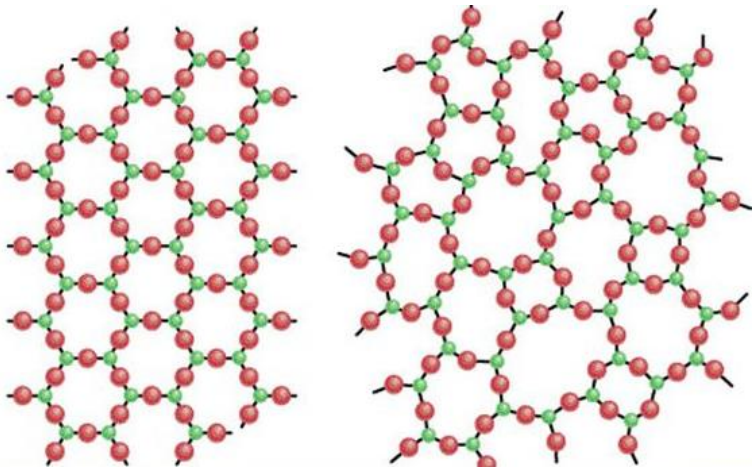


Rozdělení pevných látek

- **Krystalické** - rozložení částic se periodicky opakuje - dalekodosahové uspořádání

Krystal je jakákoli pevná látka, jejíž difrakční diagram je bodový

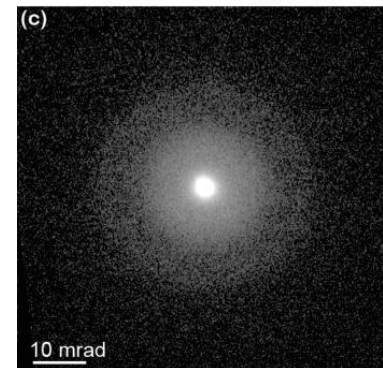
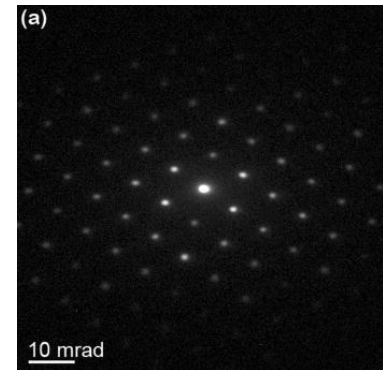
- **Amorfní (beztvaré)** - nemají pravidelnou krystalovou strukturu - krátkodosahové uspořádání částic (10^{-8} m)



SiO₂ (křemen)

křemenné sklo

(a) [110] diffraction pattern obtained in silicon



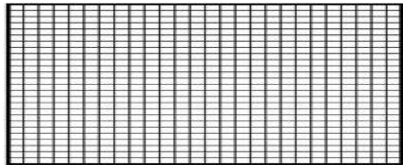
(c) amorphous diffraction pattern

Vigorous et al. *Appl.Phys.Lett.* 2014

Rozdělení pevných látek

Krystalické látky

MONOKRYSTALY: periodicitu je zachována v celém objemu (až na krystalové poruchy)
anizotropie -vlastnosti látky jsou závislé na směru vzhledem k stavbě krystalu
(např. štípání slídy pouze v určitých rovinách)

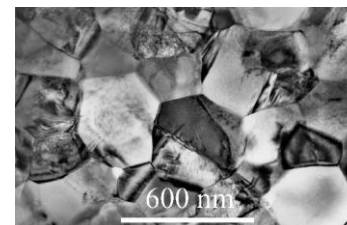
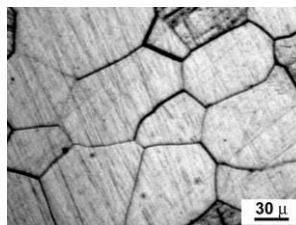
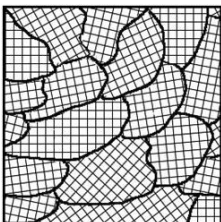


Např.: NaCl, SiO₂, ...



POLYKRYSTALY: jsou složeny z drobných krystalků (zrn),
uvnitř zrn částice uspořádány pravidelně, poloha a orientace zrn je však nahodilá
velikost zrn: desítky mikrometrů až několik milimetrů
polykrystaly jsou **izotropní** (ve všech směrech mají stejné fyzikální a mechanické vlastnosti)

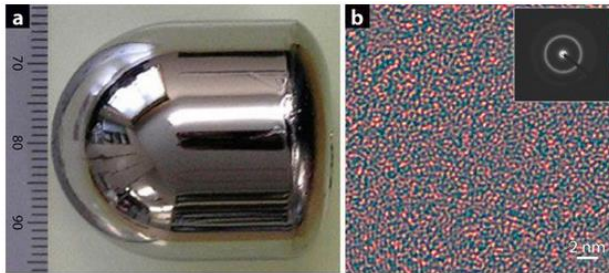
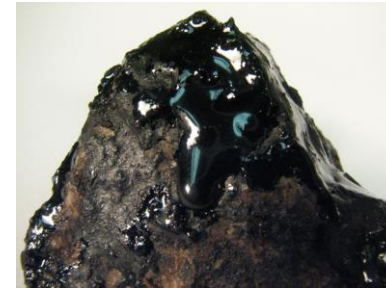
Např. kovy



