

Bodové grupy symetrie

- **bodová grupa** je množina prvků symetrie, jejichž operace ponechávají **alespoň jeden bod tělesa** v prostoru **nepohyblivý**
- **tělesem** chápeme např. **molekulu látky**
- tento požadavek splňuje **8 prvků symetrie** (beztranslační):
 - n-četná rotační osa: **1, 2, 3, 4, 6**
 - rovina zrcadlení: **m**
 - inverzní 4-četná rotační osa: $\bar{4}$
- tyto prvky a jejich **kombinace** tvoří 32 bodových grup, kterými lze charakterizovat symetrii vnějšího tvaru krystalu

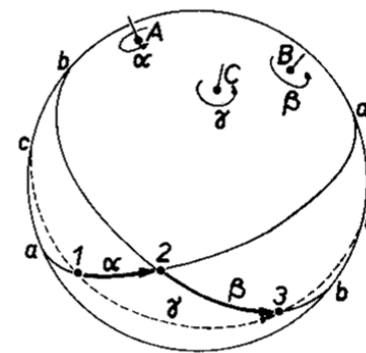
Omezení počtu 32 bodových grup plyne z následujícího:

Kombinace os symetrie:

- při kombinaci os splňující požadavek bodových grup je nutné dodržet 3 podmínky
1. kombinované osy se musí **vzájemně protínat** – **průsečík** zůstává **nepohyblivý** (splněna podmínka bodové grupy)
 2. osové kombinace se vždy skládají ze **tří protínajících se os** – třetí osa **vzniká automaticky** při kombinaci dvou os

Vysvětlení:

Otočení kolem **osy A** o **úhel α** a následné otočení kolem **osy B** o **úhel β** je ekvivalentní otočení kolem určité **osy C** o **úhel γ** .



Bodové grupy symetrie

Kombinace os symetrie:

3. **všechny možné osové kombinace** vyplývají z Eulerovy konstrukce ve sférické trigonometrii

- např. pro úhel mezi **osou A** (perioda $\alpha = 2\pi/n_A$) a **osou B** (perioda $\beta = 2\pi/n_B$) platí vztah

$$\cos (\angle AB) = \frac{\cos(\gamma/2) + \cos(\alpha/2) \cos(\beta/2)}{\sin(\alpha/2) \sin(\beta/2)} \quad , \text{ kde perioda } \gamma \text{ náleží ose C.}$$

- obdobně lze vyjádřit výpočet pro $\cos (\angle AC)$ a $\cos (\angle BC)$

Příklad: pro A_2 , B_2 a C_3 jsou úhly $\angle A_2B_2$, $\angle B_2C_3$ a $\angle A_2C_3$ určeny:

$$\cos (\angle A_2B_2) = \frac{\cos(120/2) + \cos(180/2) \cos(180/2)}{\sin(180/2) \sin(180/2)} = \cos 60$$

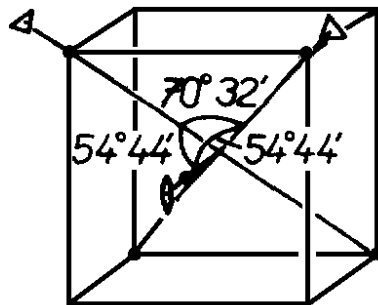
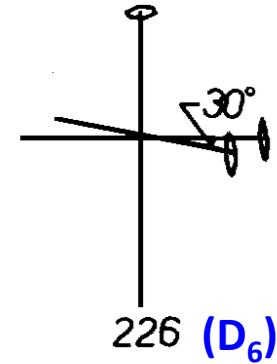
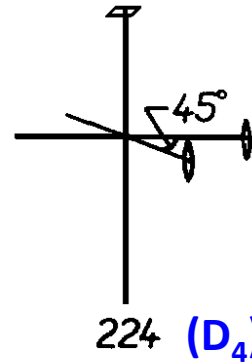
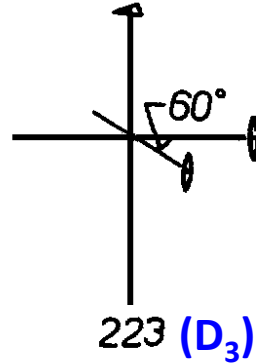
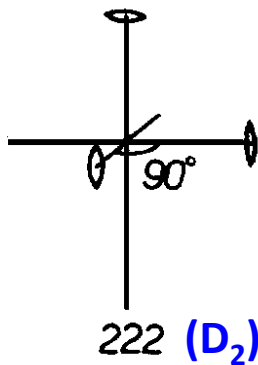
$$\cos (\angle B_2C_3) = \frac{\cos(180/2) + \cos(180/2) \cos(120/2)}{\sin(180/2) \sin(120/2)} = 0$$

$$(\angle A_2B_2) = 60^\circ, (\angle B_2C_3) = (\angle A_2C_3) = 90^\circ$$

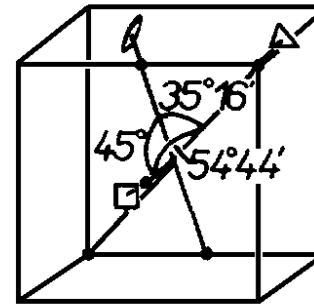
Bodové grupy symetrie

Kombinace os symetrie:

- systematickým kombinováním os 2, 3, 4 a 6 při splnění třech podmínek existuje celkem pouze **6 netriviálních osových kombinací** – **222, 223, 224, 226, 233 a 234**



233 (tetraedr)



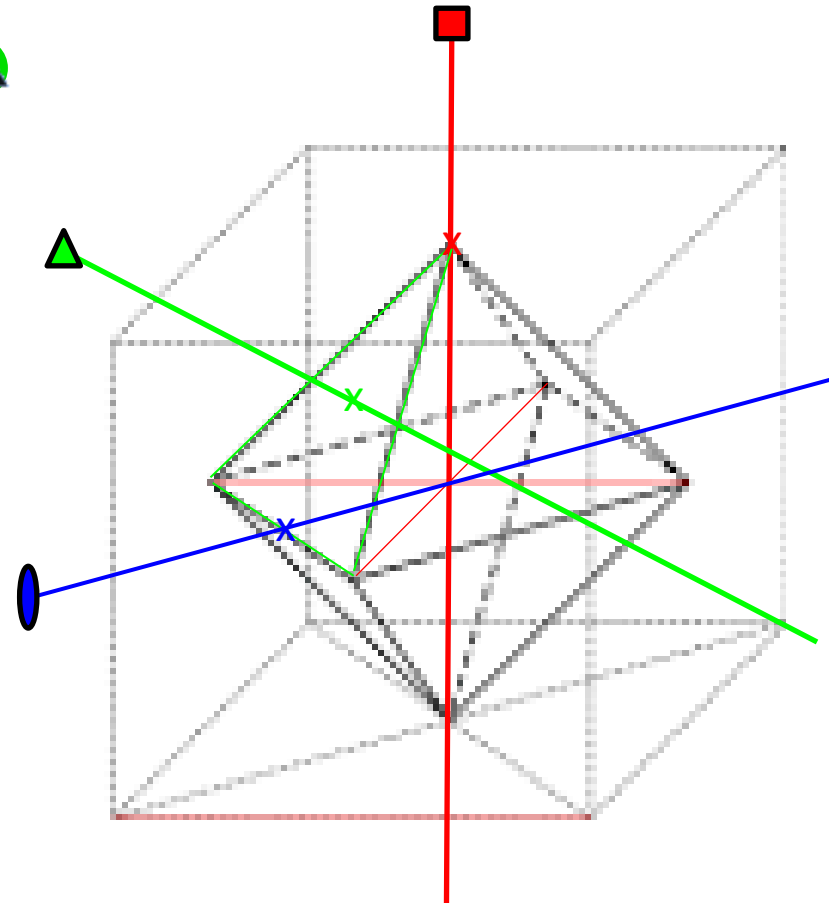
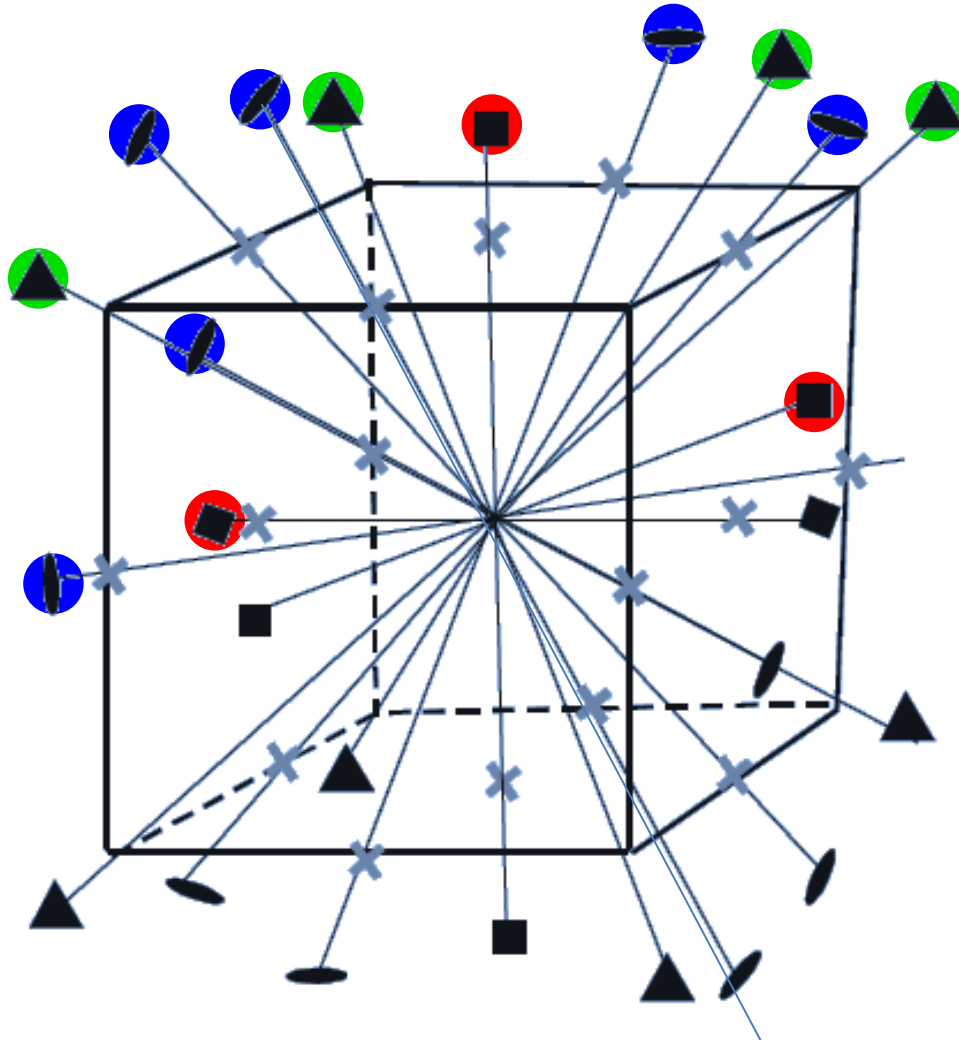
234 (oktaedr)

- symbol D_n uvádí **n -četnou vertikální osu otáčení** plus **n dvojčetných os** kolmých na hlavní vertikální osu
- operacemi jednotlivých os se celkový počet os zvyšuje – duplicity se neuvažují

Bodové grupy symetrie

Kombinace os symetrie 234 (oktaedr)

- oktaedr vznikne spojením středů stěn krychle
- při vyloučení duplicit os symetrie oktaedr obsahuje: **tři** – C_4 , **čtyři** – C_3 , **šest** – C_2



Bodové grupy symetrie

Kombinace osových grup s rovinami zrcadlení a s inverzí

- **roviny zrcadlení rovnoběžné** s rotačními osami se značí symboly 3m, 4mm, atd.
- **roviny zrcadlení kolmé** k rotačním osám se značí symboly 2/m, 4/m, atd.
- kombinace **inverze** s trojčetnou osou $\bar{3}$

Shrnutí:

Celkový počet **bodových grup je 32.**

Podle společné osy nebo společných osových kombinací lze 32 grup rozdělit do **7 krystalových soustav** (kritériem je určitá minimální symetrie).

