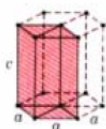


KRYSTALOGRAFIE

Krystalová mřížka je základem našich představ o vnitřní stavbě krystalických materiálů. Je pro ni charakteristické pravidelně se opakující rozložení atomů (iontů) v prostoru podle určitého geometrického uspořádání a symetrie. Geometrický element (rovnoběžnostěn), jehož opakováním lze vytvořit celou krystalovou mřížku, nazýváme **elementární buňkou**. Elementární buňka je určena **parametry mřížky**, tzn. třemi úseky a, b, c na souřadných osách x, y, z a třemi úhly α, β, γ mezi souřadnými osami. Rozlišujeme celkem 7 základních krystalografických soustav (tab. 1) a v nich celkem 14 typů elementárních buněk, tzv. Bravaisových mřížek (obr. 1).

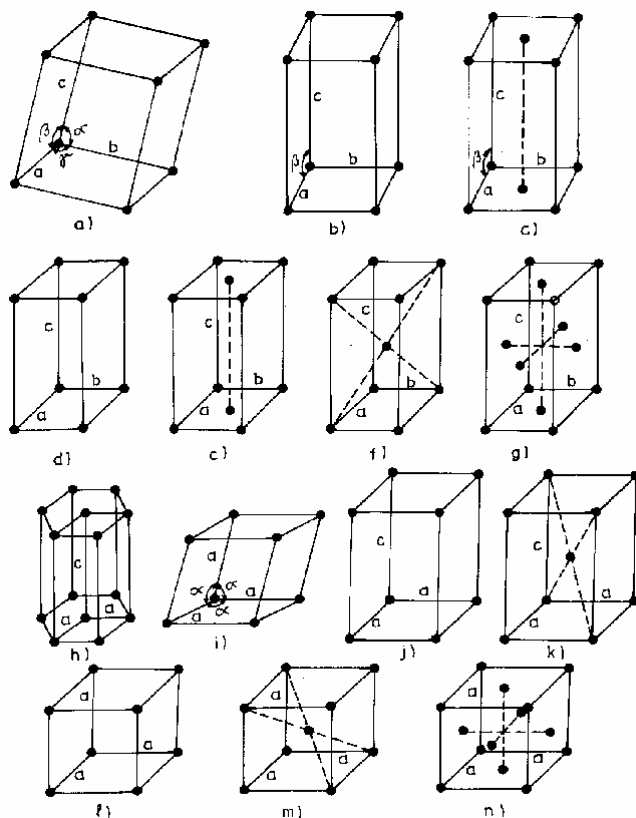
Tab. 1 Krystalografické soustavy

Soustava	Hlavní prvky souměrnosti	Elementární buňka
triklinická	žádné roviny, žádné osy	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
monoklinická	jedna dvojčetná osa nebo jedna rovina	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
ortorombická (rombická)	tři navzájem kolmé dvojčetné osy nebo dvě roviny protínající se v dvojčetné ose	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonální	jedna čtyřčetná osa nebo jedna čtyřčetná inverzní osa	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
kubická	čtyři trojčetné osy	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
hexagonální	jedna šestičetná osa	tři stejné komplanární osy $a(X_1, X_2, X_3)$ svírající úhly 120° čtvrtá osa $c (Z)$ kolmá k nim $c \neq a$
romboedrická (trigonální)	jedna trojčetná osa	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



$$a = b \neq c$$

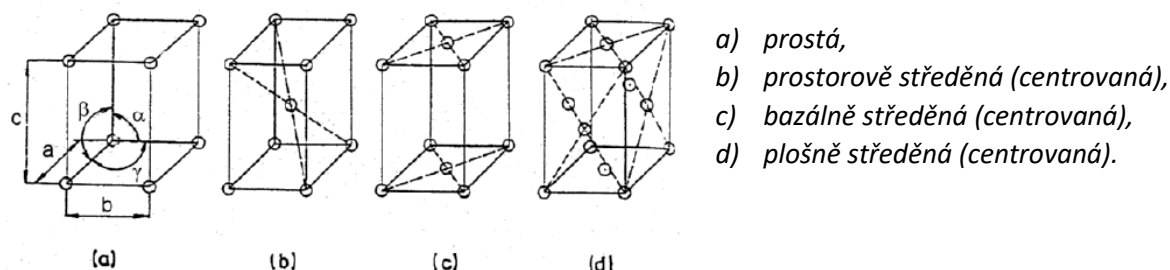
$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$



- triklinická prostá (trojklonná),
- monoklinická prostá (jednoklonná),
- monoklinická bazálně centrovaná,
- ortorombická prostá (kosočtverečná),
- ortorombická bazálně centrovaná,
- ortorombická prostorově centrovaná,
- ortorombická plošně centrovaná,
- hexagonální (šesterečná),
- romboedrická (klencová),
- tetragonální prostá (čtverečná),
- tetragonální prostorově centrovaná,
- krychlová prostá (kubická),
- krychlová prostorově centrovaná,
- krychlová plošně centrovaná.