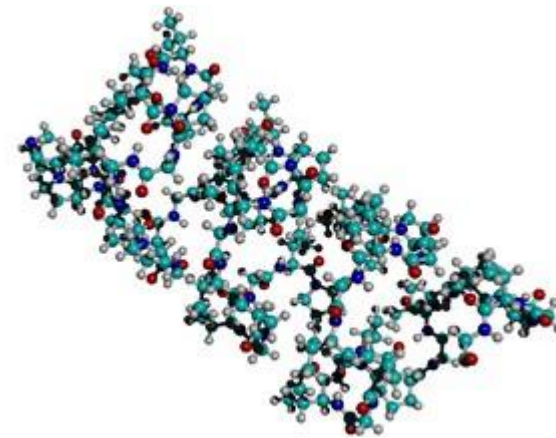
Rozdělení pevných látek

Amorfní látky

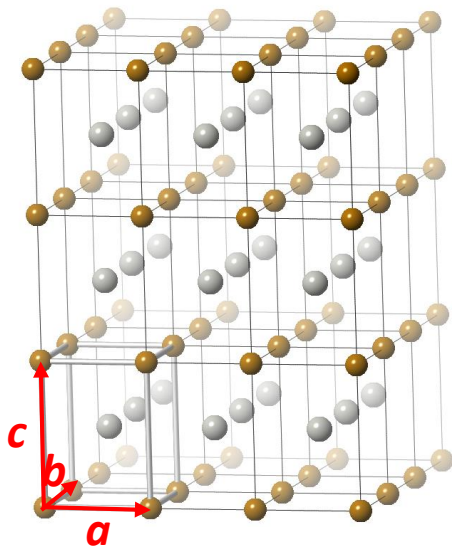
- jsou to látky izotropní
- nemají přesně definovanou teplotu tání (oblast měknutí)
- sklo, pryskyřice, vosk, asfalt, gely, polymery
- kovová skla **bulk metallic glasses (BMG)**:
obvykle slitiny, vytváří se prudkým ochlazením ($\sim 10^6 \text{K/s} - 1 \text{K/s}$), vysoká pevnost (bez poruch v krystalické struktuře), odolnost proti korozi



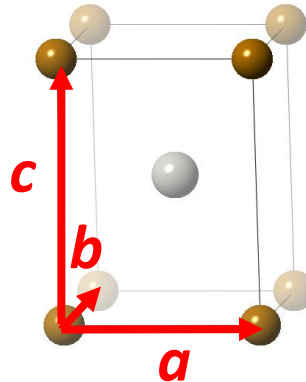
(courtesy of W. Zhang, Tohoku University, Japan)



Krystalová mřížka ideálního krystalu

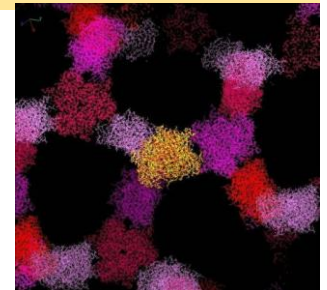


krystalová struktura = mřížka + báze



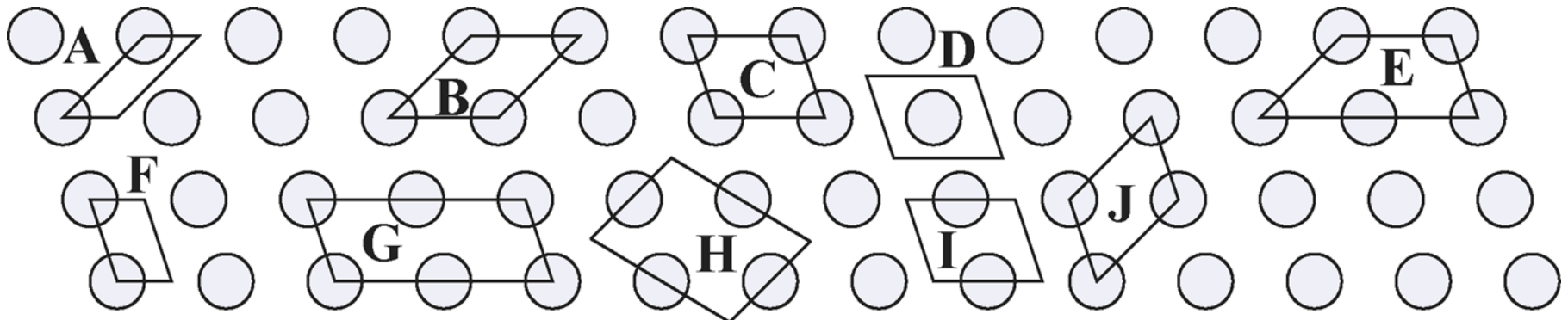
Strukturální jednotka (báze)

1 atom	Fe, Ni, Cu, Ag, ...
2 atomy	NaCl, ZnS, AuCu, diamant, ...
..	
8 atomů	Fe ₃ C (bainit), FeSi, ...
..	
10 ² atomů	anorganické krystaly
10 ⁴ atomů	krystaly bílkovin



Elementární buňka: rovnoběžnostěn vymezený základními translacemi mřížkových bodů

- **primitivní** – 1 mřížkový bod
- **násobná** (centrovaná) – více bodů



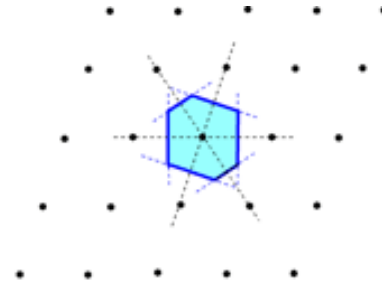
Krystalová mřížka ideálního krystalu

Operace mřížkové translace $\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$

