

ZÁKLADY KRYSTALOGRAFIE KOVŮ A SLITIN

⇒ pevné látky jsou charakterizovány omezeným pohybem základních stavebních částic (atomů, iontů, molekul) kolem rovnovážných poloh

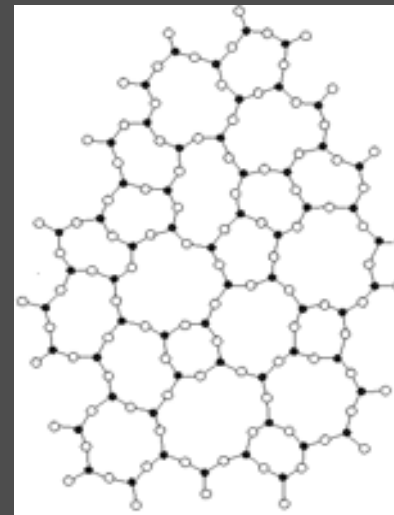
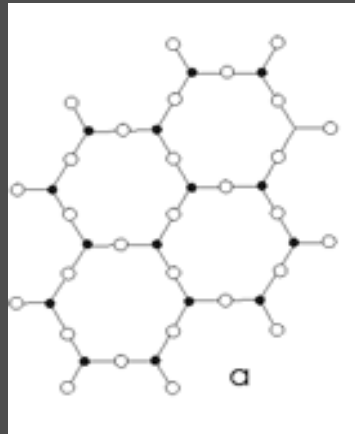
PEVNÉ LÁTKY



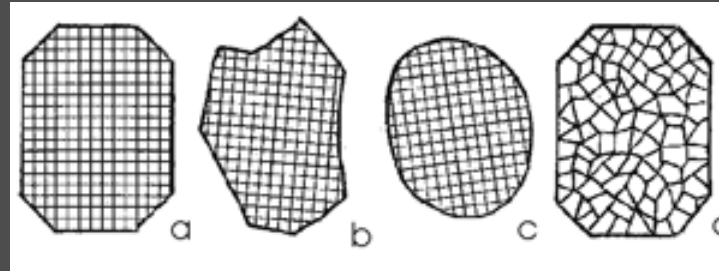
krystalické



amorfní



KRYSTAL \Rightarrow pevné těleso s trojrozměrně periodickým uspořádáním základních stavebních částic (atomů, iontů, molekul)



d – není krystal!!

STRUKTURA KRYSTALU \Rightarrow způsob rozmístění základních stavebních částic (atomů, iontů či molekul) v prostoru

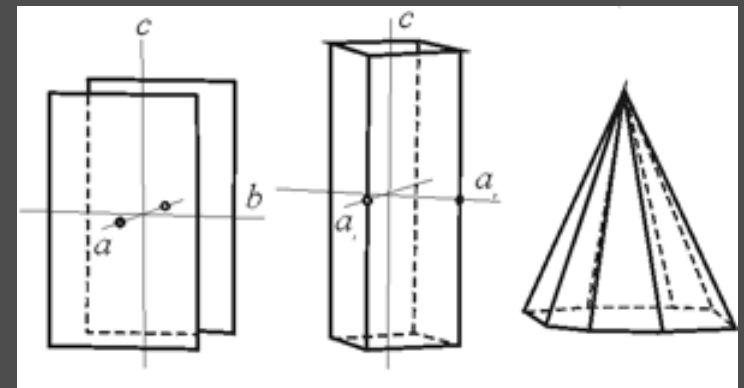
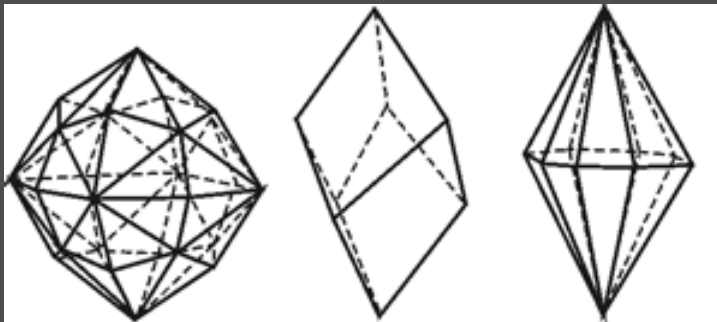
KRYSTALOVÁ MŘÍŽKA \Rightarrow geometrické vyjádření periodicity struktury krystalu; množina bodů, které mají stejné a stejně orientované okolí (homologické body)

IDEÁLNÍ KRYSTAL \Rightarrow nekonečný a jeho struktura je zcela pravidelná, bez poruch; v reálném světě neexistuje, představa ideálního krystalu je užitečná pro popis zákonitostí struktury krystalů a pro vysvětlení jejich fyzikálních vlastností

REÁLNÝ KRYSTAL \Rightarrow od ideálního se liší:

1. není nekonečný (což periodicitu vyžaduje)
2. jeho atomy kmitají (i při $T = 0$ K)
3. odchylky od ideálního periodického rozložení

➤ **Kovy mohou krystalizovat v 7 krystalových soustavách (podle společné osy souměrnosti nebo kombinace os souměrnosti)**

