

# Krystalografie kovů

---

Základní typy struktury kovů, vlastnosti příklady

Poruchy ve struktuře kovů

---

# Základní typy struktury

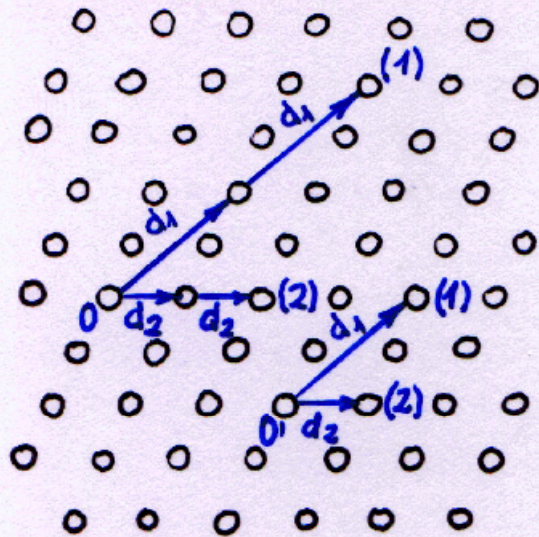
kovů,

- základní krystalografické pojmy
- uspořádání částic v kovech
- izomorfie a polymorfie
- tuhé roztoky

vlastnosti, příklady

# Konstrukce prostorové mřížky

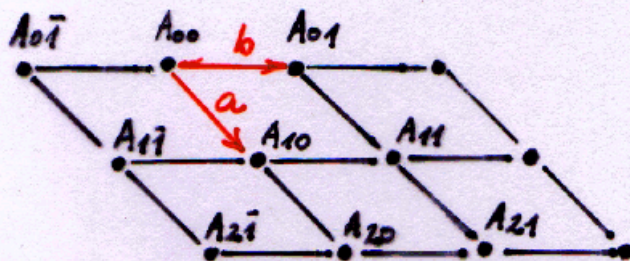
## Mřížková rovina (2 rozměry)



- zvolíme libovolný atom jako výchozí bod  $(0, 0, \dots)$
- postupujeme z bodu podle přímky orientované v určitém směru  $\Rightarrow$
- $\Rightarrow$  atomy umístěny v pravidelných vzdálenostech
- vzdálenost mezi středy sousedních atomů v daném směru

mřížková konstanta

V ideálním krystalu (bez poruch) má každý atom stejné okolí



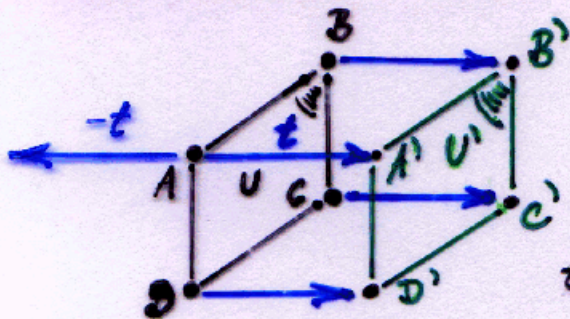
$A_{xy}$

$x, \dots$  charakterizuje mřížkovou přímku  
 $y, \dots$  charakterizuje postavení

!  $a, b$  nemusí být na sebe kolmé!



# Základní prostorová mřížka (3 rozměry)!

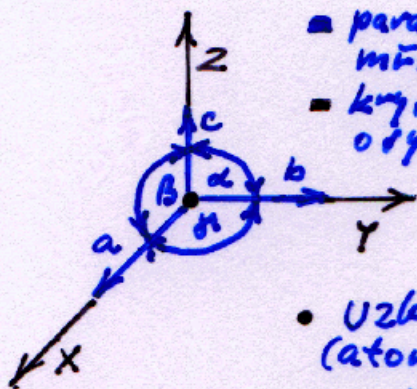


Translace  $U \rightarrow U'$

vektor  $\vec{t}$  = translační  
(směr, smysl a velikost posunutí)

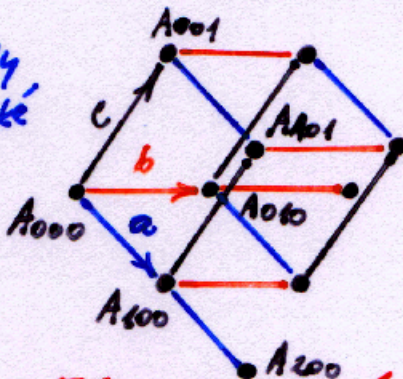
transformace: = předpis - bodu daného útvaru lze přiřadit bod

jiného útvaru  $\Rightarrow U \rightarrow U'$   
translace: zvláštní případ transformace, všechny body útvaru  $U$  jsou posunuty stejným směrem o stejnou velikost translačního vektoru



- parametry mřížky a úhly
- krystalografické osy

- uzlové body (atomy, ionty, molekuly)



Elementární  
buněk

opakováním translačních vektorů je definována prostorová mřížka



Prostorová mřížka krystalu = soubor velkého počtu buněk

### Základní pojmy

krytalografické osy: směry, ve kterých jsou v daném krystalu mřížkové konstanty nejkratší, tzn. směry hlavné

parametry mřížky: mřížkové konstanty ve směrech krytalografických os

$\alpha, \beta, \gamma$  : úhly, které svírají krytalografické osy

Tímto je zcela definována krytalová mřížka

### Základní Bravaisova pravidla pro elem. buňku

- pokud je to možné, volí se buňka tak, aby počet kolmých svírajících hran ( $a, b, c$ ) byl maximální
- " " " " " " " " , aby byl její objem minimální



# Geometrická krystalografie

## Zákony (symetrie krystalů a krystalových mřížek)

Hledisko symetrie: u krystalů jsou pro popis dostačující prvky symetrie:

$$C_1, C_2 \equiv i, C_3, C_4, C_6, C_2, C_3, C_4, C_6, C_2, C_3, C_4, C_6$$

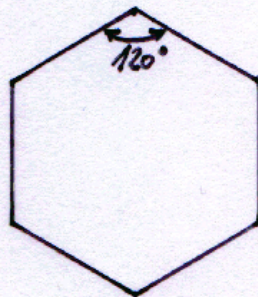
ostatní prvky nejsou v symetrii, největší tvaru uplatnění

Buňky mohou mít pouze tvar takových geometrických těles jako je: krychle, kvádr, pravidelný troj, boký a šikmý hranol, čtvercovou, kosočtvercovou nebo kosoúhelníkovou základnou (lze jimi při vhodném způsobu uložení vyplnit prostor bez mezer)

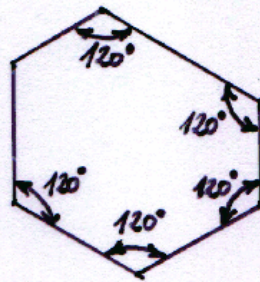
1. Zákon Stalotti:  
Úhly hran

Úhly svírané určitou dvojicí souřadnic ploch na površích krystalů chemického jedince jsou neměnné a nezávislé ani na velikosti krystalu, ani na tom, jak dokonale je vyvinut.

Pozn.: dříve důležitý  
zákon v  
mineralogii



všechny plochy  
plně vyvinuty



jedna plocha  
ne zcela vyvinuta

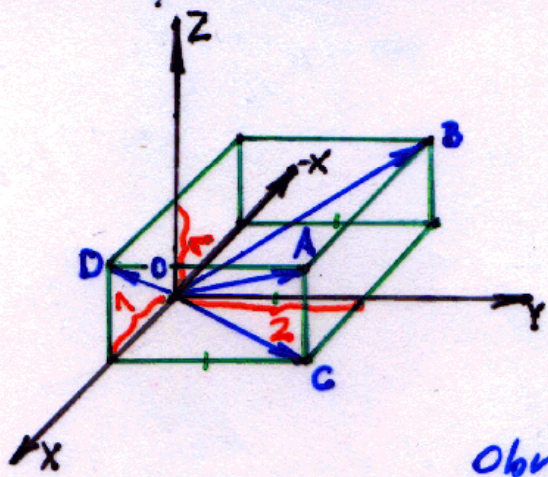
Křemen



2. Zákon o racionalitě : - existence parametrů  $a, b, c$   
 odvození koeficientů - pomocí parametrů lze vyjádřit úseky,  
 které vytvářejí plochy krystalů

Znalost orientace jednotlivých směrů a rovin v krystalu  
 nebo v prostorové mřížce je nezbytná při rozboru  
 struktury a vlastností krystalů, studiu fázových přeměn,  
 plastické deformace, šíření optických a akustických  
 vln a z hlediska popisu a studia řady jiných dějů.

Millerovy indexy směru: - Krystal umístěn do pravotočivého  
 souřadného systému  $(x, y, z)$   
 - ~~pro~~ krystalografický směr definován  
 hodnotami poměrů mezi průměty  
 úsečky  $\overline{OA}$  (od bodu  $O$  do bodu  $A$ ) do  
 tří krystalografických os  $x, y, z$   
 Průměty úsečky  $\overline{OA}$  (souřadnice bodu  $A$ )  
 se vyjadřují pomocí parametrů mřížky  
 (např. pro krychlovou  $a = b = c$ )



Obr.  $\Rightarrow$  Pro směr daný body  $O$  a  $A$  je poměr  
 průmětů úsečky  $\overline{OA}$  do os  $x, y, z$   $1:2:1 \Rightarrow$

$\Rightarrow [121]$  - Millerovy indexy směru (! vyjadřování celými čísly!)

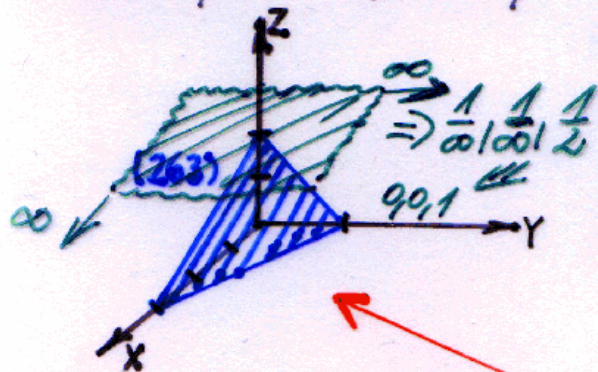
Pozn. Obecně vyjadřování  $u, v, w$  průměty na záporných osách =  
 = pruh nad indexem  $\Rightarrow \overline{OA} : [121], \overline{OB} : [\bar{1}21], \overline{OC} : [12\bar{0}], \overline{OD} : [10\bar{1}]$

Dod.  $\overline{OC}$  a  $\overline{OD}$ , případně jiné ( $[011], [\bar{1}10]$  ap.) = stejné krystalografický  $\Rightarrow$   
 $\Rightarrow$  zahrnutí do jedné skupiny, zde  $\langle \frac{110}{110} \rangle$

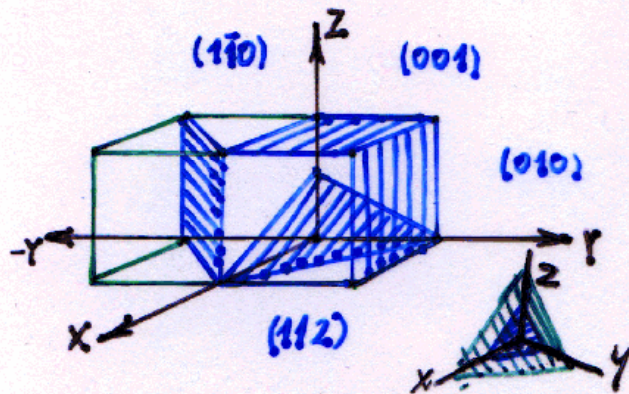


Millerovy indexy roviny: - obecně  $h, k, l$

- Postup stanovení:



1. Určíme úseky  $(x, y, z)$ , které vřtina rovina
2. Stanovíme převrácené hodnoty  $\frac{1}{x}$  atd.
3. Stanovíme poměr  $\frac{1}{x} : \frac{1}{y} : \frac{1}{z}$ , odstraníme zlomky a hodnoty převedeme na celá čísla (nejmenší možná)



Úseky na osách  $3, 1, 2 \Rightarrow \frac{1}{3} : 1 : \frac{1}{2} \Rightarrow$   
 $\Rightarrow \cdot 6 = (2, 6, 3)$

Dod. Roviny  $(001), (010)$ , příp. další  $(100), (001) =$   
 $=$  krytolografický rovinný  $\Rightarrow$   
 (stejně krytologr. ový)  
 $\Rightarrow$  zahrnutí do jedné skupiny  $\{100\}$

Vzájemně rovnoběžné roviny mají stejné indexy a trojí osnovu roviny.

