směrové kosiny kolmic k osnově rovin ($h\ k\ l$)



$$\cos \mu = \frac{d}{a/h}$$

$$\cos \nu = \frac{d}{b/k}$$

$$\cos \rho = \frac{d}{c/l}$$

- pro směrové kosiny libovolné přímky procházející počátkem platí:

$$\cos^2 \mu + \cos^2 \nu + \cos^2 \rho = 1$$

- Pro vzdálenost sousedních rovin $d_{(hkl)}$ potom platí:

$$\frac{1}{d^2_{(hkl)}} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Značení bodů, mřížových rovin a směrů v krystalu

Symetricky ekvivalentní soubor rovin

- nazývá se **forma** a značí se $\{h\ k\ l\}$
- při operacích symetrie krystalu přecházejí roviny v sebe navzájem $\Rightarrow$ z pohledu symetrie tyto roviny nerozeznáme
- u krychlové soustavy jsou symetricky ekvivalentní roviny všechny její stěny
 - Millerovy indexy: $(0\ 0\ 1)$, $(0\ 1\ 0)$, $(1\ 0\ 0)$, $(0\ 0\ \bar{1})$, $(0\ \bar{1}\ 0)$, $(\bar{1}\ 0\ 0)$
 - souhrnně se tyto roviny označují $\{1\ 0\ 0\}$

Zóna

- soubor rovin rovnoběžných s danou mřížovou přímkou $[u\ v\ w] \Rightarrow$ osa zóny
- rovina $(h\ k\ l)$ patří do zóny, platí-li: $uh + vk + wl = 0$



Operace symetrie v krystalech

Krystalická látka

- **periodicky uspořádané** elementární stavební jednotky na základě určité **transformace**
- **uspořádání** lze definovat pomocí zákonitostí **symetrie**
- z lineárních transformací se v krystalografii uplatňují pouze **transformace izometrické** $\Rightarrow$ nedochází ke změně vzdáleností mezi dvěma body před a po transformaci

Operace symetrie a prvky bodové symetrie

- geometrická transformace zachovávající vzájemné vzdálenosti v tělese
- po jejím provedení nerozlišíme, zda byla s tělesem nějaká transformace provedena
- definujeme **prvky bodové symetrie krystalu: jeden bod = atom prvku** v prostoru je při operaci symetrie **pevný**
- základní bodové operace symetrie
 - rotace** – kolem osy procházející pevným bodem (osa C_n je prvek bodové symetrie)
 - zrcadlení** – v rovině obsahující pevný bod (rovina σ je bodový prvek symetrie)
 - inverze** – dle středu totožného z daným pevným bodem (střed inverze i je prvek bodové symetrie)

Operace bodové symetrie a prvky symetrie

Prvek symetrie	Operace symetrie	Schoenfliesovy symboly	Hermann-Mauguinovy symboly
identita	rotace o 360°	E, I	1
n-četná rotační osa	rotace o $2\pi/n$	C_n	n
rovina zrcadlení	zrcadlení	σ	m
střed inverze	inverze	i	$\bar{1}$
n-četná nevlastní osa (rotačně reflexní)	rotace o $2\pi/n$ následovaná zrcadlením v rovině kolmé na rotační osu	S_n $S_1 = \sigma, S_2 = i$	$\tilde{n}$
n-četná nevlastní osa (rotačně inverzní)	rotace o $2\pi/n$ následovaná inverzí	C_{ni}	$\bar{n}$

Bodová operace symetrie: prvek symetrie n-četná osa otáčení

- **jednoduchý prvek symetrie**
- n-četná osa otáčení C_n (n – celé kladné číslo, osa kolmá k určité mřížové rovině)
- úhel otáčení n-četné osy: $\varphi_n = \frac{2\pi}{n}$
- mříž je symetrická vůči otáčení kolem osy o úhel α a jeho celistvé násobky (n)
- po n-tém otočení se mříž dostane do výchozí polohy

Jakou četnost mohou rotační osy mít?