Krystalové soustavy:

symetrie

- | | |
|----------------------------------|---|
| 1. triklinická (trojklonná): | jedna osa 1 nebo $\bar{1}$ |
| 2. monoklinická (jednoklonná) | jedna osa 2 nebo $\bar{2}$ |
| 3. ortorombická (kosočtverečná): | tři vzájemně kolmé osy 2 nebo $\bar{2}$ |
| 4. tetragonální (čtvercová): | jedna osa 4 nebo $\bar{4}$ |
| 5. trigonální (klencová): | jedna osa 3 nebo $\bar{3}$ |
| 6. hexagonální (šesterečná): | jedna osa 6 nebo $\bar{6}$ |
| 7. kubická (krychlová): | čtyři osy 3 nebo $\bar{3}$ ve směru tělesových uhlopříček krychle |

32 bodových grupy symetrie

Soustava	Schoenfliesův symbol	Mezinárodní symbol	<i>p</i> – počet bodů
triklinická	C_1	1	1
	C_2	$\bar{1}$	2
monoklinická	C_2	2	2
	C_{1h}	m	2
	C_{2h}	$2/m$	4
ortorombická	D_2	222	4
	C_{2v}	$mm2$	4
	D_{2h}	mmm	8
tetragonální	C_4	4	4
	S_4	$\bar{4}$	4
	C_{4h}	$4/m$	8
	D_4	422	8
	C_{4v}	$4mm$	8
	D_{2d}	$\bar{4}2m$	8
	D_{4h}	$4/mmm$	16
trigonální	C_3	3	3
	C_{3i}	$\bar{3}$	6
	D_3	32	6
	C_{3v}	$3m$	6
	D_{3d}	$\bar{3}m$	12
hexagonální	C_6	6	6
	C_{3h}	$\bar{6}$	6
	C_{6h}	$6/m$	12
	D_6	622	12
	C_{6v}	$6mm$	12
	D_{3h}	$\bar{6}m2$	12
	D_{6h}	$6/mmm$	24
kubická	T	23	12
	T_h	$m\bar{3}$	24
	O	432	24
	T_d	$\bar{4}3m$	24
	O_h	$m\bar{3}m$	48

P – počet symetricky ekvivalentních bodů nebo operací symetrie bodové grupy

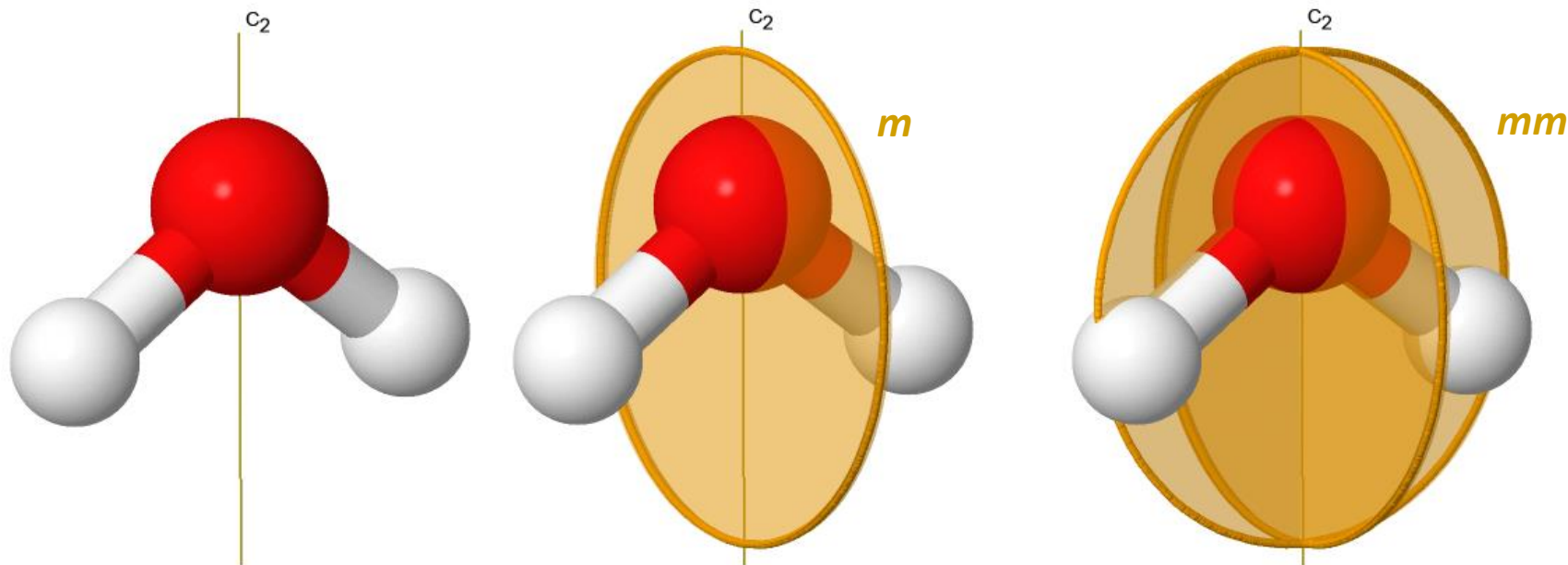
Bodové grupy symetrie

Schoenfliesova symbolika

C_n		grupa obsahující pouze vertikální polární n -četnou osu
C_{nv}		grupa obsahující vertikální polární n -četnou osu a n rovin zrcadlení procházejících podél ní (vertikální roviny)
C_{nh}		grupa obsahující kromě vertikální n -četné osy ještě kolmou rovinu zrcadlení (horizontální rovina)
C_{ni}		grupa obsahující kromě vertikální n -četné osy ještě inverzi
S_n		grupa obsahující jen reflexní n -četnou osu
D_n		grupa obsahující kromě vertikální n -četné osy ještě n dvojčetných os, které jsou k ní kolmé
D_{nh}		grupa obsahující všechny prvky grupy D_n a navíc zrcadlovou rovinu kolmou k n -četné ose
D_{nd}		grupa obsahující všechny prvky grupy D_n a navíc roviny zrcadlení protínající se podél n -četné osy a půlícíúhly mezi dvojčetnými osami
T		grupa obsahující 4 trojčetné a 3 dvojčetné osy orientované navzájem jako osy symetrie tetraedru
T_h		grupa obsahující všechny prvky grupy T a navíc inverzi
T_d		grupa obsahující všechny prvky grupy T a navíc diagonální roviny zrcadlení
O		grupa obsahující 3 čtyřčetné, 4 trojčetné a 6 dvojčetných os, uspořádaných jako osy symetrie oktaedru nebo krychle
O_h		grupa obsahující všechny prvky grupy O a navíc inverzi

Bodové grupy symetrie

Molekula vody: bodová grupa C_{2v}



vertikální osa rotace

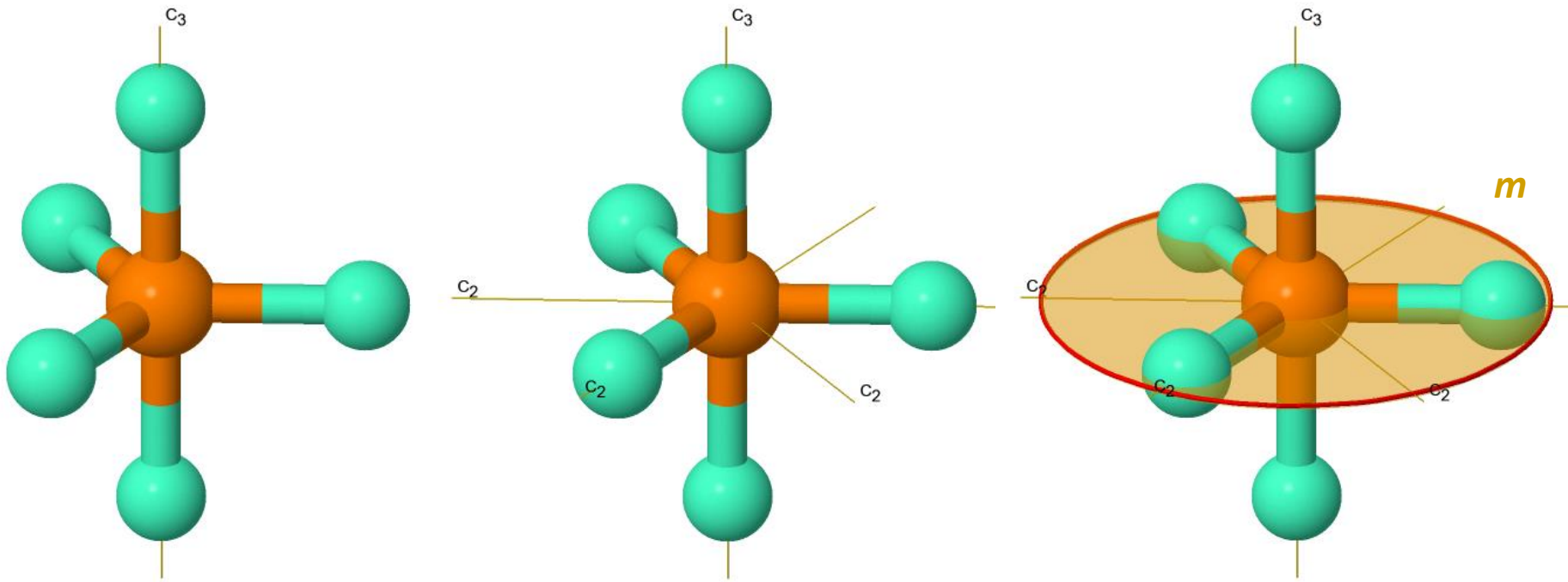
C_{2v}

dvojčetná osa rotace

2 vertikální roviny zrcadlení m

Bodové grupy symetrie

Fluorid fosforečný: bodová grupa D_{3h}



Označuje **trojčetnou** vertikální osu rotace plus **tři** dvojčetných os k ní kolmé

D_{3h}

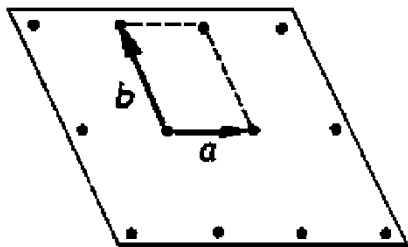
trojčetná osa rotace

horizontální roviny zrcadlení m

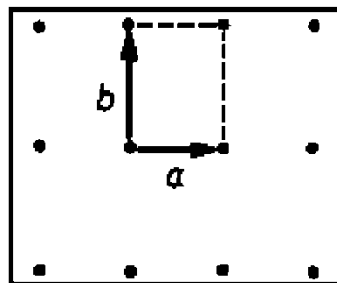
Rovinné grupy symetrie

- **rovinná grupa** je množina prvků symetrie, jejichž operace jsou **omezeny na transformace v rovině** x, y
 - v rovině x, y existuje pouze **5 typů rovinných mříží**
- od bodových grup se **rovinná grupa** liší **zahrnutím zrcadlové přímky m a skluzové přímky g** s velikostí skluzu $\frac{1}{2}$ periody identity (*definice m a g - viz dále*)
- rovinné grupy zahrnují tyto **prvky symetrie: 1, 2, 3, 4, 6, m , g**
- jednotlivé prvky symetrie a jejich kombinace tvoří **17 rovinných grup symetrie**

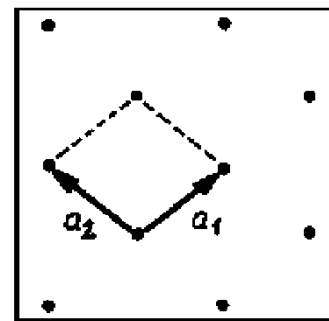
5 typů rovinných mříží



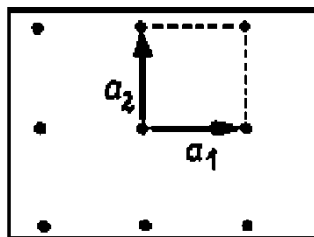
rovnoběžníková



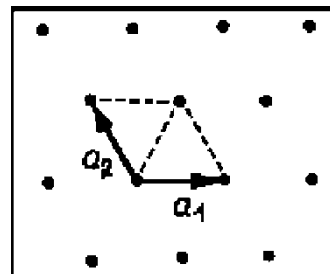
pravoúhlá



romboedrická



tetragonální



hexagonální

17 typů rovinných grup symetrie

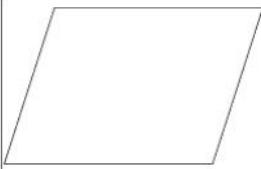
Typ mříže	Grupa	Prvky symetrie
rovnoběžníková	$p1$	1
pravoúhlá	$p2$	1, 2
	pm	1, m
	pg	1, b
	cm	1, m , b
	$p2mm$	1, 2, m
	$p2mg$	1, 2, m , a
	$p2gg$	1, 2, a , b
	$c2mm$	1, 2, m , a , b
čtvercová	$p4$	1, 2, 4
	$p4mm$	1, 2, 4, m , g
	$p4gm$	1, 2, 4, m , a , b , g
hexagonální	$p3$	1, 3
	$p3m1$	1, 3, m , b , g
	$p31m$	1, 3, m , a , g
	$p6$	1, 2, 3, 6
	$p6mm$	1, 2, 3, 6, m , a , b , g

Označení grup:

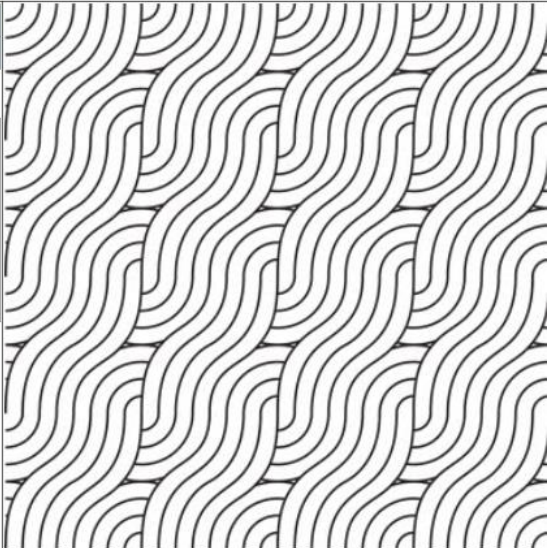
- První člen - udává typ rovinné buňky (p = primitivní, c = centrovaná)
- Druhý člen – vertikální prvek symetrie
- Třetí a čtvrtý člen - v kosoúhlé a pravoúhlé buňce je třetí prvek symetrie kolmý na x , čtvrtý prvek kolmý na y . Ve čtvercové a hexagonální buňce jsou na třetím a čtvrtém místě prvky symetrie ležící v osních a meziosních směrech.
- g – skluzová přímka neosová; a , b – skluzové přímky osové