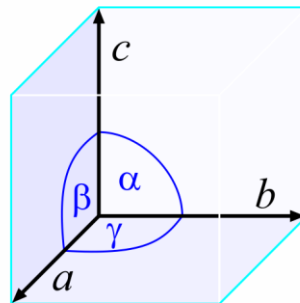
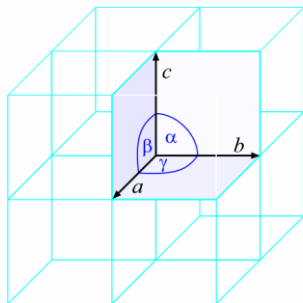
Primitivní buňka – elementární buňka s nejmenším objemem
rovnoběžnostěn definovaný $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

$$V = \vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}$$

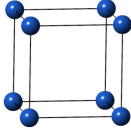
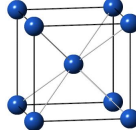
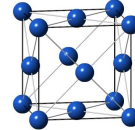
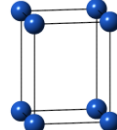
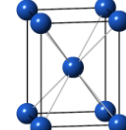
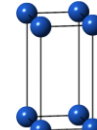
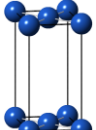
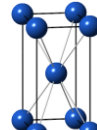
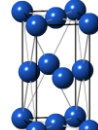
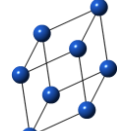
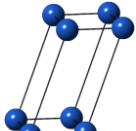
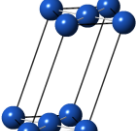
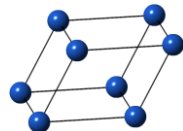
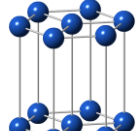
Např.: Wignerova Seitzova buňka



primitivní translační vektory



Krystalová mřížka ideálního krystalu

Bravaisovy mřížky	Mřížka prostá simple	Mřížka bazálně středěná base centered	Mřížka prostorově středěná body centered	Mřížka plošně středěná face centered
kubická $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ cubic				
tetragonální $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ tetragonal				
ortorombická $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ orthorhombic				
trigonální $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ trigonal (rhombohedral)				
monoklinická $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ monoclinic				
triklinická $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ triclinic				
hexagonální $a_1 = a_2 = a_3 \neq c$ $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 120^\circ; \gamma = 90^\circ$ hexagonal				



Auguste Bravais
1811-1863

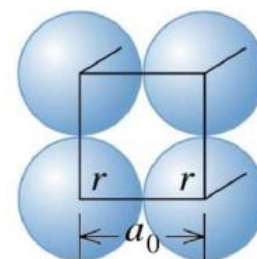
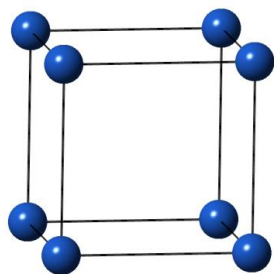
Prvky symetrie:

- osa rotace
- rovina zrcadlení
- střed symetrie
- osa rotace + inverze

Krystalová mřížka ideálního krystalu

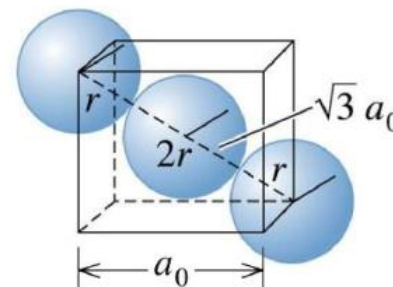
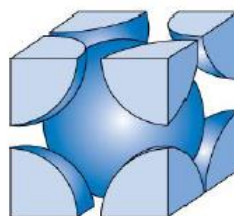
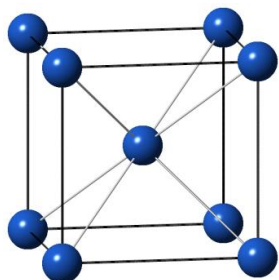
Příklady kubických mřížek (BUM)

Kubická prostá
sc – simple cubic



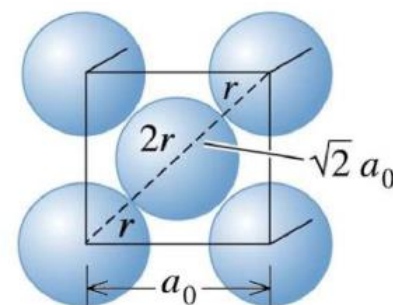
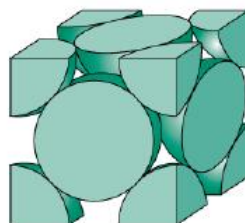
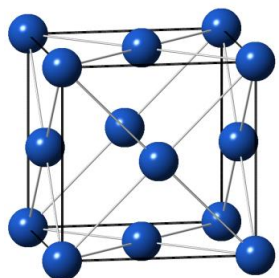
**Polonium,
Mn- α**

prostorově centrovaná
bcc – body centered cubic



**Fe- α , V,
W, Cr, Mo,
Nb, Ta**

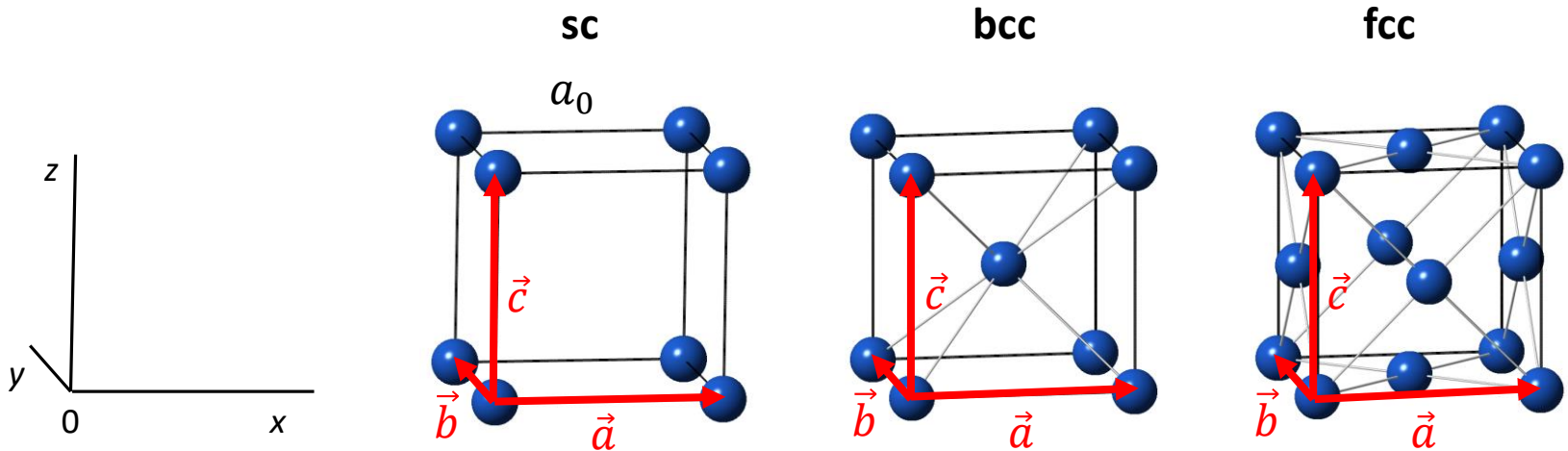
plošně centrovaná
fcc – face centered cubic
(**ccp** – cubic close packed)