- omezení četnosti rotační osy lze určit již z rovinných mříží, protože prostorové mříže vznikají jejich vrstvením

Jednočetná osa: triviální osa (identita). Rotace o úhel $2\pi \Rightarrow$ objekt zůstává nezměněn

Dvojitá osa: rotace o $2\pi/2$. Značí se  pokud je osa kolmá k obrazovce a  pokud je rovnoběžná s obrazovkou. Existují dva ekvivalentní objekty spojené rotací o π .

Trojčetná osa: rotace o $2\pi/3$. Značí se  , příp.  . Tři ekvivalentní objekty spojené rotací o $2\pi/3$.

Čtyřčetná osa: rotace o $2\pi/4$. Značí se  , příp.  . Čtyři ekvivalentní objekty spojené rotací o $\pi/2$.

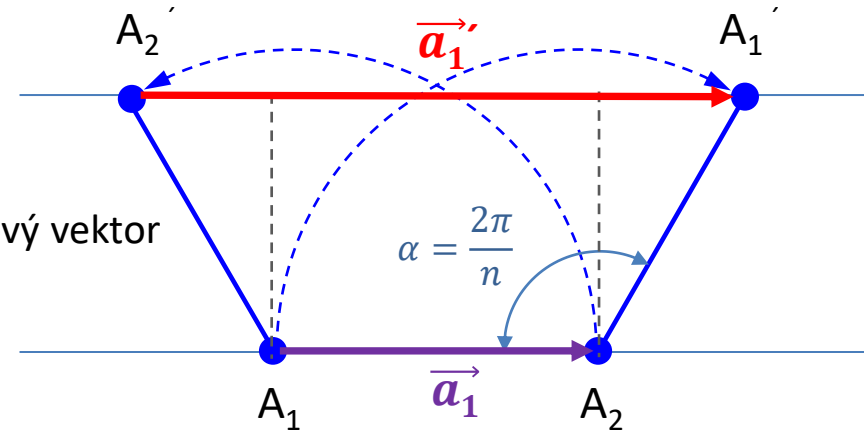
Pětčetná osa: rotace o $2\pi/5$. Značí se  , příp.  . Pět ekvivalentních objektů spojené rotací o $2\pi/5$.

Šestičetná osa: rotace o $2\pi/6$. Značí se  , příp.  . Šest ekvivalentních objektů spojené rotací o $\pi/3$.

Bodová operace symetrie: prvek symetrie n-četná osa otáčení

Omezení četnosti vlastních os otáčení – odvození

- A_1 a A_2 – sousední mřížové body, kterými prochází n-četná osa
- mřížkový vektor $\vec{a}_1$ převádí A_1 do A_2
- A_1' a A_2' - body vzniklé otočením osy o $\alpha = \frac{2\pi}{n} \Rightarrow \Rightarrow$ body A_1' a A_2' také náleží mřížce
- vektor $\vec{a}_1'$ převádějící A_1' do A_2' musí být také mřížkový vektor rovnoběžný s $\vec{a}_1$



Platí:

$$A_1'A_2' = k A_1A_2$$

$$A_1'A_2' = A_1A_2 + 2A_1A_2 \cos(\pi - 2\pi/n) = A_1A_2 + 2A_1A_2 (\cos \pi \cos 2\pi/n + \sin \pi \sin 2\pi/n) = A_1A_2 (1 - 2\cos 2\pi/n)$$

$$k = 1 - 2\cos 2\pi/n = 1 - 2\cos \alpha$$

$$\cos \alpha = (1 - k)/2$$

Protože $|\cos \alpha| \leq 1$, existují následující možnosti:

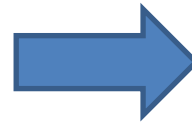
$$k = -1; \cos \alpha = 1 \Rightarrow \alpha = 0^\circ, 360^\circ \Rightarrow n = 1$$

$$k = 0; \cos \alpha = 1/2 \Rightarrow \alpha = 60^\circ \Rightarrow n = 6$$

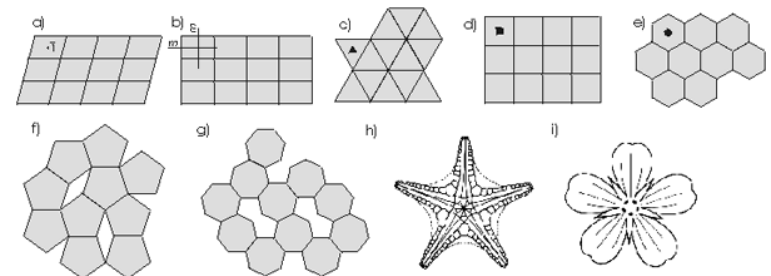
$$k = 1; \cos \alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 90^\circ \Rightarrow n = 4$$

