



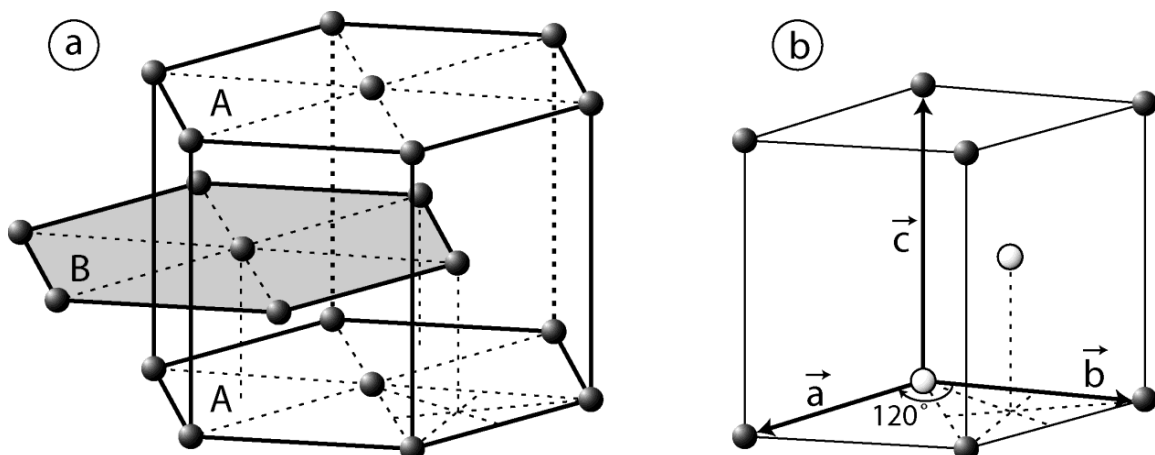
Vysoké učení technické v Brně

KRYSTALOVÁ STRUKTURA PEVNÝCH LÁTEK

Tomáš Kruml

Jean-Pierre Michel

verze 2017



OBSAH

1. ÚVOD	3
2. KRYSTAL VE DVOU DIMENZÍCH	4
3. KRYSTAL VE TŘECH DIMENZÍCH	8
4. KRYSTALOVÁ STRUKTURA KOVŮ	15
5. RECIPROKÝ PROSTOR	26
6. STEREOGRAFICKÁ PROJEKCE	30
7. SHRNUTÍ	41
PŘÍLOHA 1: KVAZIKRYSTALY	42
PŘÍLOHA 2: MILLEROVY INDEXY U HEXAGONÁLNÍ SOUSTAVY	45
PŘÍLOHA 3: FYZIKÁLNÍ DEFINICE RECIPROKÉHO PROSTORU	46
PŘÍLOHA 4: RECIPROKÝ PROSTOR V ELEKTRONOVÉ DIFRAKCI	47
PŘÍLOHA 5: VYPLNĚNÍ PROSTORU TUHÝMI KOULEMI	48
ŘEŠENÍ CVIČENÍ Z TEXTU	49

1. ÚVOD

Uspořádání atomů v pevné látce má velmi důležité důsledky pro její vlastnosti. V zásadě existuje buď 1. náhodné, nepravidelné uspořádání atomů – pak hovoříme o amorfních nebo skelných fázích, anebo 2. pravidelné, periodicky se opakující uspořádání v případě krystalů. Třetí, poněkud exotickou možností, je uspořádání kvazikrystalické.

Kovy se vyskytují převážně v krystalické formě a každému typu mřížky, ve které krystalizují, lze přiřadit (alespoň kvalitativně), určité vlastnosti. Například fcc kovy jsou dobře plastické v celém oboru teplot, bcc kovy vykazují křehce-tvárný přechod, hcp polykrystalické kovy jsou často křehké a deformují se dvojčatěním.

Každý reálný krystal obsahuje nemalé množství poruch. Jejich vlastnosti a koncentrace také výrazně ovlivňují vlastnosti daného materiálu. V tomto textu však budeme uvažovat pouze dokonalé krystaly.

Přestože vzdálenosti mezi atomy v krystalové mřížce se pohybují okolo 2×10^{-10} m, některé projevy krystalické povahy materiálů jsou pozorovatelné i pouhým okem. Přírodní krystaly (např. křišťál) mají přesně definované úhly mezi svými stěnami, což souvisí s mechanismy růstu krystalu. Jsou to úhly mezi nízkoindexovými rovinami dané krystalové mřížky.

V první kapitole jsou v maximální stručnosti zopakovány některé základní pojmy z krystalografie na příkladu krystalu ve dvou dimenzích. Ve druhé kapitole je uvažovaný prostor rozšířen o třetí rozměr. Dále jsou podrobněji popsány 3 nejčastěji se vyskytující krystalové struktury: krychlová plošně centrovaná (fcc), krychlová prostorově centrovaná (bcc) a hexagonální těsně uspořádaná (hcp). Na závěr jsou probrány dva nástroje nezbytné pro studium krystalové stavby materiálů: stereografická projekce a reciproký prostor.

Všechny technické termíny mají v závorce uveden svůj anglický ekvivalent.

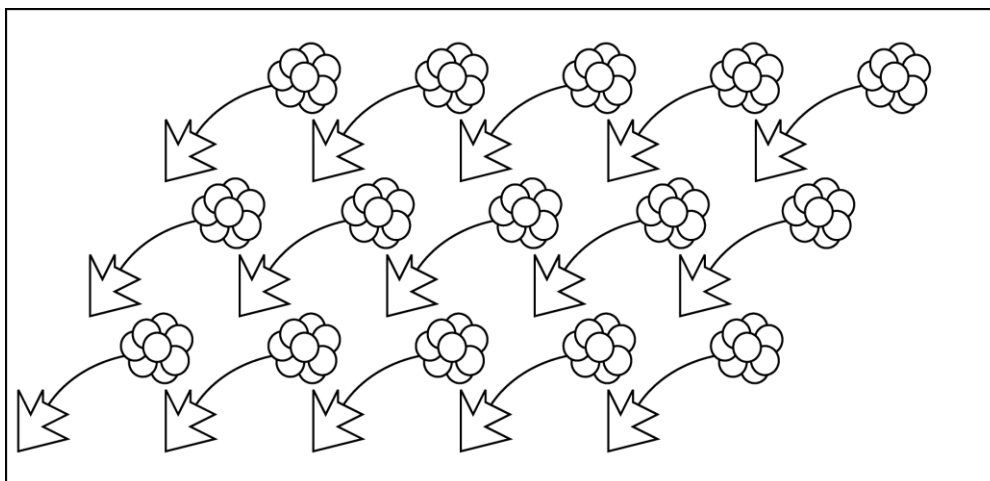
Tato skripta vznikla ve spolupráci s prof. Jean-Pierrem Michelem na Ecole des Mines v Nancy.

2. KRYSTAL VE 2 DIMENZÍCH

Velmi stručně zde uvedeme základní pojmy krystalografie, z důvodu názornosti na příkladech ve 2D.

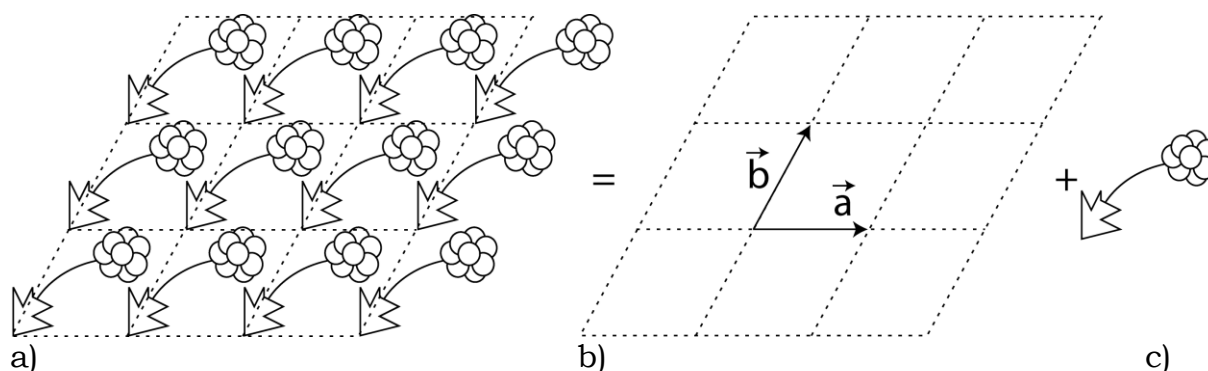
2.1 Mřížka, báze

Krystal (*crystal*) se tradičně chápe jako periodicky uspořádaná struktura. Tato definice je upřesněna v 1. příloze. Nejprve budeme charakterizovat periodickou strukturu na obr. 2.1.



Obrázek 2.1: Krystal ve 2D.

Tento krystal lze vytvořit kombinací krystalové mřížky (*crystal lattice*) a báze (*basis*, obr. 2.2).



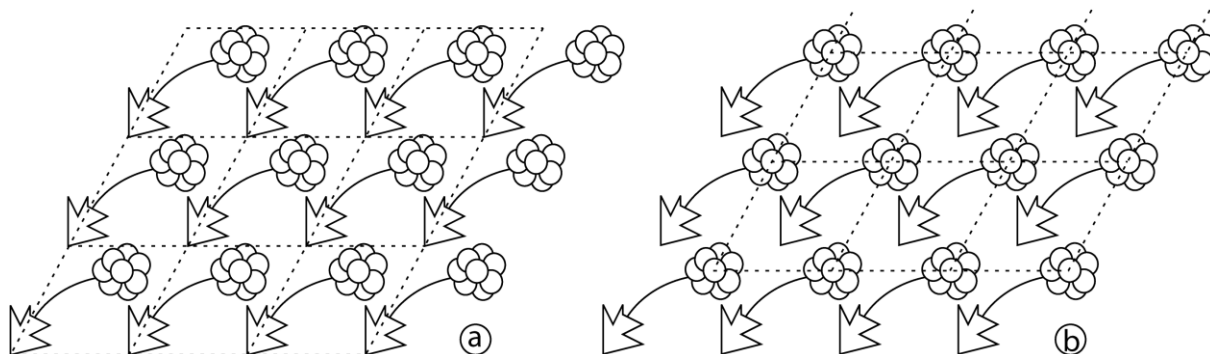
Obrázek 2.2: a) krystal ve 2D
b) krystalová mřížka s translačními vektory \vec{a} a \vec{b}
c) báze

- Mřížka (obr. 2.2b) je množina mřížkových uzlů (*node*) získaná translací základní buňky (*unit cell*) o násobek translačních vektorů (*translation vectors*) \vec{a} a \vec{b} .
- Báze (obr. 2.2c) je uspořádání atomů v okolí každého uzlového bodu, které má svoji vlastní symetrii nezávislou na symetrii mřížky.

Poznámky:

1. Mřížka zůstává stejná, ať zvolíme její počátek v kterémkoli bodě (obr. 2.3a, b). Uspořádání atomů v okolí uzlového bodu se změní, avšak celkový počet atomů každého druhu v základní buňce zůstává stejný.

2. Vektory \vec{a} a \vec{b} jsou také nazývány základní mřížkové vektory, vektory translační identity apod.



Obrázek 2.3: Dva způsoby volby krystalové mřížky.

2.2 Definice

- Translační vektory: \vec{a} a \vec{b}
- Mřížkový uzel:
Uzel u, v je bod definovaný vektorem

$$\vec{s} = u\vec{a} + v\vec{b},$$

kde u a v jsou celá čísla.

- Krystalografický směr (crystallographic direction):
Krystalografický směr $[u\ v]$ je množina přímek procházejících uzlovými body, rovnoběžných s přímkou, která protíná počátek a uzel u, v . Indexy u, v se volí jako nejmenší možná celá čísla, např. místo označení $[4\ 2]$ se používá $[2\ 1]$.
- Parametr směru $[u\ v]$:
Vzdálenost mezi sousedními uzly u, v .
- Primitivní buňka (elementary cell):
Buňka s nejmenší možnou plochou, jejímž opakováním lze vytvořit danou mřížku.
- Složená buňka (multiple cell):
Nechť vektory \vec{a} a \vec{b} definují primitivní buňku. Za translační vektory lze vybrat vektory \vec{a}' a \vec{b}' pro které platí:

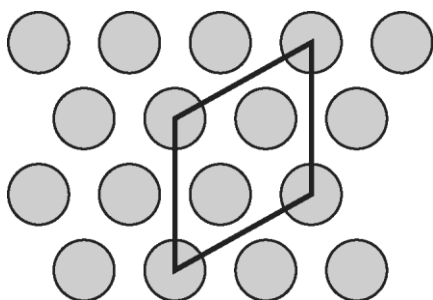
$$\begin{aligned}\vec{a}' &= u\vec{a} + v\vec{b} \\ \vec{b}' &= u'\vec{a} + v'\vec{b}\end{aligned}$$

Získaná buňka se nazývá složená anebo násobná buňka řádu p , je-li její plocha p -násobek plochy primitivní buňky. Složené buňky by se neměly používat pro definici báze.

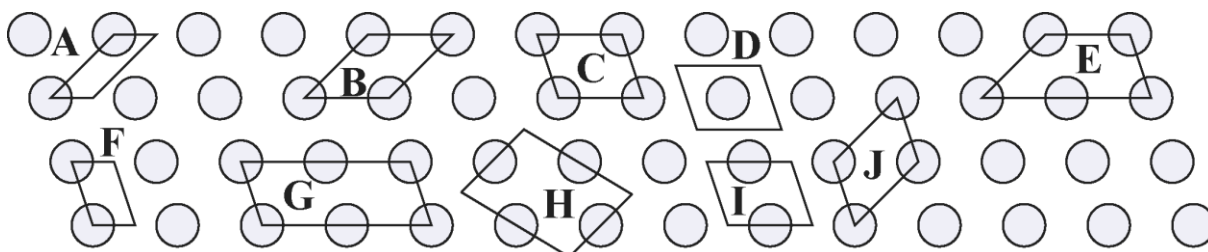
Cvičení 1. (správná řešení všech cvičení jsou uvedena na konci skript)

- Jakého řádu je složená buňka na obr. 2.4?
- Které buňky na obr. 2.5 jsou primitivní a které složené?
- Které čtverce na obr. 2.6 lze použít jako základní buňky?
- Obrázek 2.6:
 - Z kolika malých atomů je složena báze tohoto krystalu?
 - A z kolika velkých?
 - Jsou znázorněné buňky primitivní?
- Obrázek 2.7:

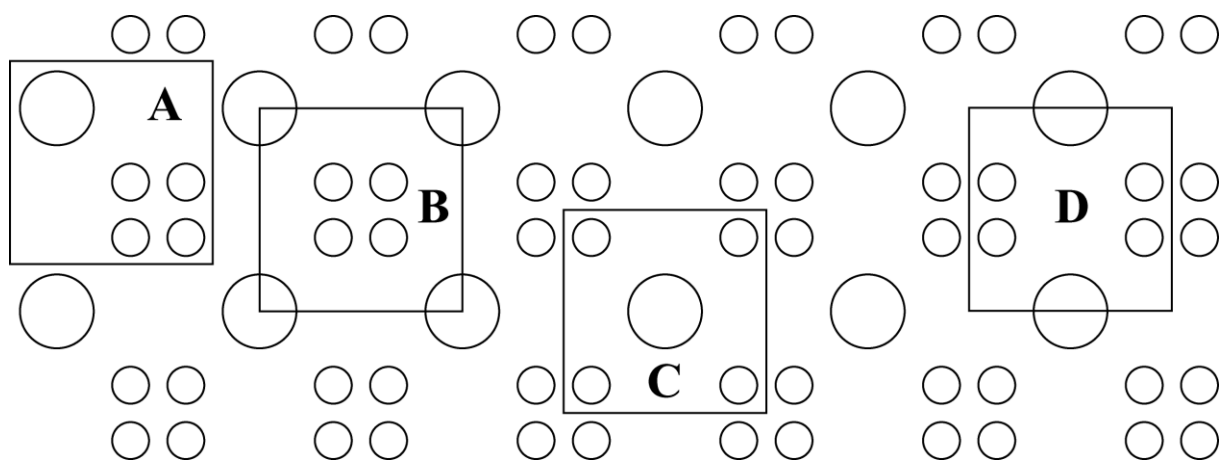
Určete typ 2D mřížky a zvolte primitivní buňku a motiv. Je-li to vhodné, zvolte navíc i některou násobnou buňku a určete její řád.