3. Zákon souměrnosti: - viz. hledisko symetrie

Existuje pouze 32 krytolografických oddílů, které jsou sdruženy do 7 krytolografických soustav



Soustava	Elementární buňka	Parametry elementární buňky	Příklady
trojklonná (triklinická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$H_3BO_3$ $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ $K_2Cr_2O_7$
jednoklonná (monoklinická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	S (modifikace $\beta$ ) $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ $FeSO_4 \cdot 7H_2O$
kosočtverečná (rombická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	S (modifikace $\alpha$ ) $CaSO_4$ $MgSO_4 \cdot 7H_2O$
čtverečná (tetragonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$TiO_2$ (rutil) $CaWO_4$ $CuFeS_2$
trigonální (romboedrická)		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$SiO_2$ ( $\beta$ ) $Al_2O_3$ $CaCO_3$ (kalcit)
šesterečná (hexagonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	C (grafit) Mg $SiO_2$ ( $\alpha$ ) ZnS (wurtzit)
krychlová (kubická)		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	C (diamant) NaCl $CaF_2$ Cu ZnS (sfalerit)

	Hermann-Mauguinův symbol		Schoenfliesův symbol	Název oddělení
	úplný	zkrácený		
<b>Soustava triklinická</b>				
(2 oddělení)	1 $\bar{1}$	1 $\bar{1}$	$C_i$ $C_1$	odd. pinakoidální odd. pediální
<b>Soustava monoklinická</b>				
(3 oddělení)	$2/m$ $m$ 2	$2/m$ $m$ $2'$	$C_{2h}$ $C_s$ $C_2$	odd. prismatické odd. domatické odd. sfenoidické
<b>Soustava rombická</b>				
(3 oddělení)	$2/m2/m2/m$ $mm2$ 222	$mmm$ $mm2$ 222	$D_{2h}$ $C_{2v}$ $D_2$	odd. rombicky dipyramidální odd. rombicky pyramidální odd. rombicky disfenoidické
<b>Soustava tetragonální</b>				
(7 oddělení)	$4/m2/m2/m$ $4mm$ 422 $4/m$ 4 $\bar{4}2m$ $\bar{4}$	$4/mmm$ $4mm$ 422 $4/m$ 4 $\bar{4}2m$ $\bar{4}$	$D_{4h}$ $C_{4v}$ $D_4$ $C_{4h}$ $C_4$ $D_{2d}$ $S_4$	odd. ditetragonálně dipyramidální odd. ditetragonálně pyramidální odd. tetragonálně trapezodrické odd. tetragonálně dipyramidální odd. tetragonálně pyramidální odd. tetragonálně skalenodrické odd. tetragonálně disfenoidické
<b>Soustava hexagonální</b>				
(7 oddělení)	$6/m2/m2/m$ $6mm$ 622 $6/m$ 6 $\bar{6}m2$ $\bar{6}$	$6/mmm$ $6mm$ 62 62 $6/m$ 6 $\bar{6}m2$ $\bar{6}$	$D_{6h}$ $C_{6v}$ $D_6$ $C_{6h}$ $C_6$ $D_{3h}$ $C_{3h}$	odd. dihexagonálně dipyramidální odd. dihexagonálně pyramidální odd. hexagonálně trapezodrické odd. hexagonálně dipyramidální odd. hexagonálně pyramidální odd. ditrigonálně dipyramidální odd. trigonálně dipyramidální
<b>Soustava trigonální</b>				
(5 oddělení)	$\bar{3}2/m$ $3m$ 32 3 $\bar{3}$	$\bar{3}m$ $3m$ 32 3 $\bar{3}$	$D_{3d}$ $C_{3v}$ $D_3$ $C_3$ $C_{3i}$	odd. ditrigonálně skalenodrické odd. ditrigonálně pyramidální odd. trigonálně trapezodrické odd. trigonálně pyramidální odd. trigonálně romboedrické
<b>Soustava kubická</b>				
(5 oddělení)	$4/m\bar{3}2/m$ 432 $2/m\bar{3}$ $\bar{4}3m$ 23	$m\bar{3}m$ 43 $m\bar{3}$ $\bar{4}3m$ 23	$O_h$ O $T_h$ $D_d$ T	odd. hexaoktaedrické odd. pentagontrioktaedrické odd. didodekaedrické odd. hexatetraedrické odd. pentagontriteraedrické

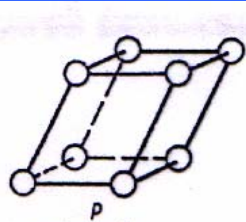
## Základní buňky kryštalových mřížek - viz. již dříve Bravais

Nejmenší počet základních buněk, jejichž translací lze odvodit strukturu libovolné kryštalové mřížky je 14

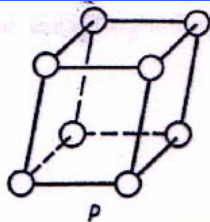
Základní buňky: - odlišnost tvarem a příslušností k určité kryštalografické soustavě  
- odlišnost v proutkové rozměrné stavěbních částech

Translace: např. - mřížky trojúhelné, trojúhelné a čtvercové soustavy =  
= translace buněk P  
- ortogonální soustavy = translace buněk C, F nebo I

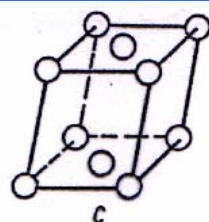




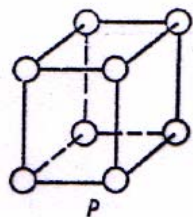
*P*  
trojklonná



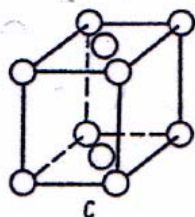
*P*  
jednoklonná



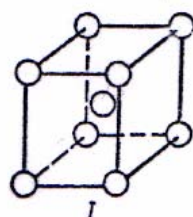
*C*



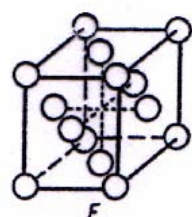
*P*



*C*

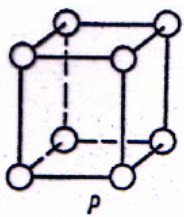


*I*

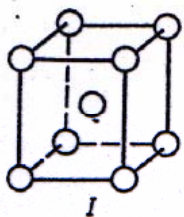


*F*

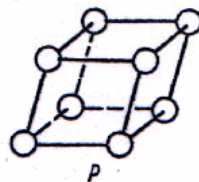
kosočtverečná



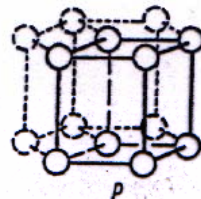
*P*



*I*



*P*

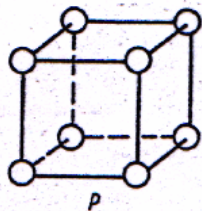


*P*

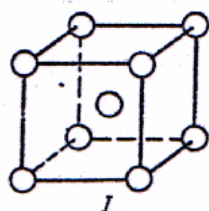
čtverečná

trigonální

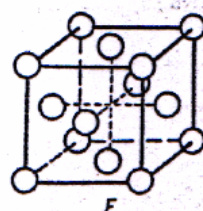
šesterečná



*P*



*I*



*F*

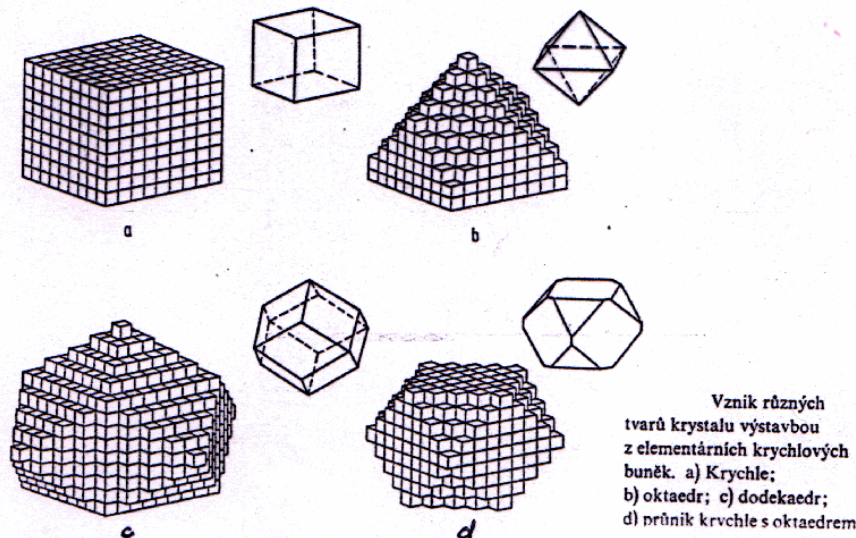
krychlová

*P*.... primitivní  
*C*.... bazálně centrována  
*F*.... plošně centrována  
*I*.... prvotvorově centrována

Vnější tvar krystalů - i přesto, že musí být splněna základní pravidla, je proměnný

Důvod: dáno tím, kterými plochami je tvar krystalu vymezen  
např.: krystaly látky patřící do krychlové soustavy -  
- tvar krychle, oktaedru, dodekaedru atd.  
- možnost i kombinovaných tvarů

Pozn. - obdobně i pro jiné krystalografické soustavy





# Uspořádání částic v kryst. strukturách

- Zákonitosti:
- 1) Princip nejmenšího objemu (nejtěsnější uspořádání)
  - 2) Princip nejvyšší souměrnosti
  - 3) Princip nejkratších spojníc

ad 1) Snaha částic vyplnit prostor co nejvíce; těsnost v mřížce se posuzuje dle koordinacího čísla (počet sousedních atomů kolem atomu centrálního, pozn. - nejvyšší k.č. = 12)  
"Účinný poloměr atomů" - souvisí s k.č.

ad 3) Spojení středů částic přímkami => soustava přímek:

a) homogenní - částice stejného typu

b) heterogenní - různé částice

c) plošná nebo prostorová - částice se umísťují tak, aby soustava nejkratších spojníc měla co největší četnost

Dále spoluvyplňují:

- I. velice velikosti vřech zůvavtráných částic
- II. směrová orientace vazeb
- III. stereochemie sloučeniny

ad I) velikostní faktor - poloměr či průměr atomů  
(1. přibližně = částice je koule)  
! prostor vyplněný jádrem i obalem!

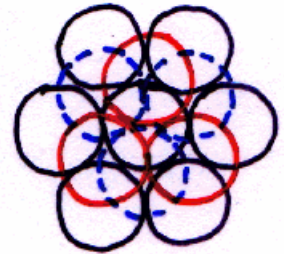
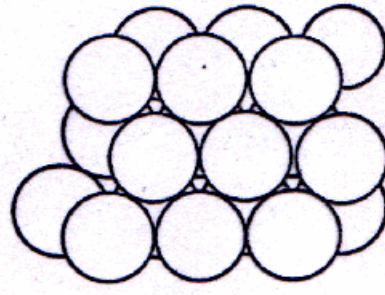
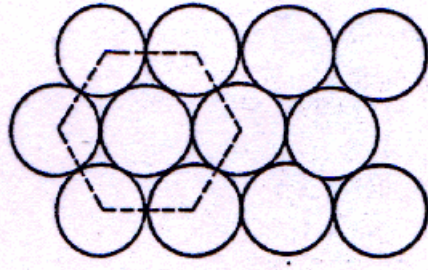
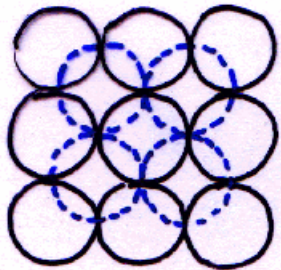


# Krystalové mřížky kovů

Částice: atomy (většinou stejný nebo podobný poloměr)

Vazby: bez směrové orientace  $\Rightarrow$

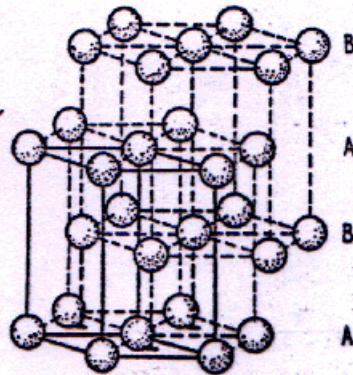
$\Rightarrow$  Nejtěsnější uspořádání - systém vrstvený



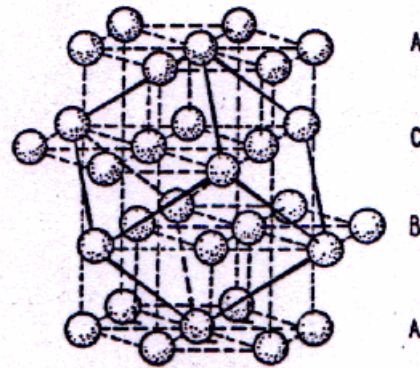
a

b

mřížka  
jehťevná



c



d

mřížka  
krychlová  
plošně středěná

A ■  
B ■  
C ■

Nejtěsnější uspořádání koulí: a) v jedné vrstvě; b) ve dvou vrstvách.  
Vznik nejtěsnějšího uspořádání koulí. c) Hexagonální; d) kubické



Vyplnění prostoru : nejtěsnější prostorové uspořádání částic  
částicemi  
a koordinační  
číslo

- hexagonální } 75%,  $K=12$   
- krychlové

Další možná :  
uspořádání

- krychlová mřížka prostorově středěná  
(sled vrstev ABAB....., 68%,  $K=8$ )  
- jednoduchá šesterečná a krychlová struktura  
(sled vrstev AAA.....)