$$k = 2; \cos \alpha = -1/2 \Rightarrow \alpha = 120^\circ \Rightarrow n = 3$$

$$k = 3; \cos \alpha = -1 \Rightarrow \alpha = 180^\circ \Rightarrow n = 2$$



Pětičetná osa a osy s četností větší jak 6 nejsou slučitelné s translační periodicitou mříže. Nelze jimi vyplnit plochu bez prázdných míst.



Bodová operace symetrie: prvek symetrie n -četná osa otáčení

Názorné zobrazení n -četné osy otáčení C_n



Hlavní osa symetrie

plný bod – označuje mřížkový bod nad nákresem

dutý kroužek – označuje bod pod nákresem

přerušovaná kružnice – nákresem

plná kružnice – rovina symetrie v nákrese

průměr (úsečka) – vertikální rovina symetrie

Postup schematického zakreslení

- na výchozí bod, který neleží na žádném prvku symetrie, aplikujeme postupně všechny operace dané grupy symetrie

N-četná vlastní osa otáčení



$C_1(1)$



$C_2(2)$



$C_3(3)$



$C_4(4)$



$C_6(6)$

Bodová operace symetrie: prvek symetrie n-četná zrcadlová osa otáčení

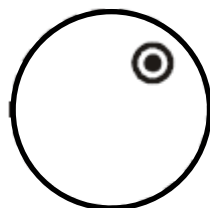
Zrcadlové osy otáčení - S_n

- **složený prvek symetrie**
- složení dvou prvků symetrie – rotace a zrcadlení v rovině kolmé k C_n (nezáleží na pořadí)

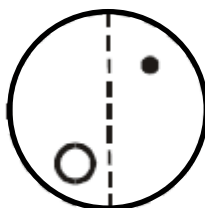
$$C_n \circ \sigma_m = \sigma_m \circ C_n \text{ (cyklická grupa)}$$



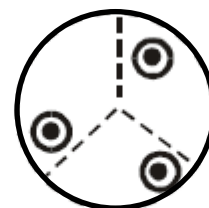
výchozí bod



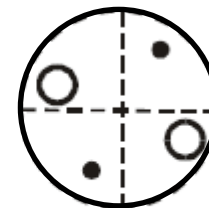
$S_1(\tilde{1}) \equiv \sigma_{(m)}$



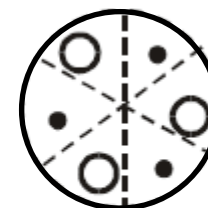
$S_2(\tilde{2}) \equiv i$



$S_3(\tilde{3})$



$S_4(\tilde{4})$

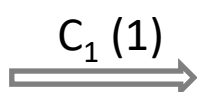


$S_6(\tilde{6})$

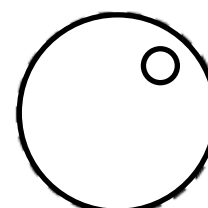
Postup pro $S_1(\tilde{1})$:



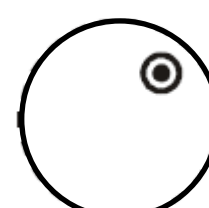
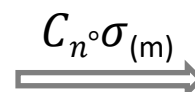
výchozí bod



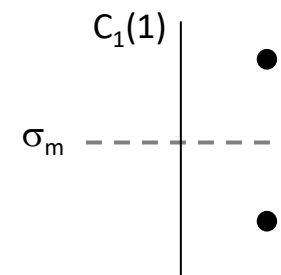
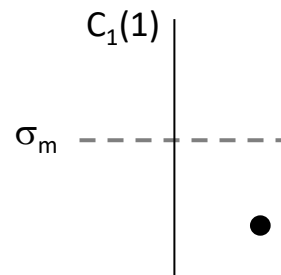
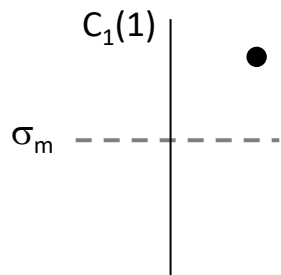
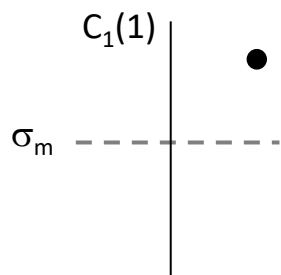
otočení o 360°