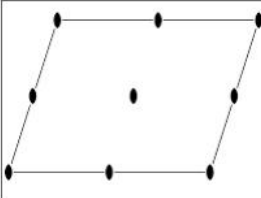
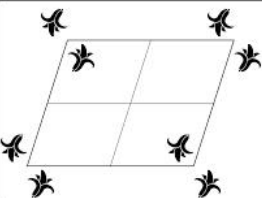
Ukázka 17 typů rovinných grup symetrie

<u>p1 (p1)</u>	No. 1	
o	Oblique	



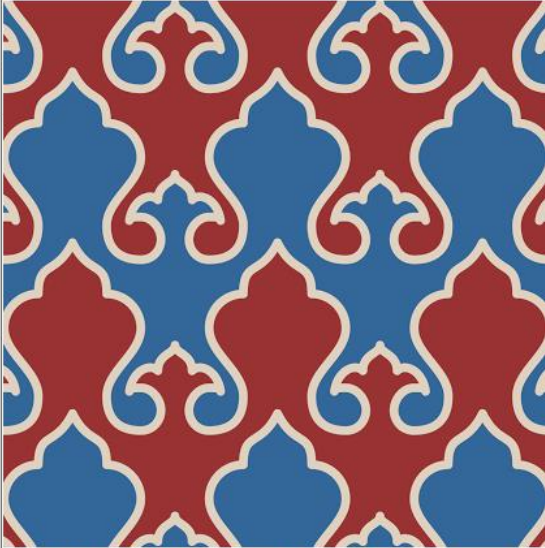

source: bluekdesign (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

<u>p2 (p2)</u>	No. 2	
2222	Oblique	

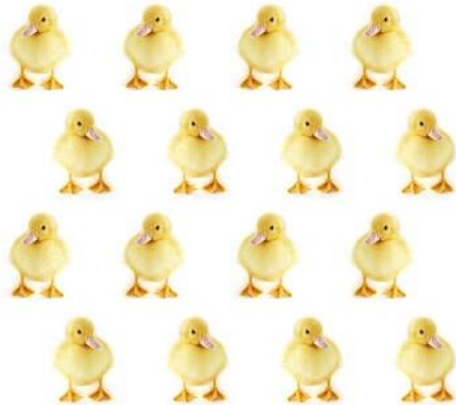
source: David Matthew Parker (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

Ukázka 17 typů rovinných grup symetrie

pm (p1m1)	No. 3	
**	Rectangular	

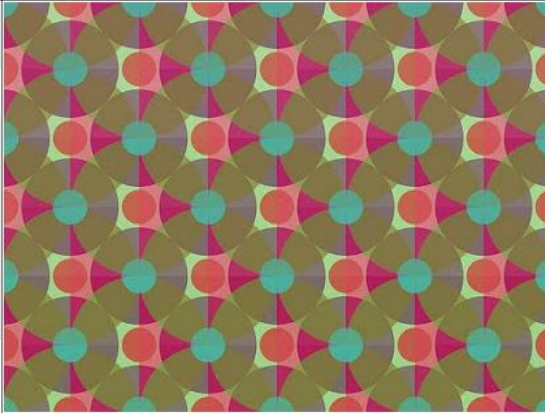
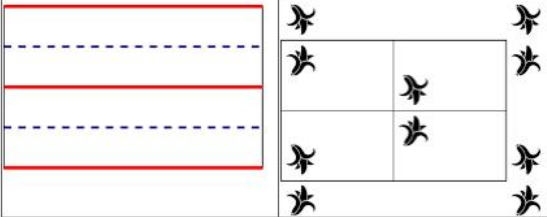
source: bluekdesign (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

pg (p1g1)	No. 4	
xx	Rectangular	

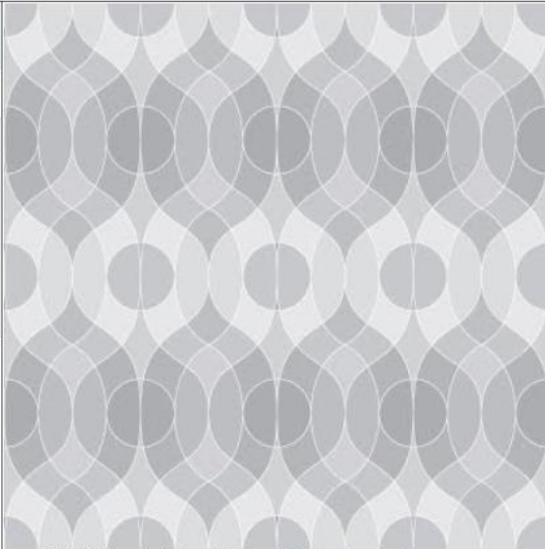
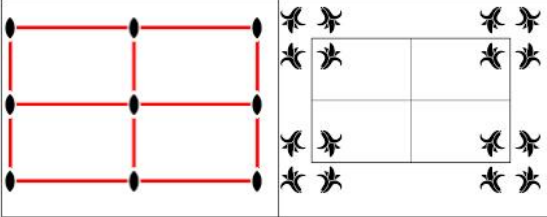
			
			
			
			

source: PJS

Ukázka 17 typů rovinných grup symetrie

cm (c1m1)	No. 5	
*x	Rectangular	
		

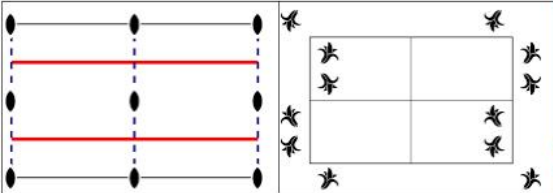
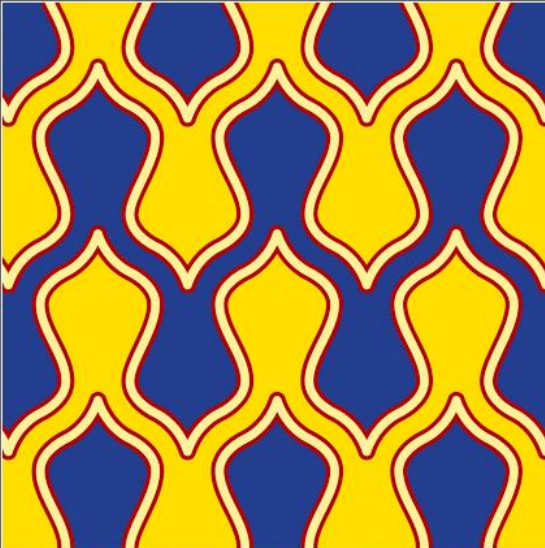
source: ciokkolata farrabuto never loved berlusconi (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

pmm (p2mm)	No. 6	
*2222	Rectangular	
		

source: David Matthew Parker (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

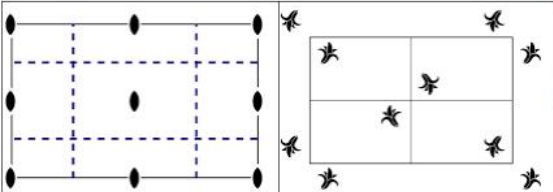
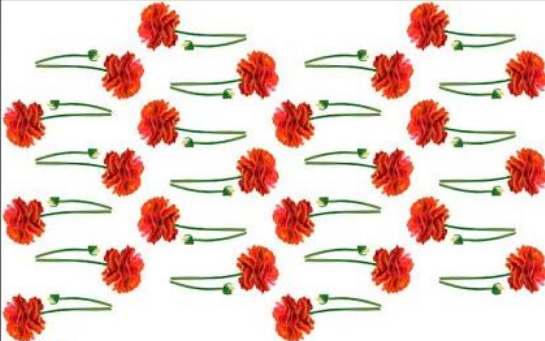
Ukázka 17 typů rovinných grup symetrie

<u>pmg (p2mg)</u>	No. 7
22*	Rectangular

source: bluekdesign (www.Flickr.com), Creative Commons License

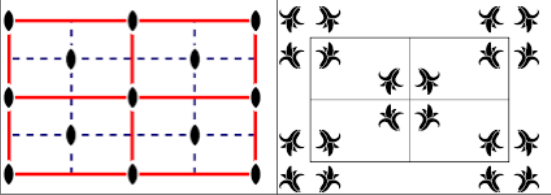
<u>pgg (p2gg)</u>	No. 8
22x	Rectangular

source: PJS

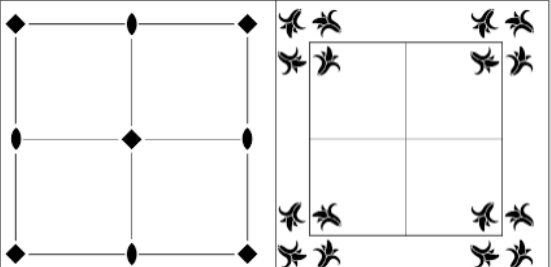
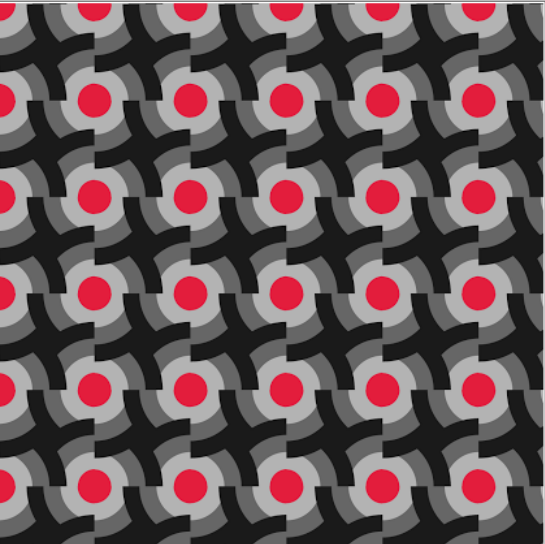
Ukázka 17 typů rovinných grup symetrie

cmm (c2mm)	No. 9
2*22	Rectangular



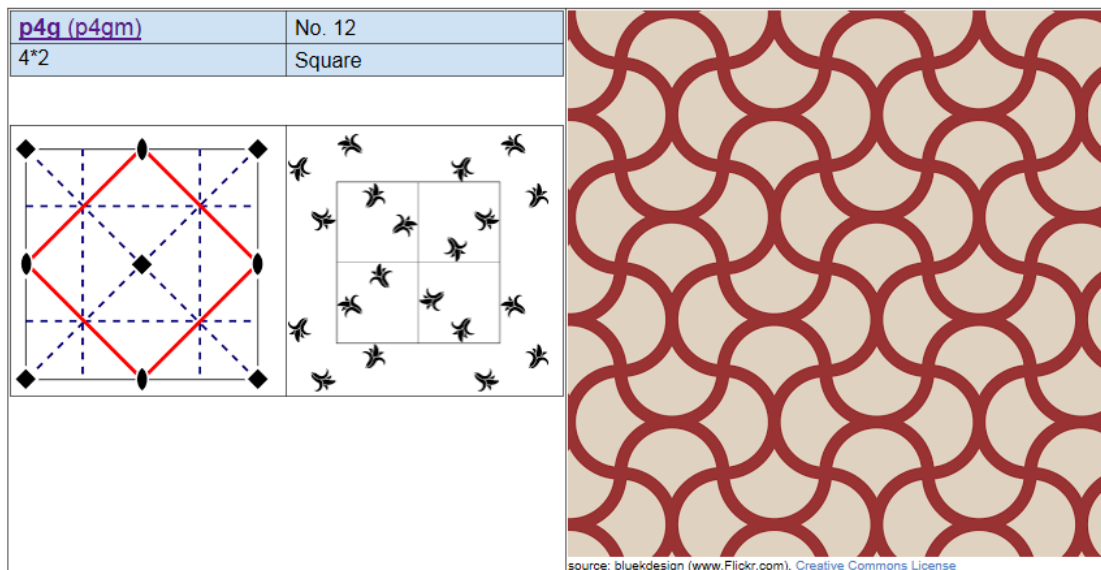
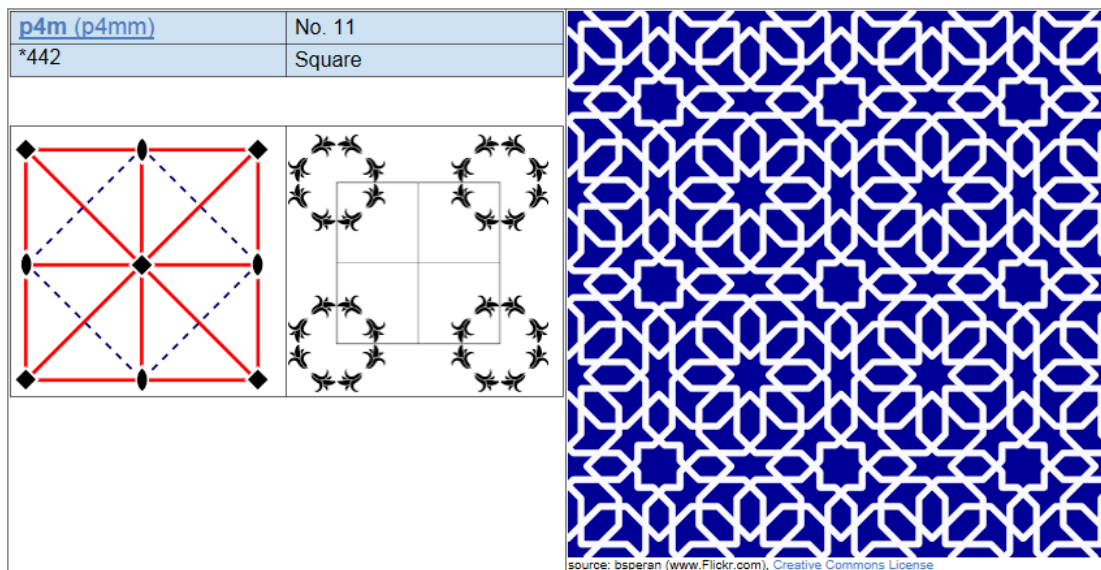