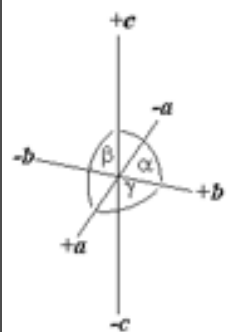


Příklady krystalových tvarů

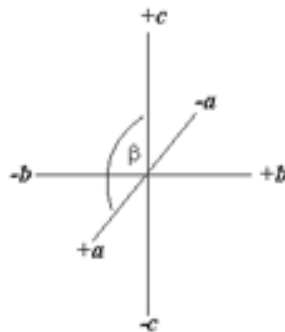
KRYSTALOVÉ SOUSTAVY

Krystalová rodina	Symbol	Krystalová soustava	Konvenční soustava souřadnic		Bravaisovy mříže
			omezení parametrů mříže	určované parametry	
triklinická (trojklonná)	a	triklinická	žádné	a, b, c a, b, g	<u>aP</u>
monoklinická (jednoklonná)	m	monoklinická	význačná osa b $\alpha = \gamma = 90^\circ$	a, b, c b	<u>mP</u> <u>mC</u> (mA, mI)
			význačná osa c $\alpha = \beta = 90^\circ$	a, b, c g	mP mA (mB, mI)
ortorombická	o	ortorombická	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a, b, c	<u>oP</u> <u>oC</u> (oA, oB) oI <u>oF</u>
tetragonální	t	tetragonální	$a = b$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a, c	<u>tP</u> tI
hexagonální (šesterečná)	h	trigonální	$a = b$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$ (hexagonální osy)	a, c	<u>hP</u>
			$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$ (romboedrické osy)	a, a	<u>hR</u>
		hexagonální	$a = b$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	a, c	<u>hP</u>
kubická	c	kubická	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a	<u>cP</u> <u>cI</u> <u>cF</u>

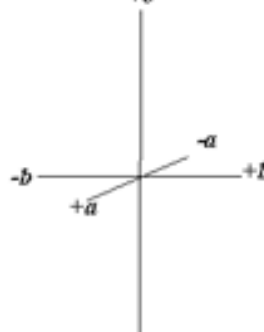
Soustava
triklinická



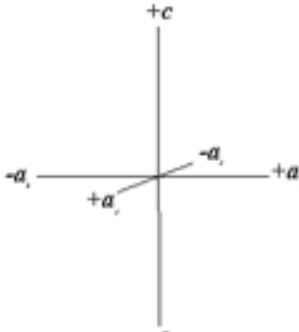
Soustava
monoklinická



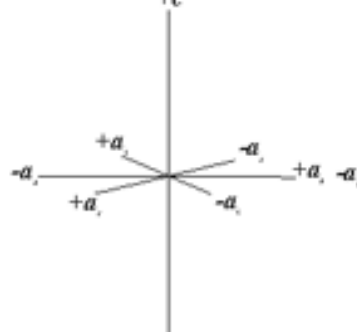
Soustava
rombická



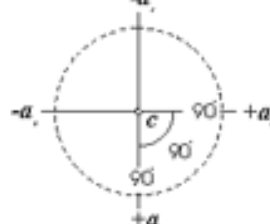
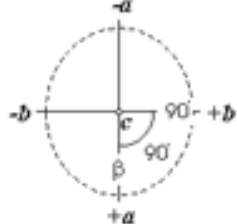
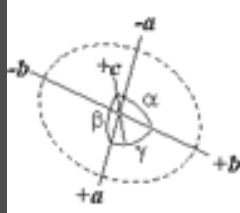
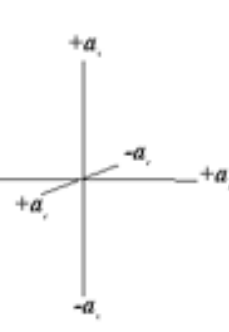
Soustava
tetragonální