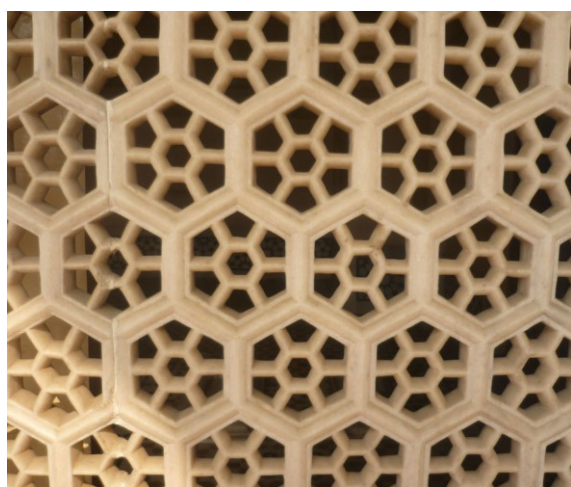
Obrázek 2.4



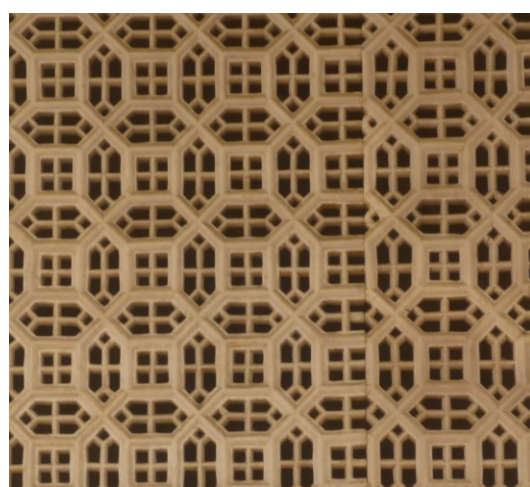
Obrázek 2.5



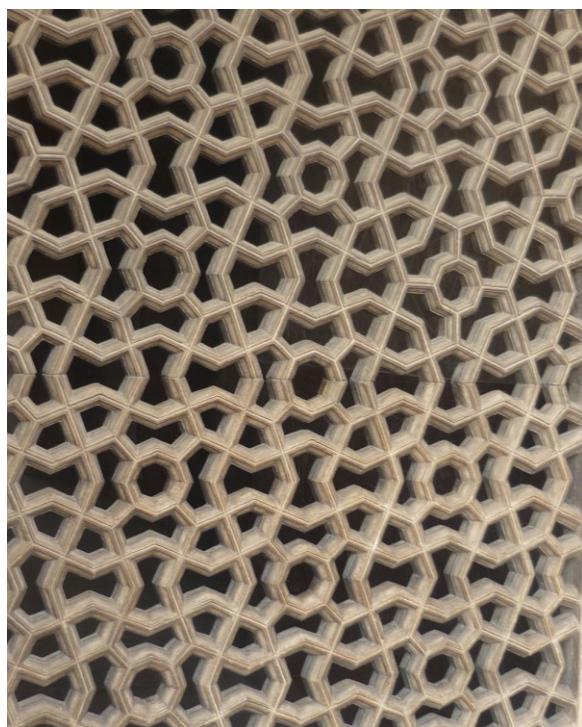
Obrázek 2.6



a)



b)



c)



d)

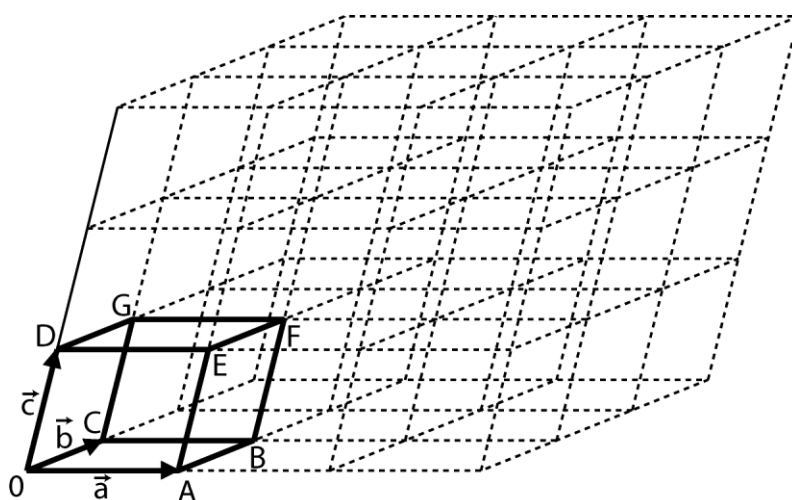
Obrázek 2.7 a), b) Akbarova hrobka, Agra. c), d) Humayunova hrobka, Delhi.

3. KRYSTAL VE TŘECH DIMENZÍCH (3D)

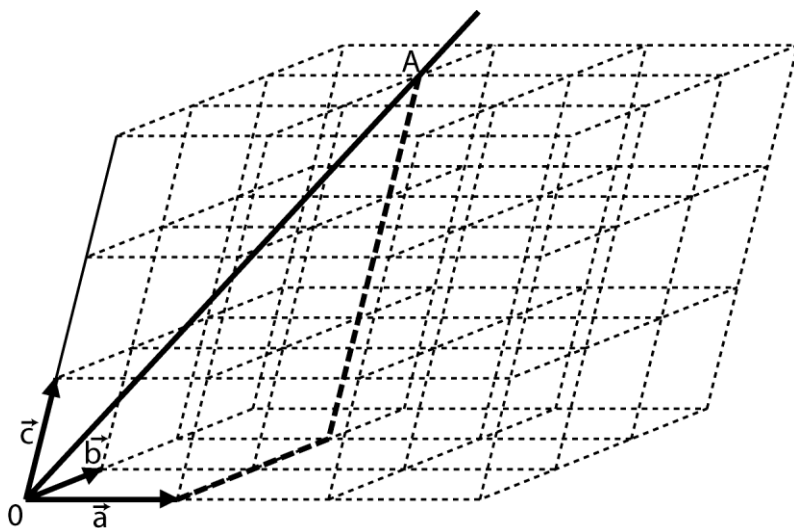
3.1 Mřížka (Obrázky 3.1 a 3.2)

Definice:

- Translační vektory: \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- Uzlové body:
Uzlový bod u, v, w se nachází na konci vektoru
 $\vec{s} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
Př.: bod A na obr. 3.1b je uzlový bod 1,2,3.
- Krystalografický směr:
Krystalografický směr $[u\ v\ w]$ je množina přímek procházejících uzlovými body, rovnoběžných s přímkou, která protíná počátek a uzel u, v, w . Indexy u, v, w se volí jako nejmenší možná celá čísla a nazývají se Millerovy indexy.
Př.: přímka OA udává směr $[1\ 2\ 3]$.
- Parametr směru $[u\ v\ w]$:
Vzdálenost mezi sousedními uzly u, v, w .
- Primitivní buňka:
Rovnoběžnostěn definovaný translačními vektory \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , jehož objem $V_D = |(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})|$ je minimální.
Př.: 0ABCDEFG (obr. 3.1 a).
- Složená buňka:
Buňka definovaná translačními vektory \vec{a}' , \vec{b}' , \vec{c}' , které jsou lineární kombinací translačních vektorů primitivní buňky \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} . Její objem $V' = p \cdot V_D$ definuje řád násobnosti buňky p .



Obrázek 3.1 a: Trojrozměrná mřížka s translačními vektory \vec{a} , \vec{b} a \vec{c} . Primitivní buňka: rovnoběžnostěn 0ABCDEFG.



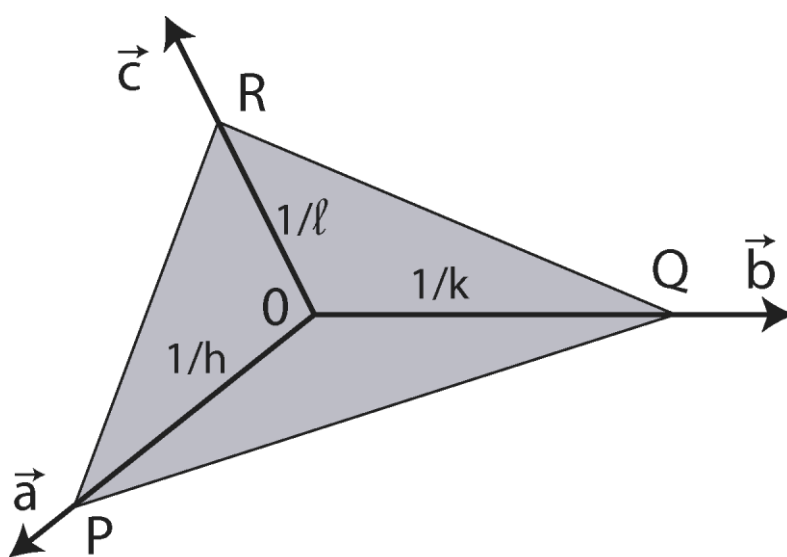
Obrázek 3.1 b: Trojrozměrná mřížka. Bod A je mřížkový uzel 1,2,3. Směr OA reprezentuje krystalografický směr [1 2 3]. Parametr směru [1 2 3] je roven vzdálenosti OA.

- Krystalografické roviny (crystallographic planes):
Rovina procházející třemi uzlovými body neležícími na stejné přímce se nazývá krystalografická rovina. Taková rovina protíná zvolené krystalografické osy v bodech P, Q a R (obr. 3.2).

Vektor $\vec{0P}$ můžeme napsat jako: $\vec{0P} = \frac{\vec{a}}{h}$; obdobně $\vec{0Q} = \frac{\vec{b}}{k}$ a $\vec{0R} = \frac{\vec{c}}{\ell}$.

Tato rovina je definována trojicí Millerových indexů (h k ℓ), kde h, k a ℓ se volí jako trojice nejmenších nesoudělných celých čísel.

Zápis (h k ℓ) označuje celou množinu rovin, které jsou vzájemně rovnoběžné a procházejí všemi uzlovými body mřížky.



Obrázek 3.2: Definice Millerových indexů (h k ℓ) pro krystalografickou rovinu.

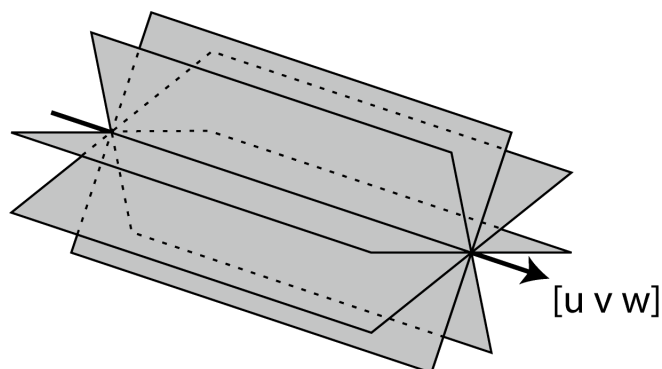
Poznámky:

1. záporné indexy se označují horizontální čarou nad číslem: např. index mínus jedna se zapisuje $\bar{1}$.
2. Krystalografický směr se od vektoru liší tím, že nemá definovanou velikost ani působíště. Často nezáleží ani na jeho orientaci.

Cvičení 2: Uvažujme mřížku krychlovou prostou. Do primitivní buňky zakreslete tyto roviny: (100), (110), (111), (211), ($2\bar{1}0$), (220).

Vzdálenost mezi sousedními rovinami patřícími do množiny rovin (h k l) se nazývá mezirovinná vzdálenost (*interplanar distance*).

Roviny, které se protínají v jedné přímce, se nazývají zonální roviny; přímka, která jim je společná je osa zóny (*zone axis*, obr. 3.3).



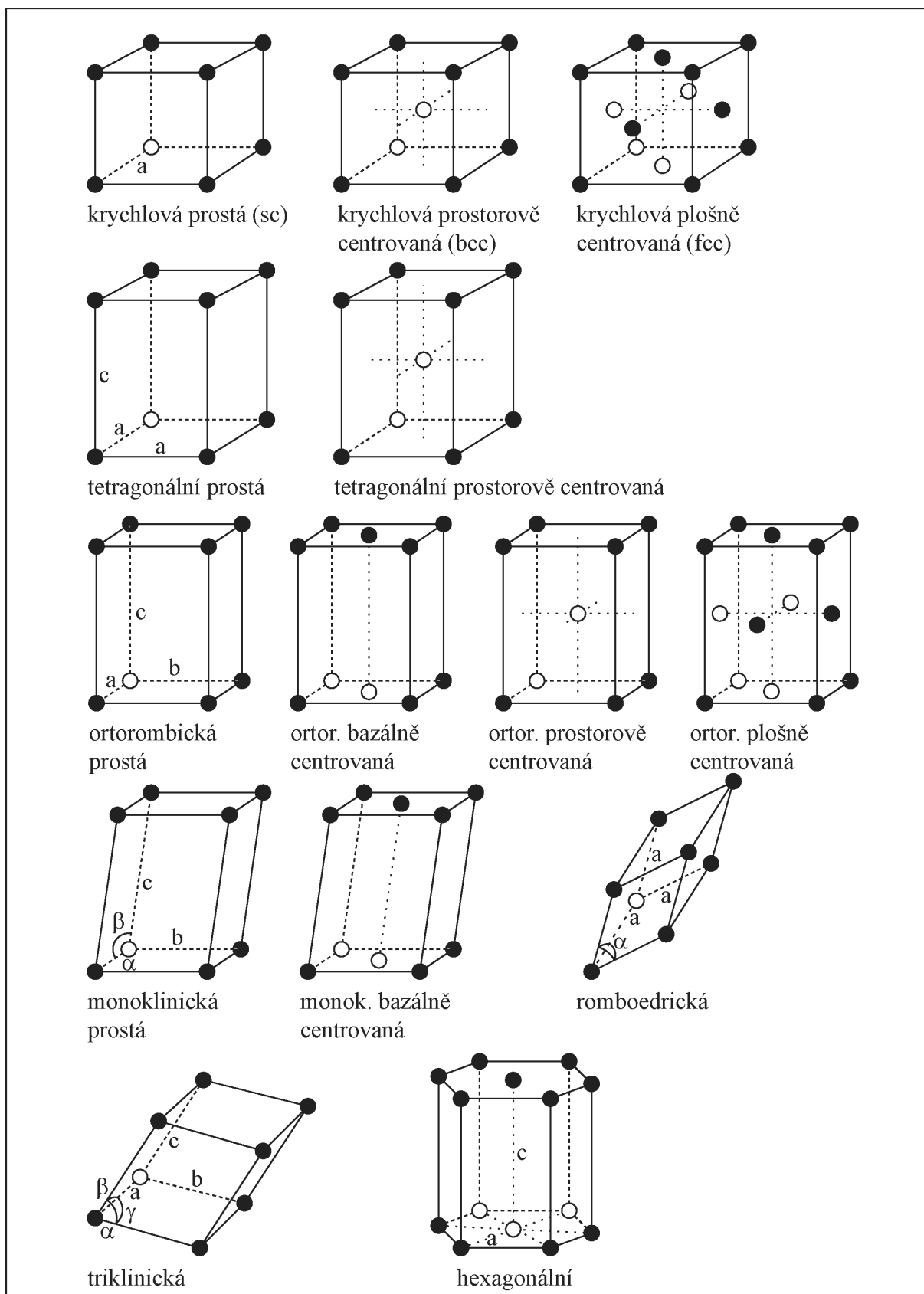
Obrázek 3.3: Osa zóny [u v w].

3.2 Bravaisovy mřížky (*Bravais lattices*)

Omezme se nyní jen na takové krystaly, které mají jako bázi jediný atom. Auguste BRAVAIS ukázal, že v tom případě existuje 14 způsobů, jak vytvořit prostorovou periodickou mřížku (obr. 3.4). Tyto mřížky se nazývají Bravaisovy a vzájemně se liší operacemi symetrie, které se u nich vyskytují. Bravais zvolil takové základní mřížky, které nejlépe znázorňují své symetrie; některé z nich jsou proto primitivní a některé složené. Pro primitivní buňky platí, že na jednu buňku připadá jeden mřížový bod. Těchto 14 mřížek je odvozeno ze 7 základních polyedrů, které jsou také označovány jako 7 krystalografických soustav a které jsou charakterizovány translačními vektory a úhly mezi nimi – viz. tabulka 3.1.

Soustava	Charakteristika mřížky	Volné parametry
Krychlová (<i>cubic</i>)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a
Tetragonální (<i>tetragonal</i>)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a, c
Ortorombická (<i>orthorhombic</i>)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a, b, c
Romboedrická (<i>rhombohedral</i>)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	a, α
Monoklinická (<i>monoclinic</i>)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	a, b, c, β
Triklinická (<i>triclinic</i>)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$
Hexagonální (<i>hexagonal</i>)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	a, c

Tabulka 3.1: Charakteristiky 7 krystalografických soustav.