source: bluekdesign (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

p4 (p4)	No. 10
442	Square

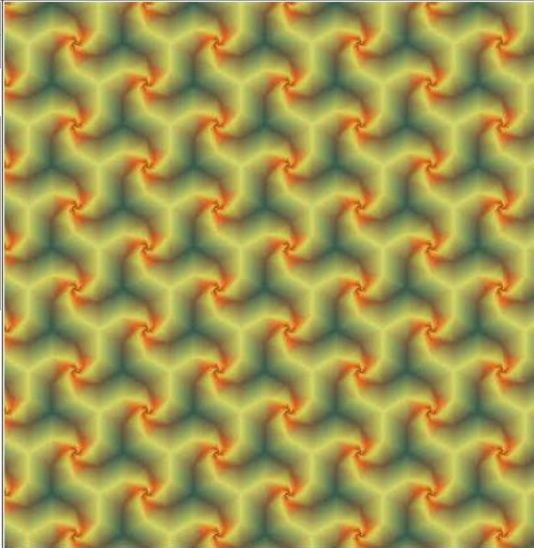
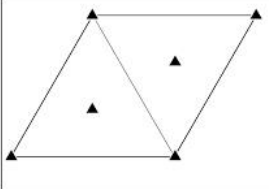
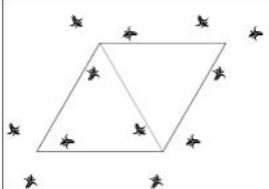



source: bluekdesign (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

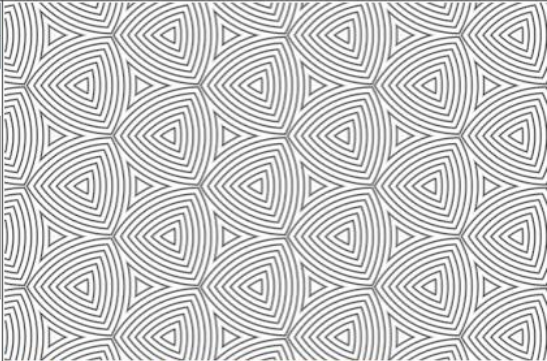
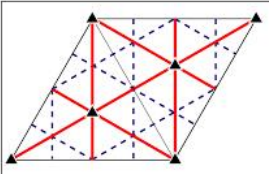
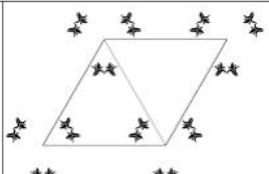
Ukázka 17 typů rovinných grup symetrie



Ukázka 17 typů rovinných grup symetrie

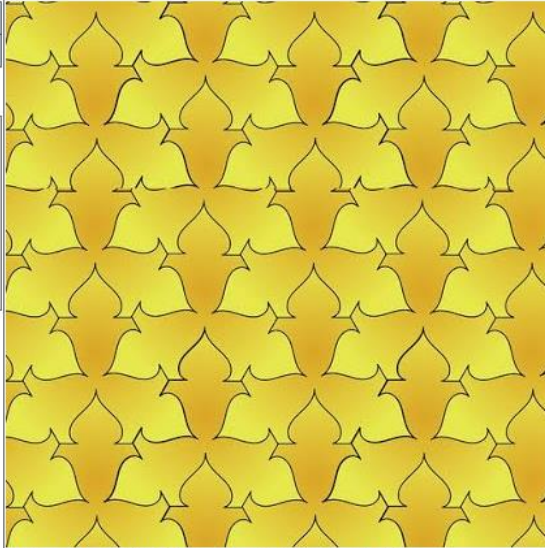
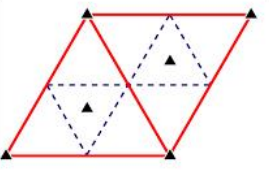
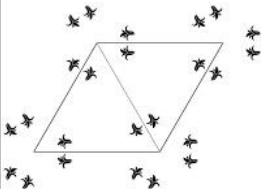
<u>p3 (p3)</u>	No. 13	
333	Hexagonal	
 		

source: eskimoblood (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

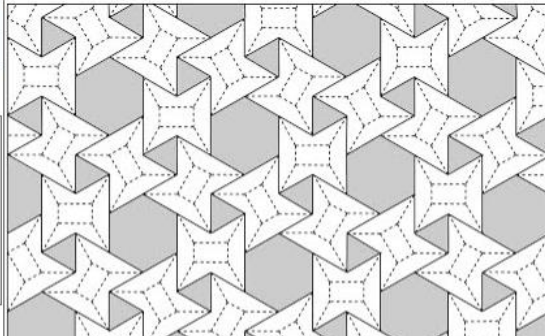
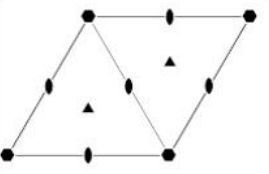
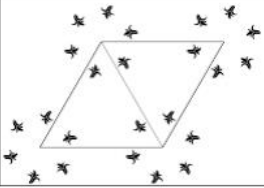
<u>p3m1 (p3m1)</u>	No. 14	
*333	Hexagonal	
 		

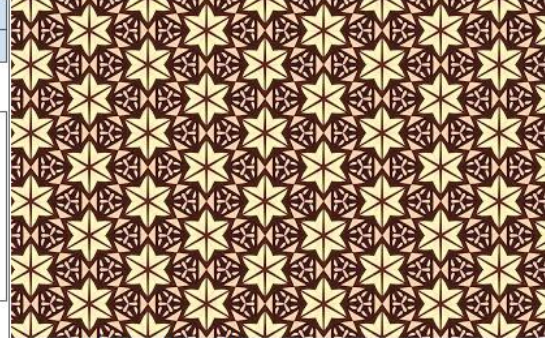
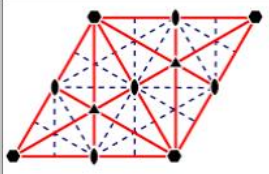
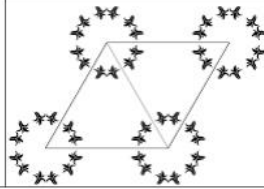
source: jff rym pmr (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

Ukázka 17 typů rovinných grup symetrie

p31m (p31m)	No. 15	
3*3	Hexagonal	
 		

Note: Ignore the color gradient, which destroys the three-fold symmetry
source: bluekdesign (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

p6 (p6)	No. 16	
632	Hexagonal	
 		

p6m (p6mm)	No. 17	
*632	Hexagonal	
 		

source: Crystal Writer (www.Flickr.com), [Creative Commons License](#)

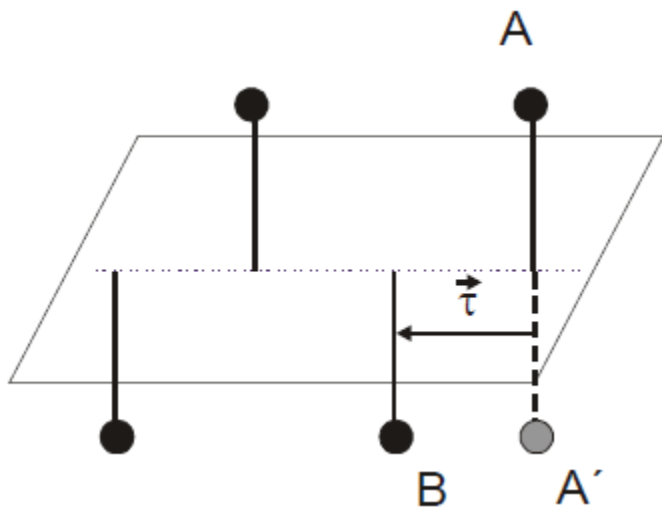
Prostorové grupy

Otevřené transformace

- kombinace bodových prvků symetrie (vlastní osy otáčení nebo roviny symetrie) s translací $\Rightarrow$ vznikají nové nebodové prvky symetrie – **skluzové roviny a šroubové osy**
- skupiny těchto prvků symetrie tvoří prostorové grupy – **celkový počet 230**

Skluzové roviny

- po **zrcadlení** objektu v rovině provedeme **translaci** o zlomek mřížového parametru rovnoběžně s touto rovinou (vektor τ) = **operace na skluzné rovině**
- velikost translace je buď *o polovinu* mřížového parametru při posuvu **podél hrany elementární buňky** nebo *o polovinu nebo čtvrtinu* translace **podél stěnové uhlopříčky elementární buňky**
- existuje **9 typů** skluzných rovin



TYPY SKLUZU	značení	translační složka
osový	a	a/2
	b	b/2
	c	c/2
úhlopříčný	n	a/2 + b/2
		b/2 + c/2
		c/2 + a/2
diamantový	d	a/4 + b/4
		b/4 + c/4
		c/4 + a/4

Prostorové grupy

Šroubové osy

- složená operace z **vlastní osy otáčení** (rotace) po níž následuje **translace** podél této osy (vzniká šroubovice)



Limitace počtu šroubových os

- necht' po ***n*** aplikacích operace **šroubové osy** (jedná se tedy o ***n*-četnou osu**) dostaneme bod **translačně posunutý** vůči výchozímu bodu
- je-li **translační složka šroubové osy $\vec{\tau}$** a **mřížová translace $\vec{t}$** , pak:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{t}; \boldsymbol{\tau} = \frac{m}{n} \mathbf{t}; m = 0, 1, 2, \dots \Rightarrow$$

$\Rightarrow$ translační složka $\boldsymbol{\tau}$ závisí na četnosti (*n*) šroubové osy

- $m = 0 \Rightarrow \tau = 0 \Rightarrow$** pouhé otáčení kolem osy (šroubová osa jako 1-četná osa)
- $m = n \Rightarrow \tau = t \Rightarrow$** čistá translace
- smysl má podmínka **$m < n$** (kde $n = 2, 3, 4, 6$) $\Rightarrow \tau$ je **menší** než hodnota **mřížové translace *t***
 $\Rightarrow$ celkem existuje pouze **11 různých šroubových os symetrie**

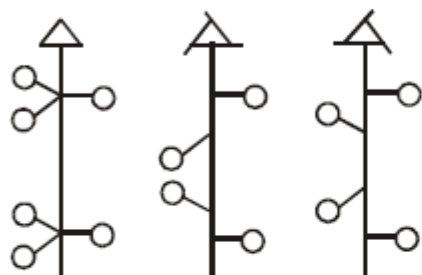
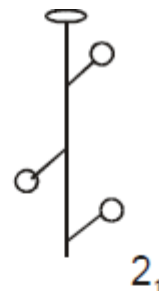
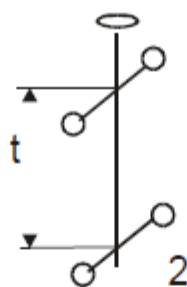
Symbody mezinárodního označení šroubových os

symbol	2_1	3_1	3_2	4_1	4_2	4_3	6_1	6_2	6_3	6_4	6_5
osa	C_2	C_3	C_3	C_4	C_4	C_4	C_6	C_6	C_6	C_6	C_6
τ/t	1/2	1/3	2/3	1/4	2/4	3/4	1/6	2/6	3/6	4/6	5/6