Soustava
hexagonální
a trigonální



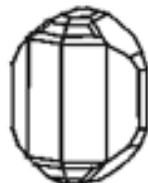
Soustava
kubická



chalkantit



realgar



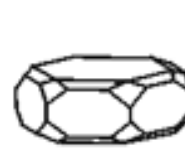
topaz



zirkon



dolomit



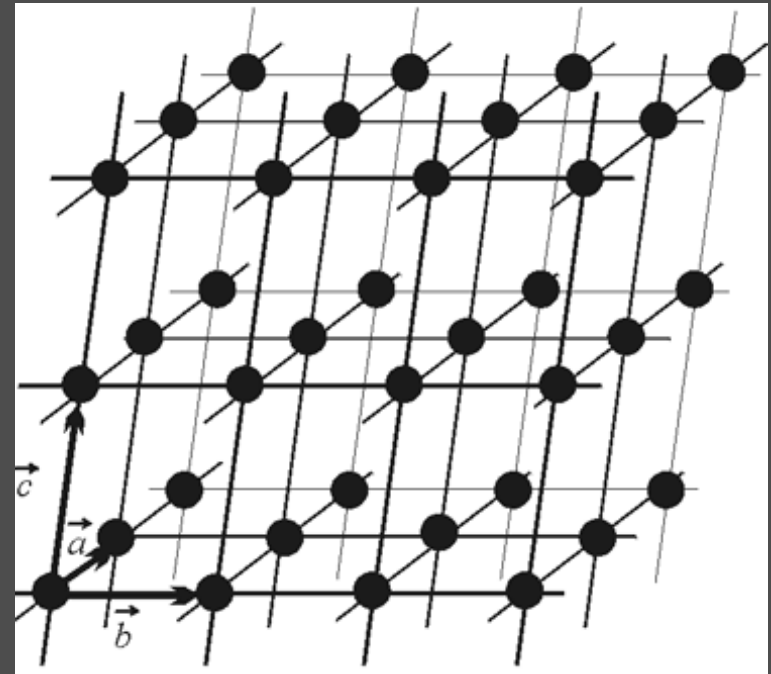
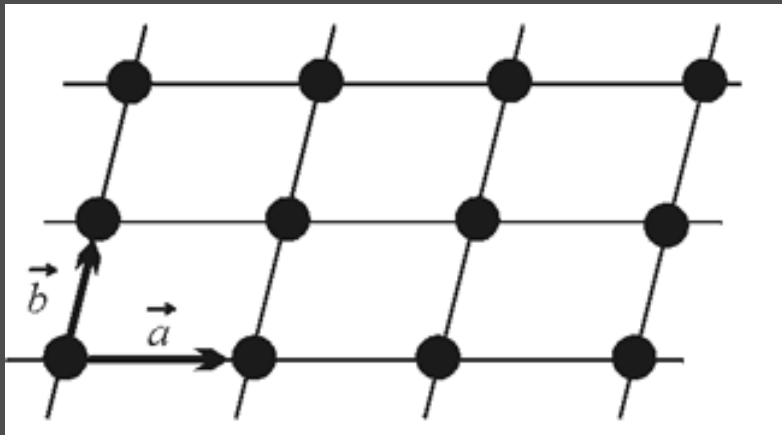
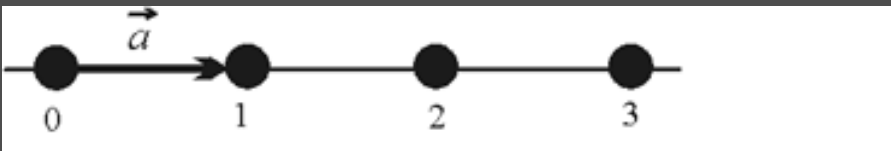
apatit



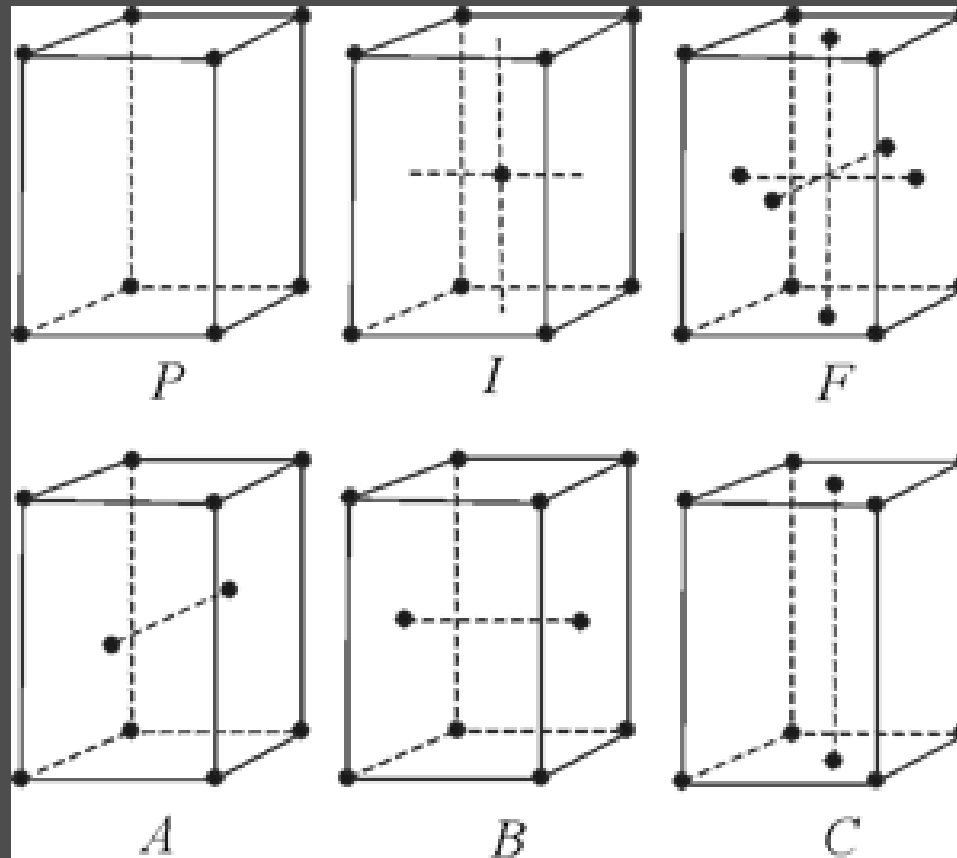
galenit

KRYSTALOVÁ MŘÍŽKA

- ⇒ výsledek opakovaných **translací** (posouvání) zvoleného počátku (výchozího bodu) podle tří nekomplanárních **mřížkových vektorů**
- ⇒ výchozí bod a všechny jeho obrazy vytvořené translacemi nazýváme **mřížkové (uzlové) body**