Pozn. v jednoduché krychlové nekrystalizuje žádný kov

Výjimka: polonium

(díky relativistickým efektům -  
podobně jako je např. třpitivý lesk zlata)



## Why Is Polonium Simple Cubic and So Highly Anisotropic?

Dominik Legut,<sup>1,2,\*</sup> Martin Friák,<sup>1</sup> and Mojmír Šob<sup>3,1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Physics of Materials, Academy of Sciences of the Czech Republic, Žitkova 22, CZ-616 62 Brno, Czech Republic*

<sup>2</sup>*Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, CZ-612 00 Brno, Czech Republic*

<sup>3</sup>*Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kollářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic*  
(Received 26 October 2006; published 6 July 2007)

Using the state-of-the-art *ab initio* electronic structure calculations, we explain why  $\alpha$ -Po prefers the simple cubic structure (it is due to the relativistic mass-velocity and Darwin terms), elucidate its extreme elastic anisotropy (this is an intrinsic property of the simple cubic crystal structure), and predict a transformation to a mixture of two trigonal structures at pressures of 1–3 GPa.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.99.016402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.016402)

PACS numbers: 71.15.Mb, 71.15.Rf, 71.55.Ak, 71.70.Ej

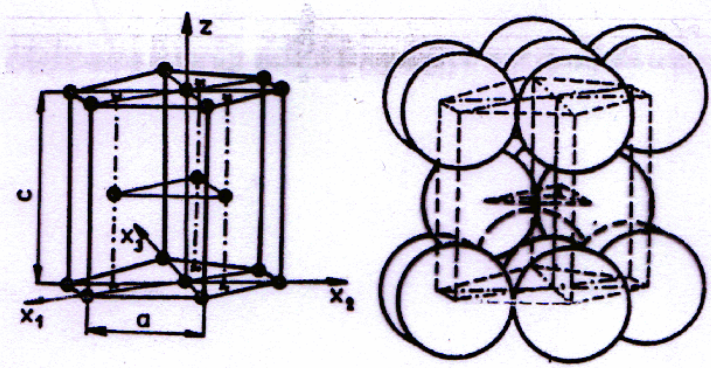
*Introduction.*—Polonium is the only element on the Earth that possesses the simple cubic (sc) structure, one of the simplest crystal structures of all. It has the atomic number  $Z = 84$  and is very rare and extremely radioactive, at present known in 36 isotopes. The energy released by its decay is very large, and hence polonium has attracted attention for usage as a lightweight heat source for thermoelectric power in space satellites. It also can be mixed or alloyed with beryllium to provide a flux of neutrons, used for removing dust from photographic paper as well as for eliminating the static charges in textile mills, and also as the initiator of a chain reaction in atomic bombs constructed in the middle of the 20th century. Although polonium is so rare, it harmfully enters our lives, for example, via air, soil [1], and plants such as tobacco [2], mushrooms [3], and even tea [4].

cell characterized by the lattice constant  $a_R$  and the angle  $\alpha$  between two diagonals of the unit cell faces; this angle equals  $60^\circ$ ,  $90^\circ$ , and  $109^\circ 28'$  for the fcc, sc, and bcc structures, respectively.

Investigation of physical and chemical properties of Po is very difficult due to its strong radioactivity and the presence of the decay products. Most available experimental characteristics of Po have been collected in [9]. It turns out that, to the best of our knowledge, no experimental information on elastic behavior of polonium exists. It has been suspected that the sc structure of Po could be due to one of the relativistic effects, a strong spin-orbit coupling [10], but this conclusion has not been supported by sufficient quantitative arguments. The main purpose of this work is to explain the stability of the sc structure of  $\alpha$ -Po and its extreme elastic anisotropy.



# šesterečná mřížka těsně uspořádaná

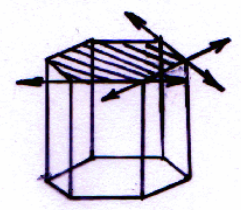


Počet atomů:  $\sum$  počet společných atomů buňky  $\times$  počet sousedních buněk

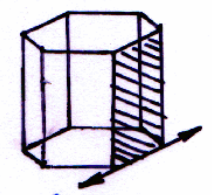
$$12 \cdot \frac{1}{6} + 2 \cdot \frac{1}{2} + 3 = 6$$

Příklady: Be, Mg, Zn, Cd

Nejkrutiější: - směry  $\langle 1\bar{1}20 \rangle$   
 obdazené - roviny složitější - závisí na poměru  $c/a$  (viz. podléjí kop. koch. vlast.)



$(0001)$  (3)  
 $\langle 1\bar{1}\bar{2}0 \rangle$  (3)  
 $c/a > \sqrt{3}$



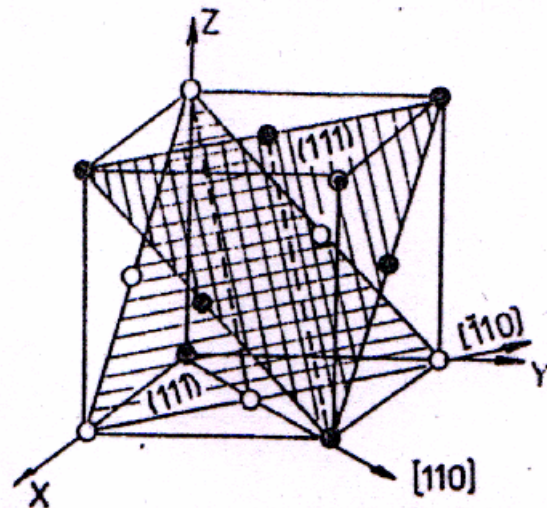
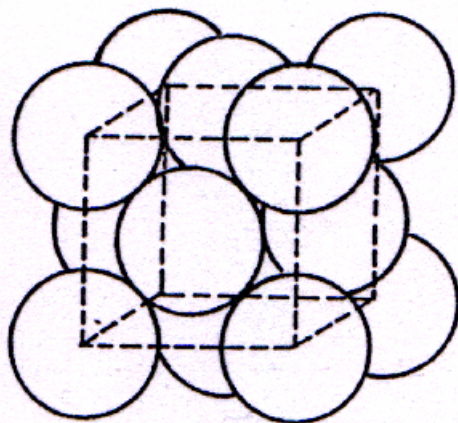
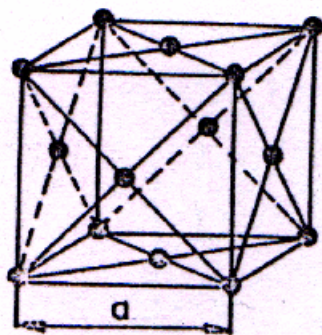
$\{10\bar{1}0\}$  (3)  
 $\langle 1\bar{1}\bar{2}0 \rangle$  (3)  
 $c/a < \sqrt{3}$



$\{10\bar{1}1\}$  (6)  
 $\langle 1\bar{1}\bar{2}0 \rangle$  (6)



# Krychlová mřížka plošně středěná (fcc)



Počet atomů:  
na 1 buňku  $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$

Rozt. prokř. mřížka  $\Rightarrow 8 \cdot \frac{1}{8} = 1 \Rightarrow$

$\Rightarrow$  jde o mřížku čtyřnádobnou, složenou ze 4 prostých;  
vznika posunutím tří z nich ve směru 3 plošných úhlopříček  
o polovinu jejich délky

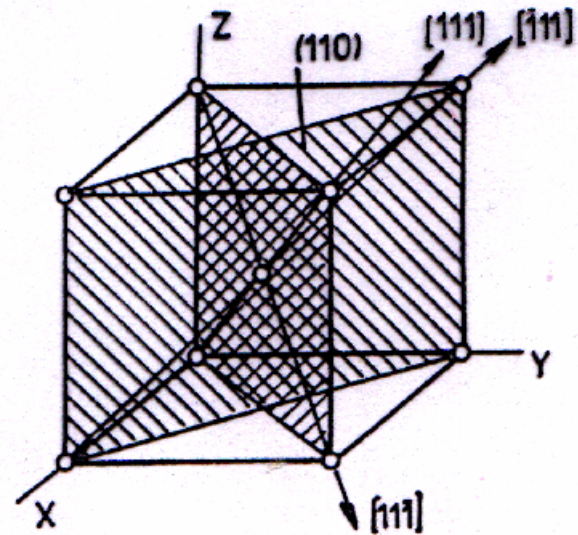
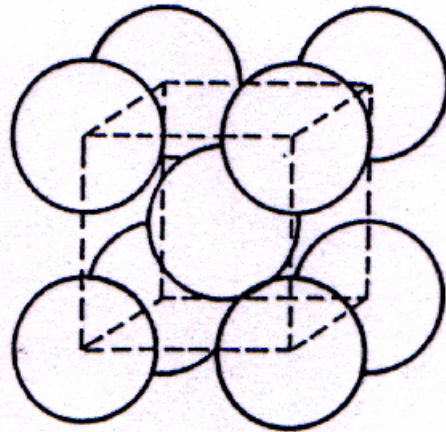
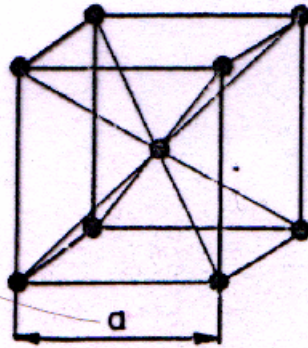
Nejkratěji: - roviny  $\{111\}$  (4 roviny)  
obvazene - směry  $\langle 110 \rangle$

Struktura  $\leftrightarrow$  vlastnosti: značný počet rovin kurtě obrazy atomů,  
ty slouží při tvárné deformaci jako  
roviny kluzu  $\Rightarrow$  kovy za studena  
dobře tvárné

Příklady: Pb, Au, Ag, Cu, Pt, Ni, Al, Fe



# Krychlová mřížka prostorově středěná (bcc)



Počet atomů:  $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2 \Rightarrow$   
na 1 buňku

$\Rightarrow$  jde o mřížku dvojnásobnou, složenou ze 2 protýčků  
vzniká posunutím jedné z nich po prostorové úhlopříčce  
o polovinu její délky

Nejhustěji: - roviny  $\{110\}$   
oblazené - směry  $\langle 111 \rangle$

Struktura  $\leftrightarrow$  vlastnosti: Kovy za studena křive tvárné

Příklady: W, Mo, Cr, Ta, Nb, V, Li, Na, K, Fe $\alpha$ , Fe $\delta$



# Izomorfie a Polymorfie

izomorfie: látky s podobnou chemickou strukturou, mající tvarově i rozměrově podobné elementární buňky v nichž jsou stavěbní jednotky uspořádány tímž způsobem, mají částo kryštaly podobného vnějšího vzhledu (krytalizace v téže soustavě)

směšné kryštaly: z roztoku nasyceného dvěma látkami nebo jejich taveniny se vylučují kryštaly jediného typu (často nerostem zastoupen)

prerůstání krytalů: při ponorením krytalu jedné látky do roztoku s druhou pokračuje růst z této látky

př.:  $K_2SO_4$  a  $(NH_4)_2SO_4$ , skalice ap.

polymorfie: látka se může v závislosti na vnějších fyzikálních podmínkách vyskytovat v několika krytalických formách

forma = modifikace

pozn.: u prvků jde o alotropii

př.: oxid křemičitý - křemen  $\alpha, \beta$   
- tridymit  $\alpha, \beta$   
- krytalobalit  $\alpha, \beta_1, \beta_2$   
- stříbrit (umělé) ap.  
 $C, S, P, Sn$  (krychlový  $\alpha$ , čtverecný  $\beta_1$ ) ap.  
šesterecný  $\beta_2$