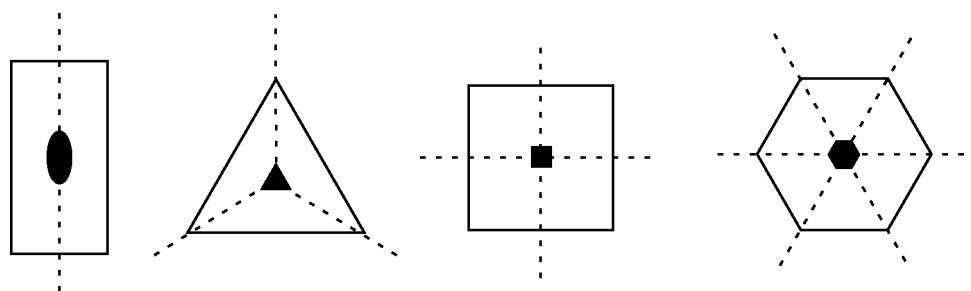
Obrázek 3.4: 14 Bravaisových mřížek.

3.3 Operace symetrie (*elements of symmetry*)

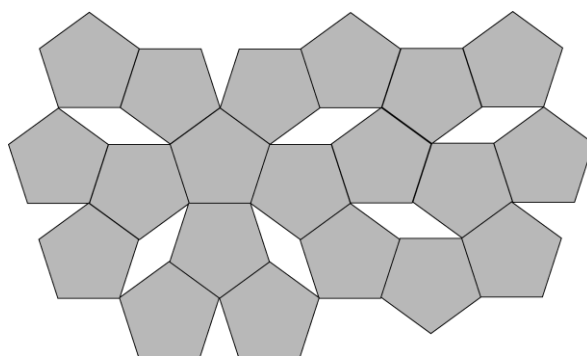
Během operace symetrie se změni polohy jednotlivých atomů tak, že krystalová struktura zůstává nezměněna. Rozeznáváme jednak operaci mřížkové translace, jednak operace, které ponechávají alespoň jeden bod na svém místě a nazývají se proto bodové operace symetrie. Jsou celkem 4:

1. rovina zrcadlení (*mirror plane*): Krystal rozdělíme pomyslnou rovinou na dvě části. Pokud jedna část krystalu je zrcadlovým obrazem druhé, jedná se o rovinu symetrie (nebo rovinu zrcadlení).
2. osa rotace (*rotation axis*): Pokud rotace krystalu o úhel $2\pi/n$ nezmění polohu mřížkových uzlů, jedná se o osu rotace řádu n (nebo n -čtetnou osu). U periodických struktur je možné nalézt osy rotace řádu 2, 3, 4 a 6 (obr. 3.5). Naopak, osy rotace řádu 5 (obr. 3.6) ani řádů vyšších než 6 u periodických struktur existovat nemohou.
3. střed symetrie (*center of symmetry*): symetrie vzhledem k jednomu bodu.
4. osa rotace-inverze (*rotation-inversion axis*): symetrie po rotaci a následující projekci přes střed symetrie.

V dalších částech budeme pracovat pouze s dvěma prvními operacemi symetrie.



Obrázek 3.5: Osy rotace řádu 2, 3, 4 a 6 a symboly, které se používají k jejich označení. Osy rotace procházejí středem každého geometrického obrazce a jsou kolmé k rovině papíru (příklad ve 2D).



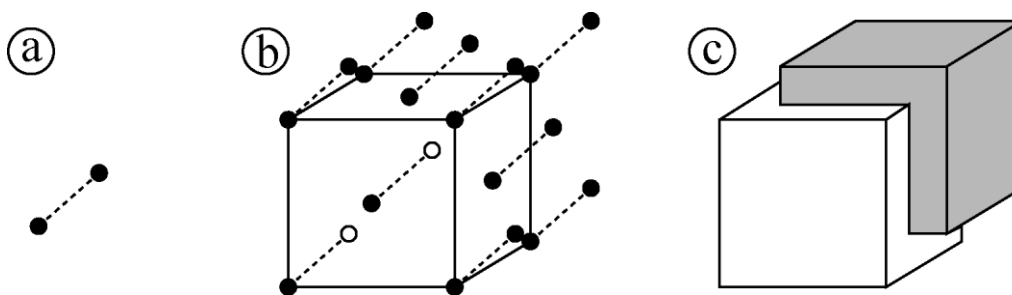
Obrázek 3.6: Předpokládejme, že existuje pětičetná osa rotace a v její blízkosti se nachází mřížkový uzel. Tento uzel po rotaci postupně o úhel $2\pi/5$ se nachází na vrcholech pravidelného pětiúhelníku. Pokud chceme nyní vytvořit periodickou strukturu, musíme být schopni pokrýt pětiúhelníky rovinu papíru. Protože to není možné, viz. obrázek, dosáhli jsme sporu s původním předpokladem (příklad ve 2D).

Poznámka: Někdy se uvádí, že pětičetná osa rotace nemůže v přírodě existovat, to je ovšem pravda jen v případě periodických struktur. Osa rotace řádu 5 se vyskytuje se u kvazikrystalů, stejně jako osy rotace řádu 10, 12 a dalších (příloha 1). Organické molekuly mohou mít osy rotace jakéhokoli řádu, protože to jsou individuální objekty. Některé dosud nepotvrzené teorie také předpokládají, že kapaliny jsou složeny z malých atomových (molekulových) klastrů s pětičetnou symetrií.

3.4 Báze

Báze se skládá z atomů, iontů nebo molekul a může být invariantní k vlastním operacím symetrie. Matematicky jsou možné krystalové mřížky popsány pomocí teorie grup. Pokud zkombinujeme 14 Bravaisových mřížek (14 translačních grup) s možnými bázemi s vlastními symetriemi (32 bodových grup), dostaneme 230 tzv. prostorových grup (*space groups*) a tedy 230 možností, jak uspořádat periodicky atomy pevné látky v 3D.

Příklad: Diamant krystaluje v mřížce fcc. Báze je tvořena dvěma atomy o polohách $0,0,0$ a $\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}$, tedy vzdálených o $\frac{1}{4}$ tělesové úhlopříčky (obr. 3.7).



Obrázek 3.7: Diamantová struktura (*diamond structure*): báze (a) složená ze 2 atomů aplikovaná na mřížku fcc (b). Diamantovou strukturu si také můžeme představit jako 2 mřížky fcc posunuté o $\frac{1}{4}$ tělesové úhlopříčky (c).

Poznámky:

1. Materiáloví vědci mají ve zvyku zvolit počátek mřížky ve středu jednoho z atomů. I když je tento způsob názorný, nedovoluje někdy nalézt všechny existující operace symetrie a krystalografové se mu proto vyhýbají. Tito proto volí za počátek nějaký střed symetrie, pokud u studované mřížky existuje (viz mezinárodní krystalografické tabulky). Například u diamantové mřížky je středem symetrie bod uprostřed 2 atomů tvořících bázi (tedy bod $\frac{1}{8},\frac{1}{8},\frac{1}{8}$, pokud za počátek zvolíme jeden z atomů). Krystalografům tento bod vyhovuje jako počátek mřížky lépe.

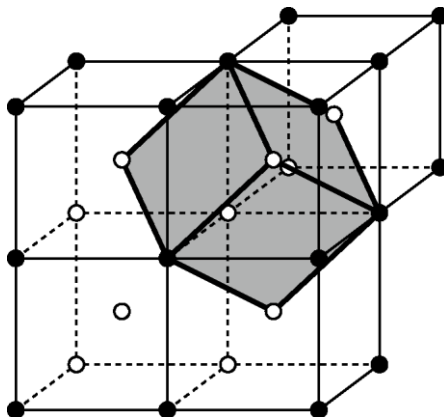
2. Termín "mřížka" je v češtině chápán buď v užším smyslu jako jedna ze 14 Bravaisových mřížek, nebo v širším smyslu jako jakákoli periodická struktura, tj. jakákoli ze 230 prostorových grup (oba přístupy jsou zhruba stejně časté). Podle autorů dávajících přednost prvnímu přístupu není termín "diamantová mřížka" správný; fcc mřížku kombinovanou s bází dvou atomů nazývají diamantovou strukturou. Podobně, hcp struktura je tvořena hexagonální prostou mřížkou a bází o dvou atomech.

4.1 Mřížka krychlová prostorově centrovaná

(Body centered cubic, bcc)

4.1.1 Primitivní a složená buňka

Primitivní buňka je romboedrická, s jedním uzlovým bodem připadajícím na buňku (obr. 4.1). Tato buňka je pro použití méně vhodná než krychlová prostorově centrovaná složená buňka (řádu 2). Souřadnice uzlových bodů jsou $0,0,0$ a $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.



Obrázek 4.1 Krychlová prostorově centrovaná buňka a její primitivní romboedrická buňka.

Cvičení 4: Nalezněte charakteristiky primitivní buňky (parametr translačního vektoru \vec{a}' a úhel α), když víte, že hrana krychle složené buňky má délku a (a nazýváme mřížkový parametr, *lattice parameter*).

4.1.2 Operace symetrie

Zrcadlové roviny:

- 3 roviny $\{001\}$: (100), (010) a (001),
- 6 rovin $\{011\}$: (110), $(\bar{1}10)$, (101), $(\bar{1}01)$, (011) a $(0\bar{1}1)$.

Roviny $\{111\}$ nejsou u krychlové soustavy zrcadlovými rovinami!

Osy rotace:

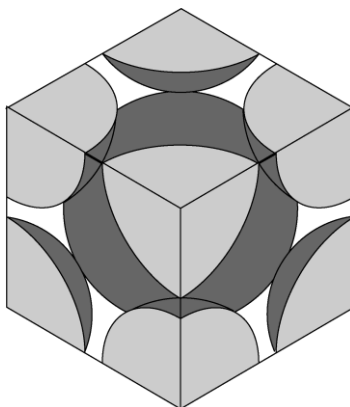
- 3 osy $\langle 001 \rangle$ řádu 4,
- 4 osy $\langle 111 \rangle$ řádu 3,
- 6 os $\langle 011 \rangle$ řádu 2.

4.1.3 Koeficient zaplnění (*packing fraction*)

Pokud nahradíme atomy pevnými koulemi, které se vzájemně dotýkají, můžeme u každé mřížky vypočítat poměr objemu vyplněným materiálem k celkovému objemu. Tento poměr se nazývá koeficient zaplnění c . Pro mřížku bcc:

$$c = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3}$$

Protože platí $a\sqrt{3} = 4R$ (obr. 4.3), $c = 0.68$.

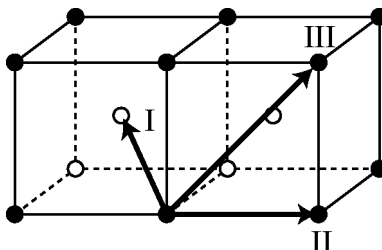


Obrázek 4.3 Model mřížky bcc vytvořené nedeformovatelnými dotýkajícími se koulemi.

4.1.4 Vzdálenosti mezi atomy

Každý atom má tyto sousedy (uvažujme pro jednoduchost bázi tvořenou jen jedním atomem):

- 8 nejbližších sousedů (*first neighbours*) ve vzdálenosti $a \frac{\sqrt{3}}{2}$, o souřadnicích $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$, atd. Počet nejbližších sousedů se nazývá koordinační číslo (*coordination number*);
- 6 druhých sousedů ve vzdálenosti a ;
- 12 třetích sousedů ve vzdálenosti $a\sqrt{2}$ (obr. 4.2).



Obrázek 4.2 Nejbližší, druhí a třetí nejbližší sousedé mřížky bcc.

4.1.5 Mezirovinná vzdálenost

Pro mřížku krychlovou prostou je mezirovinná vzdálenost roviny (hkl) :

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

Bcc mřížka není primitivní a uprostřed krychlové buňky se nachází mřížkový bod. Proto je nutné se vzorcem v případě bcc i fcc mřížky zacházet opatrně. Např. roviny $\{001\}$ u bcc mají poloviční mezirovinnou vzdálenost než udává vzorec, protože díky atomu ve středu krychle existuje vložená krystalografická rovina mezi stěny krychle. Naopak, vložená rovina typu $\{011\}$ díky středovému atomu nevzniká a pro d_{011} tedy uvedený vzorec platí.

4.1.6 Ekvivalentní směry (*equivalent directions*)

Směry, které se odvodí od zvoleného směru $[u \ v \ w]$ operacemi symetrie, jsou směry ekvivalentní k směru $[u \ v \ w]$. U krychlové soustavy mají translační vektory stejnou velikost a jsou vzájemně kolmé, je možné je jakkoli zaměňovat. Proto i jakákoli permutace směru $[u \ v \ w]$ je směrem ekvivalentním k $[u \ v \ w]$. Všechny ekvivalentní směry zapisujeme pomocí ostrých závorek $\langle u \ v \ w \rangle$. Jestli u , v a w jsou nenulové a vzájemně různé, existuje 48 ekvivalentních směrů (24 pokud neuvažujeme orientaci). Směr $\langle u \ v \ 0 \rangle$ má 24 (nebo 12 bez rozlišování orientace) ekvivalentních směrů, stejně jako směr $\langle u \ u \ w \rangle$.

4.1.7 Ekvivalentní roviny (*equivalent planes*)

Obdobně, roviny odvozené od roviny $(h \ k \ \ell)$ různými operacemi symetrie jsou roviny ekvivalentní k původní rovině. Společně se zapisují notací se složenými závorkami $\{h \ k \ \ell\}$.

Příklad:

$\langle 0 \ 0 \ 1 \rangle$ označuje směry jakékoli orientace, rovnoběžné s libovolným ze tří základních translačních vektorů.

$[0 \ 1 \ 0]$ směr rovnoběžný s vektorem \vec{b} a stejné orientace jako \vec{b} . $[0 \ \bar{1} \ 0]$ je směr opačné orientace.

$\{0 \ 0 \ 1\}$ jsou všechny roviny rovnoběžné s libovolnými dvěma základními translačními vektory.

$(0 \ 1 \ 0)$ je rovina rovnoběžná s vektory \vec{a} a \vec{c} , její normála je orientovaná do stejného poloprostoru jako vektor \vec{b} .

Cvičení 5:

Najděte všechny ekvivalentní roviny $\{1 \ 2 \ 3\}$.

4.1.6. Úhly mezi rovinami a směry

Úhly mezi nízkoindexovými směry krychlové soustavy jsou uvedené v tabulce 4.2. Všechny kombinace mezi různými permutacemi směrů $\langle u \ v \ w \rangle$ a $\langle u' \ v' \ w' \rangle$ jsou započteny, s využitím rovnice pro výpočet úhlu mezi dvěma vektory ($\vec{p} \cdot \vec{q}$ je skalární součin vektorů \vec{p} a \vec{q}).

$$\vec{p} \cdot \vec{q} = |\vec{p}| |\vec{q}| \cos \alpha$$

U krychlové soustavy (obecně to však neplatí !) má normála k rovině $(h \ k \ \ell)$ stejné indexy jako rovina: $[h \ k \ \ell]$. Tabulka 4.2 tedy může být použita i pro úhly mezi rovinami.

$u \ v \ w$	$u' \ v' \ w'$	úhly mezi dvěma rovinami nebo směry					
100	100	0°	90°				
	110	45°	90°				
	111	54° 44'					
	210	26° 34'	63° 26'	90°			
	211	35° 16'	65° 54'				
	221	48° 11'	70° 32'				
	311	25° 14'	72° 27'				

110	110	0°	60°	90°			
	111	35° 16'	90°				
	210	18° 26'	50° 46'	71° 34'			
	211	30° 1'	54° 44'	73° 13'	90°		
	221	19° 28'	45°	76° 22'	90°		
	311	31° 29'	64° 47'	90°			
111	111	0°	70° 32'				
	210	39° 14'	75° 2'				
	211	19° 28'	61° 52'	90°			
	221	15° 48'	54° 44'	78° 54'			
	311	29° 30'	58° 30'	79° 58'			
210	210	0°	36° 52'	53° 8'	66° 25'	78° 28'	90°
	211	24° 6'	43° 51'	56° 47'	79° 29'	90°	
	221	26° 34'	41° 49'	53° 24'	63° 26'	72° 39'	90°
	311	19° 17'	47° 36'	66° 8'	82° 15'		
211	211	0°	33° 33'	48° 11'	60°	70° 32'	80° 24'
	221	17° 43'	35° 16'	47° 7'	65° 54'	74° 12'	82° 12'
	311	10° 0'	42° 24'	60° 30'	75° 45'	90°	
221	221	0°	27° 16'	38° 57'	63° 37'	83° 37'	90°
	311	25° 15'	45° 17'	59° 50'	72° 27'	84° 14'	
311	311	0°	35° 6'	50° 29'	62° 58'	84° 58'	

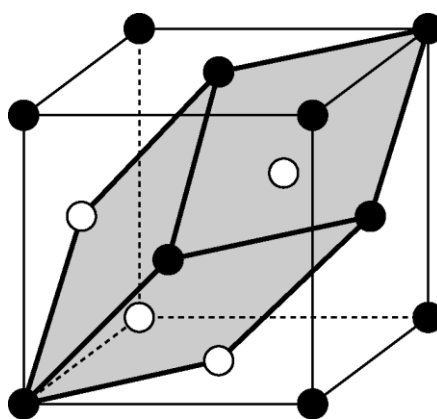
Tabulka 4.2 Úhly mezi rovinami nebo směry v krychlové soustavě.