BUŇKA \Rightarrow je každý uzavřený rovnoběžnostěn, v jehož vrcholech (rozích) se nacházejí mřížkové body. Podle toho, kolik mřížkových bodů připadá na objem jedné buňky, se rozlišují se tyto mřížky



P – primitivní buňka; *I* – prostorově centrovaná buňka; *F* – plošně centrovaná buňka;
A, *B*, *C* – bazálně centrované buňky

ZÁKLADNÍ BUŇKA (ZB) \Rightarrow má co nejlépe vystihovat symetrii krystalu (holoedrie krystalové soustavy). Kritéria:

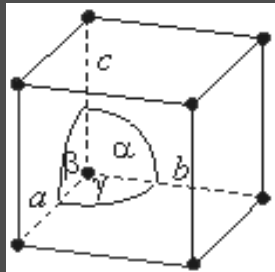
1. ZB musí mít co možná nejvyšší počet pravých úhlů nebo stejných úhlů
2. ZB musí mít co nejvyšší počet stejných hran
3. Při splnění požadavků 1.a 2. má mít ZB co nejmenší objem.

\Rightarrow S pomocí těchto pravidel lze odvodit **14 typů** základních buněk (mřížek)

\Rightarrow Nesmírné množství krystalových struktur je tedy možno popsat pomocí pouhých čtrnácti typů mřížek

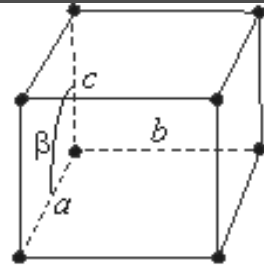
\Rightarrow Poprvé takto postupoval francouzský krystalograf A. Bravais (1811 – 1863), proto 14 typů mřížek nazýváme **Bravaisovy mřížky**

14 TYPŮ BRAVAISOVÝCH BUNĚK (MŘÍŽEK)



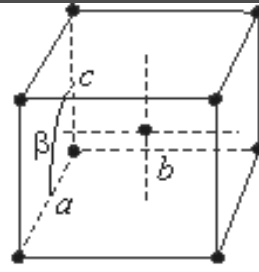
P

Trigonická soustava

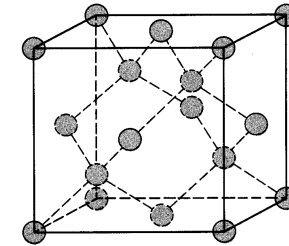


P

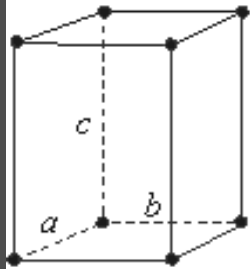
Monoklinická soustava



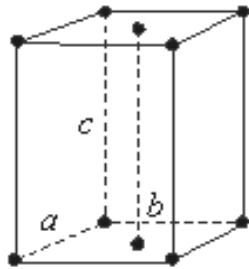
I



Kubická diamantová mřížka

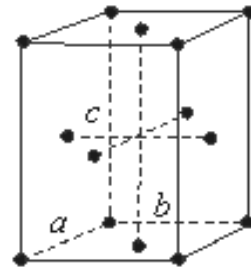


P

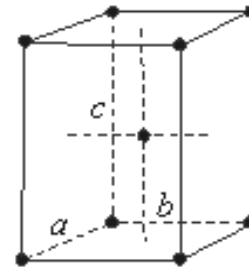


C

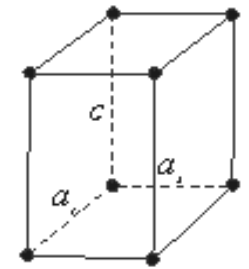
Rombická soustava



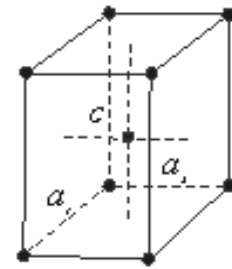
F



I

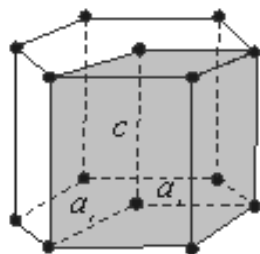


P



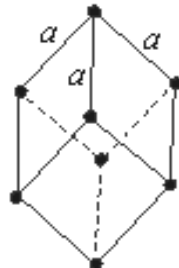
I

Tetragonální soustava



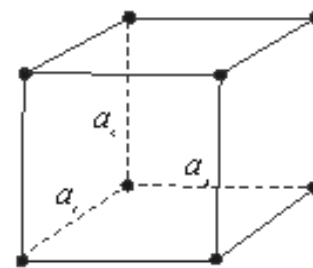
P

Hexagonální soustava

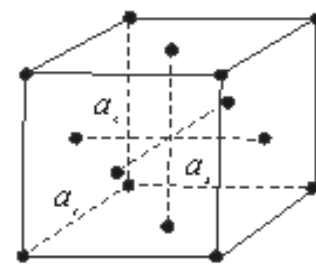


R

Trigonální soustava



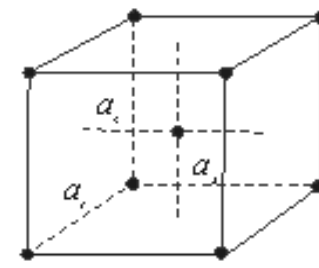
P



F

KPC

Kubická soustava



I

KSC

P – primitivní buňka; I – prostorově centrovaná buňka; F – plošně centrovaná buňka;