# Krystalická stavba

Stavba:

vliv na fyzikální vlastnosti

Typický představitel:

slitiny

Základní klasifikace: 1) Tuhé roztoky

2) Intermediární fáze (sloučeniny)

ad 1

## Tuhé roztoky

Charakteristika: pevná fáze krystalického typu tvořená  
nejméně 2 složkami

1 = základní  
2...n = přívada

V krystalové mřížce základní složky  
se a to my přívady uspořádávají tak,  
aby E<sub>pot.</sub> byla co nejnižší

a) substituční

b) intersticiální

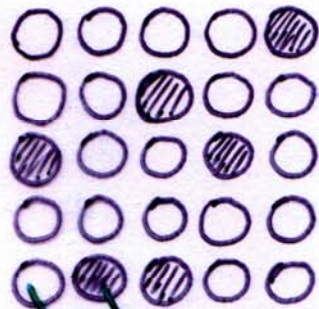
α) neuspořádané

β) částečně uspořádané

γ) uspořádané



ad a)



A - základní prvek  
B - přídavek

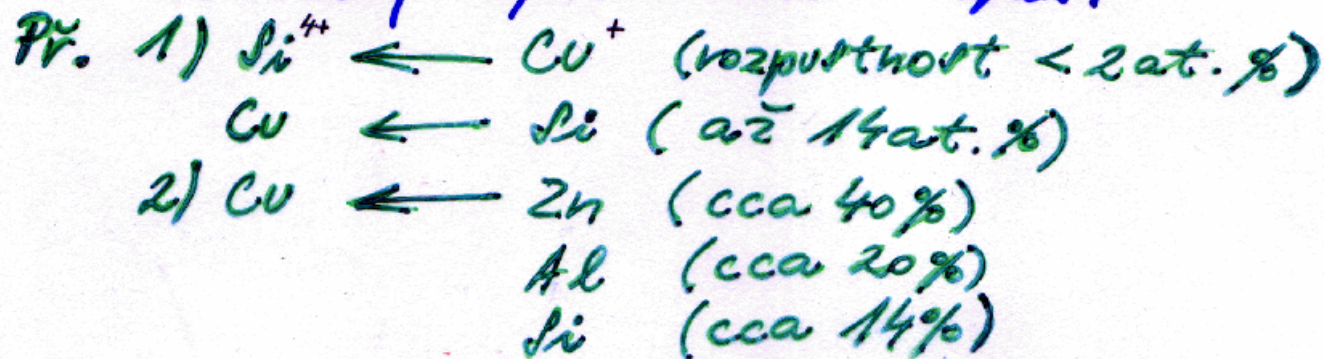
- na hrázování atomů A v uzlových bodech atomů B
- obrazování je nahodilé (libovolný atom)
- neomezená nebo omezená rozpustnost složky B (viz. faktory)

Faktory ovlivňující tvorbu subst. roztoku (faktory příbuznosti)

- Krystalová mřížka: stejný nebo podobný typ  
(co nejméně odlišné síly na okolí - stabilita)  
stejný  $\Rightarrow$  neomezená rozpustnost
- Velikost atomů: co nejméně rozdílné
  - $< 8\%$  - neomezená rozpustnost
  - $< 8\% - 15\%$  - omezená  $\curvearrowright$
  - $> 15\%$  - velký pokles rozpustnosti

- Elektrochemické: co nejbližší  
Vlastnosti  
čím více je jeden elektro pozitivnější a  
druhý elektro negativnější, tím menší  
snaha tvorby tuhého roztoku a naopak  
větší snaha tvorby intermedinární fáze

- Valence: co nejpodobnější  
Není-li splněno, pak příměrová složka s nižší  
valencí snižuje koncentraci valenčních  $e^-$  v  
mřížce a má menší rozpustnost.  
U složky s vyšší valencí naopak.

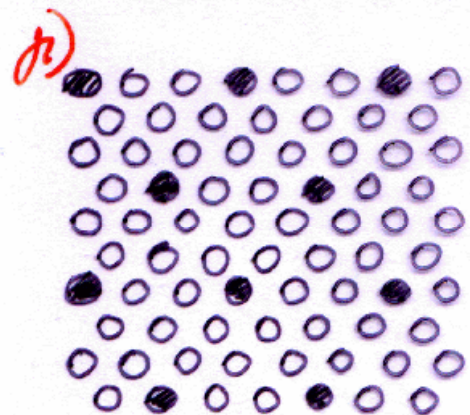
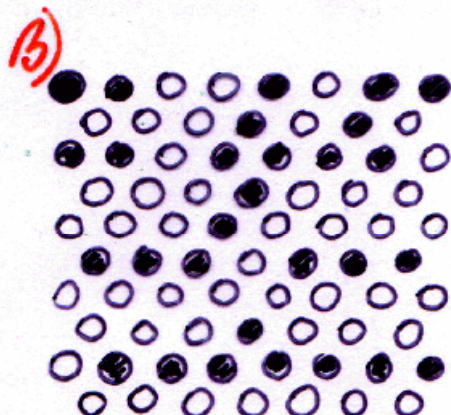
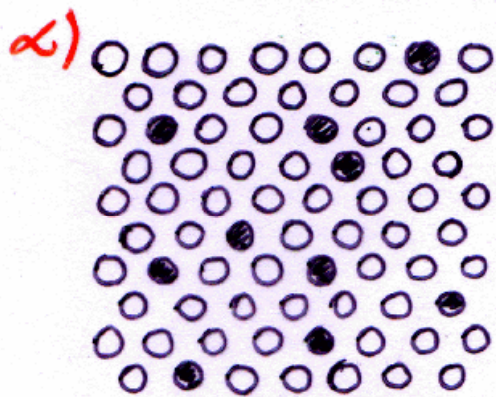




ad  $\alpha$ ) - zcela náhodné umístění příměsových atomů (možné i souvedrtí)  
 - při různé velikosti atomů  $\Rightarrow$  značné vnitřní pnutí

ad  $\beta$ ) - atomy téhož druhu nejsou přímo v souvedrtí a jsou umístěny pravidelně  $\Rightarrow$  zmenšená pnutí

ad  $\gamma$ ) - zcela pravidelné rozmístění atomů v řech složek -  
 - tzv. nadmřížka - superstruktura  
 - výskyt za nižších teplot (viz. fázové diagramy)



Fyzikální  
vlastnosti:

tvárné, houževnaté

mezi

tvrdé, křehké

Příklady:

obecné slitiny

Cu-Zn

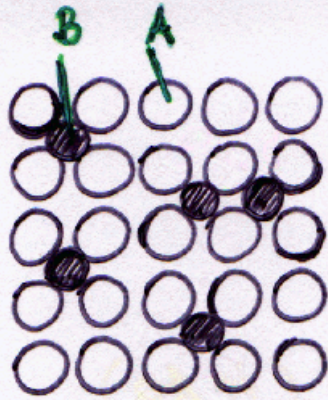
Cu-Au, Cu-Zn, Fe-Al

Fe-Cr, Co-Cr ap.

Příklady: - neomezená rozpustnost: Cu-Ni, Au-Pt, Fe-Cr atd.  
 omezená : Cu-Ag, Al-Si atd.  
 úplná nerozpustnost: Sn-Cd, Sn-Zn atd.



ad b)



A - zákl. prvek  
B - přívada

- umístění atomů přívad dovolených prostorů mezi atomy zákl. prvku
- počet atomů A nezměněn
- atomy B zvyšují počet atomů v mřížce
- toto obdazování je nahodilé
- neo mezená rozpustnost je nereálná

### Faktory ovlivňující tvorbu interstičního roztoku

- velikostní faktor:  $f = \frac{V_{\text{přívada}}}{V_{\text{zákl. složka}}} \leq 0,59$

Př.: u kovů: H, N, C, O, B

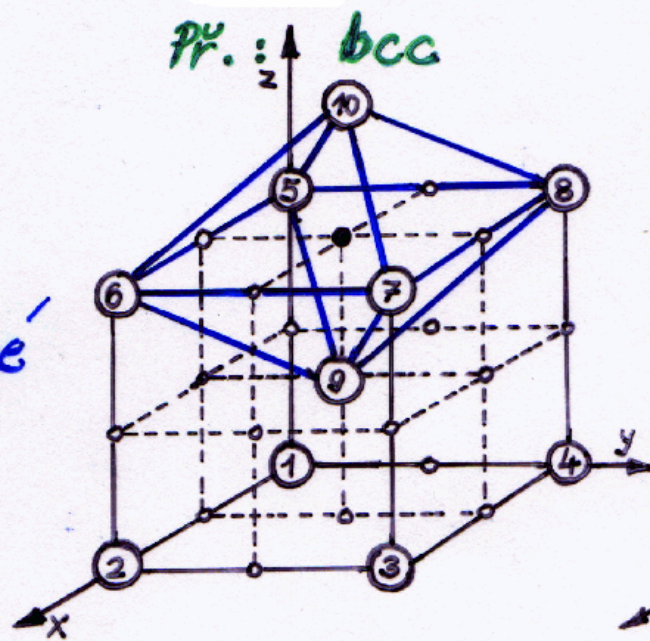
Fe-C = ocel ( $f=963 \Rightarrow$  velmi malá rozpustnost)

- Uspořádání prostorů (dvtm)

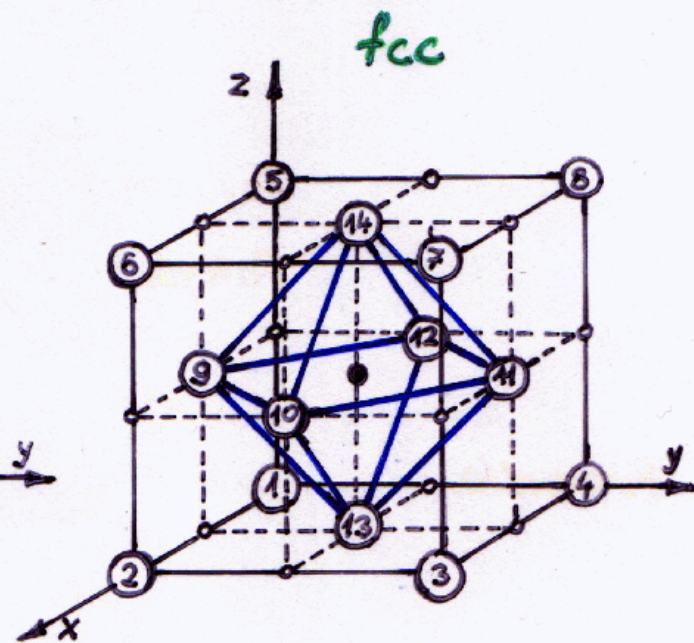
:  $\frac{N \text{ malých objemů}}{\text{libovolný tvar}} \xrightarrow{\text{růz. rozpustnosti}} \frac{M \text{ velkých objemů}}{\text{koule}} \rightarrow N > M$