4.2 Mřížka krychlová plošně uspořádaná

(*Face centered cubic, fcc*)

4.2.1 Primitivní buňka

Primitivní buňka je romboedrická (obr. 4.4). Většinou je výhodnější pracovat se složenou buňkou řádu 4, která je krychlová s atomy v rozích krychle a ve středech jejích stěn.



Obrázek 4.4 Krychlová a primitivní romboedrická buňka mřížky fcc.

Cvičení 6: Nalezněte charakteristiky primitivní buňky (parametr translačního vektoru \vec{a}' a úhel α) pomocí mřížkového parametru složené krychlové buňky.

4.2.2 Vzdálenosti mezi atomy

Každý atom má tyto sousedy (uvažujme pro jednoduchost bázi tvořenou jen jedním atomem):

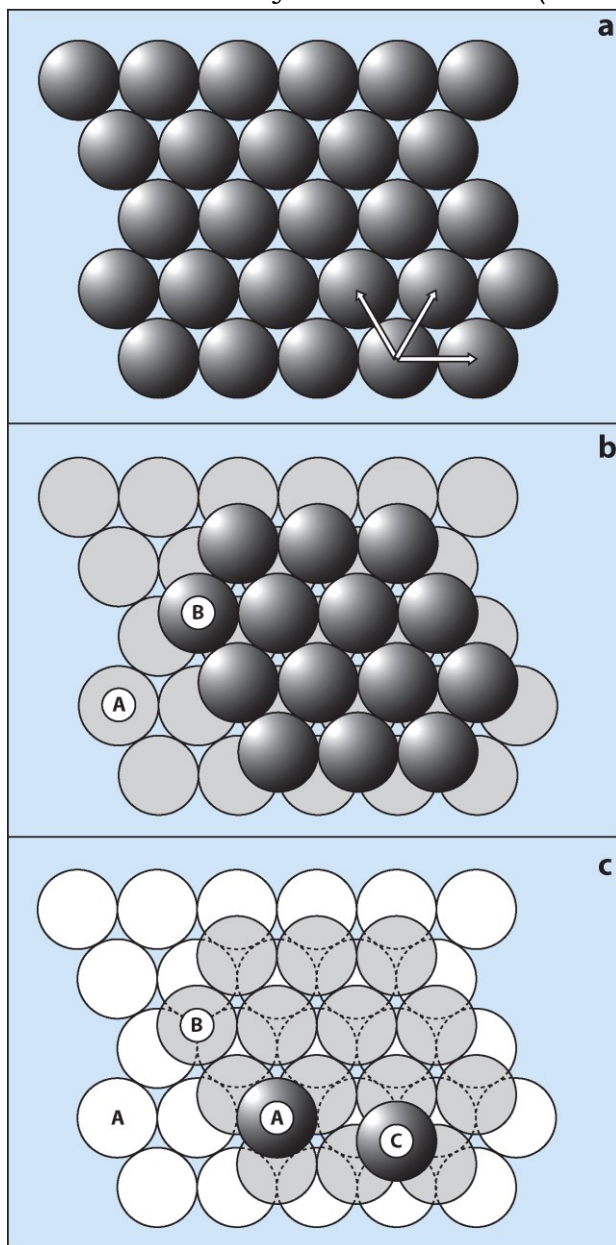
- 12 nejbližších sousedů ve vzdálenosti $a \frac{\sqrt{2}}{2}$, o souřadnicích $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$, atd.,
- 6 druhých nejbližších sousedů ve vzdálenosti a ,
- 24 třetích nejbližších sousedů ve vzdálenosti $a \sqrt{\frac{3}{2}}$.

4.2.3 Koeficient zaplnění

Společně s hcp strukturou má tato mřížka nejvyšší možný koeficient zaplnění, rovný 0.74 (ověřte výpočtem, viz také příloha 4). Obě struktury jsou proto nazývané kompaktní struktury (*compact structures*).

4.2.4 Mřížka fcc jako vrstvení těsně uspořádaných rovin

Ideální vyplnění jedné vrstvy pevnými koulemi je takové, při kterém se každá koule dotýká 6 sousedů (obr. 4.5a) – tato rovina se nazývá těsně



uspořádaná nebo kompaktní a v mřížce fcc má indexy $\{111\}$. Mřížka fcc vznikne vrstvením takových rovin podle sekvence ABCABC... (obr. 4.5).

Obrázek 4.5 Vrstvení kompaktních rovin u struktur hcp a fcc.

a) První těsně uspořádaná vrstva. Takto jsou atomy seskupeny v rovině $\{111\}$ mřížky fcc a v bazální rovině $\{0001\}$ hexagonální těsně uspořádané struktury (viz. příští kapitola). Kompaktní směry (šipky na obrázku) jsou $\langle 011 \rangle$ fcc nebo $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ hcp.

b) Koule druhé vrstvy mají své středy nad otvory v první vrstvě. A: pozice atomů první vrstvy, B: pozice atomů druhé vrstvy.

c) Třetí vrstva může být umístěna na dvou různých pozicích. 1) Koule jsou umístěny nad koulemi první vrstvy A. Kompaktní vrstvy tedy tvoří sekvenci ABABAB... což ve výsledku odpovídá hcp struktuře. 2) Koule mohou být umístěny nad otvor společný první i druhé vrstvě, do pozice C, sekvence střídání kompaktních vrstev je ABCABC... a výsledkem je mřížka fcc.

4.2.5 Podobnost s bcc

Všechny mřížky krychlové soustavy mají stejné úhly mezi krystalografickými směry a rovinami, stejný vzorec pro výpočet mezirovinné vzdálenosti a stejné zrcadlové roviny a rotační osy.

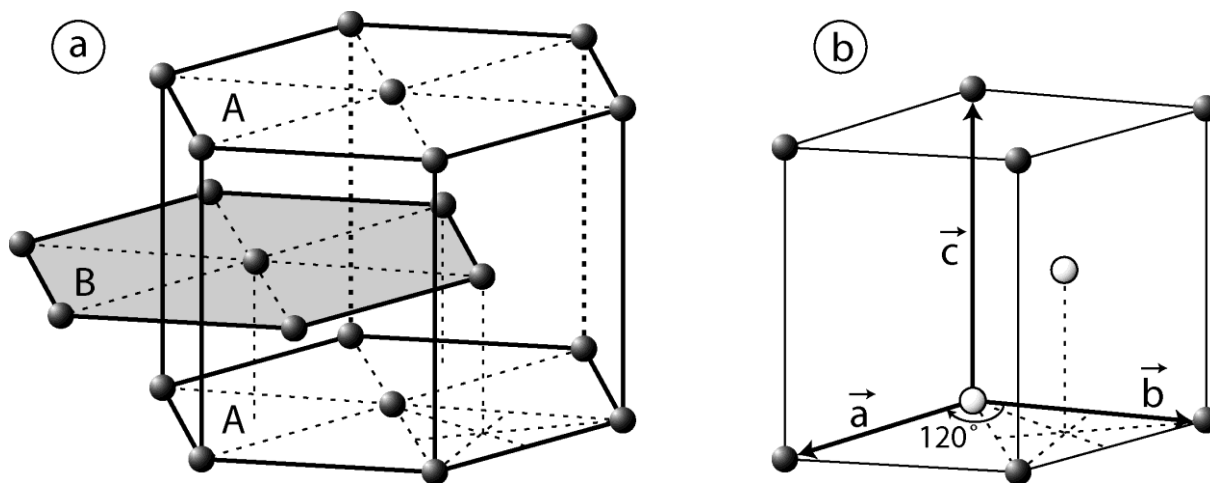
Poznámka: I když model používající pevné koule dokáže vysvětlit některá pozorování a je snadno pochopitelný, čtenář by neměl zapomínat, že uspořádání atomů v pevné látce je dáno vzájemnou interakcí mezi atomy a je tedy určováno zákony kvantové mechaniky. V případě pevných koulí např. koule 3. vrstvy nijak necítí polohu 1. vrstvy a 3. vrstva může být se stejnou pravděpodobností na pozici A i C. U reálných krystalů se jen výjimečně můžeme setkat s náhodným vrstvením kompaktních vrstev, za takových podmínek (teplota, tlak), kdy hcp i fcc struktury jsou stejně energeticky výhodné.

4.3 Hexagonální těsně uspořádaná struktura

(Hexagonal close packed, hcp)

4.3.1 Mřížka

Podobně jako krychlová prostá mřížka, ani hexagonální prostá mřížka se v přírodě téměř nevyskytuje. Hexagonální těsně uspořádaná struktura je kombinací hexagonální mřížky (obr. 3.4) s bází dvou atomů v každém mřížkovém bodě. Primitivní buňka je rovnoběžnostěn s lichoběžníkovou základnou a úhlem mezi stranami lichoběžníka 120° (obr. 4.6). Atomy báze se nacházejí na pozicích $0,0,0$ a $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}$.



Obrázek 4.6 Mřížka hexagonální těsně uspořádaná. a) Střídání kompaktních vrstev ABABA..., b) primitivní buňka.

4.3.2 Poměr c/a

Velikosti translačních vektorů \vec{a} a \vec{c} nejsou nezávislé. Ověřte výpočtem, že poměr c/a je roven $\sqrt{8/3} = 1.633$ pro případ dotýkajících se pevných koulí.

U reálných krystalů se tento poměr od této hodnoty více či méně liší (tabulka 4.3).

prvek	Be	Ti	Zr	Mg	Co	Zn	Cd
c/a	1.568	1.587	1.593	1.623	1.633	1.856	1.886

Tabulka 4.3 Hodnoty poměru c/a pro hcp kovy.

4.3.3 Vzdálenosti mezi atomy

- Ukažte, že počet nejbližších sousedů může být 12:
 - 6 z nich ve vzdálenosti a (sousedé v kompaktní rovině)
 - 6 ve vzdálenosti $\sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}$.
- Diskutujte vzdálenosti sousedních atomů pro c/a větší, menší a rovno $\sqrt{8/3}$.
- Pro c/a rovno $\sqrt{8/3}$ má hcp struktura ideální koeficient zaplnění 0.74.

4.3.4 Operace symetrie

Hexagonální soustava obsahuje tyto operace symetrie:

- osa symetrie řádu 6: [001],
- rovina zrcadlení: (001),
- 6 os řádu 2 ležících v rovině (001),
- 6 rovin zrcadlení kolmých na osy řádu 2 s osou zóny [001].

4.3.5 Zápis pomocí 4 indexů

a) Proč používat 4 osy v trojrozměrném prostoru?

Pokud zvolíme translační vektory \vec{a} , \vec{b} a \vec{c} tak, jako na obr. 4.7, roviny I, II a III mají tyto Millerovy indexy:

$$\text{rovina I} = (1 \bar{1} 0)$$

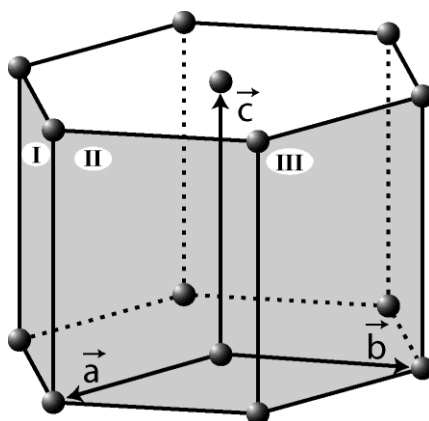
$$\text{rovina II} = (100)$$

$$\text{rovina III} = (010).$$

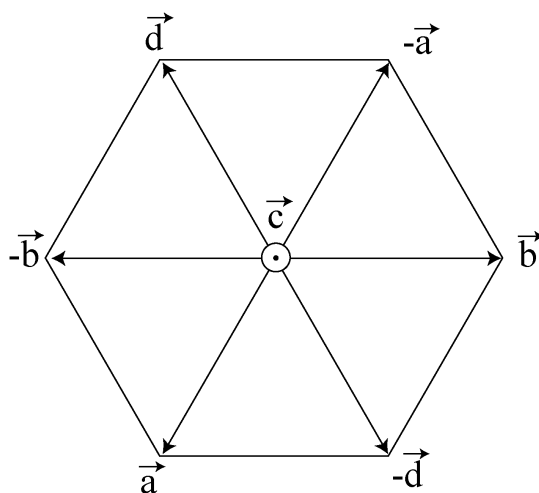
Tyto roviny jsou ekvivalentní, tj. krystalograficky identické, avšak označení roviny I nelze získat permutací indexů roviny II nebo III. Tzn. pokud provedeme operace symetrie, rotaci okolo osy řádu 6 [001], indexy stejných krystalografických rovin se nebudou měnit symetricky. Čtenář zvyklý pracovat s krychlovou mřížkou je při pohledu na indexy rovin I a II náchylný se domnívat, že tyto dvě roviny nejsou ekvivalentní. Při práci s hexagonální mřížkou v notaci se 3 indexy je tedy nutné si pamatovat, že ekvivalentní směry a roviny nemusejí mít indexy vzniklé jen obměnou číslic a znamének.

Z opačného pohledu, ačkoliv roviny (110) a $(1\bar{1}0)$ nejsou ekvivalentní, jejich zápis se liší jen v jednom znaménku. U mnoha krystalových soustav tuto nevýhodu nelze obejít, u hexagonální soustavy však existuje možnost, jak dosáhnout toho, aby krystalograficky identické směry a roviny měly indexy vzniklé vzájemnou permutací. Dosáhne se toho zavedením čtvrtého translačního vektoru \vec{d} , definovaného jako (obr. 4.8):

$$\vec{d} = -(\vec{a} + \vec{b})$$



Obrázek 4.7: Nevýhoda popisu hexagonální mřížky pomocí 3 Millerových indexů.



Obrázek 4.8: Definice translačního vektoru \vec{d} .

b) indexace rovin

Nový index i je přidán na třetí místo mezi indexy h , k a l : $(h\ k\ i\ l)$. Podle obrázků 4.8 a 4.9 je možné vypočítat hodnotu indexu i ze známých hodnot h a k . Index i definujeme jako:

$$\vec{OS} = \frac{\vec{d}}{i} = -\frac{\vec{a} + \vec{b}}{i}$$

Vektory \overrightarrow{SP} a \overrightarrow{SQ} jsou rovnoběžné:

$$\overrightarrow{SP} \times \overrightarrow{SQ} = 0$$

$$(\overrightarrow{OP} - \overrightarrow{OS}) \times (\overrightarrow{OQ} - \overrightarrow{OS}) = 0$$

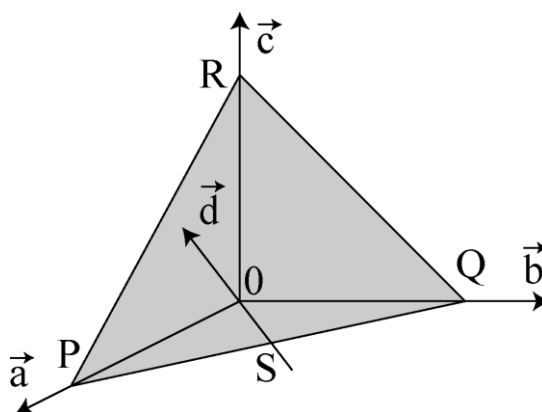
$$\left[\left(\frac{\vec{a}}{h} + \frac{\vec{a} + \vec{b}}{i} \right) \times \left(\frac{\vec{b}}{k} + \frac{\vec{a} + \vec{b}}{i} \right) \right] = 0$$

odkud je možné odvodit, že:

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

Rovinu PQR tedy označujeme $(h \ k \ \ell)$ v zápisu se třemi indexy a $(h \ k \ h+k \ \ell)$ v zápisu se čtyřmi indexy.

Důkaz, že zápis se čtyřmi indexy vede k symetrii mezi indexy při provedení operace symetrie - rotace kolem osy \vec{c} - je uveden v příloze 3.



Obrázek 4.9: Čtvrtý index i roviny PQR je definován průsečíkem roviny a osy \vec{a} : $\overrightarrow{OS} = \vec{d}/i$.