A , B , C – bazálně centrované buňky

HUSTOTA USPOŘÁDÁNÍ – FAKTOR ZAPLNĚNÍ

$$f = V_n / V * 100$$

V_n objem n atomů nebo iontů obsažených v buňce

V objem základní buňky

ZAPLNĚNÍ BUŇKY

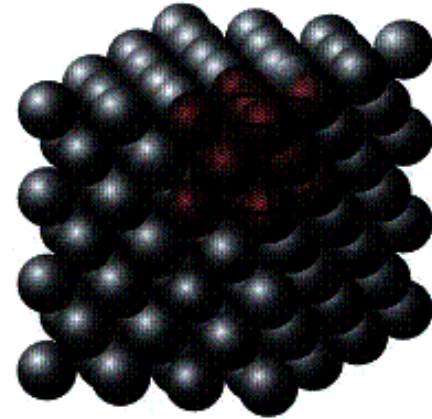
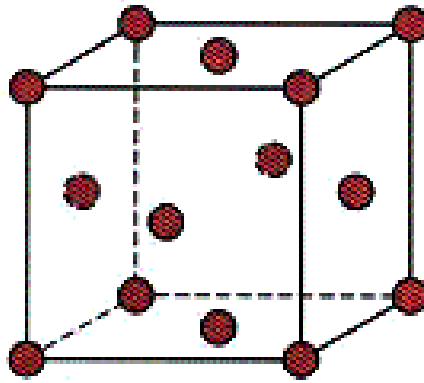
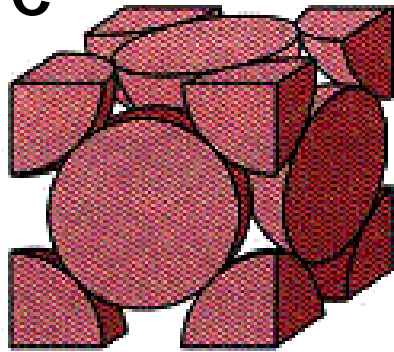
KSC: 2 atomy $8 * 1/8 + 1 = 2$

KPC: 4 atomy $8 * 1/8 + 6 * 1/2 = 4$

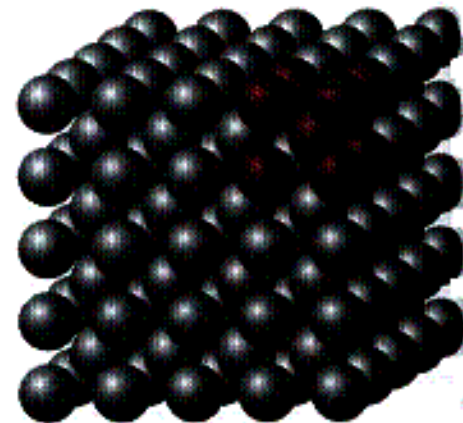
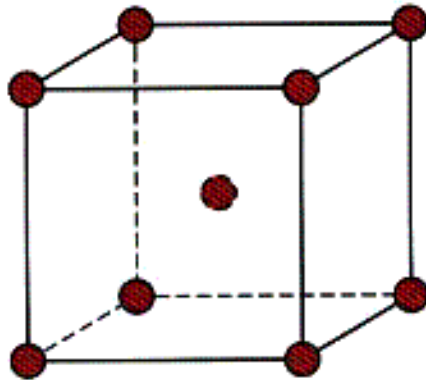
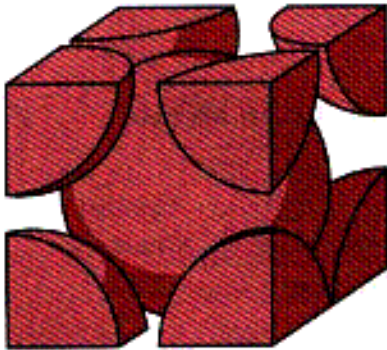
K_{prim} : 1 atom $8 * 1/8 = 1$

K_{diamant} : 8 atomů $8 * 1/8 + 6 * 1/2 + 4 = 8$

KPC



KSC



NEJKRATŠÍ VZDÁLENOSTI V ZÁKLADÍ BUŇCE

KPC MŘÍŽKA



$$2R = \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

KSC MŘÍŽKA



$$2R = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$

K_{prim} MŘÍŽKA



$$2R = a$$

K_{diam} MŘÍŽKA



$$2R = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

PŘÍKLAD: Vypočítejte faktor zaplnění v jednotlivých typech kubické mřížky:

KPC:

$$V_n = n \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot R^3 = 4 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{a\sqrt{2}}{4} \right)^3 = \frac{\pi \cdot a^3 \cdot \sqrt{2}}{6}$$

$$f = \frac{V_n}{V} \cdot 100 = \frac{\pi \cdot a^3 \cdot \sqrt{2}}{6 \cdot a^3} = \frac{\pi \cdot \sqrt{2}}{6} \cdot 100 = 74 \%$$