oktaedrické

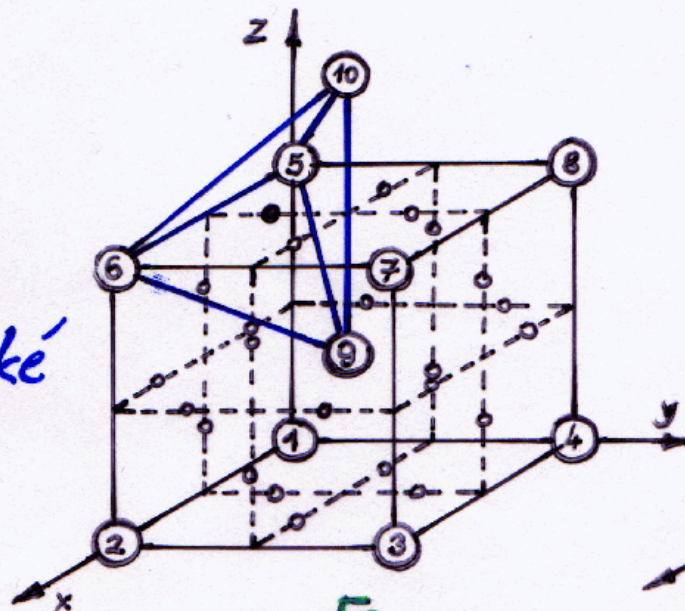


K 8

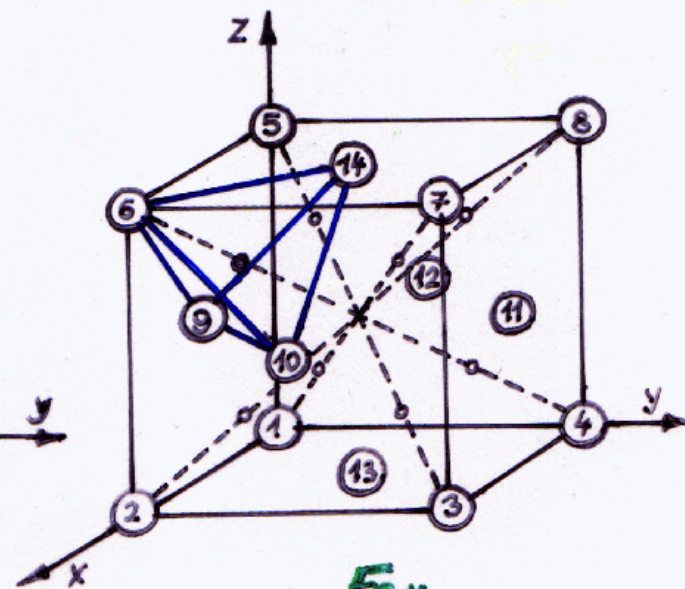


K 12

tetraedrické



Fe<sub>d</sub>



Fe<sub>t</sub>

# Parametry soustav K<sub>8</sub> a K<sub>12</sub>

Charakteristika	Krystalografická soustava kubická				
	prostá	prostorově středěná		plošně středěná	
		obecně	αFe		obecně
uspořádání zákl. atomů v rovinách	čtverečné	čtverečné, tj. méně těsné		trojúhelníkové, tj. nejtěsnější	
vrstvení rovin	A A A A	ABAB, tj. méně těsné		A B C A B C, tj. nejtěsnější	
počet mřížkových bodů v elem. buňce	1	2		4	
délka hrany elem. buňky [nm]	a	a	0,28665; 20°C (0,29322; 1394°C)	a	0,36349; 20°C (0,36468; 910°C)
objem elementární buňky [nm <sup>3</sup> ]	a <sup>3</sup>	a <sup>3</sup>	0,0235535	a <sup>3</sup>	0,0484993
objem primitivní buňky [nm <sup>3</sup> ] tj. prostor připadající na 1 atom	a <sup>3</sup>	1/2 a <sup>3</sup>	0,0117768	1/4 a <sup>3</sup>	0,0121248
počet mřížkových bodů v jednotk. obj. [nm <sup>-3</sup> ]	1/a <sup>3</sup>	2/a <sup>3</sup>	84,91	4/a <sup>3</sup>	82,48
první nejbližší sousedé	počet	6	8		12
	vzdálenost mezi nimi [nm]	a	$\frac{a\sqrt{3}}{2}$	0,2482462	$\frac{a\sqrt{2}}{2}$ 0,2578677
druzí nejbližší sousedé	počet	6		6	
	vzdálenost mezi nimi [nm]	a		a	0,36468
velikost atomu Fe.	poloměr r <sub>a</sub> [nm]	a/2	$\frac{a\sqrt{3}}{4}$	0,1241231	$\frac{a\sqrt{2}}{4}$ 0,1289339
	průměr d <sub>a</sub> [nm]	a	$\frac{a\sqrt{3}}{2}$	0,2482462	$\frac{a\sqrt{2}}{2}$ 0,2578677
hustota záplnění h elem. buňky hmotou atomů	0,52	0,68		0,74	
poměrný prázdný prostor v elem. buňce k <sub>p</sub> = 1 - h	0,48	0,32		0,26	



pokrač.		Mřížka k. pr. s.		Mřížka k. pl. s.	
		oktaedrická intersticiální poloha	tetraedrická intersticiální poloha	oktaedrická intersticiální poloha	tetraedrická intersticiální poloha
souřadnice		$(\frac{1}{2}, 0, 0)$ , $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$ , $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$
počet intersticiálních poloh v 1 elementární buňce		6	12	4	8
počet intersticiálních poloh na 1 základní atom v elem. buňce		3	6	1	2
velikost intersticiální dutiny [nm]	průměr (koule vepsané bez deformace mřížky)	0,113 $a_{\alpha}$	0,252 $a_{\alpha}$	0,293 $a_{\gamma}$	0,159 $a_{\gamma}$
	poloměr (koule vepsané bez deformace mřížky)	0,067 $a_{\alpha}$	0,126 $a_{\alpha}$	0,147 $a_{\gamma}$	0,0795 $a_{\gamma}$
Velikost intersticiální dutiny [nm] v $\alpha$ Fe příp. v $\gamma$ Fe	průměr (koule vepsané bez deformace mřížky)	0,038	0,072	0,104	0,056
	poloměr (koule vepsané bez deformace mřížky)	0,019	0,036	0,052	0,028

# Poruchy ve struktuře kovů

- základní pojmy a klasifikace poruch
- bodové poruchy
- klastrové poruchy a agregáty
- rozsáhlé poruchy
- čarové poruchy (dislokace)
- plošné poruchy



# Mřížkové poruchy

pojmy: bodové poruchy, poruchy clusterů;  
nestechiometrie; dislokace; hranice zrn atd.

## Reálný krystal

Ideální krystal  
(nedosažitelné)

- bezporuchový, zcela pravidelná geometrie
- pouze zde platí dvě základní zásady krytalografie (viz. předevšlá kapitola)
- JSN při OK

Reálný krystal

- defekty (poruchy)
- vědecky praktické materiály

př. Si - monokrystalický: - bez dislokací, ale lokálně chyby  
- nečistoty:  $10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ O}_1 \leq 10^{15} \text{ cm}^{-3} \text{ C}$ ,  
kovy v koncentraci ppb  
dotováni: (P, As, B, ...)  $10^{16} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$

kovové slitiny, polykrytalická keramika, skelná keramika, ...;  
dislokace, trhliny, hranice zrn



Mikrostruktura určuje  
mechanické vlastnosti jako  
pevnost, tvrdost, tažnost, ....

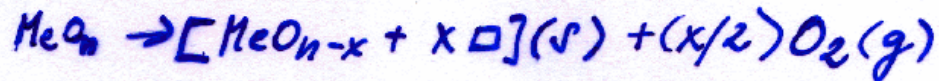
- Monokryстал - blízký id. kv., orientace mřížky jednotná
- Vláknový -  $\phi$  (mm),  $l$  (cm) ( $Fe, C, Ag, Au, Cu, Ni$  ap.)  
- nejdokonalější, velmi malý počet povrchů
- Makovin -  $\phi$  (cm),  $l$  (dm)  
- méně dokonalý, složen z bloků (dubzrna  $10^3 - 10^5$  mm),  
pravidelně v pořádku v rámci sob zrn,  
vzájemná orientace mřížky souvisejí trojnásobně
- Polykryстал - reál  
- složen ze zrn (obrykle  $10^2 - 10^4$  mm) (vřívka - několik atomů)  
vzájemná orientace mřížky rozdílná  $\Rightarrow$  hranice zrn



# Poruchy

- Klasifikace podle:
- 1) původu :
    - a) vnitřní (vrozené)
    - b) vnější (vzniklé zásahem)
  - 2) typu :
    - a) chemická (příměr)
    - b) strukturální (bez vlivu příměří)
  - 3) velikosti a tvaru :
    - a) bodové (vakance a intersticiály)
    - b) čárové (např. dislokace, ...)
    - c) 2 rozměrné (roviny) (např. vrstevně dýhy, ...)
    - d) 3 rozměrné (plochy) (např. nestechiometrie, odmířeny, hranice zrn, ...)

př. Nestechiometrie: redukce oxidů



- ad 1a) Ideální monokrytal při  $T > 0$ ; prázdna místa & atomy ve vakancích: koncentrace pouze teplotně závislá ( $f(T)$ )
- ad 1b) dotováni, nečistoty, pyloučeny (odmířeny), nestechiometrie, ...: koncentrace =  $f(T, \text{ložení})$

# Vnitřní bodové poruchy

Gibbsova energie monokrystatu

$$\Delta G(T) = \Delta H(T) - T\Delta S(T)$$

při 0K:  $\Delta H \approx E_k$  (energie krystatu)

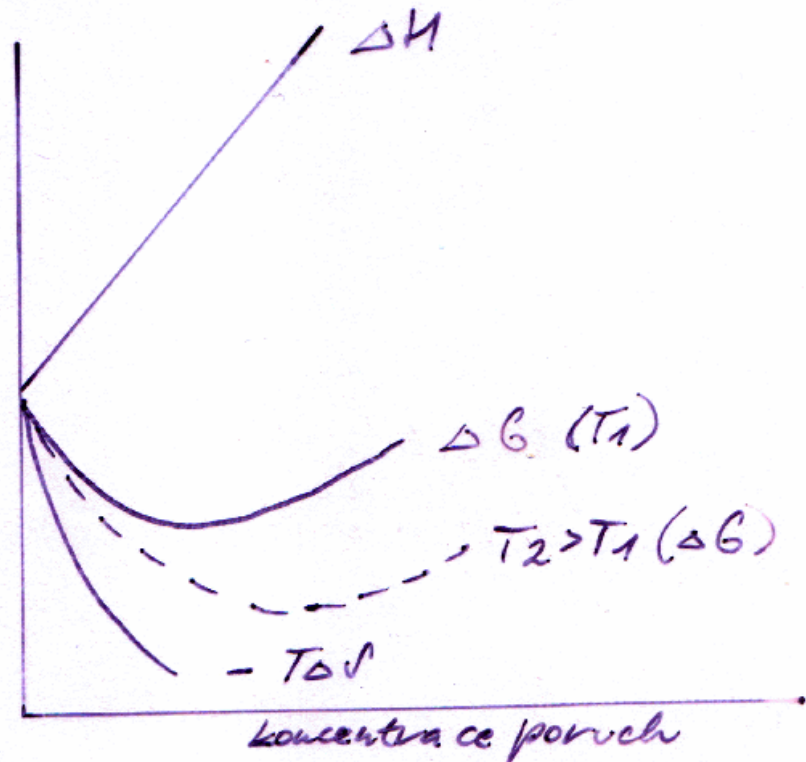
$$S = k \cdot \ln W = 0$$

$k$  - Boltzmannova konstanta

$W$  - pravděpodobnost stavu = 1 při 0K

při  $T > 0K$ : přivůstek  $\Delta H$  a  $\Delta S(T)$

$S = k \cdot \ln W$ ,  $\Rightarrow$  při velmi vysoké  $T$   
bude vliv  $\Delta S$  slabší



Obr. Rovnováha mezi bod. poruchami  
a mřížkovými vibracemi

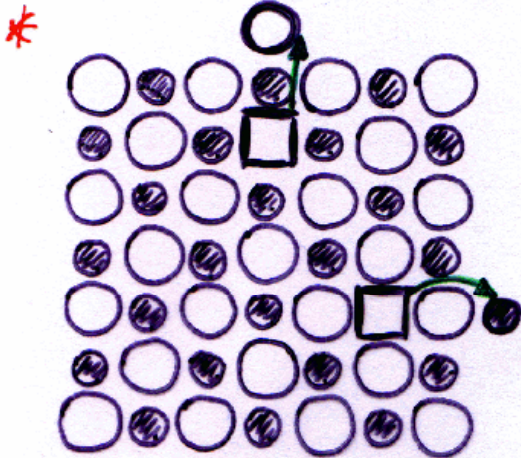


\* Schottkyho poruchy : vakance  $\square$

\*\* Frenkelovy poruchy : intersticiální atomy  $\bullet$

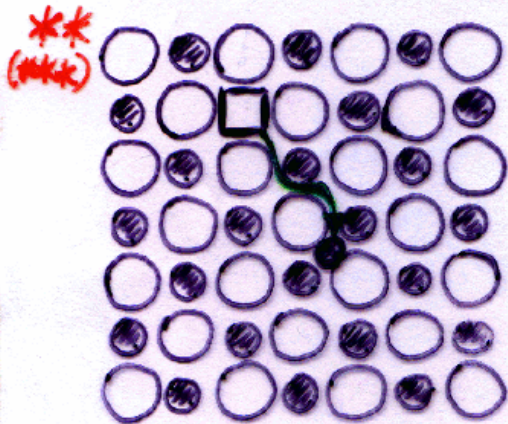
\*\*\* Frenkelovy páry : vakance + intersticiální atomy  $\square + \bullet$

migrační  
pohyb  
krytalem  
 $\begin{matrix} \square \rightarrow \\ \bullet \leftarrow \end{matrix}$