**Fe- γ , Cu,
Ni, Pb, Au,
Ag, Pt,**

Krystalová mřížka ideálního krystalu

Modelování kubických krystalů (krychle o hraně a_0 - mřížkový parametr)



Translační vektory

$$\begin{aligned}\vec{a} &= (a_0; 0; 0) \\ \vec{b} &= (0; a_0; 0) \\ \vec{c} &= (0; 0; a_0)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{a} &= (a_0; 0; 0) \\ \vec{b} &= (0; a_0; 0) \\ \vec{c} &= (0; 0; a_0)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{a} &= (a_0; 0; 0) \\ \vec{b} &= (0; a_0; 0) \\ \vec{c} &= (0; 0; a_0)\end{aligned}$$

Báze

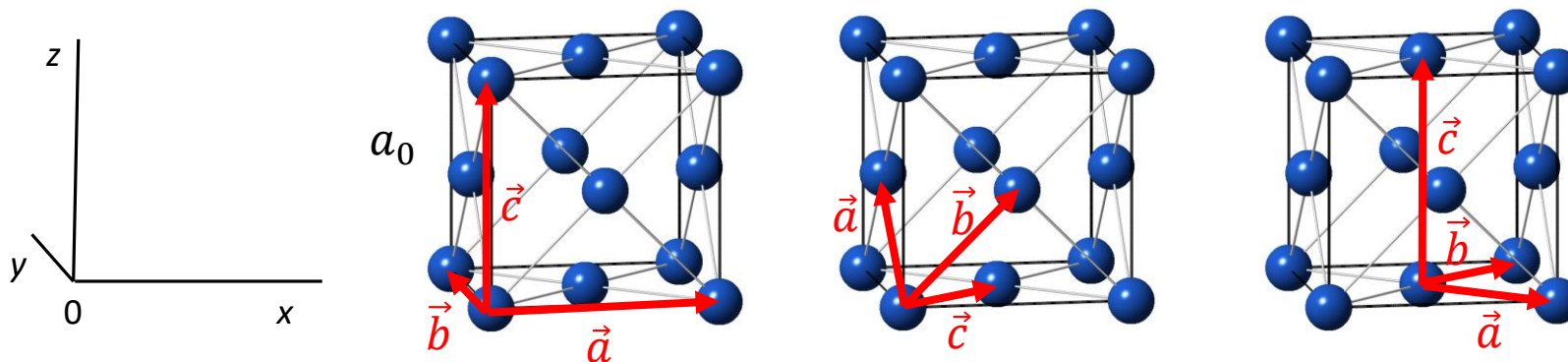
$$0; 0; 0$$

$$0; 0; 0 \\ \frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2}$$

$$0; 0; 0 \\ 0; \frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2} \\ \frac{a_0}{2}; 0; \frac{a_0}{2} \\ \frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2}; 0$$

Krystalová mřížka ideálního krystalu

Modelování fcc krystalu (aneb – jde to i jinak)



Translační vektory

$$\begin{aligned}\vec{a} &= (a_0; 0; 0) \\ \vec{b} &= (0; a_0; 0) \\ \vec{c} &= (0; 0; a_0)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{a} &= \left(0; \frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2}\right) \\ \vec{b} &= \left(\frac{a_0}{2}; 0; \frac{a_0}{2}\right) \\ \vec{c} &= \left(\frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2}; 0\right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{a} &= \left(\frac{a_0}{2}; -\frac{a_0}{2}; 0\right) \\ \vec{b} &= \left(\frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2}; 0\right) \\ \vec{c} &= (0; 0; a_0)\end{aligned}$$

Báze

$$\begin{aligned}0; 0; 0 \\ 0; \frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2} \\ \frac{a_0}{2}; 0; \frac{a_0}{2} \\ \frac{a_0}{2}; \frac{a_0}{2}; 0\end{aligned}$$