KSC:

$$V_n = n \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot R^3 = 2 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{a\sqrt{3}}{4} \right)^3 = \frac{\pi \cdot a^3 \cdot \sqrt{3}}{8}$$

$$f = \frac{V_n}{V} \cdot 100 = \frac{\pi \cdot a^3 \cdot \sqrt{3}}{8 \cdot a^3} = \frac{\pi \cdot \sqrt{3}}{8} \cdot 100 = 68 \%$$

PŘÍKLAD: Vypočítejte faktor zaplnění v jednotlivých typech kubické mřížky:

K_{prim}:

$$V_n = n \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot R^3 = 1 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{4}{3} \cdot \frac{\pi \cdot a^3}{8} = \frac{\pi \cdot a^3}{6}$$

$$f = \frac{V_n}{V} \cdot 100 = \frac{\pi \cdot a^3}{6 \cdot a^3} = \frac{\pi}{6} \cdot 100 = 52 \%$$

K_{diamant}:

$$V_n = n \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot R^3 = 8 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{a\sqrt{3}}{8}\right)^3 = 8 \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{\pi \cdot a^3 \cdot 3 \cdot \sqrt{3}}{8^3} = \frac{a^3 \cdot \sqrt{3}}{16}$$

$$f = \frac{V_n}{V} \cdot 100 = \frac{\pi \cdot a^3 \cdot \sqrt{3}}{16 \cdot a^3} = \frac{\pi \cdot \sqrt{3}}{16} \cdot 100 = 34 \%$$

PŘÍKLADY

1. Určete počet atomů elementární buňky Fe, které krystalizuje v kubické soustavě

$$a_{\text{Fe}\alpha} = 0.28985 \text{ nm (KSC)}$$

$$a_{\text{Fe}\gamma} = 0.36394 \text{ nm (KPC)}$$

$$M_{\text{Fe}} = 55.845 \text{ g/mol}$$

$$\rho_{\text{Fe}} = 7.8 \text{ g/cm}^3$$

$$n = \rho / M_A * N_A$$

N_A ... Avogadrova konstanta $6.022 \cdot 10^{23}$ at/mol

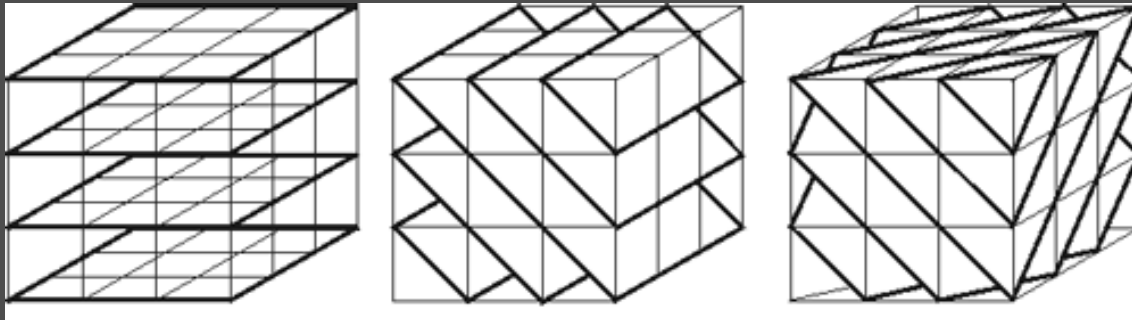
2. Cu krystalizuje v KPC mřížce. Vypočítejte:

- Počet atomů v jednotce objemu n
- Počet atomů v elementární buňce.... n_1
- Objem elementární buňky..... V
- Mřížkovou konstantu..... a
- Vzdálenost nejbližších sousedních atomů $d = 2 R$
- Atomový poloměr..... r
- Součinitel zaplnění.... f