- probíhá v povrchové vrstvě
- vznikají vakance
- energetická náročnost (cca 1 eV), energie uhrazena z tepelných kmitů

$T$   
amplituda kmitů  
Emřížky, vakance

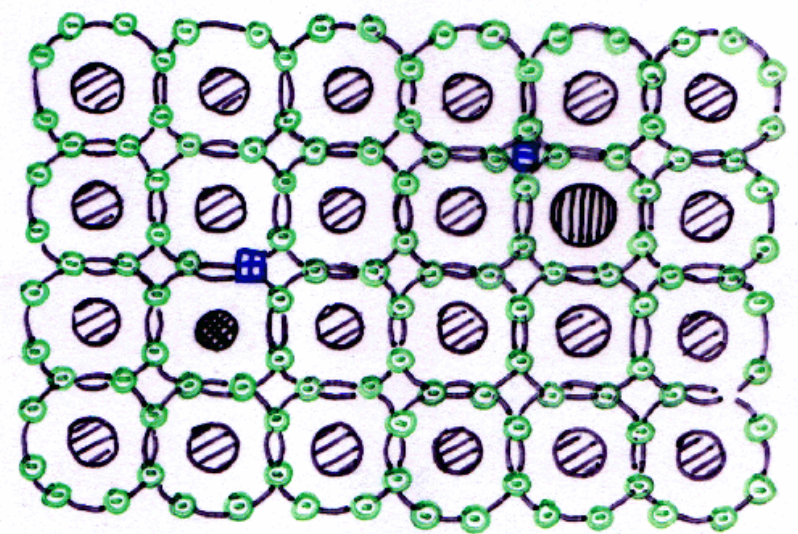


- probíhá uvnitř
- dvojice - vakance + int. atom
- obě složky se dále pohybují samostatně  $\Rightarrow$   
 $\Rightarrow$  rozpad na oba druhy poruch
- energetická náročnost (cca 2 eV), energie nelze uhradit jen z tep. kmitů -  
- vnitřní vnější zdroj (neutrony, částice E bohatě ap.)

Substituční dotování

$P^{+5}$  a  $B^{+3}$  v  $Si$

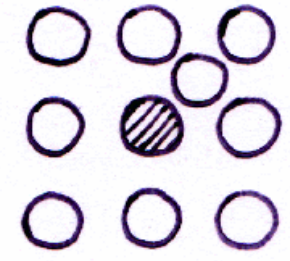
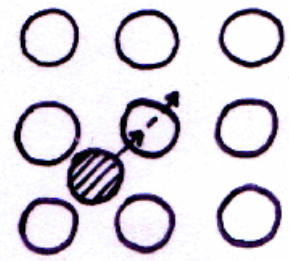
(Vnější)



Pozn.:



Body jsou důležité pro difúzi

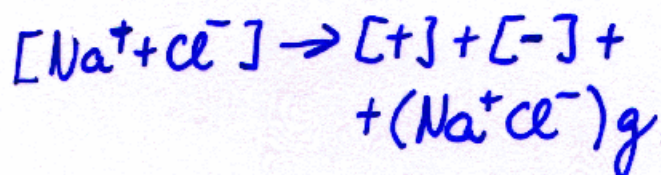




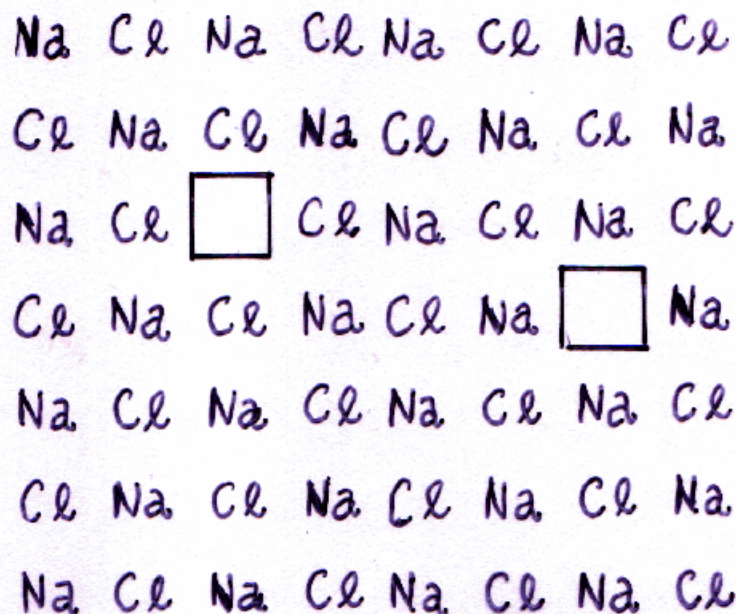
# příklady:

\*

## NaCl



Při 300K ca.  $10^{-15}$  poruch/atom  
tzn.  $10^4$ /1g NaCl



Protože se spolu odpařuje mnoho kationtů a aniontů, zůstává stechiometrie a nábojová elektroneutralita zachována.

Při vysokých koncentracích poruch nárůstá jejich nahromadění (kondenzace) či shluk následkem elastické přitažlivé síly případně snižováním  $\Delta G$  (asi 10 kJ/mol v NaCl)

\*\*

cizí atom s malým poloměrem v kovech  
např. (C v Fe) → kalení  
(tvrzení)

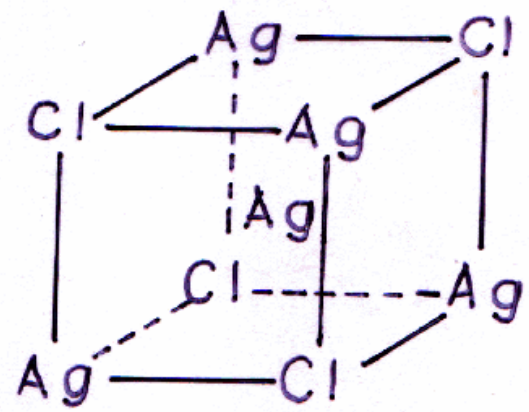
\*\*\*

AgCl

[Ag] → □ + Ag<sub>int.</sub>

Ag Cl Ag Cl Ag Cl Ag  
 Cl Ag Cl Ag Cl Ag Cl  
 Ag Cl □ Cl Ag<sup>Ag</sup> Cl Ag  
 Cl Ag Cl Ag Cl Ag Cl  
 Ag Cl Ag Cl Ag Cl Ag

a) Celkový obraz



b) Ag na vakantním místě  
tetraedricky koordinovaný  
4 Ag a 4 Cl

Stechiometrie a elektroneutralita  
zachovány. Kovalentní interakce  
se sousedy stabilizují porušené vř. Schottkyho poruše



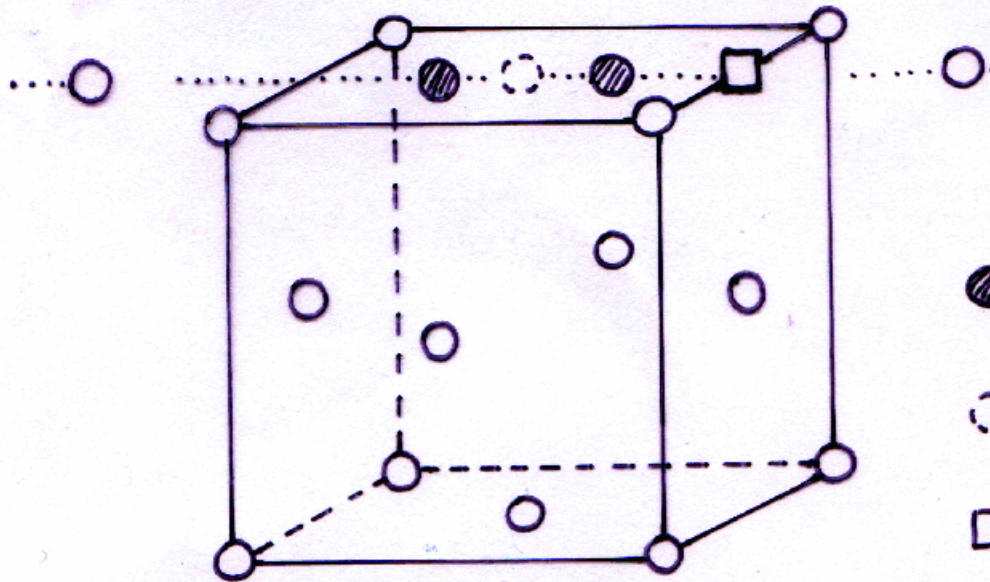
# Klastrové poruchy a agregáty

1. Bodové poruchy jako interstiční atomy a prázdná místa ovlivňují krystalickou mřížku v jejím okolí
2. Systém se pokouší snížit Gibbsovu energii tím, že vytváří větší klastrové poruchy a shluky

## ad 1) příklady

a) Pt-interstiční atomy v Pt kovu, kubickém, plošněcentrovaném (fcc):

"Ideální" vakantní místo v největším nabízeném místě je oktaedrická mezera ve středě hrany (viz. obr.). Energie systému je však nižší, když bude obvažená oktaedrická dutina zdeformována, čímž bude atom posunut ve směru středu plochy. Tam ležící Pt-atom tím bude rovněž posunut. Vznikne napnuté "činkutvořící" vakantní místo.



● interstiční atomy

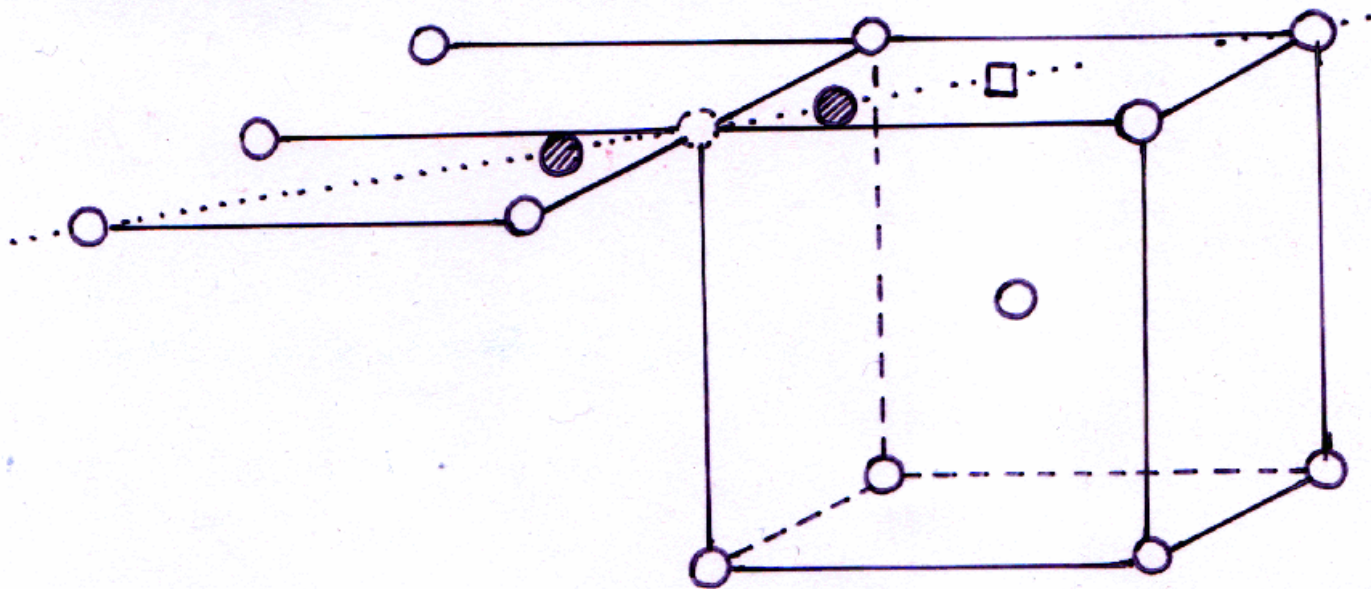
○ normálně obvažená místa  
mřížky

□ oktaedrická místa



b) Proutorově centrovaná kubická mřížka (např.  $\alpha$ -Fe):

Oktaedrická mezera se nachází ve středu plochy.  
Je-li, obdrazena interstičním atomem, je způsobe na rovněž  
deformace (viz. obr.) a tím posun interstičního atomu a  
mřížkového atomu ve směru  $[110]$ .