zrcadlení

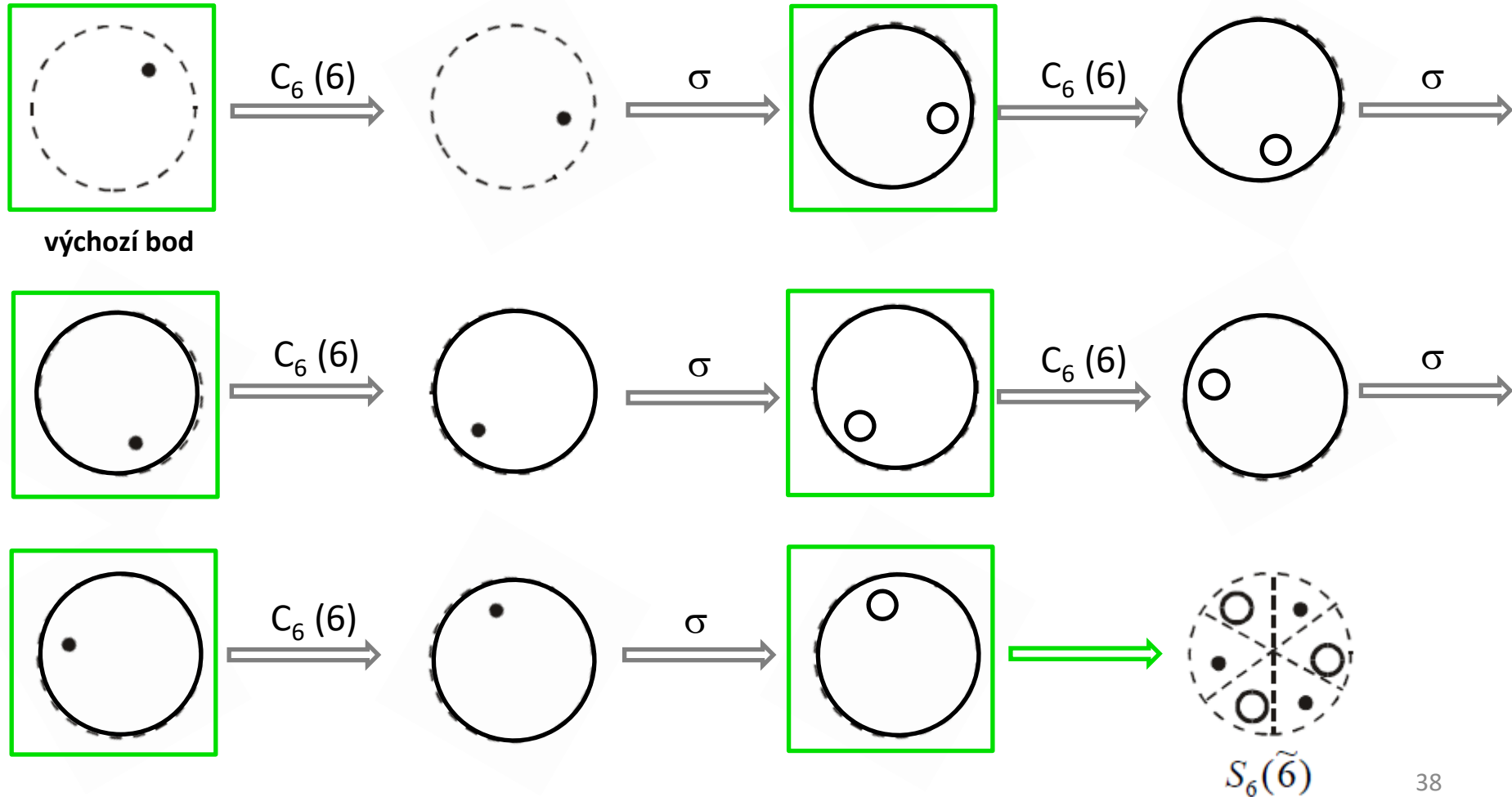


$S_1(\tilde{1}) \equiv \sigma_{(m)}$



Bodová operace symetrie: prvek symetrie n-četná zrcadlová osa otáčení

Zrcadlové osy otáčení - postup složení prvků symetrie



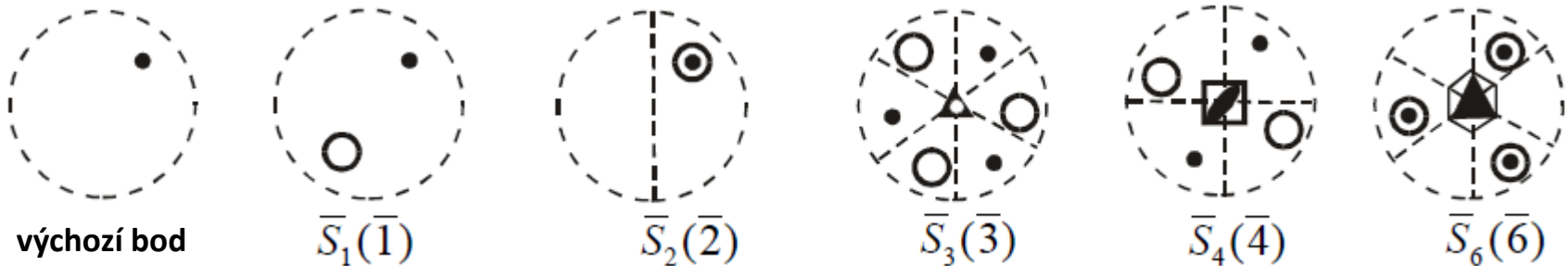
Bodová operace symetrie: prvek symetrie [inverzní n-četná osa otáčení](#)

Inverzní osy otáčení

- složený prvek symetrie** – skládá se z otáčení a inverze (nezáleží na pořadí)