$$M_{\text{Cu}} = 63.54 \text{ g.cm}^{-3}; \rho = 8.885 \text{ g.cm}^{-3}$$

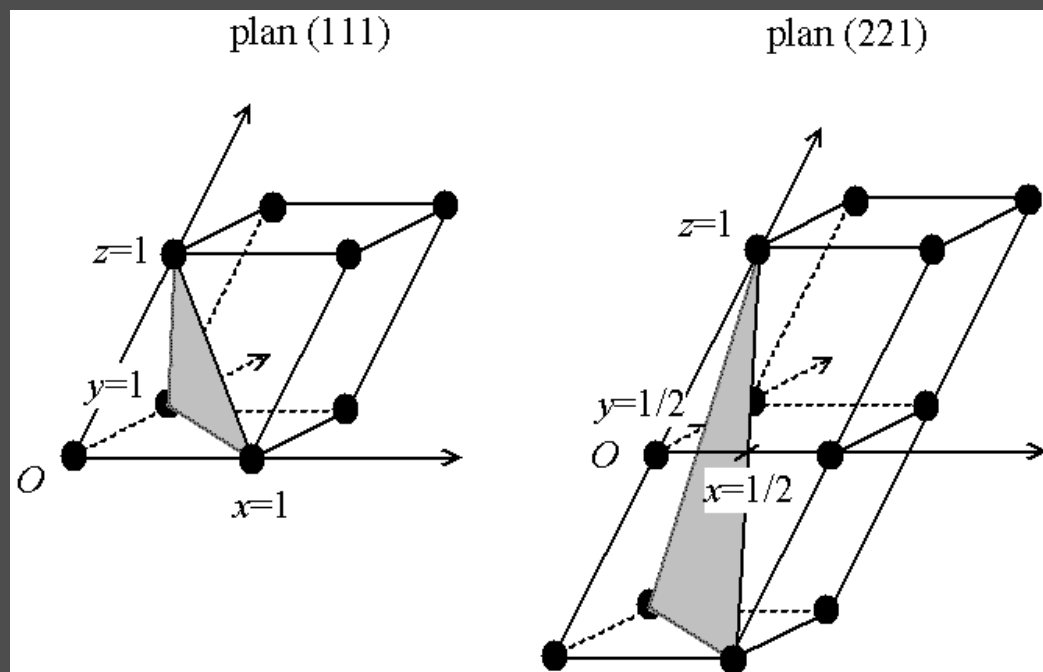
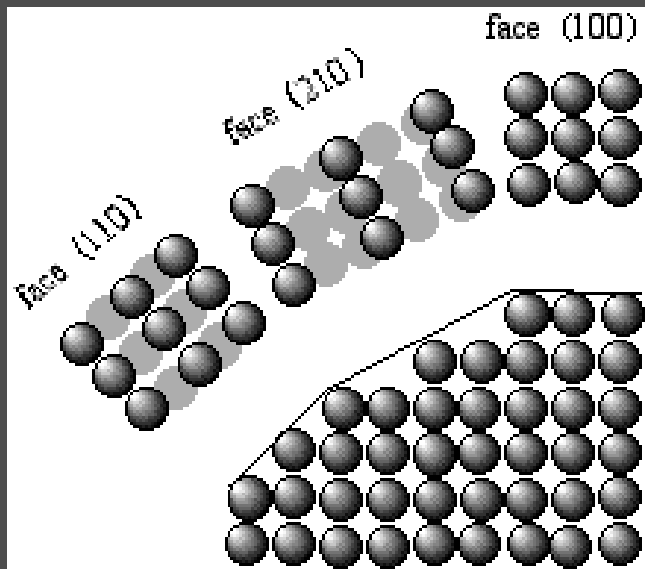
MŘÍŽKOVÉ ROVINY

- ⇒ každá rovina, v níž leží alespoň tři uzlové body krystalové mřížky, se nazývá **mřížková rovina** (nesmí ležet na téže přímce)
- ⇒ každý soubor vzájemně rovnoběžných mřížkových rovin se nazývá **osnova mřížkových rovin**
- ⇒ kolmá vzdálenost mezi dvěma nejbližšími strukturními rovinami téže osnovy se nazývá **mezirovinná vzdálenost** a označuje symbolem d_{hkl} (např. d_{001} , d_{321})



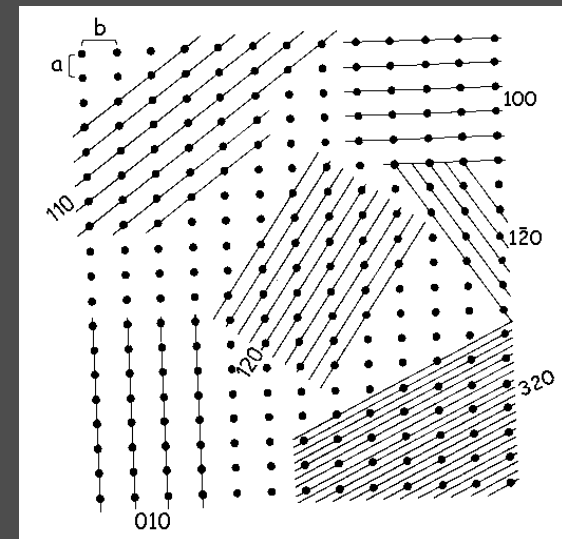
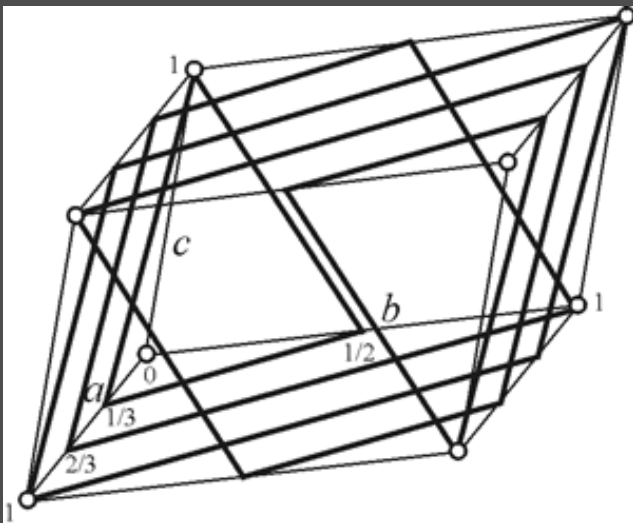
Příklady osnov mřížkových rovin