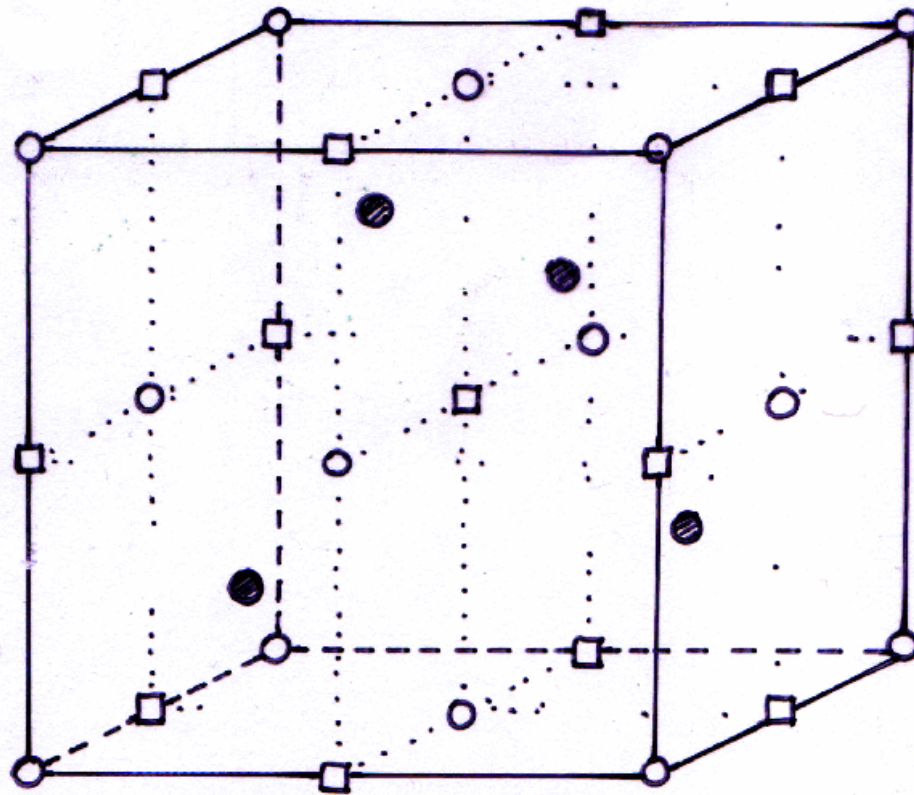


## ad 2) příklady

- Zdeformované oblasti horkotělné mřížky způsobené interakcím atomů vykazují tendenci k tvorbě shluků, neboť toto dále snižuje energii systému → klad struktury.
- Alkalický suboxid: Již malé podíly kyslíku v kovu vedou k tvorbě "oxidových klastrov" v kovu, které se v přebývajícím obsahu kyslíku vyvíjí do zase vyvíjejících strukturálních jednotek.
- Wustit:  $\text{Fe}_{1-x}\text{O}$ ,  $0 \leq x \leq 0,1$  (!ne  $\text{FeO}_{1+x}$ !)  
Anionty kyslíku tvoří kubickou nejtěsněji uspořádanou fcc-strukturu, ve které jsou obsazeny všechny aniontové polohy. Nedostatek Fe je kompenzován tvorbou  $\text{Fe}^{3+}$  místo  $\text{Fe}^{2+}$  (elektroneutralita).  
Systém by měl možnost statisticky obsadit "nejvhodnější" oktaedrická místa protřednictvím  $\text{Fe}^{2+}$  a  $\text{Fe}^{3+}$ .  
Ve skutečnosti se ale ionty  $\text{Fe}^{3+}$  v klastru nacházejí na tetraedrických místech.



# Kochův klaster v $Fe_{1-x}O$

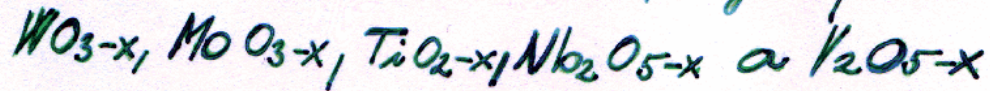


- ionty oxidu
- volná oktaedrická místa
- $Fe^{3+}$  na tetraedrických místech

# Rozsáhlé poruchy

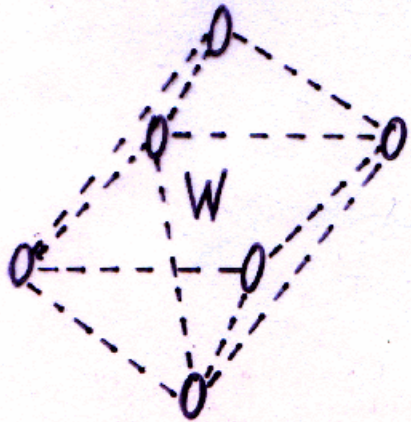
(extended defect) - krytalograficky porušené struktury se vyskytují ve většině nestechiometrických sloučenin  $A_n \cdot x B_m$ .  
Vyznačují se nestechiometrií "x" pro určitě obdaru jistých fází.  
Tyto fáze mají společné strukturální prvky, ale rozdílné doplňkové nadstruktury.

Př.: nestechiometrické oxidické Mangelovy fáze:

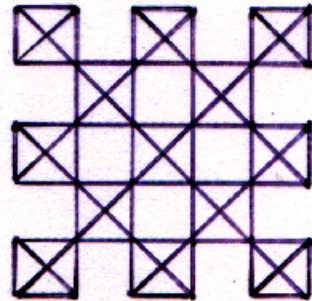


Uvažujme strukturálně jednoduchý  $\text{WO}_3$ . Stavební jednotka je  $\text{WO}_6/2$  oktaedr s jedním  $\text{W}^{6+}$  iontem ve středu; v krytalu jsou tyto oktaedry rohově spojeny a tvoří kubickou strukturu (obv. a). Je transparentním dielektrikem. Vlastnosti jsou v podstatě určeny nejbližšími sousedy (viz. kap. "Aproximace silně vázaného elektronu").  
Redukcí na  $\text{WO}_3-x$  chce systém eachovat tyto stavební jednotky →  
→ kyslíková prázdna místa se uspořádávají (obv. b) a prostřednictvím krytalografického kluzu (suntě) nastává homogórné spojené umístění celé krytalografické roviny (obv. c). Při nízké podstechiometrii x jsou tyto krytalografické kluzové roviny (KKR) statisticky rozděleny (Wadleyovy poruchy). Mohou také tvořit další struktury (obv. d pro  $\text{Mo}_n\text{O}_{3n-1}$ ,  $n=8, 12$  zru. " $\text{Mo}_8\text{O}_{23}$ "). S rostoucí koncentrací se KKR uspořádávají (také struktury d) a tvoří nadstruktury, které poskytnou v RTG rozptylu dodatečně reflexe k  $\text{WO}_3$ . Takové fáze opravdu existují, např. v rutilu o složení  $\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$  s  $n=3, 4, \dots, 10$ . Tak jsou  $\text{Ti}_8\text{O}_{15}$  ( $\text{Ti}_8\text{O}_{15}$ ) a  $\text{Ti}_9\text{O}_{17}$  ( $\text{Ti}_9\text{O}_{17}$ ) dvě rozdílné, avšak homogenní fáze.

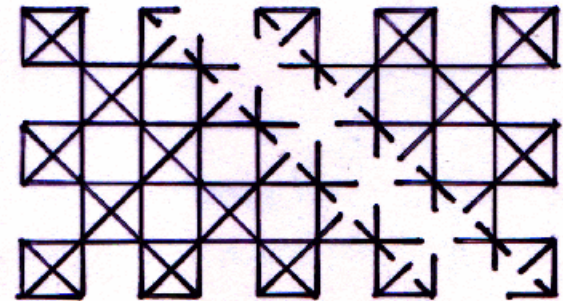




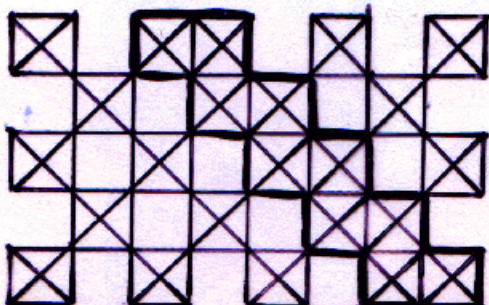
(a)



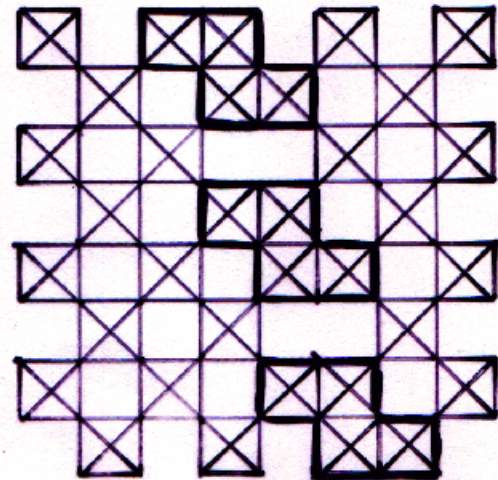
(b)



(c)



(d)



# Dislokace

Dislokace = čarová (jedno rozměrná) porucha

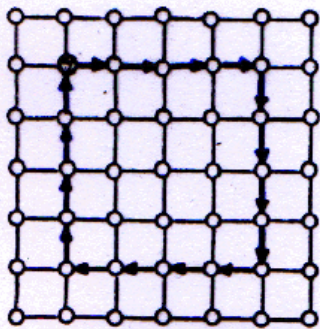
- představuje mírnou nepravidelnost v uspořádání částic krystalové mřížky
- kvantitativně charakterizována Burgersovým vektorem  $\vec{b}$ , který má hodnotu a směr kluzového kroku se zřetelem na dislokační čáru (tvorba Burgersovy smyčky)



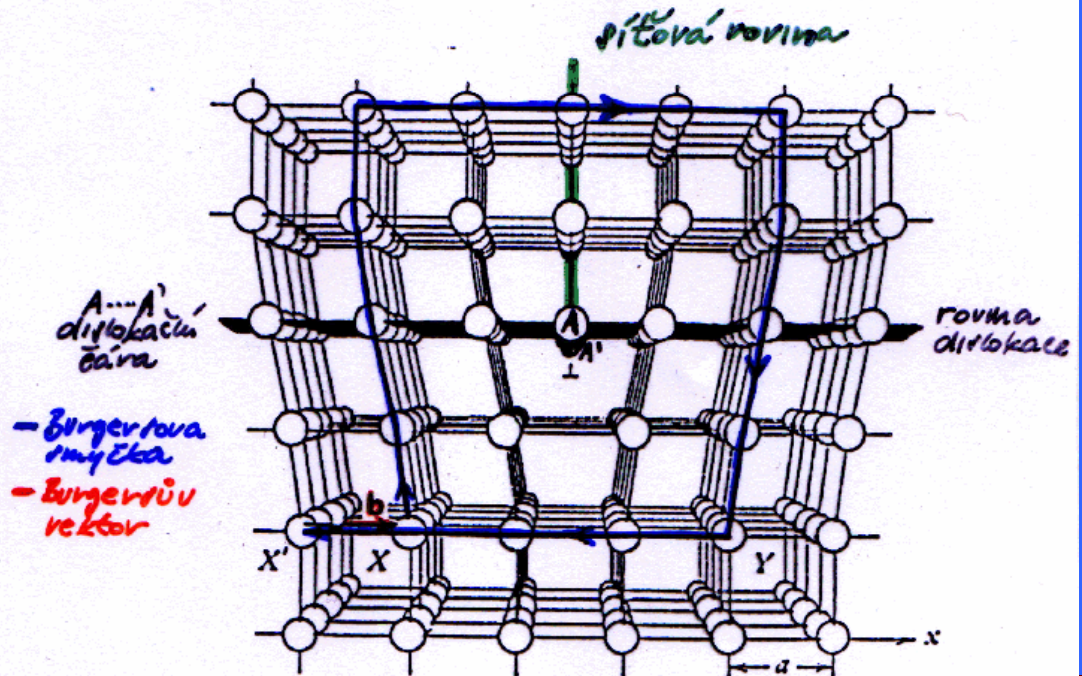
1. Hranová (stupňovitá) dislokace (např. v kubické mřížce):

≡ vsunutá (vysunutá) síťová rovina, nakloněná "dislokační čára"