$$0; 0; 0$$

$$\begin{aligned}0; 0; 0 \\ \frac{a_0}{2}; 0; \frac{a_0}{2}\end{aligned}$$

Objem $V = \vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}$

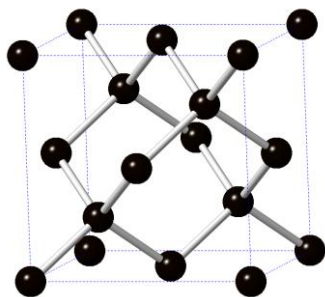
$$V = a_0^3$$

$$V = a_0^3/4$$

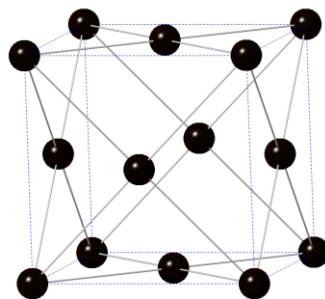
$$V = a_0^3/2$$

Krystalová mřížka ideálního krystalu

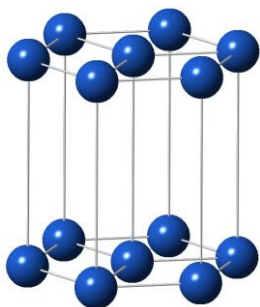
Pár dalších příkladů mřížek



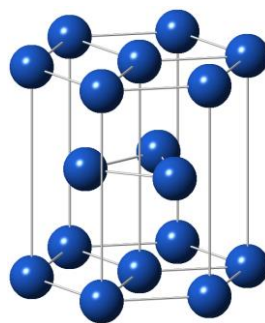
Kubická mřížka diamantu



fcc mřížka



Hexagonální

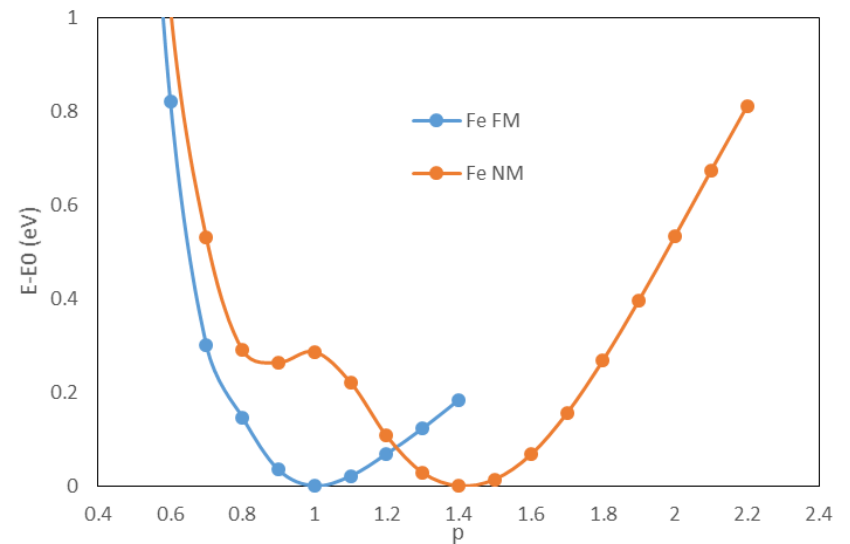
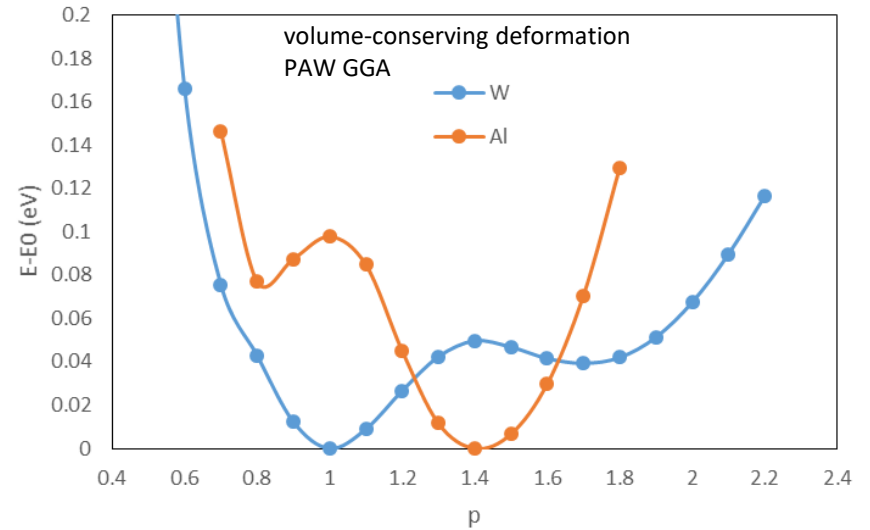
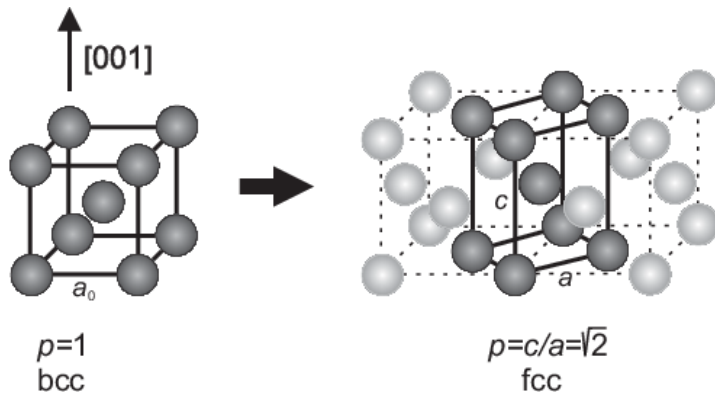


Hexagonální těsně uspořádaná
(hcp – hexagonal close packed)