Šroubové osy

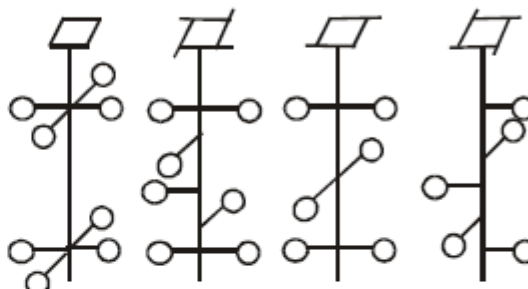


pravotočivá osa



3₁

3₂



4₁

4₂

4₃



6₁

6₂

6₃

6₄

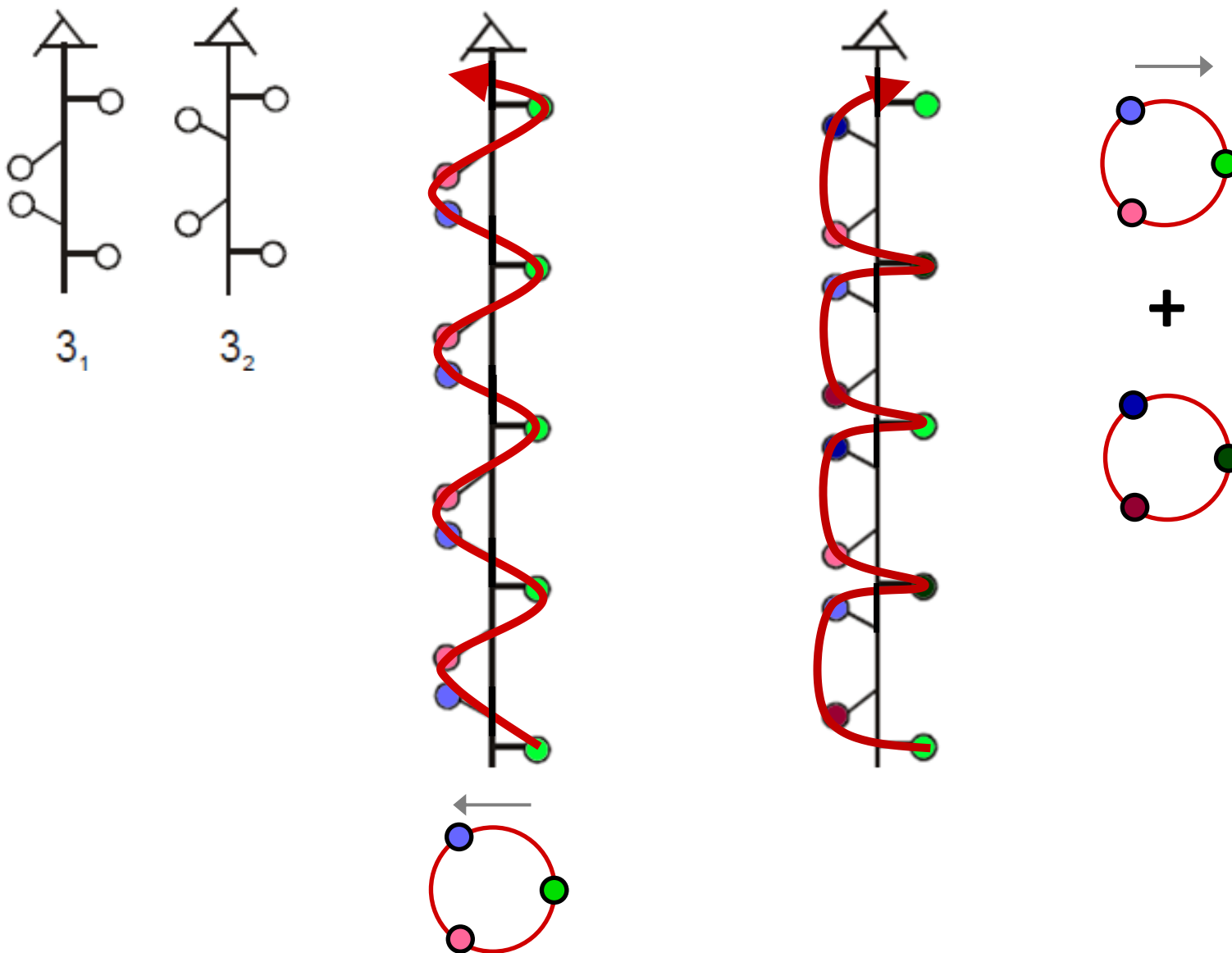
6₅

Sdružené enantiomorfnní osy (pravo a levo-točivé)

3₁ - 3₂; 4₁ - 4₃; 6₁ - 6₅; 6₂ - 6₄

symbol	2 ₁	3 ₁	3 ₂	4 ₁	4 ₂	4 ₃	6 ₁	6 ₂	6 ₃	6 ₄	6 ₅
osa	C ₂	C ₃	C ₃	C ₄	C ₄	C ₄	C ₆	C ₆	C ₆	C ₆	C ₆
τ/t	1/2	1/3	2/3	1/4	2/4	3/4	1/6	2/6	3/6	4/6	5/6

Šroubové osy – pravotočivé 3_1 a levotočivé 3_2



3_1 – pravotočivá šroubovice

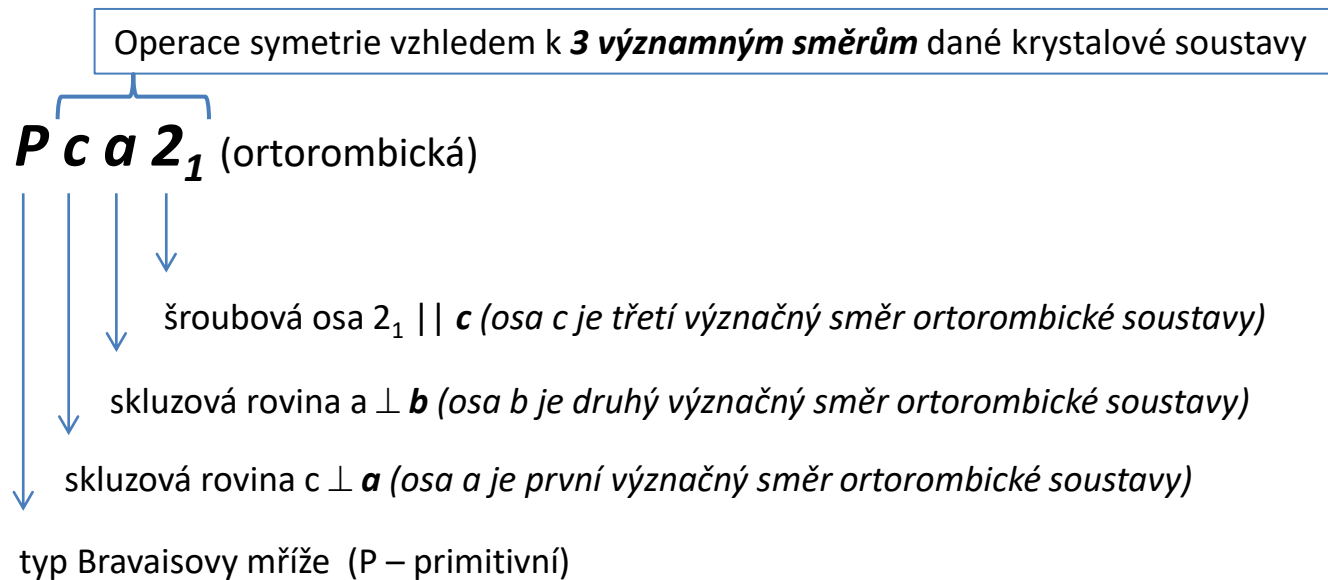
3_2 – levotočivá šroubovice

obě šroubovice mají stejné stoupání

Symbolika a znázornění prostorových grup symetrie krystalu - Hermann-Mauguin

- 230 prostorových grup má **mezinárodní standardní značení T ABC**
- **T – typ mříže** (P-primitivní, I – prostorově centrovaná, F – plošně centrovaná, R – rhombodrická, bazálně centrované buňky)
- **ABC – trojice prvků symetrie** (vlastní osy a zrcadlení), které byly kombinovány s translacemi při tvorbě prostorové grupy
 - rovina zrcadlení může být nahrazena skluzovou rovinou (ozn. a, b, c, n, d – dle typu skluzu)
 - symbol pro n-četnou osu šroubovou osou
 - pořadí symbolů prvků symetrie je dáno **označením význačných směrů** v soustavě (může se pro danou krystalografickou soustavu lišit od pořadí hlavních krystalografických os a, b, c)

Příklad symboliky:



Symbolika a znázornění prostorových grup symetrie krystalu - Hermann-Mauguin

Mezinárodní konvenční označení **význačných směrů** krystalových soustav

- ve význačném směru existuje prvek symetrie (nejvyšší n -četná osa rotace)
- ortorombická soustava – význačné směry jsou shodné s hlavními krystalografickými osami ***a***, ***b***, ***c***
- triklinická soustava – nemá význačný směr (pouze bod inverze, který nemá žádný směr)
- monoklinická soustava – význačný směr se označuje směr osy ***b*** (příp. ***c***)
- tetragonální a hexagonální soustavy – n -četná osa s nejvyšším řádem symetrie (4-četná) je ve směru osy ***c***), následuje osa ***a*** a dále pak **význačný směr [110] a [210]**, z kterého **vidíme další prvek symetrie** (u tetragonální a hexagonální soustavy platí, že ***a* = *b*** $\Rightarrow$ proto ze směru osy ***b*** vidíme ten samý prvek symetrie jako ze směru osy ***a*** $\Rightarrow$ nutné určit jiný význačný směr)
- kubická soustava – význačné směry ve směru osy ***a*** a dále **[111] a [110]**

Soustava	význačný směr I	význačný směr II	význačný směr III	příklad
triklinická	-			P 1, P $\bar{1}$
monoklinická	b (<i>c</i>)			P 1 m 1
ortorombická	a	b	c	P 2 2 2
tetragonální	c	a	[110]	P 4 ₃
hexagonální	c	a	[210]	P 6 ₁
kubická	a	[111]	[110]	P 4 3 2

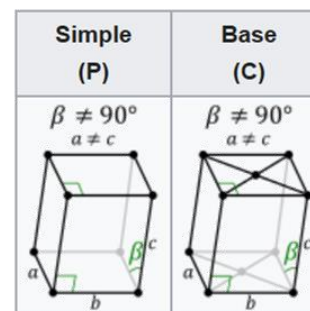
Symbolika a znázornění prostorových grup symetrie krystalu – Schoenfliesova symbolika

- prostorové grupy (jsou ozn. jako izogonální) obsahují symbol bodové grupy, z které byly odvozeny
 - izogonální prostorové grupy jsou odvozeny od bodové grupy se zachováním úhlových vztahů mezi operacemi symetrie
- symbol grupy je doplněn o horní index značící pořadové číslo prostorové grupy příslušné k dané bodové grupě

Příklad: monoklinická krystalová soustava

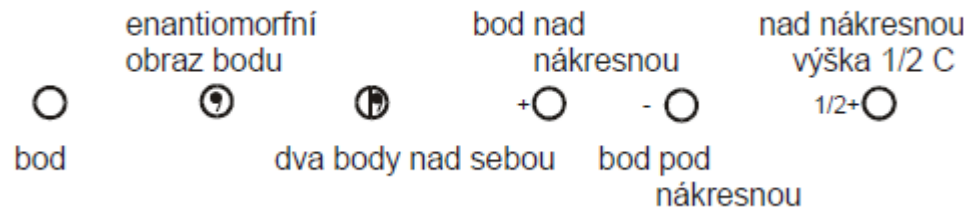
Monoclinic crystal system					
Number	Point group	Short name	Full name(s)		Schoenflies
3	2	P2	P 1 2 1	P 1 1 2	C_2^1
4	2	P2 ₁	P 1 2 ₁ 1	P 1 1 2 ₁	C_2^2
5	2	C2	C 1 2 1	B 1 1 2	C_2^3
6	m	Pm	P 1 m 1	P 1 1 m	C_s^1
7	m	Pc	P 1 c 1	P 1 1 b	C_s^2
8	m	Cm	C 1 m 1	B 1 1 m	C_s^3
9	m	Cc	C 1 c 1	B 1 1 b	C_s^4
10	2/m	P2/m	P 1 2/m 1	P 1 1 2/m	C_{2h}^1
11	2/m	P2 ₁ /m	P 1 2 ₁ /m 1	P 1 1 2 ₁ /m	C_{2h}^2
12	2/m	C2/m	C 1 2/m 1	B 1 1 2/m	C_{2h}^3
13	2/m	P2/c	P 1 2/c 1	P 1 1 2/b	C_{2h}^4
14	2/m	P2 ₁ /c	P 1 2 ₁ /c 1	P 1 1 2 ₁ /b	C_{2h}^5
15	2/m	C2/c	C 1 2/c 1	B 1 1 2/b	C_{2h}^6