$$C_n \circ i = i \circ C_n \text{ (cyklická grupa)}$$

- pootočíme objekt (mřížkový bod) o úhel $360^\circ/n$, pak provedeme inverzi a výsledkem je ekvivalentní objekt, ten znovu pootočíme a provedeme inverzi atd., v závislosti na četnosti osy otáčení



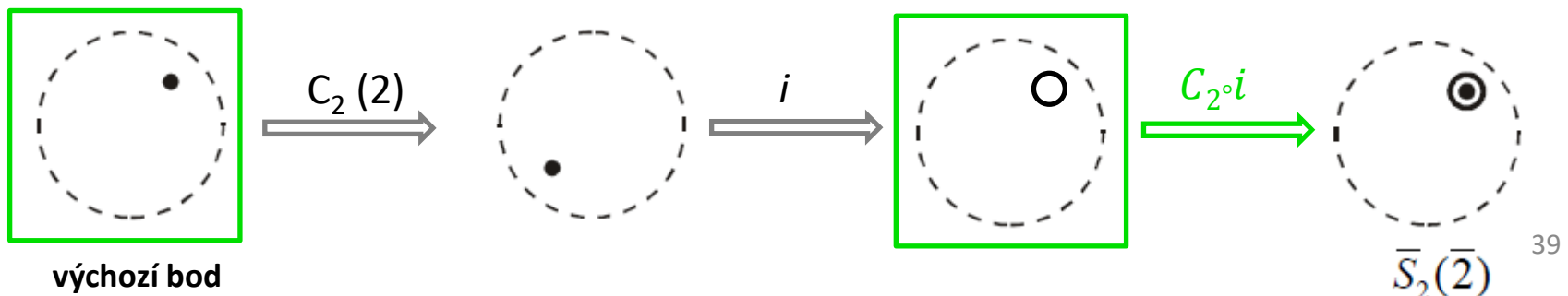
- z rozboru inverzní osy otáčení plyne:

$\bar{1} = i$ (operace inverzní osy otáčení je totožná s inverzí samotnou)

$\bar{2} = m$ (operace inverzní osy otáčení je totožná s rovinou zrcadlení m)