Cvičení 7: Užijte zápis se čtyřmi indexy pro označení rovin I, II a III z obrázku 4.7.

c) indexace směrů

Vektor $u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ definuje krystalografický směr $[u \ v \ w]$. Jeho směr ani velikost nezměníme, pokud k němu přičteme p -násobek nulového vektoru $\vec{a} + \vec{b} + \vec{d}$:

$$u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} = (u+p)\vec{a} + (v+p)\vec{b} + p\vec{d} + w\vec{c}$$

Pro tento směr tedy můžeme použít zápis se 4 indexy $[u+p, v+p, p, w]$, kde p může být libovolné. Je zvykem volit p tak, aby, stejně jako v případě krystalografických rovin, byl součet prvních tří indexů nulový:

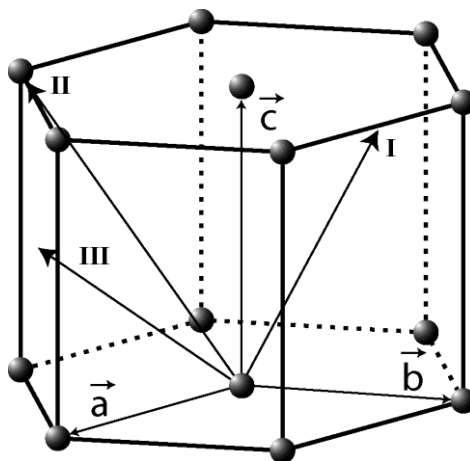
$$\mathbf{p} = -\frac{1}{3}(\mathbf{u} + \mathbf{v})$$

Přechod ze zápisu se 3 indexy $[u \ v \ w]$ k notaci ve čtyřech indexech se tedy provede následujícím způsobem:

$$[u \ v \ w] \rightarrow \frac{1}{3}[2u - v, -u + 2v, \overline{u + v}, 3w]$$

Poznámka: Až na výjimky, u hexagonální soustavy neplatí, že normála k rovině $(h \ k \ l)$ je rovnoběžná se směrem o stejných indexech $[h \ k \ l]$ (ať používáme zápis se 3 nebo 4 indexy). Zmíněné výjimky jsou osa \bar{c} a směry obsažené v bazální rovině.

Cvičení 8: 1. Určete indexy směrů \bar{a} , \bar{b} , \bar{c} , I, II a III v obr. 4.10 v zápisu se 4 indexy. 2. Stejný úkol, pokud I, II a III považujeme za vektory.



Obrázek 4.10

5. RECIPROKÝ PROSTOR (RP)

Reciprokový prostor (*reciprocal space*) je myšlenková konstrukce nutná k pochopení a řešení problémů spojených s difrakcí krystalů a některých dalších problémů ve fyzice pevných látek (např. vodivost elektrická a tepelná, pásová teorie pevných látek atd.). Vektory spojující difrakční body bodového difrakčního obrazce mohou být považovány za vektory v reciprokém prostoru. Více detailů naleznete v příloze 3.

5.1 Translační vektory

Translační vektory RP \vec{A} , \vec{B} , \vec{C} jsou definovány pomocí translačních vektorů a objemu primitivní buňky V_D z přímého prostoru (PP):

$$\vec{A} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V_D}, \quad \vec{B} = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V_D}, \quad \vec{C} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V_D}$$

Poznámka: Uvedená definice se používá v krystalografii. Ve fyzice pevných látek se definice translačních vektorů RP odvozuje s využitím Fourierovy transformace, což vede k přidání faktoru 2π : $\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V_D}$ Užití nebo vynechání faktoru 2π je jen otázkou konvence – nemění vlastnosti reciprokého prostoru, pouze ho 2π krát zvětšuje.

5. 2 Vlastnosti

5.2.1 Směr vektorů v RP

\vec{A} je vždy kolmé k \vec{b} a \vec{c} (podobně, \vec{B} je vždy kolmé k \vec{a} a \vec{c} a \vec{C} je vždy kolmé k \vec{a} a \vec{b}). Pokud jsou \vec{a} , \vec{b} a \vec{c} ortogonální (mřížky krychlové, tetragonální a ortorombické), \vec{A} je navíc rovnoběžné s \vec{a} (podobně pro \vec{B} a \vec{C}). V obecném případě ovšem \vec{A} s \vec{a} rovnoběžné být nemusí.

5.2.2 Skalární a vektorový součin

Pro analýzu difrakčních obrazců jsou využitelné tyto dvě vlastnosti:

a) Skalární součin vektoru z RP a vektoru z PP.

- translační vektory:

Protože $V_D = \vec{a}(\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b}(\vec{a} \times \vec{c}) = \vec{c}(\vec{a} \times \vec{b})$, alternativní definice translačních vektorů reciprokého prostoru je:

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{a} &= 1, & \vec{A} \cdot \vec{b} &= 0, & \vec{A} \cdot \vec{c} &= 0 \\ \vec{B} \cdot \vec{b} &= 1, & \vec{B} \cdot \vec{a} &= 0, & \vec{B} \cdot \vec{c} &= 0 \\ \vec{C} \cdot \vec{c} &= 1, & \vec{C} \cdot \vec{a} &= 0, & \vec{C} \cdot \vec{b} &= 0 \end{aligned}$$

- obecné vektory:

$$(\vec{u}\vec{a} + \vec{v}\vec{b} + \vec{w}\vec{c})(\vec{h}\vec{A} + \vec{k}\vec{B} + \vec{\ell}\vec{C}) = u\vec{h} + v\vec{k} + w\vec{\ell}$$

b) Vektorový součin dvou vektorů z RP:

$$\begin{aligned} & (\vec{h}_1\vec{A} + \vec{k}_1\vec{B} + \vec{\ell}_1\vec{C}) \times (\vec{h}_2\vec{A} + \vec{k}_2\vec{B} + \vec{\ell}_2\vec{C}) \\ &= (\vec{k}_1\vec{\ell}_2 - \vec{k}_2\vec{\ell}_1)\vec{a} + (\vec{h}_2\vec{\ell}_1 - \vec{h}_1\vec{\ell}_2)\vec{b} + (\vec{h}_1\vec{k}_2 - \vec{h}_2\vec{k}_1)\vec{c} \end{aligned}$$

Výsledkem je vektor o složkách:

$$\begin{aligned} & \vec{k}_1\vec{\ell}_2 - \vec{k}_2\vec{\ell}_1 \\ & \vec{h}_2\vec{\ell}_1 - \vec{h}_1\vec{\ell}_2 \\ & \vec{h}_1\vec{k}_2 - \vec{h}_2\vec{k}_1 \end{aligned}$$

z přímého prostoru (= složky jsou stejné jako bychom získali násobením dvou vektorů z přímého prostoru).

Poznámky:

1. rozměr vektorů z RP je $[m^{-1}]$.
2. Pokud pracujete s hexagonální mřížkou a jí odpovídajícím RP, pracujte vždy s notací se třemi indexy a k notaci se 4 indexy přejděte až pro finální výsledek.

5.2.3 Reciproký prostor reciprokého prostoru

Reciprokým prostorem k reciprokému prostoru je přímý prostor.

5.2.4 Rovina $(h \ k \ \ell)$ z PP a vektor $[h \ k \ \ell]$ z RP

Rovina $(h \ k \ \ell)$ v PP obsahuje tyto dva vektory:

$$\left(\frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h} \right) \text{ a } \left(\frac{\vec{c}}{\ell} - \frac{\vec{b}}{k} \right) \quad (\text{viz obr. 3.2})$$

Normála \vec{n}_{hkl} k této rovině je rovnoběžná s vektorovým součinem těchto 2 vektorů:

$$\begin{aligned} \vec{n}_{hkl} & \parallel \left(\frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h} \right) \times \left(\frac{\vec{c}}{\ell} - \frac{\vec{b}}{k} \right) \\ \vec{n}_{hkl} & \parallel \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{k\ell} + \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\ell h} + \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{hk} \end{aligned}$$

Vynásobením faktorem hkl/V_D získáme:

$$\vec{n}_{hkl} \parallel h \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V_D} + k \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V_D} + \ell \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V_D} = h\vec{A} + k\vec{B} + \ell\vec{C} = \vec{N}_{hkl}$$

Normála \vec{n}_{hkl} k rovině (h k l) z RP je tedy rovnoběžná s vektorem [h k l] z RP. Obdobně, normála k rovině (u v w) z RP je vektor [u v w] z PP.

5.2.5 Velikost vektoru [h k l] v PP

Uvažujme několik rovnoběžných rovin (h k l), obr. 5.1, a zvolme, že: rovina 0 prochází počátkem,

rovina 1 prochází body $\frac{\vec{a}}{h}$, $\frac{\vec{b}}{k}$, $\frac{\vec{c}}{\ell}$,

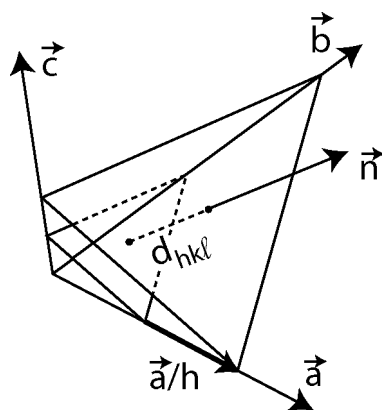
rovina 2 prochází body $2\frac{\vec{a}}{h}$, $2\frac{\vec{b}}{k}$, $2\frac{\vec{c}}{\ell}$, atd.

Mezirovinná vzdálenost d_{hkl} mezi sousedními rovinami je tedy rovna průmětu vektoru $\frac{\vec{a}}{h}$ (nebo vektorů $\frac{\vec{b}}{k}$ či $\frac{\vec{c}}{\ell}$) do normály roviny \vec{n}_{hkl} (obr. 5.1).

Podle 5.2.4, \vec{n}_{hkl} je rovnoběžná s vektorem $\vec{N}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B} + \ell\vec{C}$ z RP:

$$d_{hkl} = \frac{\vec{a}}{h} \cdot \frac{\vec{N}_{hkl}}{|\vec{N}_{hkl}|} = \frac{\vec{a}}{h} \cdot \frac{h\vec{A} + k\vec{B} + \ell\vec{C}}{|\vec{N}_{hkl}|} = \frac{1}{|\vec{N}_{hkl}|}$$

Velikost vektoru [h k l] v RP je tedy roven převrácené hodnotě mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} rovin (h k l), čímž jsme našli vzorec z kapitoly 4.1.5.



Obrázek 5.1 Mezirovinná vzdálenost rovin (h k l).

5.3 Aplikace

Ke konstrukci RP je nejjednodušší využít translační vektory primitivní buňky v PP. Pokud použijeme vektory násobné buňky, např. $a[1\ 0\ 0]$, $a[0\ 1\ 0]$ a $a[0\ 0\ 1]$ pro mřížku fcc, dostaneme body v RP, které ve skutečnosti neexistují (které by nevznikly při použití primitivní buňky) a je třeba je odhalit a vyloučit.

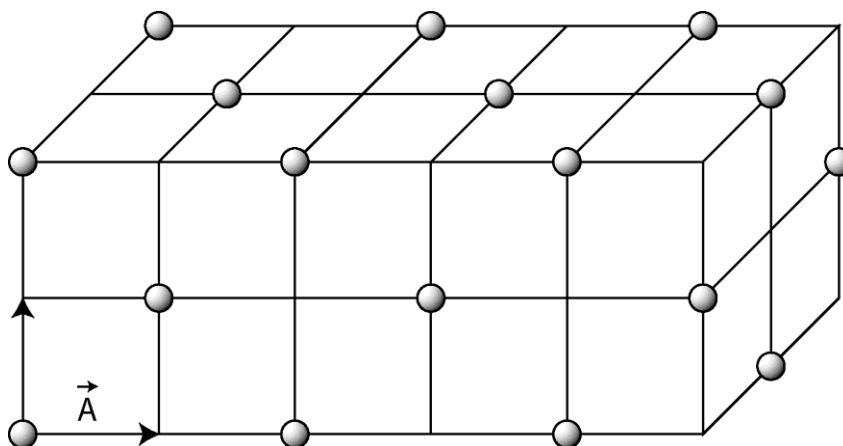
5.3.1 RP mřížky bcc

Reciproká mřížka k mřížce bcc má translační vektory \vec{A} , \vec{B} a \vec{C} s těmito vlastnostmi:

$$\vec{A} \parallel \vec{a} \quad \vec{B} \parallel \vec{b} \quad \vec{C} \parallel \vec{c},$$

$$|\vec{A}| = |\vec{B}| = |\vec{C}| = \frac{1}{a}$$

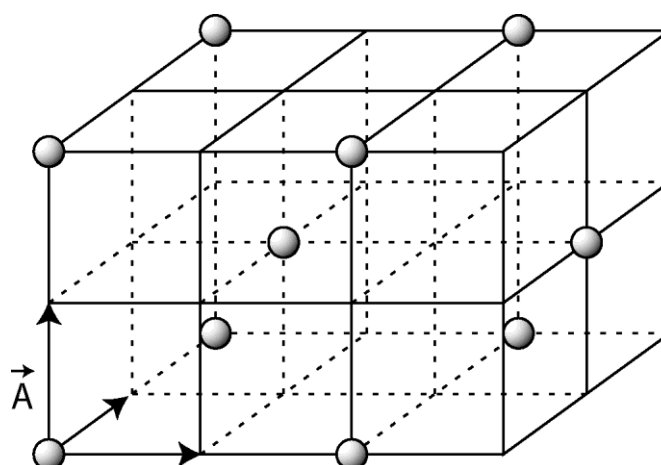
Je možné dokázat, že v RP neexistují mřížkové body, u nichž je součet indexů lichý ((1 0 0), (1 1 1), ...). Reciproká mřížka k mřížce bcc je tedy mřížka fcc s mřížkovým parametrem $\frac{2}{a}$ (obr. 5.2).



Obrázek 5.2 Reciproká mřížka k mřížce bcc.

5.3.2 RP mřížky fcc

Reciproká mřížka k mřížce fcc je mřížka bcc s mřížkovým parametrem $\frac{2}{a}$ (obr. 5.3). Jsou tedy vyloučeny mřížkové body s indexy, které kombinují sudá a lichá čísla, např. (1 0 0), (2 1 0), ...



Obrázek 5.3 Reciproká mřížka k mřížce fcc.

5.3.3 RP hcp struktury

Translační vektory \vec{A} a \vec{B} mezi sebou svírají úhel 60° a jsou kolmé k \vec{C} , který je navíc rovnoběžný s \vec{c} .

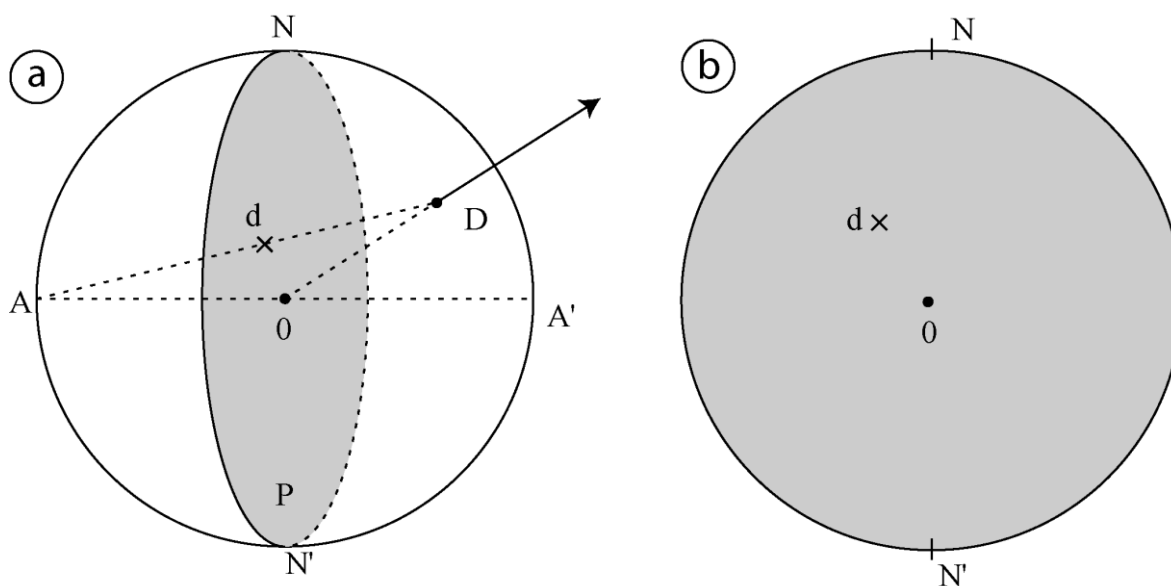
6. STEREOGRAFICKÁ PROJEKCE

Stereografická projekce (*stereographic projection*) je jedna z možných projekcí ze 3D do 2D. Tato projekce byla známá a používaná astronomy a kartografy již v antickém Řecku. Je nezbytným nástrojem také v krystalografii, ve fyzice pevných látek a v metalurgii, kde se používá se nejen při práci s monokrystaly, ale také pro grafické znázornění textury. V krystalografii je používána jako způsob zobrazení směrů a rovin ve dvou dimenzích. Tato projekce zachovává úhly mezi směry a rovinami; tyto úhly mohou být změřeny pomocí Wulffovy sítě.