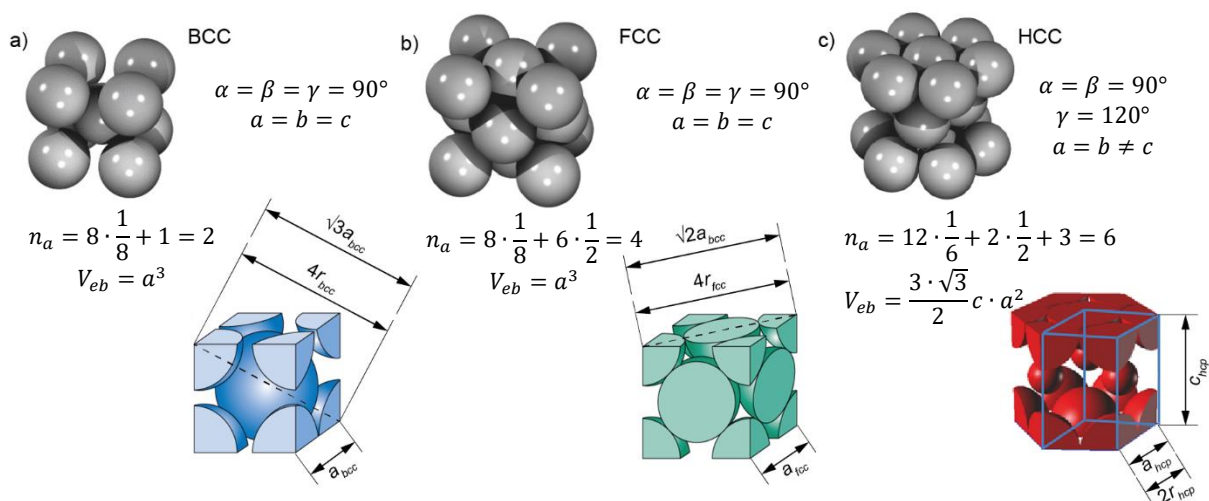
Obr. 1 Čtrnáct Bravaisových mřížek

Rozeznáváme elementární buňky **prosté**, **prostorově středěné**, **plošně středěné** a **bazálně středěné** (obr. 2). Důležitou charakteristikou krystalových mřížek je jejich koordinační číslo, tzn. počet atomů, které jsou v dané mřížce stejně vzdáleny od libovolného atomu a pravidelně kolem něho uspořádány. Koordinační číslo roste se zvyšujícím se vyplněním prostoru atomy a vyjadřuje symetrii mřížky. V důsledku existence kovové vazby je u kovů vysoká hustota zaplnění prostoru atomy (tj. poměr objemu hypotetických koulí všech atomů v buňce k objemu elementární buňky).



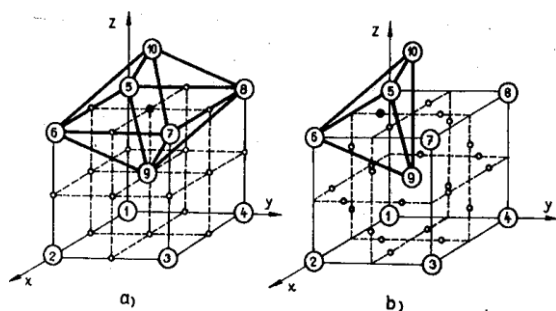
Obr. 2 Typy elementárních buněk

Kovy krystalizují nejčastěji v **krychlové plošně** (fcc) nebo **prostorově** (bcc) **středěné mřížce** a v **mřížce šesterečné (hexagonální) těsně uspořádané** (hcp), viz. obr. 3. Jsou to prostorové mřížky s vysokou souměrností a jednotlivé atomy se v určitých směrech (v geometrickém modelu) vzájemně dotýkají. V případě takovéto ideální hcp mřížky je poměr stran $c/a = 1,633$. U reálných kovů vyskytujících se v přírodě se však c/a od ideálního může lišit.

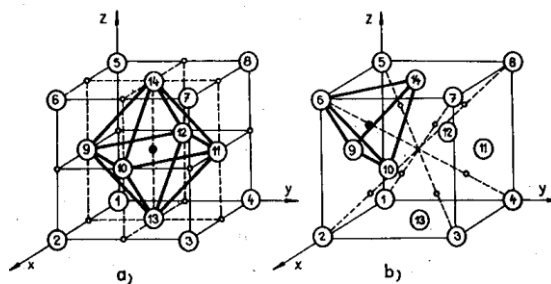


Obr. 3 Nejčastější typy krystalových mřížek, a) bcc, b) fcc, c) hcp. Počet atomů příslušejících elementární buňce n_a a objem elementární buňky V_{eb} .

I přes vysokou hustotu zaplnění prostoru atomy, zůstávají v elementární buňce volná místa, tzv. **intersticiální dutiny** (obr. 4 a 5). Z geometrického pohledu jsou tyto dutiny umístěny u krychlových mřížek buď uprostřed tetraedru nebo oktaedru tvořeného atomy základní buňky. Některé atomy v základní buňce jsou zároveň součástí dalších buněk, které ji v prostoru obklopují tzn., že dané elementární buňce přísluší pouze určitý (menší) počet atomů.