Krystalová mřížka ideálního krystalu

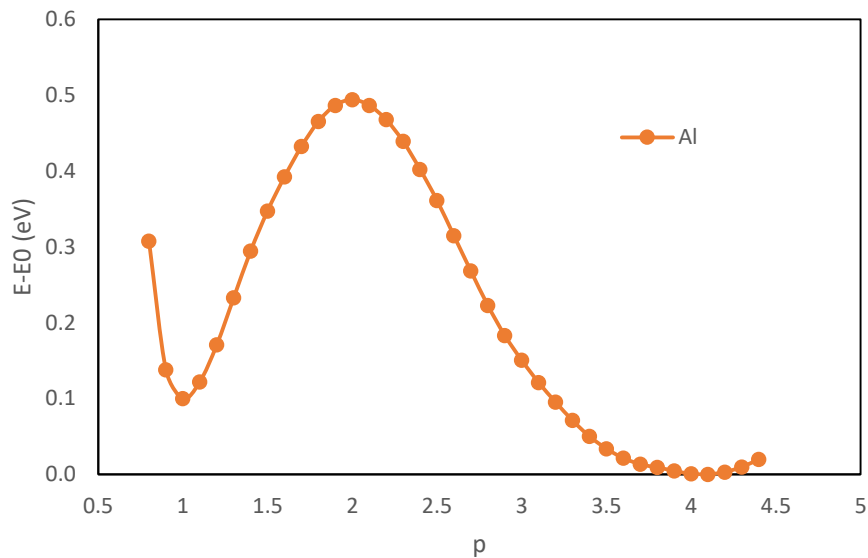
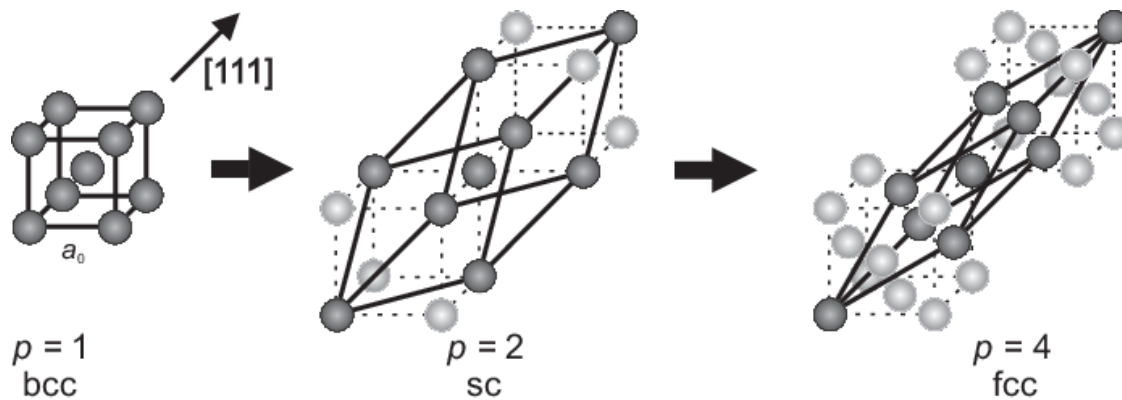
Bainova (tetragonální) transformace **bcc** - **fcc**

Edgar C. Bain: *The Nature of Martensite*, *Trans. AIME*, 1924, vol. 70, pp. 25–35;



Krystalová mřížka ideálního krystalu

Trigonální transformace bcc – sc - fcc



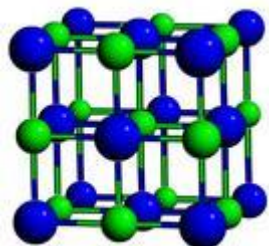
Krystalová mřížka ideálního krystalu

Crystal structure of elements in the periodic table																	
1 H HEX																	2 He HCP
3 Li BCC	4 Be HCP											5 B RHO	6 C HEX	7 N HEX	8 O SC	9 F SC	10 Ne FCC
11 Na BCC	12 Mg HCP											13 Al FCC	14 Si DC	15 P ORTH	16 S ORTH	17 Cl ORTH	18 Ar FCC
19 K BCC	20 Ca FCC	21 Sc HCP	22 Ti HCP	23 V BCC	24 Cr BCC	25 Mn BCC	26 Fe BCC	27 Co HCP	28 Ni FCC	29 Cu FCC	30 Zn HCP	31 Ga ORTH	32 Ge DC	33 As RHO	34 Se HEX	35 Br ORTH	36 Kr FCC
37 Rb BCC	38 Sr FCC	39 Y HCP	40 Zr HCP	41 Nb BCC	42 Mo BCC	43 Tc HCP	44 Ru HCP	45 Rh FCC	46 Pd FCC	47 Ag FCC	48 Cd HCP	49 In TETR	50 Sn TETR	51 Sb RHO	52 Te HEX	53 I ORTH	54 Xe FCC
55 Cs BCC	56 Ba BCC	57* La DHCP	72 Hf HCP	73 Ta BCC/TETR	74 W BCC	75 Re HCP	76 Os HCP	77 Ir FCC	78 Pt FCC	79 Au FCC	80 Hg RHO	81 Tl HCP	82 Pb FCC	83 Bi RHO	84 Po SC/RHO	85 At [FCC]	86 Rn FCC
87 Fr [BCC]	88 Ra BCC	89** Ac FCC	104 Rf [HCP]	105 Db [BCC]	106 Sg [BCC]	107 Bh [HCP]	108 Hs [HCP]	109 Mt [FCC]	110 Ds [BCC]	111 Rg [BCC]	112 Cn [HCP]	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og [FCC]
	*	58 Ce DHCP/FCC	59 Pr DHCP	60 Nd DHCP	61 Pm DHCP	62 Sm RHO	63 Eu BCC	64 Gd HCP	65 Tb HCP	66 Dy HCP	67 Ho HCP	68 Er HCP	69 Tm HCP	70 Yb FCC	71 Lu HCP		
	**	90 Th FCC	91 Pa TETR	92 U ORTH	93 Np ORTH	94 Pu MON	95 Am DHCP	96 Cm DHCP	97 Bk DHCP	98 Cf DHCP	99 Es FCC	100 Fm [FCC]	101 Md [FCC]	102 No [FCC]	103 Lr [HCP]		

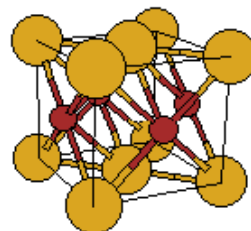
From Wikipedia, the free encyclopedia

Krystalová mřížka ideálního krystalu

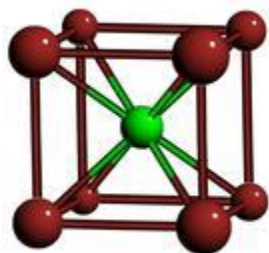
Několik vybraných typů struktur s víceatomovou bází