6.1 Princip

6.1.1 Stereografická projekce krystalografického směru

Princip stereografické projekce je znázorněn na obrázku 6.1. Zvolme si kouli se středem O a průměrem R (R je standardně volen 10 cm). Krystalografický směr, který chceme znázornit, je polopřímka mající počátek v O a protínající kouli v bodě D . Rovinou stereografické projekce rozumíme rovinu P (šedá rovina na obr. 6.1) procházející středem O a kolmou na průměr koule AA' . Bod A se nachází na opačné polokouli než bod D . Přímka AD protíná P v bodě d , který se nazývá stereografická projekce směru \overrightarrow{OD} .

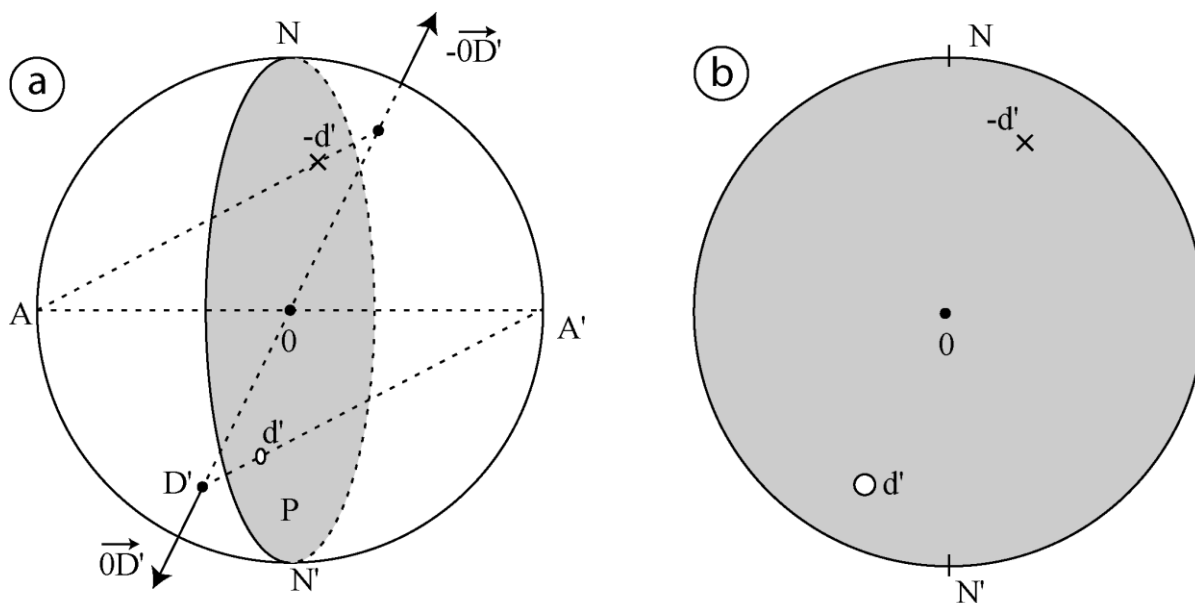


Obrázek 6.1 a) Princip stereografické projekce krystalografického směru.
b) Rovina projekce P .

Nechť $\overrightarrow{OD'}$ je směr, kde D' se nachází na opačné polokouli než směr D . Stereografická projekce směru $\overrightarrow{OD'}$ je bod d' , průsečík přímky $A'D'$ s rovinou P . Body A a A' se nazývají středy promítání. Projekce d a d' se znázorňují křížkem (x) v případě, že zobrazený směr směřuje z O nad rovinu projekce a kroužkem (o) v opačném případě.

V praxi je lépe vyhnout se společnému zobrazování směrů směřujících nad a pod rovinu projekce, protože se tím komplikuje čitelnost projekce. Pokud je to možné, tedy pokud orientace směru $\overrightarrow{OD'}$ není důležitá, raději pracujeme se směrem opačným k $\overrightarrow{OD'}$, tedy směrem $-\overrightarrow{OD'}$ (obr. 6.2).

V následujících pasážích už budeme uvažovat pouze směry směřující nad rovinu P, tedy mající jako střed promítání bod A.

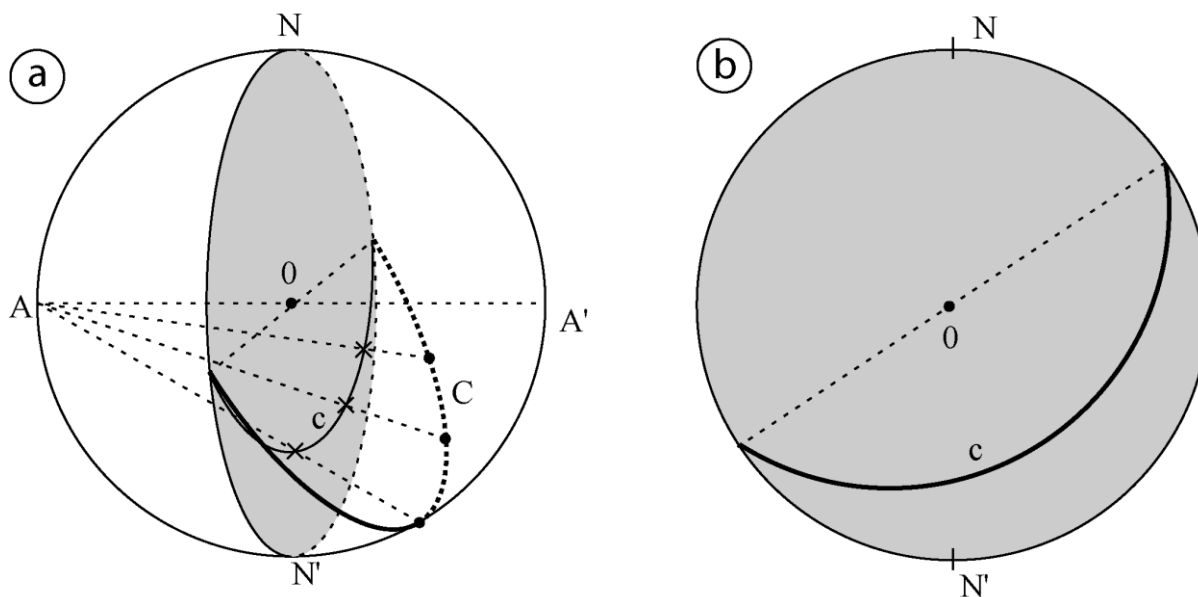


Obrázek 6.2 Projekce obou orientací stejného směru.

Příklad: Pokud je u krychlové mřížky $\vec{0A'} = [001]$, pracujeme jen se směry $[h k \ell]$, které mají $\ell \geq 0$.

6.1.2 Stereografická orientace krystalografické roviny

Představme si rovinu C procházející 0 a promítněme všechny průsečíky této roviny s horní polokoulí do P. Průmětem je část kružnice (obr. 6.3).



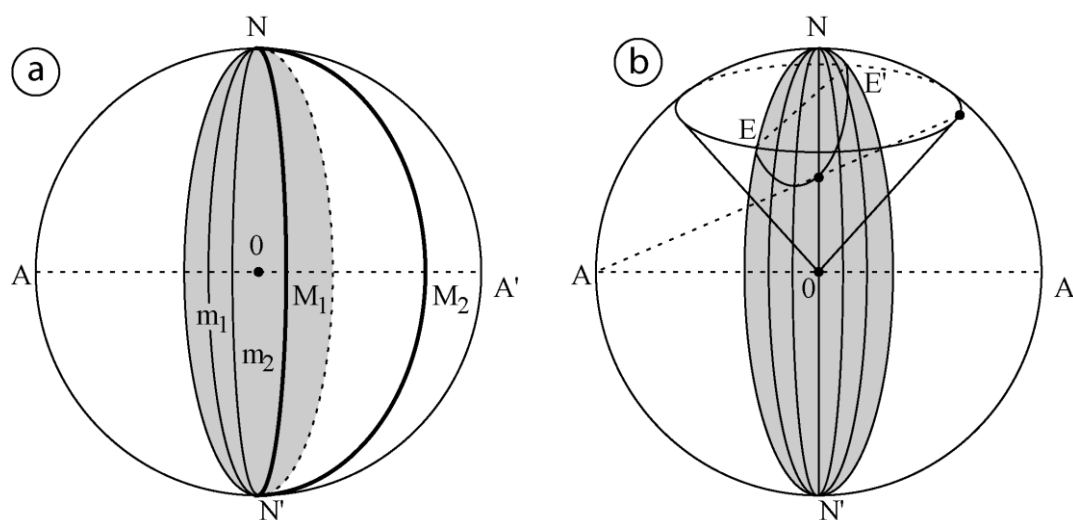
Obrázek 6.3 Stereografická projekce roviny C je část kružnice (c).

6.2 Wulffova síť (Wulff net)

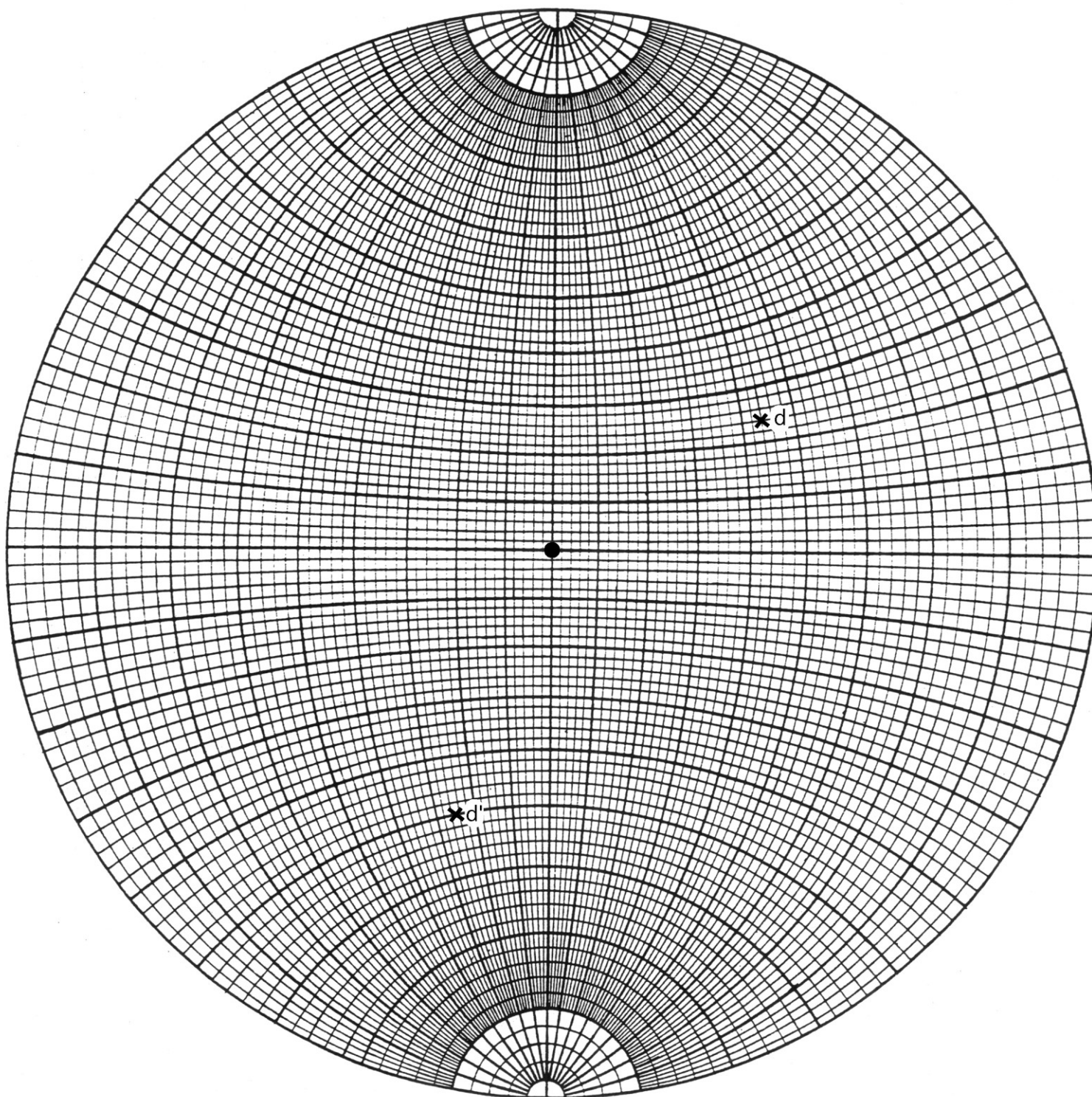
Pro kvantitativní používání stereografické projekce WULFF navrhl síť, která umožňuje převést vzdálenosti mezi body na projekci na úhly mezi odpovídajícími směry.

Síť obsahuje projekce dvou systémů rovin. Tzv. **poledníky** ($m_1, m_2 \dots$), jsou průměty rovin ze zóny NN' (obr. 6.4 a 6.5). Úhel mezi promítnutými rovinami je vždy 2° .

Navíc Wulff do své sítě zakreslil všechny směry svírající úhel od 2° postupně s krokem 2° s přímkou ON . Množina projekcí všech směrů svírajících s ON úhel $\pi/2 - \beta$ (β je násobek 2 menší než 180) tvoří část kružnice EE' . Křivky EE' jsou tedy projekcemi kuželů s osou ON , kde vrcholový úhel 2β je násobek 4 (obr. 6.4b). Nazývají se **rovnoběžky**; rovník je rovnoběžka procházející středem stereografické projekce.



Obrázek 6.4 Wulffova síť: a) konstrukce poledníků; M_1, M_2 jsou roviny procházející O , m_1, m_2 jejich stereografické projekce. b) Konstrukce rovnoběžek.



Obrázek 6.5 Wulffovu síť tvoří dva systémy částí kružnic. Sousední průsečíky kružnic jsou projekce směrů, které spolu svírají 2° . Směr d může být popsán úhlovými souřadnicemi $+44^\circ$, $+24^\circ$, směr d' souřadnicemi -25° , -50° .

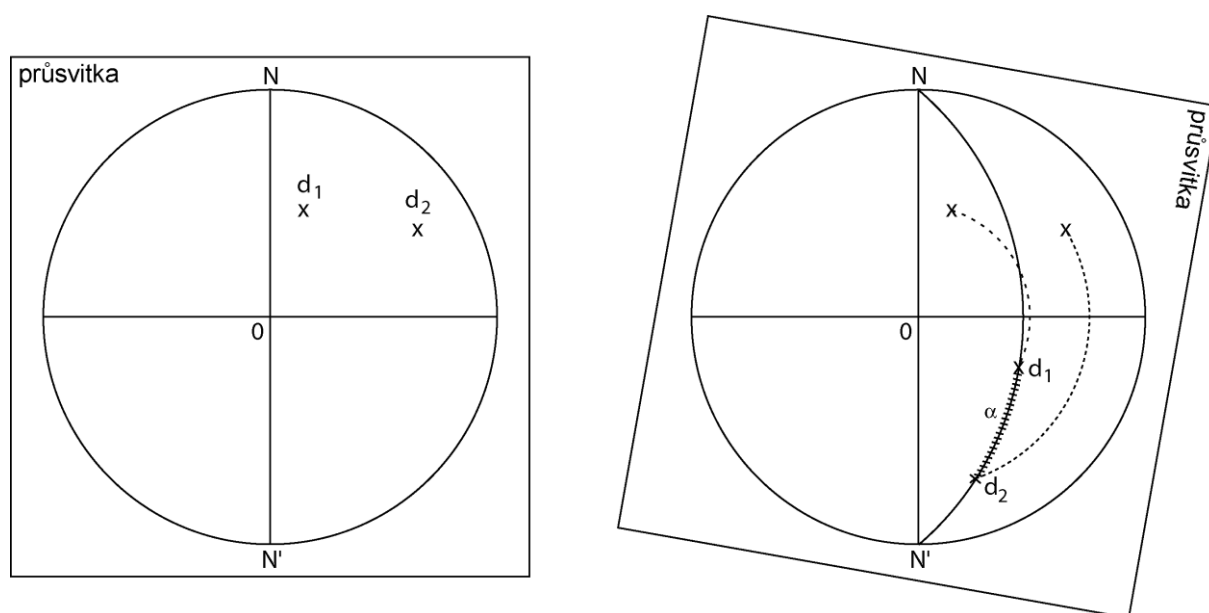
6.3 Příklady použití

Nyní na několika příkladech ukážeme použití stereografické projekce pro měření úhlů a pro geometrické konstrukce.