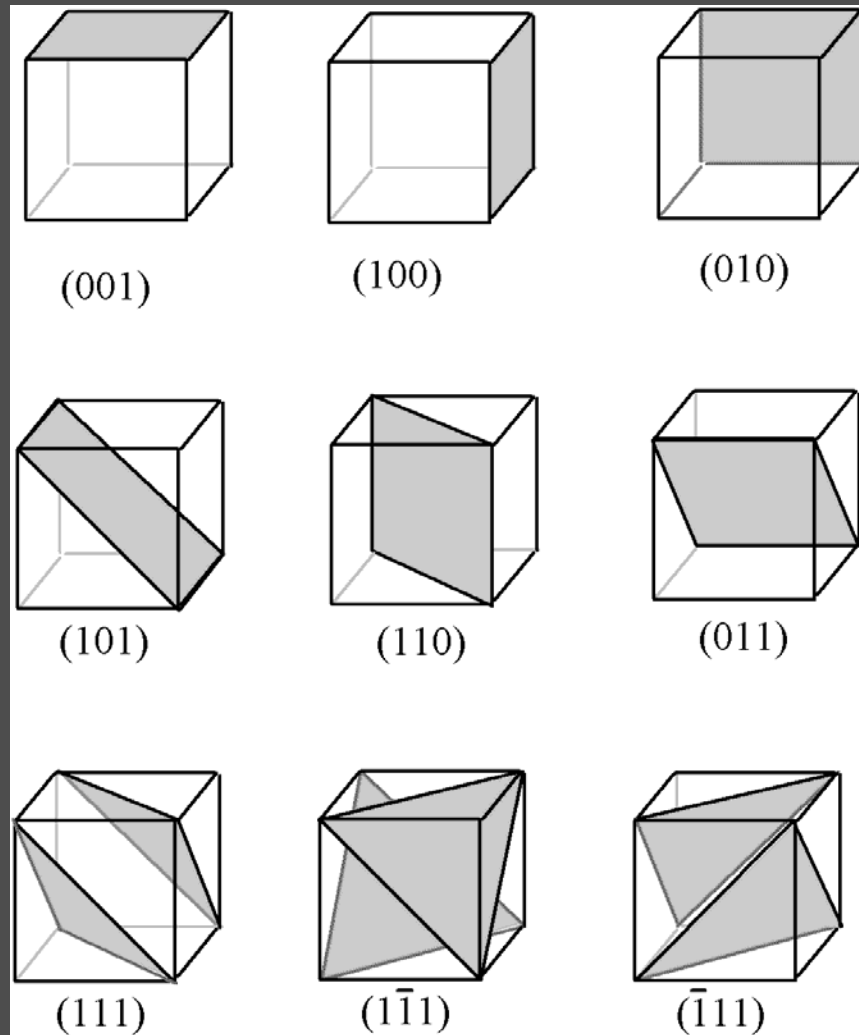
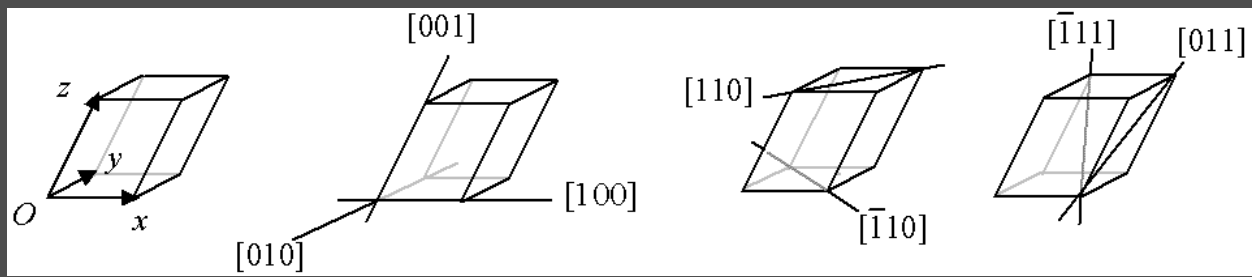
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$



ZNAČENÍ MŘÍŽOVÝCH ROVIN A SMĚRŮ

- ⇒ k popisu orientace mřížové roviny (a tudíž i orientaci celé osnovy mřížových rovin) vůči krystalografickým osám se používají **Millerovy symboly hkl**
- ⇒ **Millerovy indexy h, k, l** jsou celá nesoudělná čísla, udávající, na kolik dílů dělí daná osnova rovin krystalografické osy a, b, c
- ⇒ MI můžeme také určit z úseků které vytíná na osách a, b, c rovina osnovy ležící nejbliže počátku (neprocházející však počátkem) ⇒ MI jsou pak rovny převráceným hodnotám úseků vyřezaných touto rovinou na krystalografických osách.





POSTUP PŘI STANOVENÍ MI:

1. Nalezneme délky úseků na 3 osách v násobcích či zlomcích jednotlivých vzdáleností
2. Určíme převrácené hodnoty těchto čísel
3. Redukujeme na tři nesoudělná čísla o stejném vzájemném poměru
4. Dáme je do závorek (hkl)

Krystalografické směry se popisují symbolem $[uvw]$, kde u, v, w jsou nesoudělná celá čísla odpovídající složkám vektoru mířícího z počátku do mřížového bodu:

$$\mathbf{t} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

⇒ Při zaznačování záporných MI do elementární buňky se posune počátek souřadnicového systému tak, aby daná rovina nebo směr byla znázorněna v elementární buňce