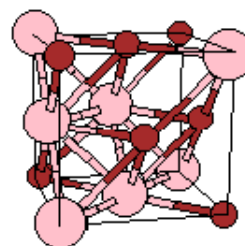
B1
prototyp: NaCl
cF8



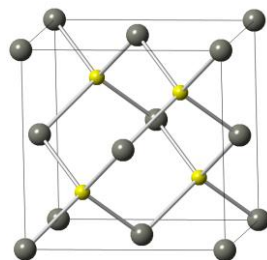
L1₀
prototyp: CuAu
tP2



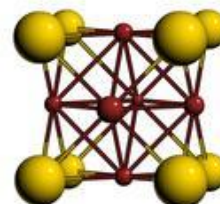
B2
prototyp: CsCl
cP2



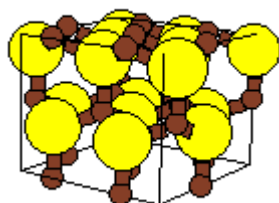
L1₁
prototyp: CuPt
hR32



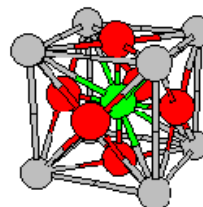
B3
prototyp: ZnS (sfalerit)
cF8



L1₂
prototyp: Cu₃Au
cP4

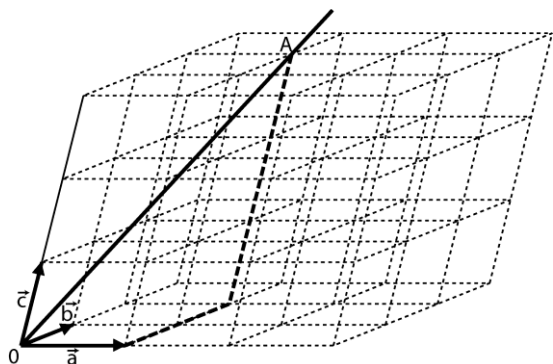


B4
prototyp: ZnS (wurtzit)
hP4



E2₁
prototyp: CaTiO₃ perovskit
cP5

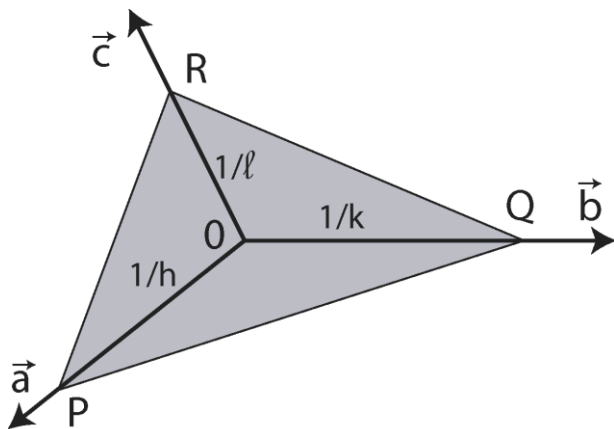
Značení rovin a směrů v krystalové mřížce



$$u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

$[uvw]$ konkrétní směr

$\langle uvw \rangle$ libovolný ekvivalentní směr



Millerovy indexy

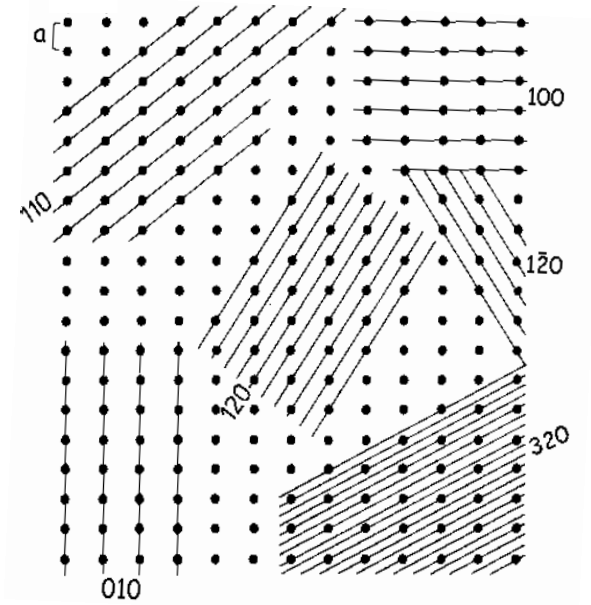
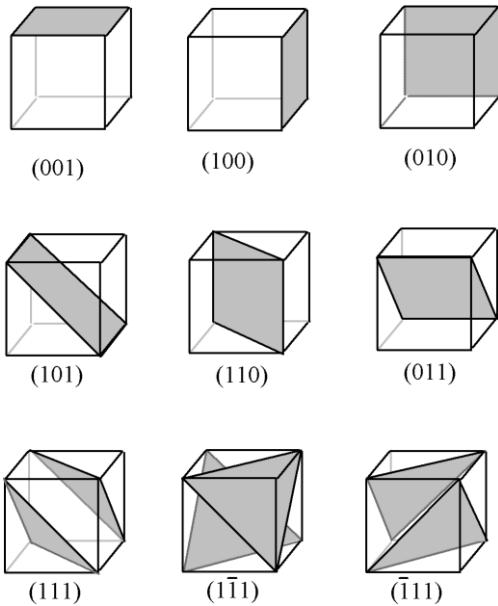
$$\overrightarrow{OP} = \frac{\vec{a}}{h}; \quad \overrightarrow{OQ} = \frac{\vec{b}}{k}; \quad \overrightarrow{OR} = \frac{\vec{c}}{l};$$

(hkl) konkrétní rovina

$\{hkl\}$ libovolná ekvivalentní rovina

Značení rovin a směrů v krystalové mřížce

Nejvýznamnější roviny (nízkoindexové)



Mezirovinná vzdálenost

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

v kubických krystalech

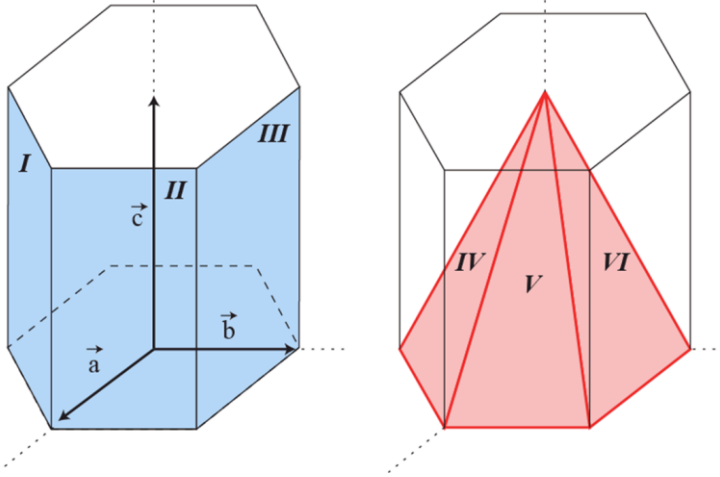
$$d_{hkl} = \frac{na}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

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

Značení rovin a směrů v krystalové mřížce

HEXAGONÁLNÍ MŘÍŽKA

3 nebo 4 indexy ?