6.3.1 Úhel mezi dvěma směry určenými jejich projekcemi

Jsou dány projekce d_1 a d_2 dvou směrů \overline{OD}_1 a \overline{OD}_2 . Úkolem je zjistit úhel mezi oběma směry.

Na Wulffovu síť umístíme průsvitku a na ni vyneseme obě projekce d_1 a d_2 . Otáčíme průsvitku kolem středu projekce 0 až do okamžiku, kdy se d_1 a d_2 nacházejí na stejném poledníku. Úhel α mezi d_1 a d_2 odečteme přímo na Wulffově síti. Tento úhel je stejný jako úhel mezi přímkami \overline{OD}_1 a \overline{OD}_2 (obr. 6.6).



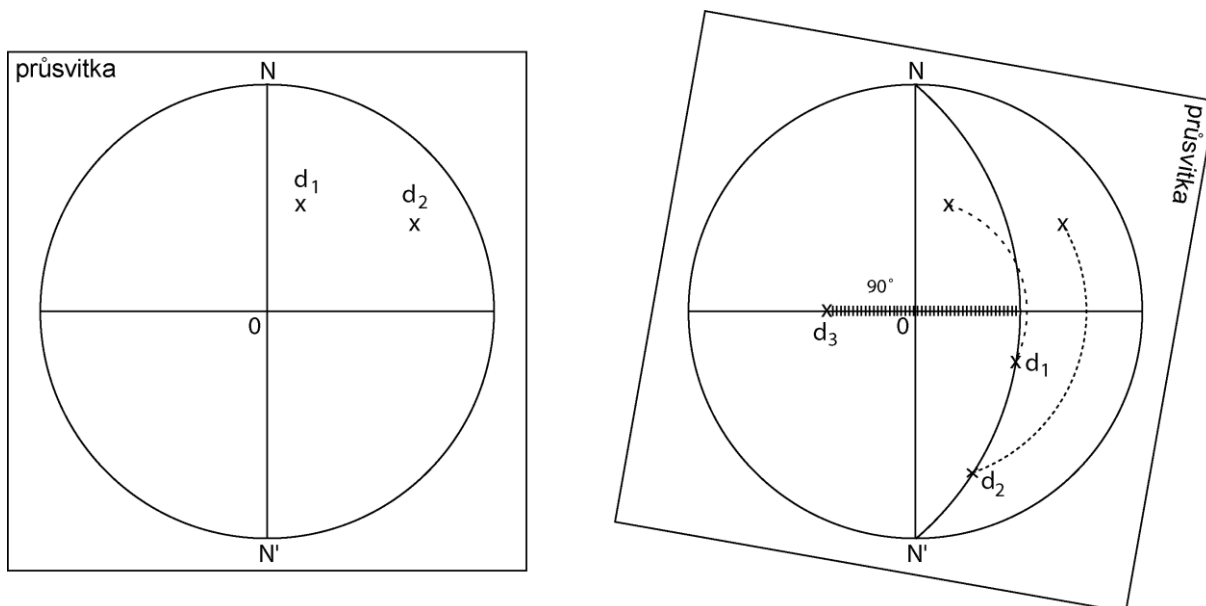
Obrázek 6.6 Určení úhlu α mezi přímkami OD_1 a OD_2 určenými jejich stereografickými projekcemi d_1 a d_2 .

Cvičení 9: Pomocí Wulffovy sítě určete úhel mezi projekcemi d_1 ($+30^\circ$, $+40^\circ$) a d_2 ($+70^\circ$, $+20^\circ$).

6.3.2 Normála roviny definované dvěma přímkami

Jsou dány projekce d_1 a d_2 . Hledáme projekci d_3 normály OD_3 k rovině, v níž leží přímky OD_1 a OD_2 .

Tak jako v předchozím případě, natočíme průsvitku tak, aby obě projekce d_1 a d_2 ležely na stejném poledníku. Od tohoto poledníku odečteme 90° na rovníku. Tak najdeme projekci bodu d_3 , který svírá úhel 90° se všemi směry na poledníku. Poledník je tedy projekcí roviny obsahující OD_1 a OD_2 a d_3 je normála k této rovině (obr. 6.7). Stejně jako v předchozím případě, rotace průsvitky nemění úhel mezi d_1 a d_2 .



Obr 6.7 Konstrukce normály d_3 k rovině procházející OD_1 a OD_2 .

Cvičení 10

1. Změřte úhel mezi dvěma danými rovinami.
2. Zakreslete roviny půlící úhly mezi dvěma danými směry.
3. Zakreslete směr svírající stejný úhel se třemi danými směry.
4. Zakreslete směr symetrický k danému směru vzhledem k dané ose symetrie.
5. Zakreslete symetrický směr k danému směru vzhledem k dané rovině symetrie.
6. Zakreslete směr, který vznikne rotací o úhel φ daného směru okolo dané osy.

6.4 Standardní projekce krychlové mřížky

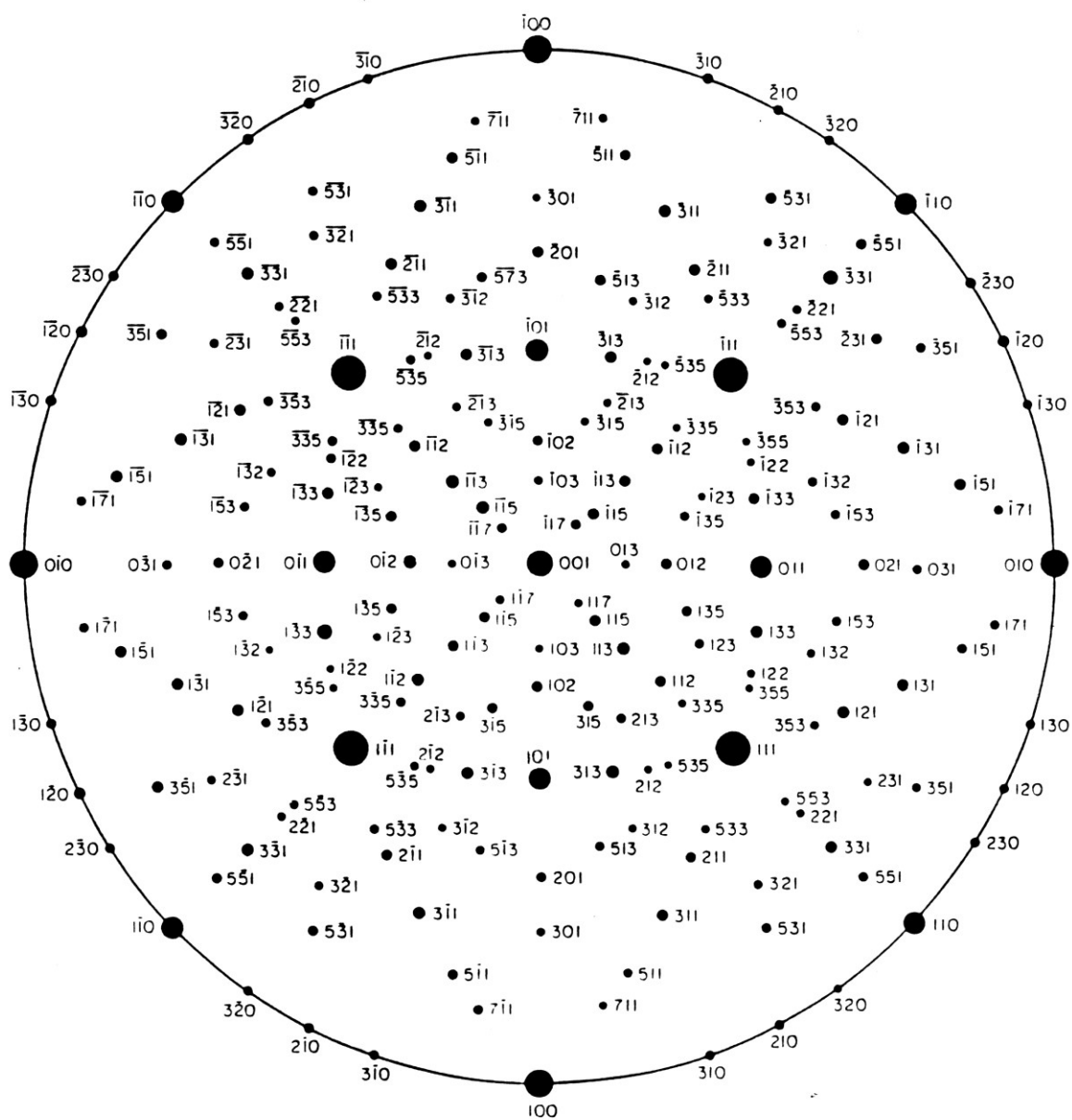
Stereografická projekce se často vynáší tak, aby její rovina byla kolmá na některou osu symetrie mřížky.

- Standardní projekce (0 0 1) – obrázek 6.8a
- Standardní projekce (1 1 0) – obrázek 6.8b
- Standardní projekce (1 1 1) – obrázek 6.8c

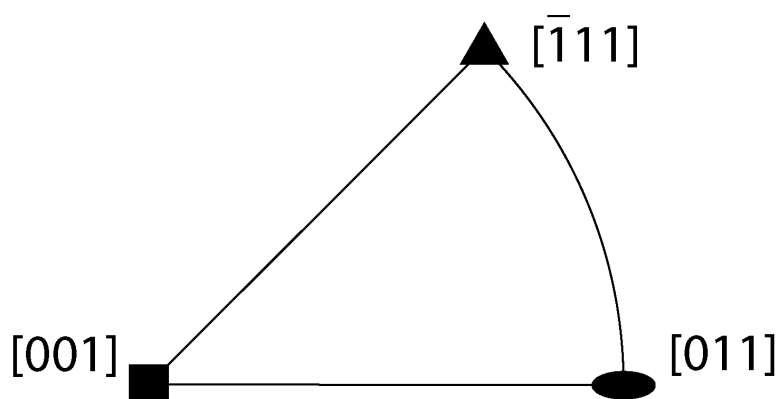
U krychlové mřížky platí, že normála k rovině $(h k \ell)$ je rovnoběžná se směrem $[h k \ell]$. Uvedené projekce lze tedy použít pro znázornění směrů i rovin.

6.4.1 Standardní stereografický trojúhelník

Uvážíme-li prvky symetrie krychlové soustavy, je možné se v určitých aplikacích omezit jen na směry obsažené v tzv. standardním trojúhelníku (*standard stereographic triangle*) daném vrcholy $\langle 0 0 1 \rangle$, $\langle 0 1 1 \rangle$ a $\langle 1 1 1 \rangle$, který vymezuje $1/48$ prostorového úhlu (obr. 6.9). Tento trojúhelník obsahuje právě jeden ekvivalentní krystalografický směr k libovolnému směru $[u v w]$.



Obrázek 6.8a Stereografická projekce krychlové mřížky se středem [001].



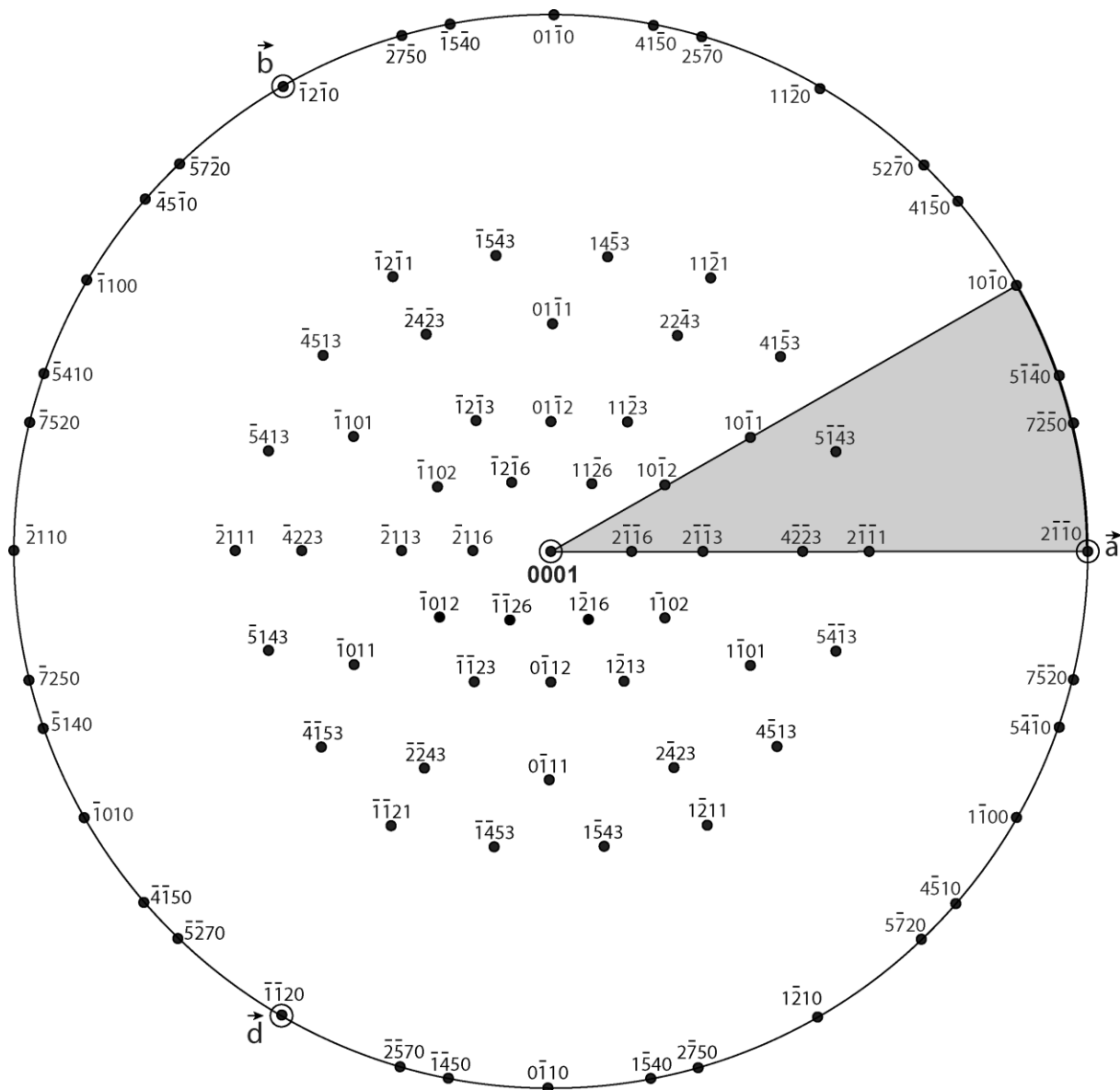
Obrázek 6.9 Standardní stereografický trojúhelník pro krychlovou soustavu. Každý takový trojúhelník obsahuje právě 1 ekvivalentní směr $\langle u\ v\ w \rangle$; např. trojúhelník na obrázku obsahuje směr $[\bar{1}\ 2\ 3]$ a žádný další směr typu $\langle 1\ 2\ 3 \rangle$.

Poznámka:

Stereografická projekce je shodná pro všechny mřížkové varianty krychlové soustavy, tj. fcc, bcc nebo sc mřížky, neboť jsou pro ně shodné translační vektory.

6.5 Standardní projekce hexagonální mřížky

U hexagonální mřížky neplatí, že normála k rovině má stejné Millerovy indexy jako sama rovina. Stereografická projekce krystalografických směrů hexagonální mřížky (viz obr. 6.10) tedy není shodná se stereografickou projekcí normál k rovinám.



Obrázek 6.10 Stereografická projekce krystalografických směrů pro hexagonální mřížku se středem $[0001]$. Základní stereografický trojúhelník je vybarven šedě; jedná se o část prostoru, která obsahuje právě 1 ekvivalentní směr k libovolnému směru $[u \ v \ u+v \ w]$.

SHRNUTÍ

1. Prvky krystalizují nejčastěji s bcc mřížkou (krychlová prostorově centrovaná), fcc mřížkou (krychlová plošně centrovaná) nebo ve struktuře hcp (hexagonální těsně uspořádaná).

- **bcc** není kompaktní mřížka ($c = 0.68$)

- **fcc** je kompaktní mřížka ($c = 0.74$) vytvořená střídáním těsně uspořádaných rovin $\{111\}$ podle sekvence ABCABC... V každé této rovině existují tři těsně uspořádané směry $\langle 110 \rangle$.