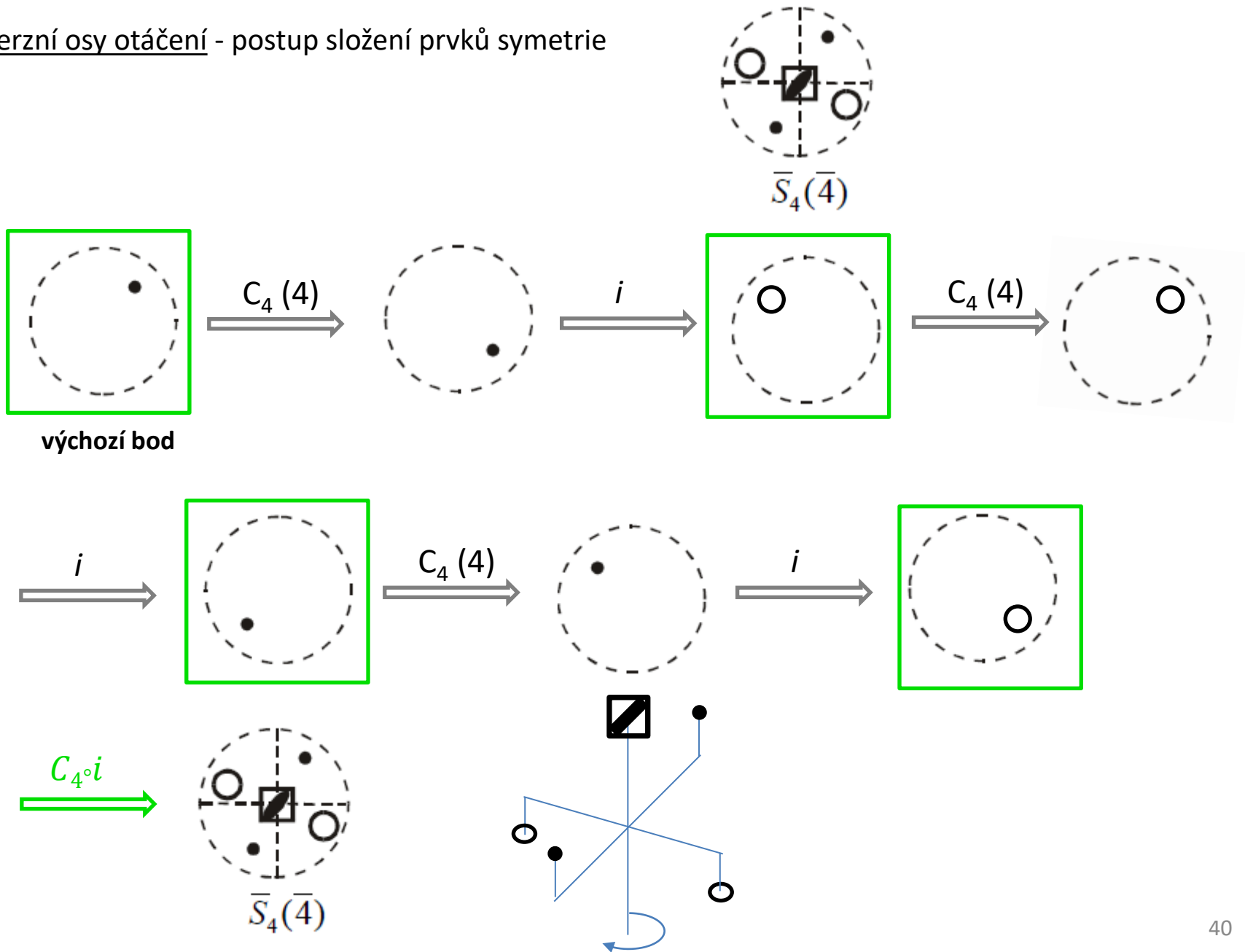
$\bar{3}$ a $\bar{6}$ lze vytvořit **kombinací jednoduchých prvků** symetrie (**rotace 3**, **inverze** a **rotace 3 a zrcadlení**)

Postup operace inverzní osy otáčení (**složený prvek symetrie**):