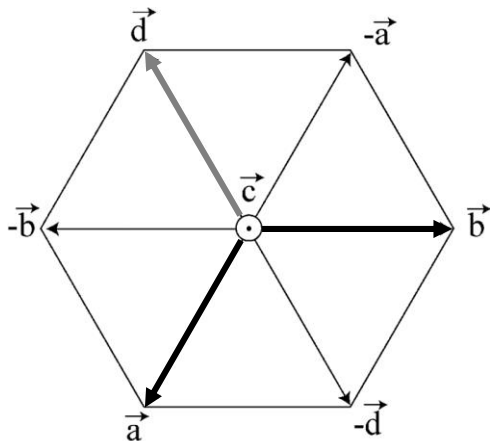


3 indexy 4 indexy

(hkl) $(hkil)$

$$i = -(h+k)$$

Další translační vektor \vec{d}



Důvod:

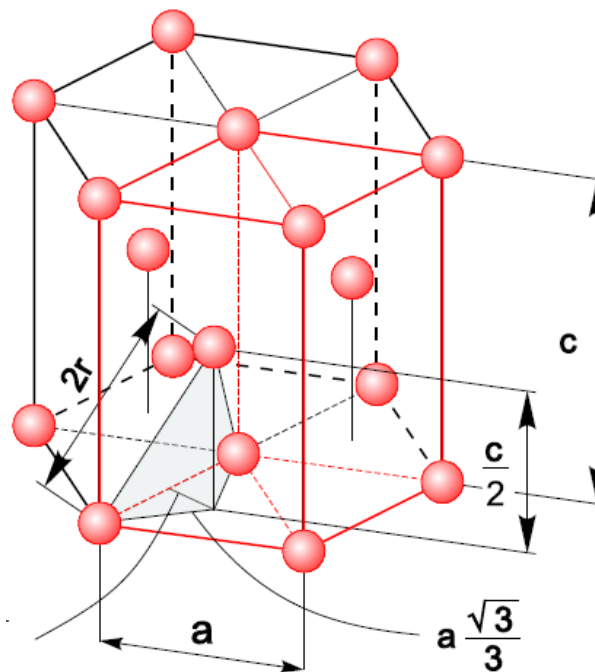
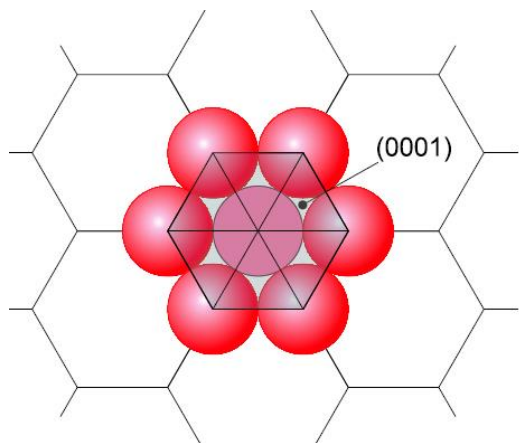
krystalograficky ekvivalentní roviny
(např. prismatické roviny 1. druhu)

	I	II	III
3 indexy:	$(\bar{1}10)$	(100)	(010)

4 indexy:	$(\bar{1}1\bar{0}0)$	$(10\bar{1}0)$	$(01\bar{1}0)$
-----------	----------------------	----------------	----------------

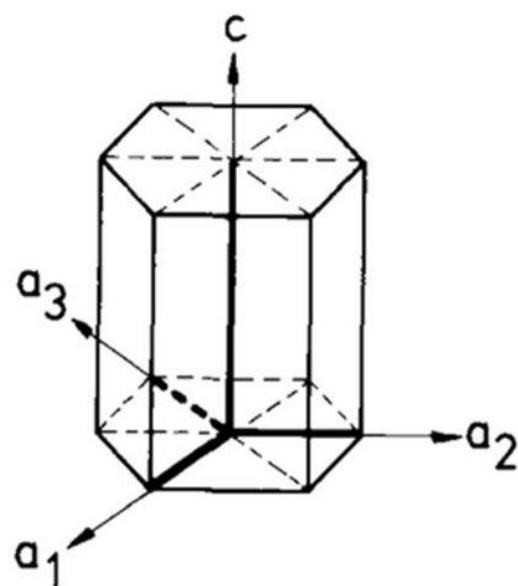
Příklad 1.3:

Ukažte, že pro ideální hexagonální těsně uspořádanou strukturu je poměr $\frac{c}{a}$ roven $\left(\frac{8}{3}\right)^{1/2} \approx 1,633$.



Příklad 1.3:

Ukažte, že pro ideální hexagonální těsně uspořádanou strukturu je poměr $\frac{c}{a}$ roven $\left(\frac{8}{3}\right)^{1/2} \approx 1,633$.



Cd	= 1,886	} above - normal
Zn	= 1,856	
	= 1,633	} Hard-sphere model
Co	= 1,628	} below - normal
Mg	= 1,624	
Re	= 1,615	
Tl	= 1,598	
Zr	= 1,593	
Ti	= 1,587	
Hf	= 1,581	
Y	= 1,571	
Be	= 1,568	

FIG. 1—The c/a axial ratio for various hcp metals.