**Burgers:** táhne se čára kolem čáry dislokacím o též počet a tomany kroků v každém krystalografickém směru. Toto bývá často překročeno a je uzavřeno Burgersovým vektorem  $\vec{b}$  (zde kolmý k dislokační čáře  $\Rightarrow$  značený  $\perp$ )



a) Neporušená část krystalu



b) Porušená část krystalu s hranovou dislokací

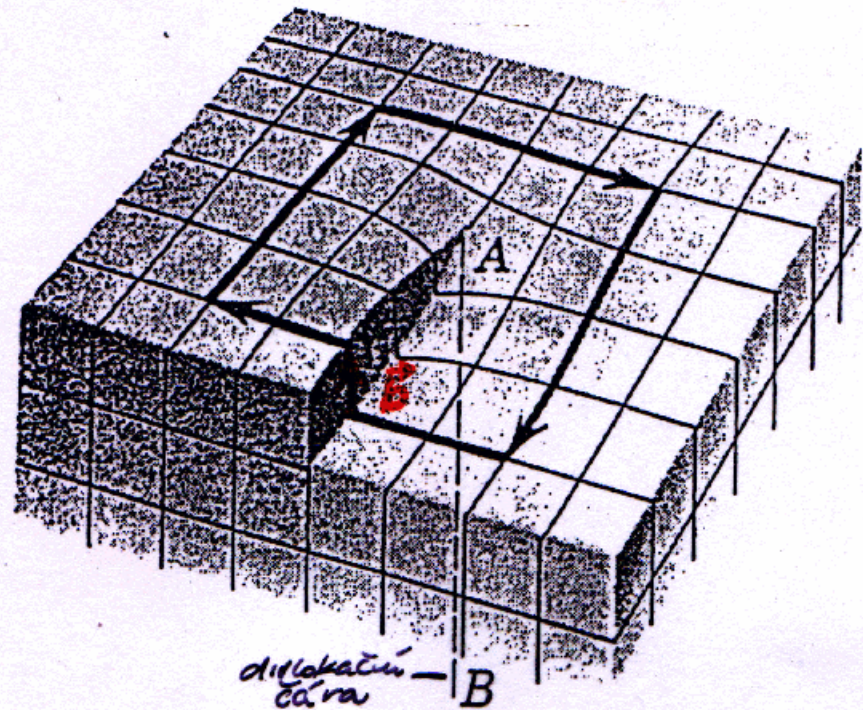


- Pozn.: - dislokace kladná  $\perp$  a záporná  $\top$  (vzniká rovina nad nebo pod rovinou dislokace)
- 2 rovnoběžné dislokace - stejného směru ( $\perp\perp$  nebo  $\top\top$ ) se odpuzují
  - opačného " $\perp$ " ( $\perp\top$  nebo  $\top\perp$ ) se přitahují
  - 2 dislokace opačného znaménka se při setkání v téže rovině anihiují (viz. později)

## 2. Šroubová dislokace:

- $\equiv$  vzniká porušením části krytálu do krytalogra s určitého směru  $A-B$   
 příslušný  $\vec{b}$  -  
 - (zde paralelně k  $AB \Rightarrow$   
 $\Rightarrow$  značením  $\odot$  nebo  $\otimes$   
 podle orientace )

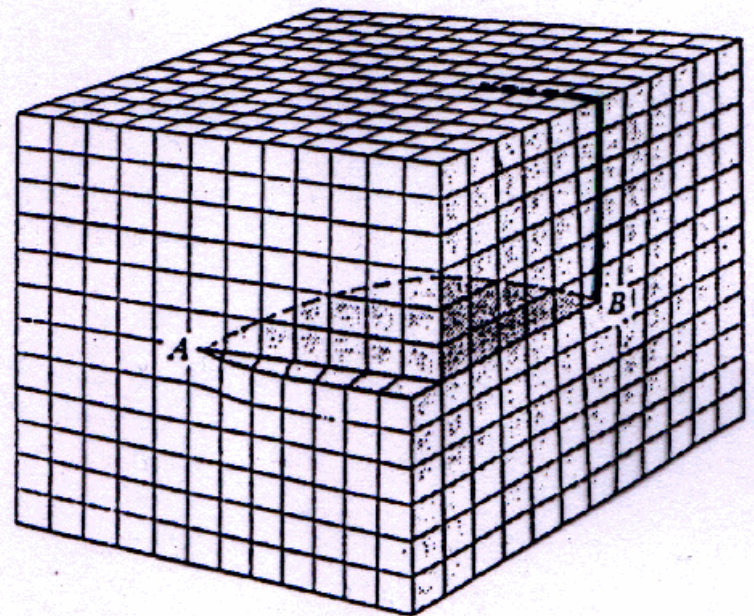
Pozn.: absence roviny dislokace





### 3. Smíšená dislokace:

≡ čistá šroubová dislokace  
v rovině A a hranová  
dislokace v rovině B.  
Mezi tím má dislokace  
směrný charakter



Pozn.: uvedené příklady - dislokace jednoduchá

Je-li  $\vec{b}_{dk.} = n \cdot \vec{b} \Rightarrow$  dislokace ušlechtilá

Je-li  $\vec{b}_{dk.} < \vec{b} \Rightarrow$  dislokace neúplná

Závěry: Atomové roviny v blízkosti dislokace deformovány  $\Rightarrow$   
 $\Rightarrow$  napětí v okolí dislokace (z velikosti lze stanovit  $E_{dnl.}$ )

$E_{dnl.} \gg E_{vak.}$

Dislokace nemohou vzniknout jako důsledek  
tepelných kmitů v krystalu



# Plošné poruchy

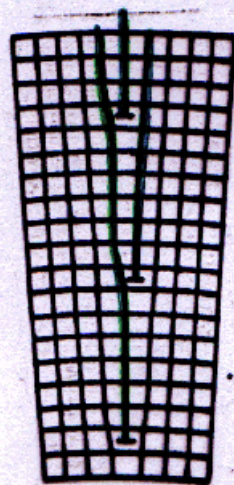
Domény, hranice (pod)zrn, vrstevné chyby  
≡ představují složitější povrchem mřížky, zabírající větší objem ( $\downarrow_x$   $\downarrow_z$ )

1. Domény: např. ve ferroelektrickém nebo feromagnetickém krystalu  
Totéž uspořádání atomů, ale rozdílná orientace elektrických dipolů (momentů), příp. spinů

2. Hranice podzrn (bloků): (viz. již u uvažování monokrystalů)

- mezi oblastmi se vzájemně málo rozdílnou orientací mřížky
- struktura hranice poměrně dokonale
- rovnoměrné nakupení hraničních dislokací; sítové roviny oddělují tzv. podzrna (dislokační hranice tj. hranice s malým úhlem tj. uspořádaná hranice)

Význam: pro výklad mechanických vlastností kovů a slitin





**Příklad:** v neideálním monokrystatu s danou orientací  
jednotlivých stěn monokrystatu.

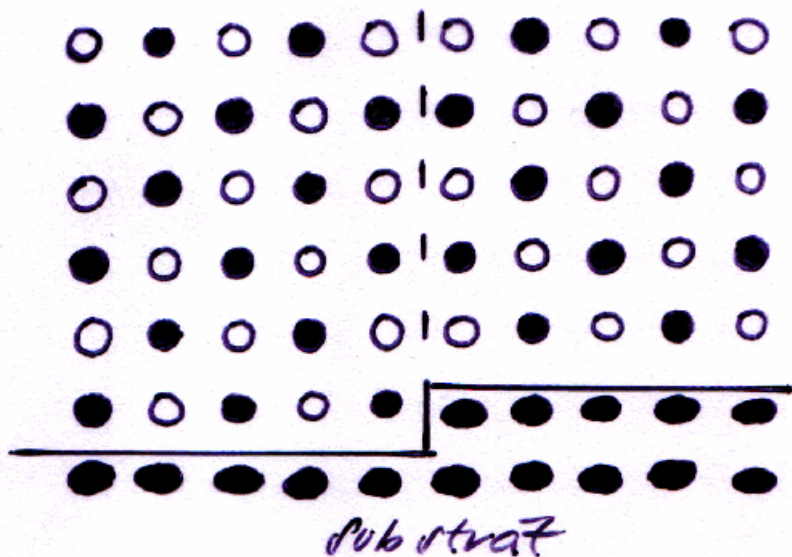
Vraťme elementární kryстал ( $\text{Si}$ ,  $\text{Fe}$ ,  $\text{Ni}$ , ...):

Když spolu rostou např. plochy krystatu (100) s plochami  
sousedního krystatu (100), vzniká tzv. "pohybově shodná  
mřížka", přičemž se atomy na hranici zcela snaží  
vytvořit tolik vazeb, kolik je možno. Tvorba mechanických  
pnutí a dislokací je ale nevyhnutelná.

### Anti fázová hranice

např. při epitaktickém růstu  
binární sloučeniny na povrchu  
substrátu s atomárními  
stupni rostou vedle sebe  
stejně atomy ( $\bullet \mid \bullet$ )  $\rightarrow$

$\rightarrow$  protistranné odpuzování,  
napětí v tahu, elektrické poruchy  
(GaAs ap.)



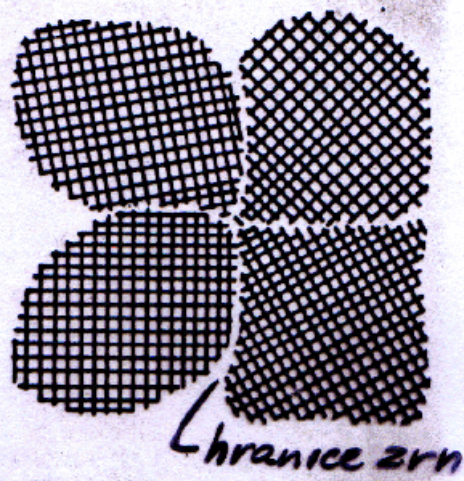


### 3. Hranice zrn: (viz. již u polykrystatu)

- mezi oblastmi se vzájemně dosti rozdílnou orientací mřížky
- struktura hranice neuspořádaného charakteru
- dislokace se přibližují, až se začnou překrývat
- vznik dalších poruch ( $\square, \bullet$ )  
⇒ velká koncentrace bodových a čárových poruch

čistý kov  $\xrightarrow[\text{množství poruch}]{\text{růst}}$  technický kov, slitina

(hranice s velkým úhlem)



- Význam:
- vliv na chemické, fyzikální a mechanické vlastnosti (chemické reakce - koroze, oxidace - především na hranicích)
  - vliv na difúzi (po hranicích rychleji než uvnitř zrn)
  - ! pohyb dislokací (např. při plastické deformaci)  
Zastavování na hranicích

(viz. později)



## 4. Vrstevné chyby: odchylna od normálního vrstevní roviny v krystalu -

- vyšívání nebo vsouvání některé nebo jiné roviny

Jednoduchý: nejčastější u spojářů  
typický pří.

- atomová vrstva A, další může být B nebo C
- sled rovin: ABCABCABC... = nejčastější kubické  
ABABAB... = hexagonální
- když se při růstu krystalu pořadí náhle změnilo, např. ABCABCABC... vzniká tato chyba, ...BCB... hexagonální
- tvorba vrstevných chyb je zvláště častá u SiC a příčinou pro zvláště lehké polytypy:
  - Stavbu jednotka je dvojitá z SiC<sub>1/4</sub> tetraedru

■ nejdůležitější polytypy:

3C-SiC: ABCABC... kubický,  $E_g = 2,39 \text{ eV}$

6H-SiC: ABCABCABC... hexag.,  $\approx 3,02 \text{ eV}$

4H-SiC: ABABAB...  $\approx 3,26 \text{ eV}$

pozn.:  $E_{\text{ven}}^{\text{řad}} < E_{\text{H2}}$ , ovlivňuje ale polyb difúzí např. při plastické deformaci kovů



## Vrstevné chyby a dislokace v grafitu

Grafit byl používán jako moderátor neutronů v prvních jaderných reaktorech. Ve srovnání s tekoucí vodou, vyšší faktor neutronového náboje v grafitem moderovaném reaktoru je též předností při výrobě tritia pro jaderné zbraň. Ovšem na druhou stranu, grafitem moderovaný reaktor vykazuje přirozenou nestabilitu při ztrátě chladičí vody (Černobyl  $\leftrightarrow$  Three Mile Island).

Grafit má hexagonální strukturu (ABABAB ...); rozdělené vrstevné bazální roviny a prismové roviny s převážně  $C-C$  vazbami na krystalových plochách (v.d.W.).

Při provozu jsou atomy uhlíku vyraženy v dipledku  
 škodlivého záření z rovinných poloh a kondenzují  
 mezi bazálními rovinami, kde se tvoří nové baz. roviny (viz. obr.).  
 Tyto vlnuté krytalové roviny vůči hexagonálnímu pořadí,  
 např.  $ABAB \text{ } \ominus \text{ } ABAB$  a vedou k vrstevným chybům.

Pozn.: okraj vlnuté bazální roviny je "prizmová" rovina s  
 neodrycenými C-vazbami  
 Jedná se o dislokaci