Monoclinic Bravais lattice

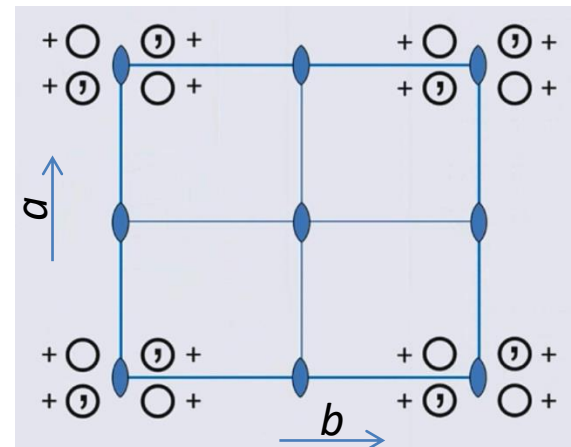
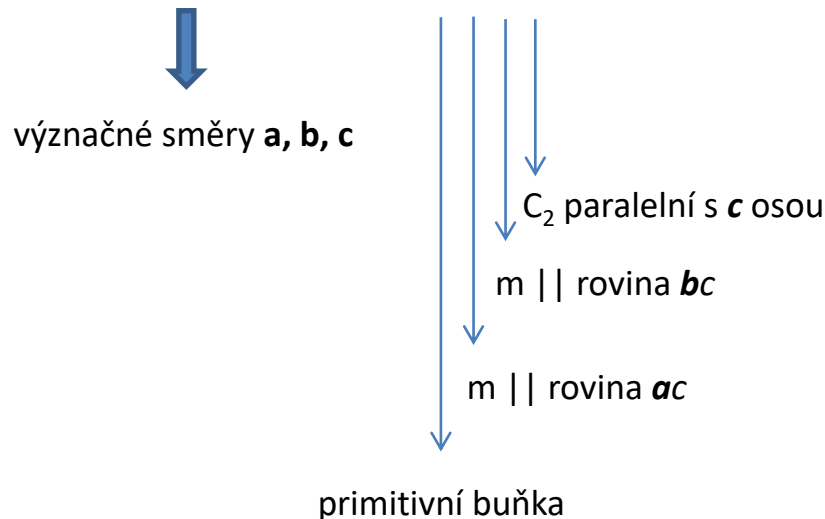


Znázornění prostorových grup

- všechny operace prostorové grupy získáme, vycházíme-li z bodu v obecné poloze (neleží na žádném prvku symetrie)
- aplikujeme všechny operace dle prvků symetrie $\Rightarrow$ základní buňka se promítne do nákresny (kolmá na osu c)
- využívají se následující grafické symboly

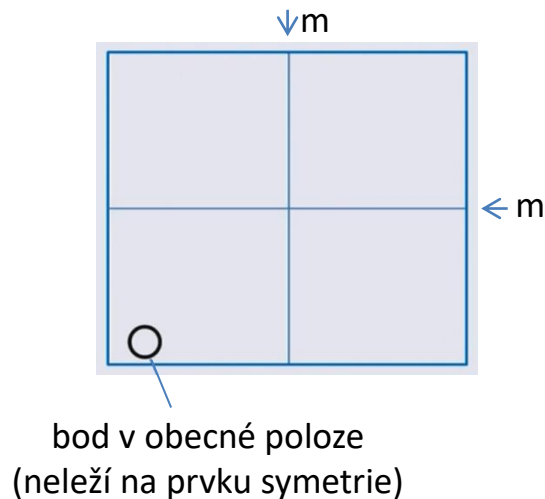


Příklad: ortorombická soustava $Pmm2$

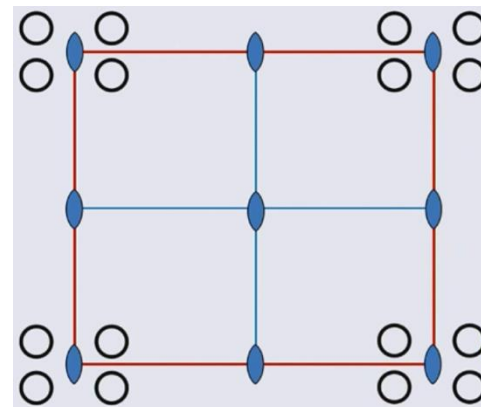


Znázornění prostorových grup - konstrukce

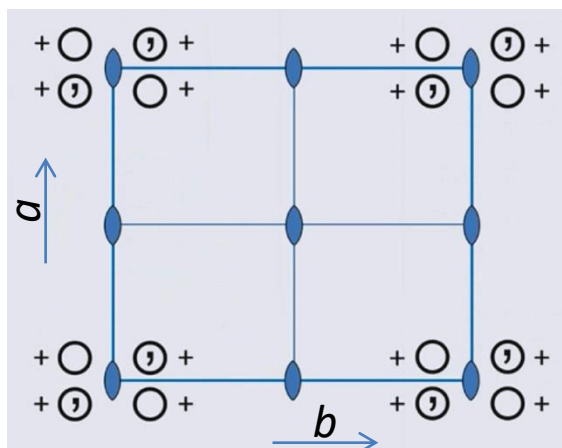
Příklad: ortorombická soustava $Pmm2$



Aplikace operace zrcadlení
nebo C_2 rotace



- v případě, že výchozí bod je nad rovinou projekce (+) $\Rightarrow$ všechny body (+) jsou nad rovinou projekce (operace zrcadlení ani C_2 osa nemění souřadnici na ose c)
- pro nesymetrický bod (např. pravá ruka) zrcadlení vytváří **enantiomorfni obraz bodu** (levá ruka)



Vnější tvar krystalů

- krystaly rostoucí volně v kapalném nebo plynném prostředí přijímají tvar mnohostěnů, tj. vnější tvar je omezen rovnými plochami
- tvar závisí na termodynamických podmínkách (tlak, teplota, složení prostředí, elektrické pole. apod.)

Rozlišujeme:

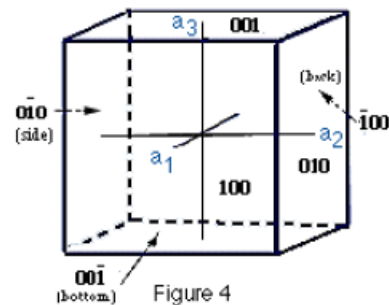
Idiomorfnní krystaly – mají vlastní tvar

- rovinné plochy idiomorfnního krystalu jsou rovnoběžné s mřížovými rovinami $\Rightarrow$ lze je charakterizovat Millerovými indexy (h k l)
- roviny s nízkými Millerovými indexy vytváří velké plochy (1 0 0), (0 0 1), (1 1 0) apod.
- roviny s vyššími indexy (např. (3 2 1)) vytváří menší plochy

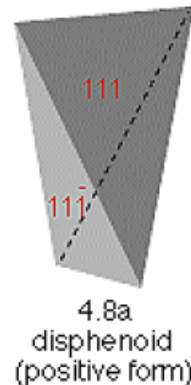
jednoduchý krystal – jedna speciální forma {}

Příklady:

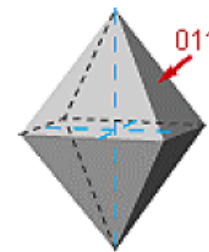
krychle {1 0 0}



čtyřstěn {1 1 1}



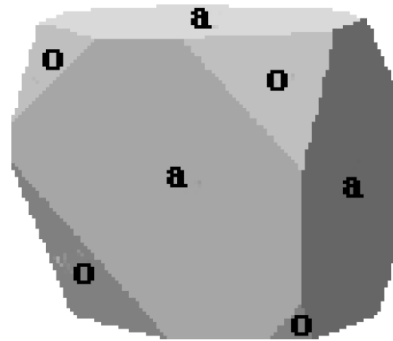
osmistěn {0 1 1}



Vnější tvar krystalů

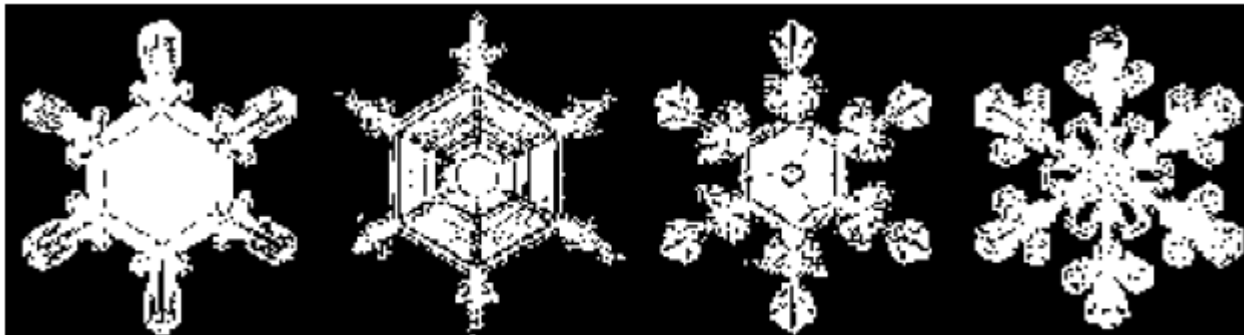
složený krystal – obecná forma {}

- představuje průnik více forem
- příklad: složení kubické a oktaedrické formy



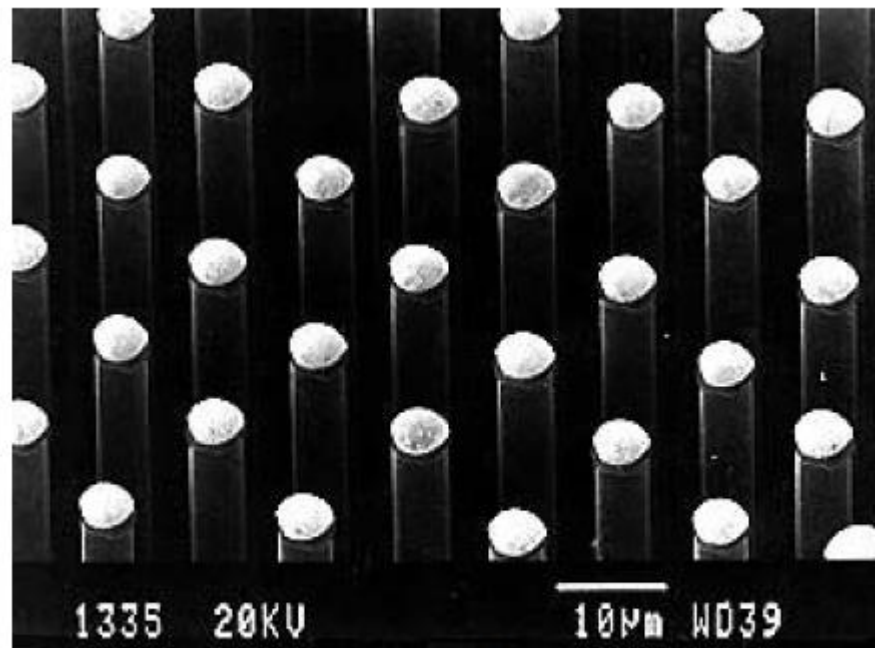
Krystaly:

- izometrické - narůstají rovnoměrně ve všech směrech
- dendritické – rostou ve dvou směrech
- whiskery – v jednom směru – krystaly tvoří „válečky“



příklady dendritického krystalu v podobě sněhových vloček

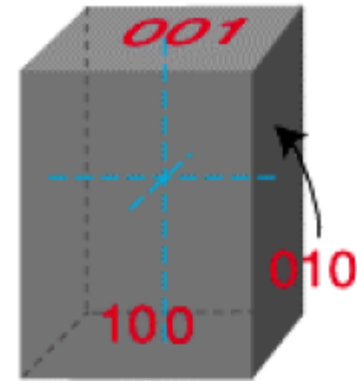
Vnější tvar krystalů



whiskery

Projekce krystalu

- *úhly mezi rovinami jsou nejdůležitější* $\Rightarrow$ velikost úhlů zachovává tzv. **projekce**

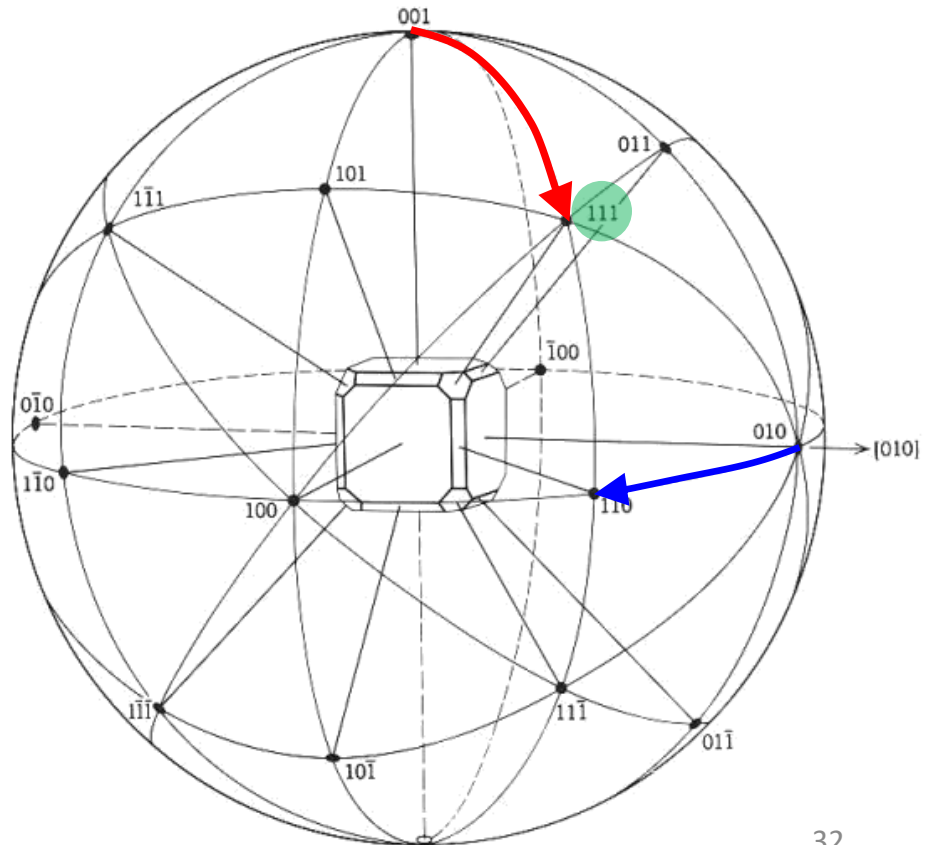


Projekce:

1. stereografická (gnómostereografická)
2. gnómickeá

Výchozí situace - sférická projekce

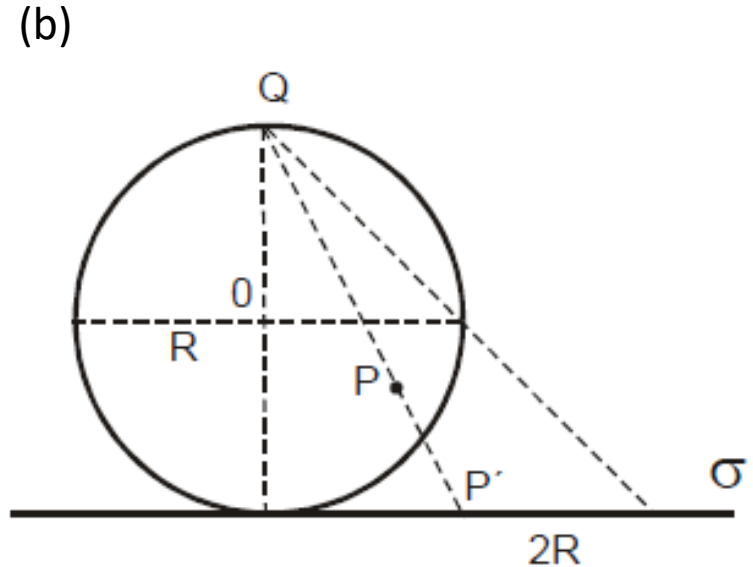
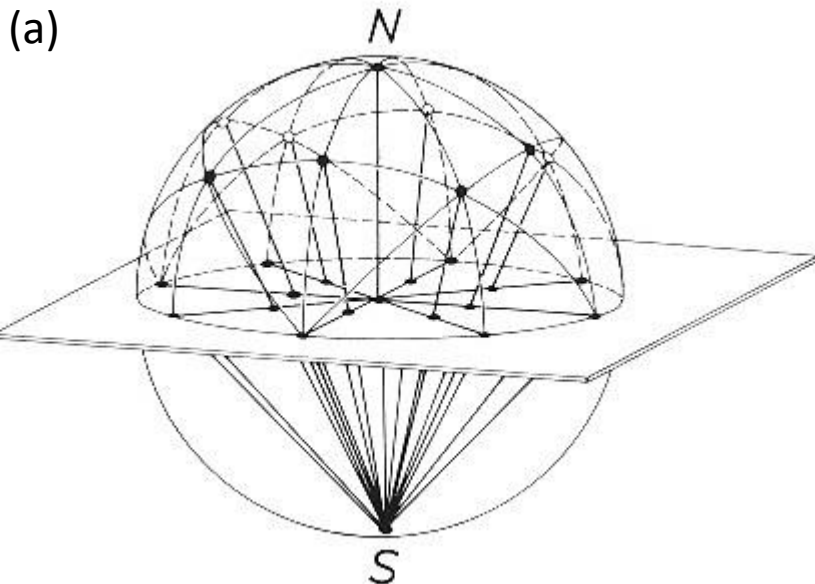
- projekce směrů v krystalu na kulovou referenční plochu
- **krystal** je umístěn do středu myšlené referenční **kulové plochy**
- projekce všech **normál** (kolmic) rovin $\{100\}$, $\{110\}$, $\{111\}$ na kulovou plochu
- průsečík normály a plochy = **pól**
- **úhel** mezi rovinami je dán **délkou oblouku**
- **pozice pólu 111** je daná **úhlovými souřadnicemi** od severního pólu 001 (**úhel ρ**)
a hlavního poledníku 010 (**úhel ϕ**)



Stereografická projekce

- redukuje ***sférickou projekci krystalu*** do ***referenční plochy*** při zachování všech vzájemných úhlů
- ***póly ze severní polokoule*** promítáme do ***projekční roviny rovníku*** přes ***spojnici s jižním pólem*** – tzv. ***zorný bod*** a (a naopak)
- průsečík spojnice a projekční plochy rovníku je ***průmět dané plochy do roviny***
- poledníkové směry jsou kolmé na projekční rovníkovou plochu a zobrazí se jako úsečky procházející středem projekční kružnice
- různá poloha referenční plochy, ale zorný bod je stále v pozici pólu:

(a) rovník projekční koule, (b) tečná rovina sférické projekce

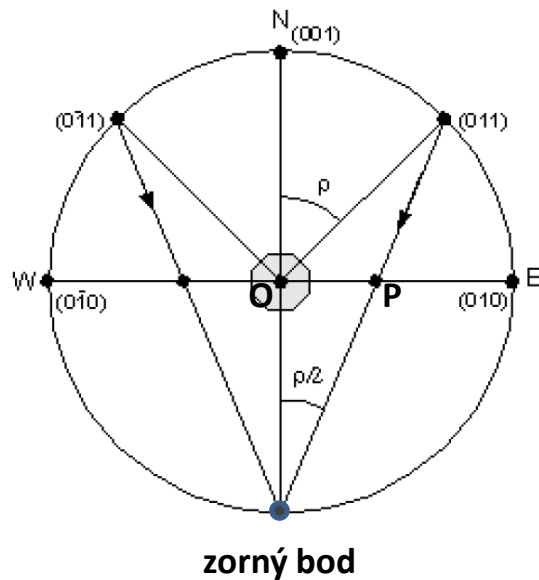


Obrazem pólu P je bod P' na rovině σ - průsečík polopřímky QP se σ .
Dolní polokoule – kruh o poloměru $2R$, horní polokoule – vně.³³

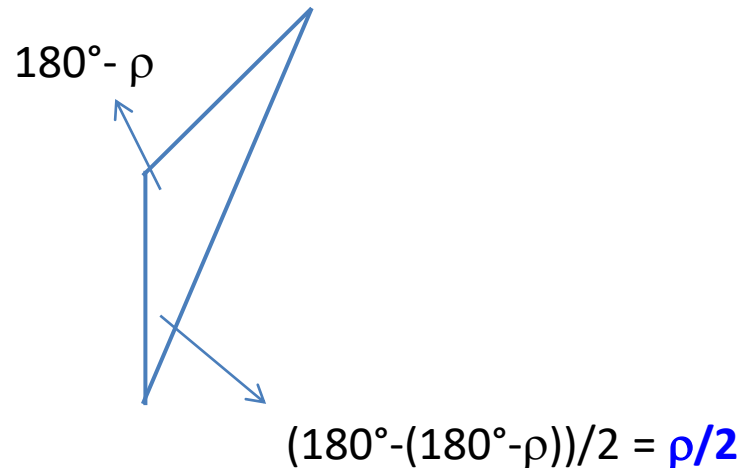
Stereografická projekce

Příklad:

- Uvažujme krystal uvnitř koule. Pól k rovině (0 0 1) má vertikální směr (osa c) (severní pól).
- Pro plochu (0 1 1) narýsujeme úsečku od jejího pólu k „jižnímu“ pólu (zorný bod).
- Úsečka protne rovinu rovníku – bod P.
- Velikost úsečky OP udává úhel $\rho/2$ (při známém poloměru kulové plochy) $\Rightarrow$ zjistíme tak vzájemný úhel ρ dvou rovin krystalu.

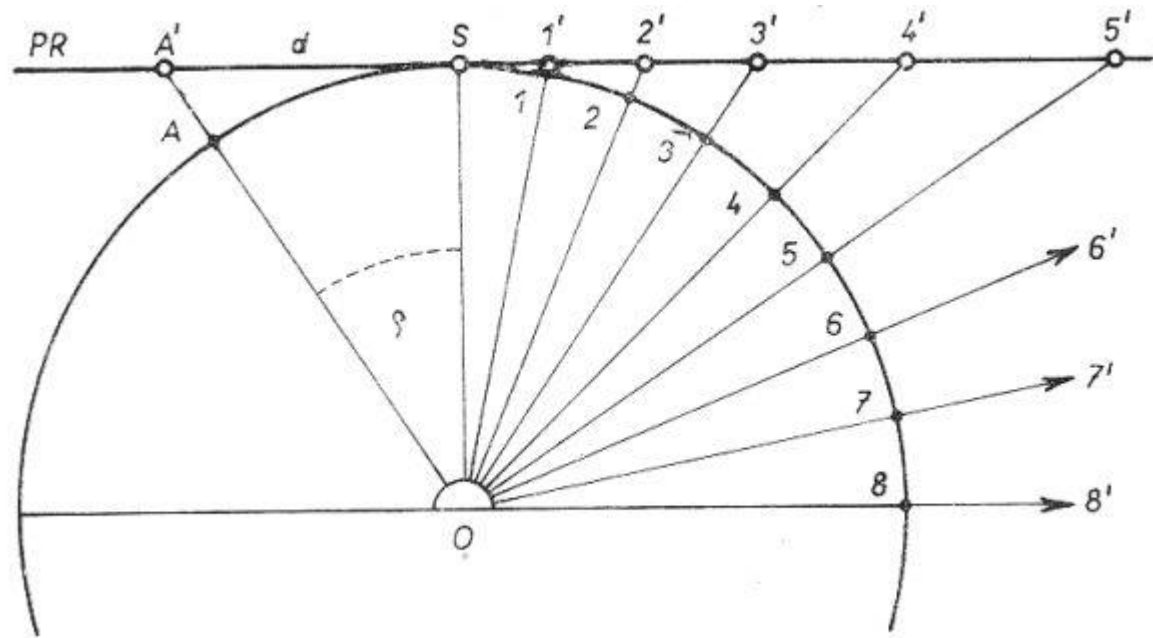


Rovnoramenný trojúhelník



Gnomická projekce

- také vychází ze sférické projekce
- projekční plocha je tečnou k pólu
- zorný bod je střed koule (krystalu)
- průmětná přímka vychází ze středu, prochází pólem a protíná projekční rovinu
- vzdálenost průmětu krystalové plochy od středu projekční roviny závisí na jejím sklonu $\Rightarrow$ plochy vertikálního pásma se promítnou v nekonečno



Reálné krystaly

- uspořádání atomů v krystalu je určováno charakterem jejich vazby a rozměry atomů

Vazby lze z geometrického hlediska rozdělit na:

a. směrové (kovalentní, H – můstky, permanentní dipóly);

- atomy se seskupují za dosažení *maxima vazebních sil a minima energie*

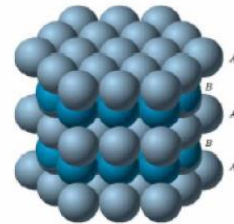
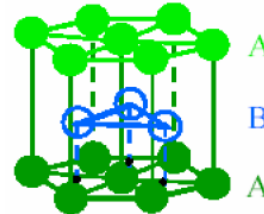
b. nesměrové (kovová, iontová, van der Waalsova aj.)