Obr. 4 Intersticiální dutiny v mřížce bcc
a) oktaedrické, b) tetraedrické



Obr. 5 Intersticiální dutiny v mřížce fcc
a) oktaedrické, b) tetraedrické

Typ krystalové mřížky ovlivňuje i vlastnosti kovových materiálů. Kovy s mřížkou fcc (Ni, Al, Ag, Pb, Au aj.) se např. vyznačují dobrou tvárností za tepla i za studena, kovy s mřížkou bcc (mezi něž patří i α Fe) mají tvařitelnost i houževnatost horší. Různá hustota obsazení jednotlivých směrů a rovin atomy v témže krystalu vede k anizotropii vlastností monokrystalických látek (např. modulu pružnosti, teplotní roztažnosti, tepelné a elektrické vodivosti, magnetických vlastností aj.).

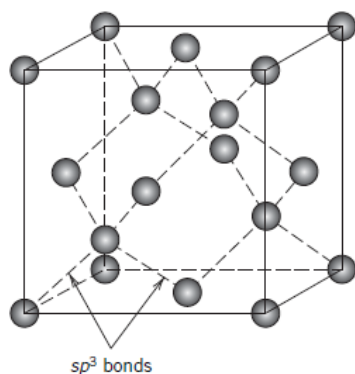
Na obr. 6. je uvedena **Mendělejevova periodická tabulka** prvků, ve které je ke každému prvku v tabulce přiřazena krystalografická mřížka. V případě polymorfních kovů se jedná o krystalografickou mřížku, ve které jsou atomy daného prvku umístěny za pokojových a nižších teplot.

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 [HCP]	114 Fl [HCP]	115 Mc [HCP]	116 Lv [HCP]	117 Ts [HCP]	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 HCP	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]							

Obr. 6 Mendělejevova periodická tabulka prvků s vyznačenými krystalografickými mřížkami. Pozn: FCC (face centered cubic) – kubická plošně středěná, BCC (body centered cubic) – kubická prostorově středěná, SC (simple cubic) – kubická prostá, DC (diamond cubic) – kubická diamantová, HEX – hexagonální (šesterečná), HCP (hexagonal close packed) – hexagonální s nejtěsnějším uspořádáním, DHCP (double HCP) – dvojitá HCP, TETR – tetragonální, ORTH – ortorombická, RHO – romboedrická, MON – monoklinická.

Kromě krystalografických mřížek (elementárních buněk) existují i tzv. krystalografické struktury. Mřížkové uzly v elementární buňce jsou tvořeny jedním atomem (iontem). V případě složitějších krystalografických struktur jsou atomové uzly nahrazeny tzv. **bází**, tj. soustavou atomů. Typickým představitelem je diamantová kubická struktura. Krystalizuje v ní např. Si, Ge apod. Jedná se o kubickou

mřížku plošně centrovanou (fcc), kde jsou mřížkové uzlové body tvořeny dvěma atomy; jeden leží v mřížkovém uzlovém bodě a druhý atom je posunut o $\frac{1}{4}$ do všech směrů ($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$), viz. obr. 7.



Obr. 7 Diamantová kubická struktura

K umožnění popisu a hodnocení vlastností v různých krystalografických rovinách a směrech byl zaveden jednotný popis rovin a směrů v krystalových mřížkách pomocí tzv. **Millerových indexů**.

Millerovými indexy roviny (**hkl**) jsou reciproké, tj. převrácené, hodnoty úseků, které tato rovina vytíná na osách (x,y,z) převedené na nejmenší nesoudělná čísla.

Millerův index krystalografického směru [**uvw**] (tj. směr který prochází libovolným uzlovým bodem) získáme tak, že s daným směrem vedeme rovnoběžku z počátku souřadného systému. Určíme souřadnice bodu, který rovnoběžka vytne na jednotkových hranách základní buňky a převedeme je na nejmenší nesoudělná čísla. Roviny stejného typu (soubor rovin) se uzavírají do závorek **{hkl}** a krystalograficky rovnocenné směry (soubor směrů) do závorek **<uvw>**.

V šesterečné soustavě (hcp) by při uvedeném způsobu označování neměly krystalograficky stejnocenné roviny obdobné indexy. Proto se zavedlo označování pomocí tzv. **Bravaisových indexů**, 4 indexů (**hkil**), přičemž platí, že $i = -(h+k)$. Indexy (**hkil**) se určují z úseků vytínaných na třech osách v rovině základny šestiboké buňky se vzájemnými úhly 120° . Označování dle Millerových indexů (3 indexů) se v tomto systému někdy používá.

Prostorové uspořádání atomů v krystalových soustavách lze experimentálně studovat využitím difrakčních jevů a interference monochromatického rentgenového záření, na jednotlivých atomy obsazených krystalových rovinách (viz. 3.r. magisterského studia Fyzika materiálů).