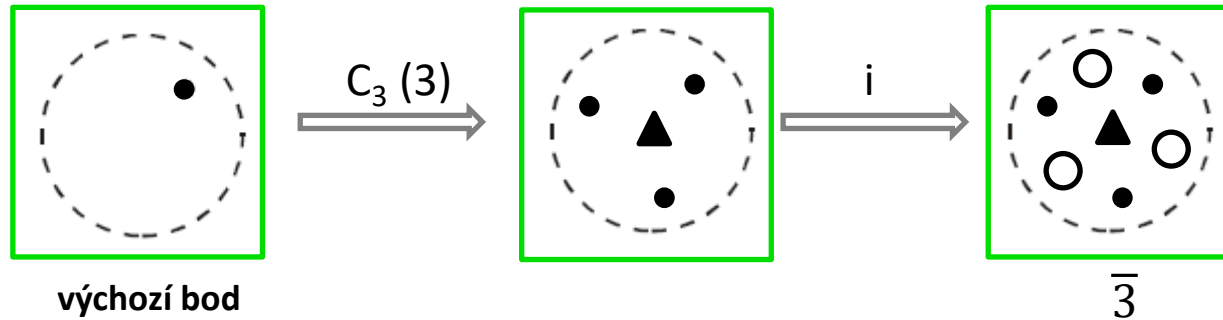
Bodová operace symetrie: prvek symetrie inverzní n-četná osa otáčení

Inverzní osa otáčení - postup složení prvků symetrie

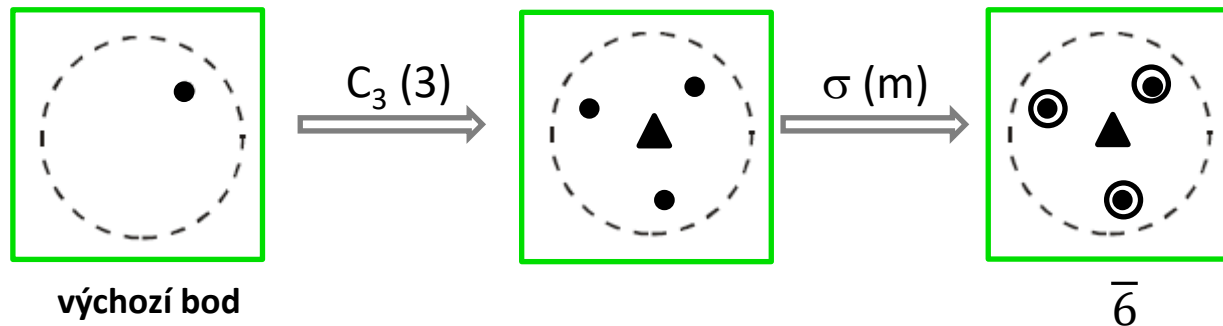


Bodová operace symetrie: prvek symetrie **inverzní n-četná osa otáčení**

Inverzní osy otáčení $\bar{3}$ a $\bar{6}$ - **nahrazení** složeného prvku symetrie kombinací **jednoduchých prvků**



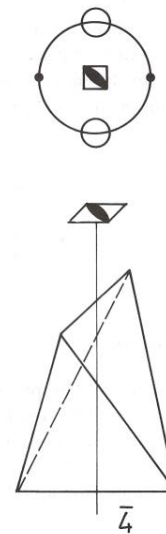
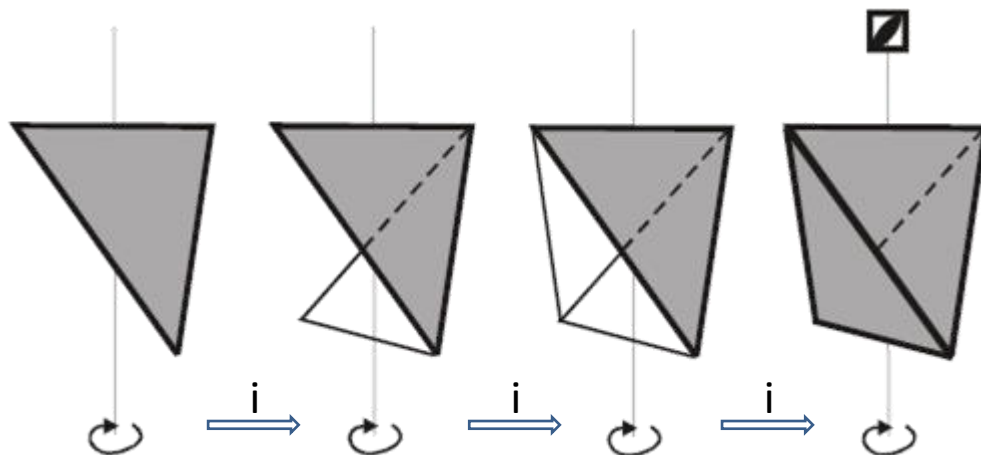
- kombinací **celé řady rotací** (3) a poté **operace inverze lze nahradit** složený prvek inverzní osy otáčení