- *těsně uspořádané koule* (všechny vzácné prvky v tuhém stavu a zhruba 2/3 kovů)

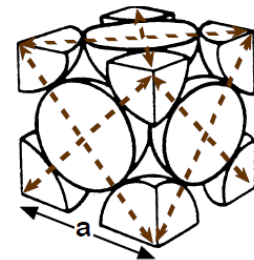
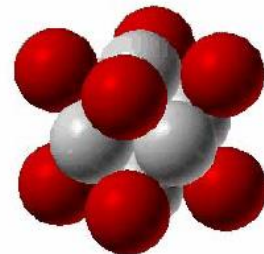
Pravidla nejtěsnějšího směstnání tuhých koulí:

- snaha maximalizovat „**Atomic packing factor (APF)**“

Hexagonální uspořádání: APF = 74%



Kubická plošně centrovaná buňka: APF = 74%

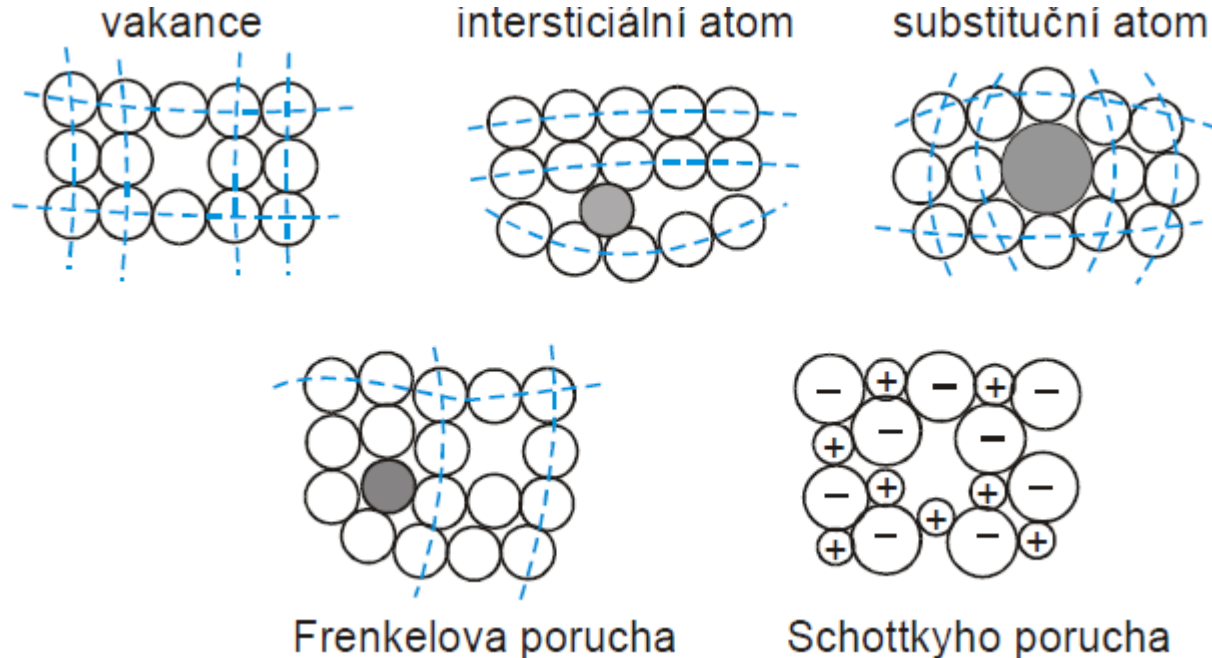


Poruchy krystalových struktur

Porucha – odchylka od ideální periodické krystalové struktury

1. **krátkodobé** – trvání $< \text{ms}$; (fonony, excitony . . .)
2. **statické** – bodové, čárové, plošné, objemové

Bodové poruchy:



- **vakance** – v mřížce chybí atom
- **intersticiální atom** – atom je uložen mimo vlastní polohu (může být i cizí atom)
- **substituční atom** – atom dané látky je nahrazen cizím atomem
- **Frenkelova porucha** – komplex vakance – intersticiál
- **Schottkyho porucha** – v iontovém krystalu jde o chybějící dvojici kationtu a sousedního aniontu (atom z vnitřní polohy na povrch)

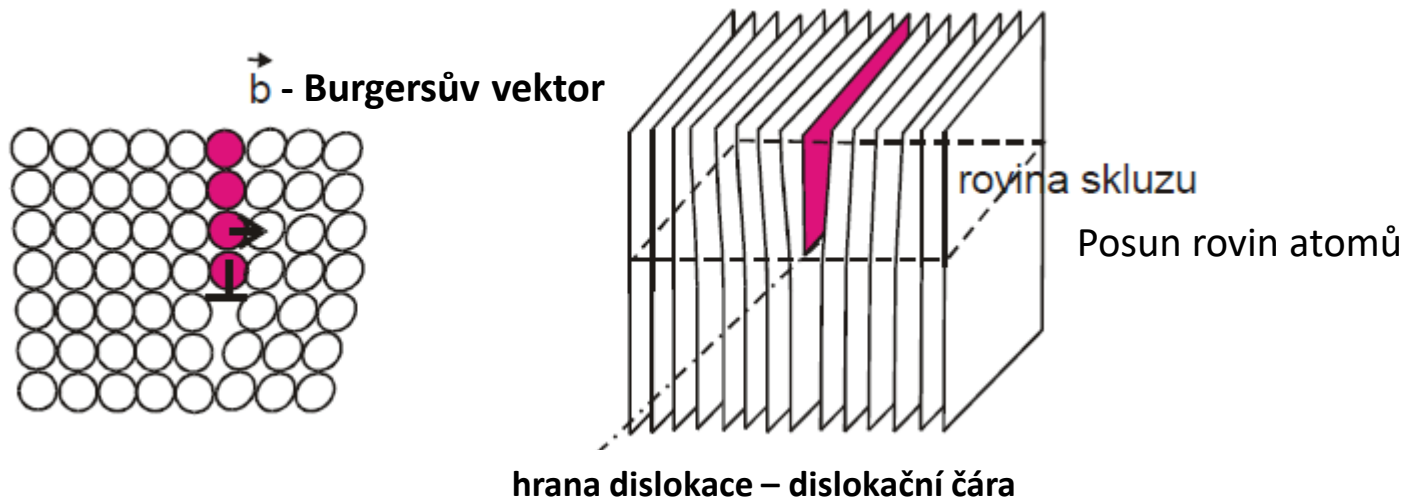
Poruchy krystalových struktur

Čárové poruchy – dislokace

- netýká jednoho bodu mřížky (resp. jedné částice), ale celé roviny částic
- vznikají přesunutím určitého množství atomů při skluzovém pohybu vzhledem k vrstvě sousední
- **dislokace** je hranice mezi **uskutečněným a neuskutečněným skluzem v krystalu**

hranová dislokace

- vklíněná polorovina (krystal se vůči deformaci chová nejdříve elasticky, od určité hodnoty napětí se deformuje nevratně – plasticky)
- vrstvy atomů se posunou o celou mřížkovou translaci – vznikne *lineární dislokace*
- dislokaci definuje tzv. **Burgersův vektor ($\mathbf{b}$)**, který vyjadřuje velikost a orientaci relativního posunutí dvou částí krystalu
- u hranové dislokace je **Burgersův vektor kolmý** k dislokační čáře

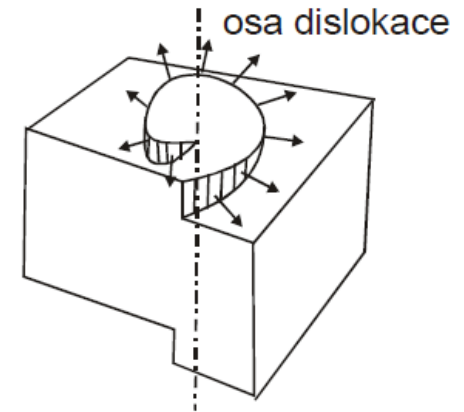
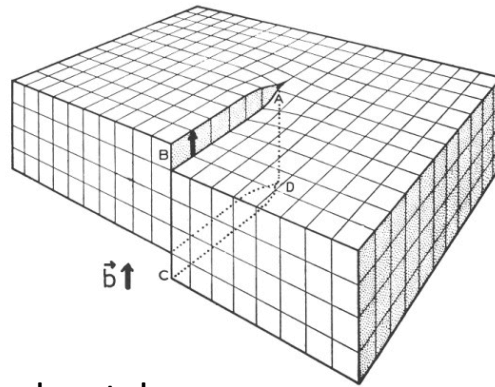


Poruchy krystalových struktur

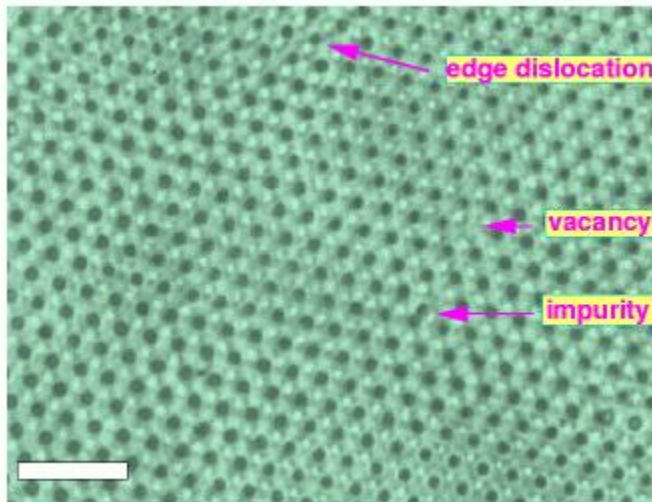
Čárové poruchy – dislokace

šroubová dislokace

- vzniká ze systematického rozmístění původně lineární dislokace během růstu krystalu
- název šroubová proto, že zárodek roste (během procesu krystalizace) ve všech směrech stejně rychle (šroubový chod)
- **Burgersův vektor je rovnoběžný s dislokační čarou**



Příklad: defekty v reálném krystalu



hranová dislokace

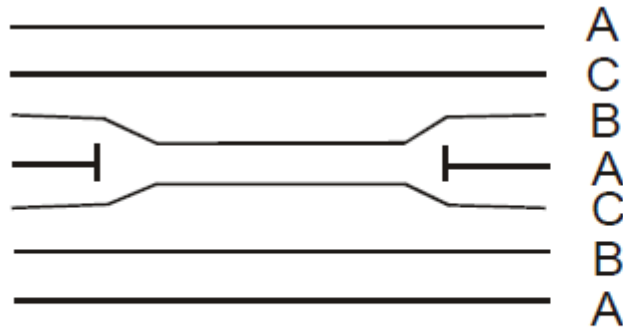
vakance
nečistota (substituční atom)

Poruchy krystalových struktur

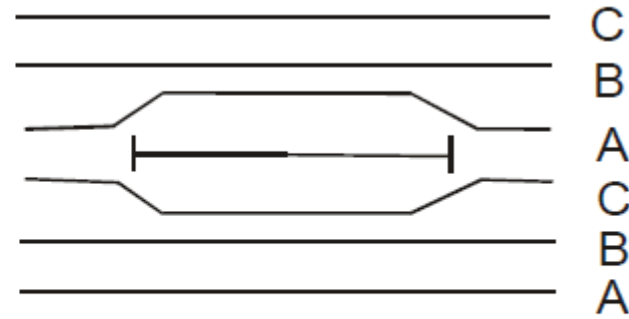
Plošné poruchy

vrstvená chyba

- jednoduchá vrstevnatá porucha – změna v pravidelnosti vrstvení (sledu) atomových rovin
- např. - není vypuštěna celá vrstva, jen určitá oblast vrstvy
- většinou vzniká rozštěpením dislokace na dvě **neúplné dislokace**



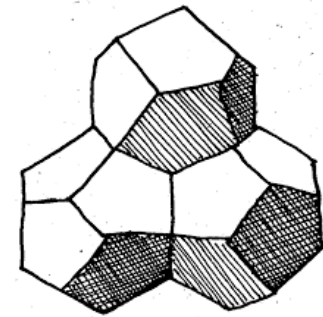
a) neúplná tzv. zakotvená dislokace
(kondenzace vakancí)



b) prizmatická zakotvená dislokace, intersticiální.

Hranice zrn

- zrnno – část lišící se od okolí orientací mřížky
- hranice mezi zrny jsou plošné poruchy krystalické mřížky
- typické pro kovy - tyto poruchy kov intenzivně zpevňují.



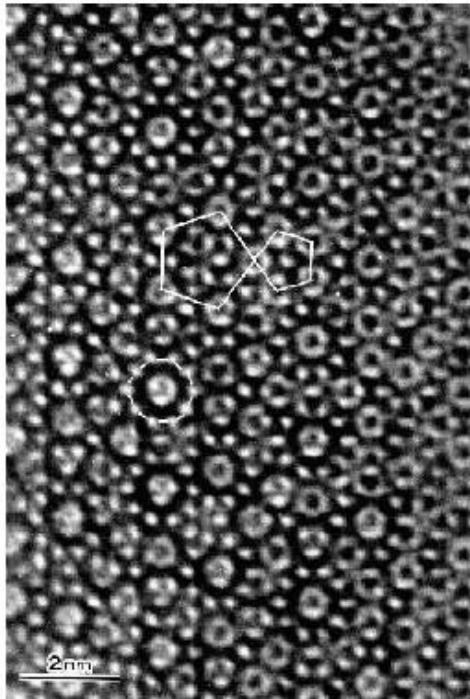
Objemové poruchy

- dutiny, trhliny, precipitáty

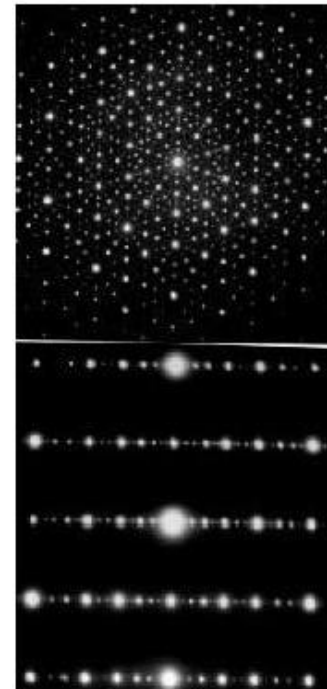
Kvazikrystaly

- v roce 1984 byl zveřejněn objev, že slitina Al(86%)–Mn(14%) vykazuje při difrakci elektronů zvláštní obrazec
- difrakční obrazec je složený z ostrých skvrn, ale má osu C_5 (pětičetnou osu symetrie)
- takové látky nemají translační symetrii
- tyto látky byly nazvány jako kvazikrystaly (quasicrystals)

Snímek struktury kvazikrystalu Al-Mn



difrakční obraz slitiny Al-Mn (5-fold symetrie)



- kvazikrystaly jsou příkladem nesouměřitelných struktur: na dlouhou vzdálenost je zachováno orientační uspořádání (rovnoběžnost vazeb), polohové uspořádání je nepravidelné