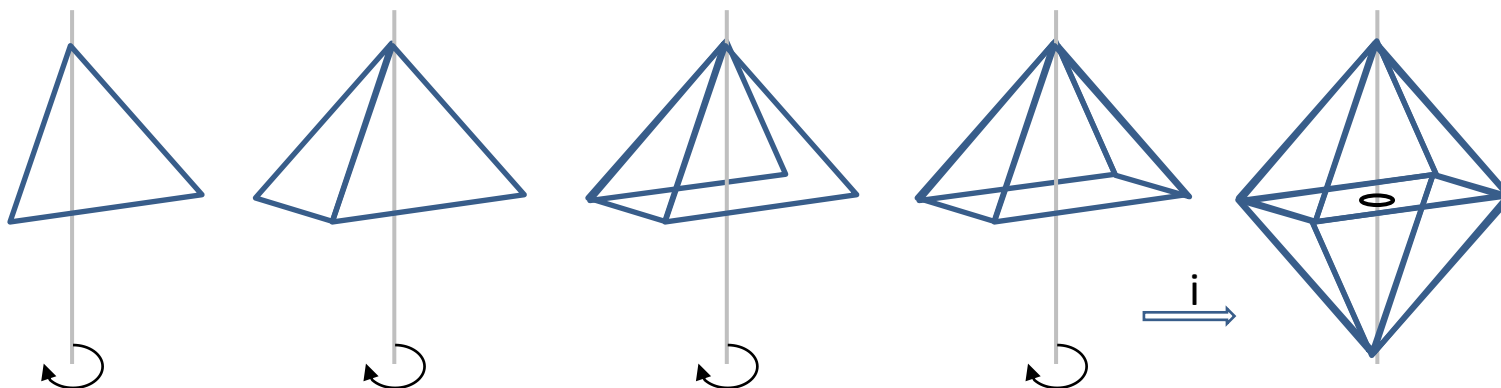
- kombinací **celé řady rotací** (3) a poté **operace zrcadlení lze nahradit** složený prvek inverzní osy otáčení

Rozdíl mezi kombinací a složením prvků symetrie

Vznik tetraedrického tvaru **operací složeného prvku symetrie** – 4-četné rotačně inverzní osy $\bar{4}$



Vznik oktaedru pomocí **kombinace jednoduchých prvků symetrie** (4-četné rotace a inverze)



- kombinaci rotace (**4**) a inverze **i** lze také nahradit kombinací rotace (**4**) a zrcadlení **m**
- rotačně inverzní osy $\bar{4}$ **nelze nahradit kombinací prvků symetrie** – **nutné složení prvků!**

Rozdíl mezi kombinací a složením prvků symetrie

Kombinace – v grupě jsou všechny operace vzniklé složením dílčích operací reprezentovaných kombinovanými prvky

Složení – cyklická grupa generovaná jedním prvkem vzniklým složením základních (jednoduchých) prvků operací symetrie

Kombinace jednoduchých prvků operace symetrie (rotace a inverze) vede ke vzniku jiného útvaru než při **složení** jednoduchých prvků operací symetrie (rotace a inverze)

Závěr:

Bodovou symetrii libovolného **periodického vzoru** (např. molekula) krystalu můžeme popsat pomocí **8 základních prvků bodové symetrie**:

$$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, S_1, S_2, S_4 \quad (1, 2, 3, 4, 6, m, i \text{ (střed inverze)}, \bar{4})$$