- **hcp** je kompaktní struktura vytvořená střídáním těsně uspořádaných rovin (0001) podle sekvence ABABAB...

2. Pro zápis krystalografických směrů a rovin používáme Millerovy indexy.

3. Translační vektory reciprokého prostoru jsou definovány takto:

$$\vec{A} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V_D} \quad \vec{B} = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V_D} \quad \vec{C} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V_D}$$

Pro libovolnou mřížku platí, že vektor $[h \ k \ \ell]$ z RP je kolmý na rovinu $(h \ k \ \ell)$ z PP a mezirovinná vzdálenost d_{hkl} je rovná převrácené hodnotě jeho velikosti.

Reciprokou mřížkou k fcc mřížce je bcc mřížka s parametrem $a/2$.

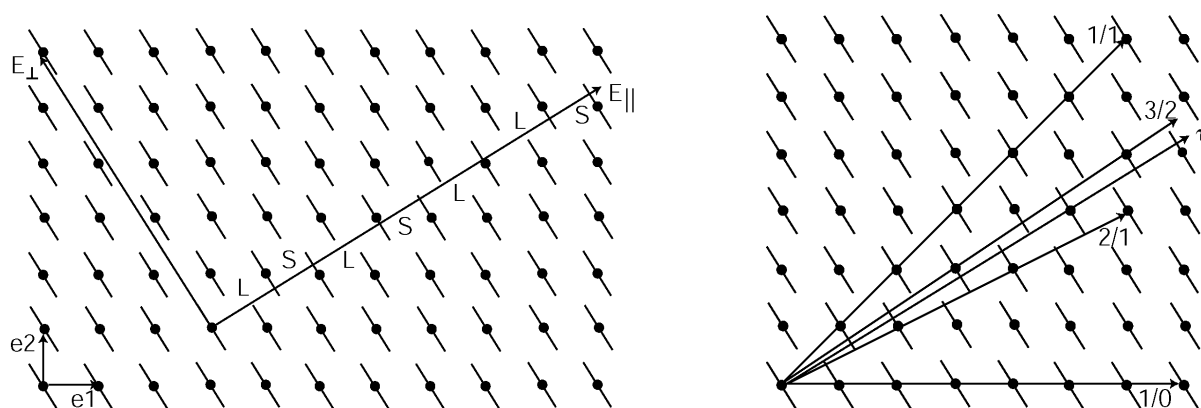
Reciprokou mřížkou k bcc mřížce je fcc mřížka s parametrem $a/2$.

4. Stereografická projekce je projekcí 3D \rightarrow 2D, která zachovává úhly mezi směry a rovinami.

SP krystalografického směru je bod.

SP krystalografické roviny je část kružnice.

atomem v každém mřížkovém bodě v hyperprostoru o 2 dimenzích (budeme ji nazývat hypermřížka). Reálný jednodimenzionální prostor protíná hyperprostor podél přímky E_{\parallel} . V reálném světě můžeme pozorovat pouze atomy, které jsou dostatečně "blízko", řekněme blíže osy E_{\parallel} než je jejich poloměr. Velikost atomů je schematizována krátkými úsečkami. V reálném světě tedy pozorujeme atomy, mezi kterými je buď kratší vzdálenost (S), nebo delší vzdálenost (L, obr. A1.2a). Úhel mezi E_{\parallel} a translačními vektory \vec{e} určuje, jestli je střídání S a L periodické nebo kvaziperiodické.



Obrázek A1.2 Projekce z hyperprostoru 2D do 1D.

E_{\parallel} je vektor ve 2D: $\vec{E}_{\parallel} = u\vec{e}_1 + v\vec{e}_2$. Na obr. A1.2b se znázorněné směry E_{\parallel} charakterizují poměrem u/v .

Pokud je u/v racionální číslo, u a v lze vyjádřit celými čísly. Vyjdeme-li z počátku podél E_{\parallel} , po uražení vzdálenosti $d = |u\vec{e}_1 + v\vec{e}_2|$ dosáhneme místa, kde E_{\parallel} prochází přesně hypermřížkovým bodem. Vzdálenost d nazýváme mřížový parametr (v reálném prostoru); všechny atomy mezi počátkem a uzlovým bodem $u\vec{e}_1 + v\vec{e}_2$ tvoří bázi.

Naopak, pokud u/v je iracionální číslo (např. zmíněné τ), E_{\parallel} prochází pouze jediným uzlovým bodem hypermřížky - počátkem, sekvence S a L se nikdy neopakuje a tato řada je kvaziperiodická. Kvaziperiodická 1D osa tedy může být považována za projekci periodické 2D hypermřížky.

Typy kvazikrystalů

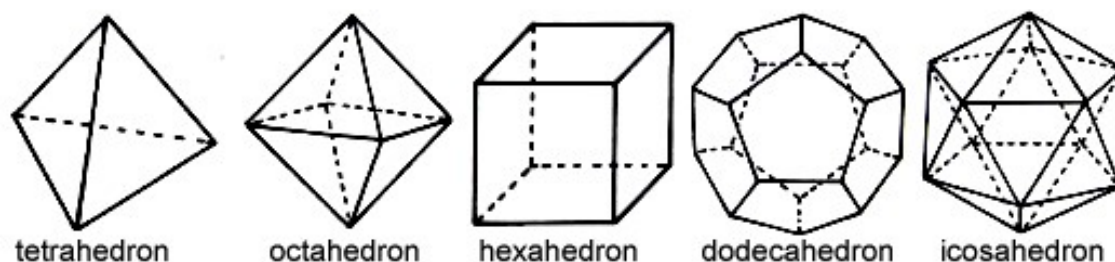
Do dnešního dne bylo nalezeno přes 100 různých kvazikrystalických materiálů, které mohou být rozděleny podle počtu kvaziperiodických os:

- "Fibonacciho kvazikrystal" které mají dvě periodické osy a jednu kvaziperiodickou osu; takový krystal tedy můžeme považovat za strukturu periodickou ve 4D;
- kvazikrystal s 1 periodickou osou a 2 kvaziperiodickými osami, pro jejichž konstrukci potřebujeme 5 periodických os;
- "dokonalé kvazikrystal" se 3 kvaziperiodickými osami; jejich směry a roviny se popisují pomocí 6 periodických os a tedy 6 Millerových indexů.

Ikosahedrální kvazikrystaly

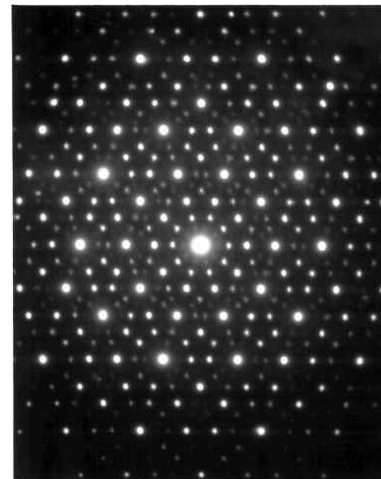
Patří mezi dokonalé kvazikrystaly. Ikosahedron je jedním z 5 tzv. Platónských polyedrů (= pravidelných mnohostěnů tvořených stěnami ze stejných mnohoúhelníků, obr. A1.3).

Ikosahedron a dodekahedron mají stejné operace symetrie, zejména 6 rotačních os řádu 5. Je zajímavé, že iracionální číslo, které potřebujeme pro projekci z 6D hyperprostoru do 3D je τ nalezené Fibonacci, neboť τ lze také spočítat jako $2\cos(\pi/5)$, kde je skrytá pětičetná symetrie.



Obrázek A1.3 Pět Platónských těles zkonstruovaných z pravidelných mnohoúhelníků. Dodekahedron a ikosahedron nemohou být primitivní buňkou pro periodické krystaly (podobně jako pětiúhelník ve 2D).

Ikosahedrální mono-kvazikrystal může mít vnější tvar ikosahedronu nebo dodekahedronu (obr. A1.4).



Obrázek A1.4 a) Mono-kvazikrystal ve tvaru dodekahedronu. b) Difrakční elektronový obrazec odhaluje zdánlivou osu symetrie 10 (ve skutečnosti jde o pětičetnou osu symetrie).

Poznámky:

1) "Symetrie řešení je minimálně stejného řádu, jako symetrie řešeného problému" postuloval P. Curie. Krystalová osa rotace řádu n tedy může vést k difrakčnímu obrazci se symetrií $2n$.

2) Po objevu kvazikrystalů změnila The International Union of Crystallography definici termínu "krystal" a začala rozlišovat mezi periodickými a neperiodickými krystaly.

Tradiční definice: "Krystal je periodická struktura."

Definice přijatá v r. 1992: "Krystal je pevná látka, která vytváří bodovou difrakci." *Acta Crystallographica A48 (1992), 922-946, strana 928.*

3) Vnější tvar monokrystalů nemusí být stejný jako tvar jeho primitivní buňky; totéž platí pro operace symetrie. Například přírodní fcc nebo bcc monokrystaly mají občas také tvar ikosahedronu.

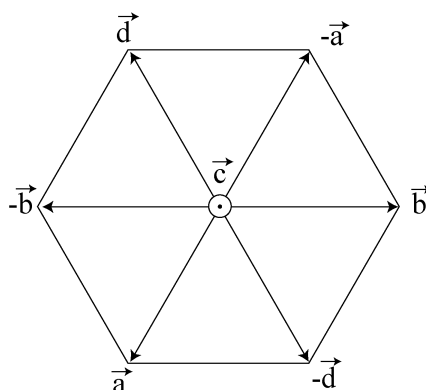
PŘÍLOHA 2 – SYMETRIE INDEXŮ A ZÁPIS SE 4 INDEXY U HEXAGONÁLNÍ TĚSNĚ USPOŘÁDANÉ MŘÍŽKY

Ověřme, že při rotaci okolo osy \vec{c} o $+60^\circ$ (operace symetrie v hexagonální soustavě) se indexy obecné roviny $(h, k, \overline{h+k}, \ell)$ mění také symetricky.

Budeme předpokládat, že translační vektory $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d})$ jsou pevné a provedeme první rotaci krystal okolo osy \vec{c} . Zvolená rovina po této rotaci protíná osu $-\vec{d}$ ve stejné vzdálenosti, v jaké před rotací protínala osu \vec{a} ; osu \vec{a} ve stejné vzdálenosti, jakou před rotací protínala osu $-\vec{b}$, atd. (obr. A2.1). Osy $(\vec{b}$ a $\vec{d})$ se obdobně transformovaly na osy $(-\vec{a}$ a $-\vec{b})$ a zápis indexů roviny je tedy $(\overline{k}, h+k, \overline{h}, \ell)$. Můžeme pokračovat v rotacích o 60° a dostaneme posloupnost:

$$\begin{aligned}
 (h, k, \overline{h+k}, \ell) & \quad (1) \\
 (\overline{k}, h+k, \overline{h}, \ell) & \quad (2) \\
 (\overline{h+k}, h, k, \ell) & \quad (3) \\
 (\overline{h}, \overline{k}, h+k, \ell) & \quad (4) \\
 (k, \overline{h+k}, h, \ell) & \quad (5) \\
 (h+k, \overline{h}, \overline{k}, \ell) & \quad (6)
 \end{aligned}$$

Je vidět, že první 3 indexy roviny v případech 1, 3 a 5 pouze cyklicky permutují. U rotací 2, 4 a 6 je navíc třeba změnit znaménka.



Obrázek A2.1 4 translační vektory u mřížky hcp.

Stejný postup vede u krystalografických směrů k posloupnosti:

$$\frac{1}{3} [2u - v, -u + 2v, \overline{u + v}, 3w] \quad (1)$$

$$\frac{1}{3} [\overline{-u + 2v}, u + v, \overline{2u - v}, 3w] \quad (2)$$

$$\frac{1}{3} [\overline{u + v}, 2u - v, -u + 2v, 3w] \quad (3)$$

$$\frac{1}{3} [\overline{2u - v}, \overline{-u + 2v}, u + v, 3w] \quad (4)$$

$$\frac{1}{3} [-u + 2v, \overline{u + v}, 2u - v, 3w] \quad (5)$$

$$\frac{1}{3} [u + v, \overline{2u - v}, \overline{-u + 2v}, 3w] \quad (6).$$

PŘÍLOHA 3 – FYZIKÁLNÍ DEFINICE RECIPROKÉHO PROSTORU

Ve fyzice je reciproký prostor definován pomocí Fourierova rozvoje. Předpokládejme nějakou periodickou funkci s periodou a v jedné dimenzi (x). Pokud by funkcí byla prostá sinusovka, můžeme ji zapsat jako:

$$f(x) = S_k \sin(2k\pi x / a); \quad k \text{ je přirozené číslo}$$

Pokud je funkce jakkoli divoká nicméně periodická, lze ji aproximovat Fourierovým rozvojem, tj. součtem konečného počtu funkcí sinus a kosinus:

$$f(x) = f_0 + \sum_k [C_k \cos(2k\pi x / a) + S_k \sin(2k\pi x / a)]$$

V argumentu funkcí sin nebo cos je člen

$$2k\pi x / a = qx$$

kde $q = 2k\pi/a$ je bod reciproké mřížky, rozměr m^{-1} . Faktor 2π se tedy objevuje kvůli podmínce periodičnosti funkcí sin a cos. Ve třech rozměrech mají fyzikové v oblibě používat zhuštěný zápis s využitím komplexních čísel:

$$f(\vec{r}) = \sum_g f_g e^{i\vec{g}\vec{r}}$$

**PŘÍLOHA 4 – POUŽITÍ RECIPROKÉHO PROSTORU
PRO INDEXACI DIFRAKTOGRAMU
ZÍSKANÉHO TRANSMISNÍ ELEKTRONOVOU MIKROSKOPIÍ**

Skalární součin $\vec{g} \cdot \vec{B} = 0$

Každý difrakční vektor $\vec{g} = h \ k \ \ell$ může být považován za vektor z RP. Skutečně; \vec{g} je kolmé k rovině $(h \ k \ \ell)$ z PP a obecně každá normála k jakékoli krystalografické rovině $(h \ k \ \ell)$ z PP je rovnoběžná se směrem z RP o stejných indexech.

$$\vec{g} = h\vec{A} + k\vec{B} + \ell\vec{C}$$

Směr prošlého svazku elektronů \vec{B} (nebo \vec{BD} : *beam direction*) je rovnoběžný s nějakým krystalografickým směrem v PP.

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

$\vec{g} \cdot \vec{B} = 0$ neboť

$$(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}) \cdot (h\vec{A} + k\vec{B} + \ell\vec{C}) = uh + vk + w\ell$$

ovšem $[u \ v \ w]$ je směrem ležícím v rovině $(h \ k \ \ell)$, z čeho plyne

$$uh + vk + w\ell = 0$$

Tento výsledek je platný pro jakoukoli krystalovou mřížku. To znamená, že vektorový součin libovolných dvou vektorů z difrakčního obrazce (vektory v RP) je vektor v PP (viz také 5.2.2. b) rovnoběžný s \vec{B} .

Poznámky:

1) Pro vektor \vec{g} se někdy používají hranaté závorky $[\]$ (\vec{g} je vektor), někdy kulaté závorky $(\)$ (v PP \vec{g} označuje rovinu $(h \ k \ \ell)$, na které došlo k difrakci), nejčastěji se však indexy píší bez závorek.

2) Uvedené výpočty platí pouze v aproximaci, kdy Ewaldova koule může být nahrazena rovinou, tedy když vlnová délka elektronů je výrazně menší než mřížový parametr. To je v transmisní elektronové mikroskopii zaručeno.

PŘÍLOHA 5 – DOKONALÉ VYPLNĚNÍ PROSTORU KOULEMI

V literatuře včetně těchto skript se uvádí, že ideální zaplnění prostoru tuhými koulemi splňují struktury fcc a hcp. Tuto domněnku vyslovil už Johannes Kepler. Ve skutečnosti dlouho neexistoval všeobecně akceptovaný důkaz tohoto tvrzení; jednalo se o jeden z nejznámějších nevyřešených geometrických problémů, který odolával důkazu 400 let. V r. 1998 byl předložen T. Halesem velmi komplikovaný důkaz Keplerovy domněnky, který ovšem nebyl plně ověřen. Hales v r. 2003 zahájil velký projekt ověření Keplerovy domněnky pomocí masivních numerických výpočtů v projektu "Flyspeck". V roce 2008 předložil opravený důkaz, v roce 2014 oznámil definitivní potvrzení důkazu a ukončení projektu Flyspeck. Článek prošlý recenzí byl publikován v časopise Forum of Mathematics, Pi.

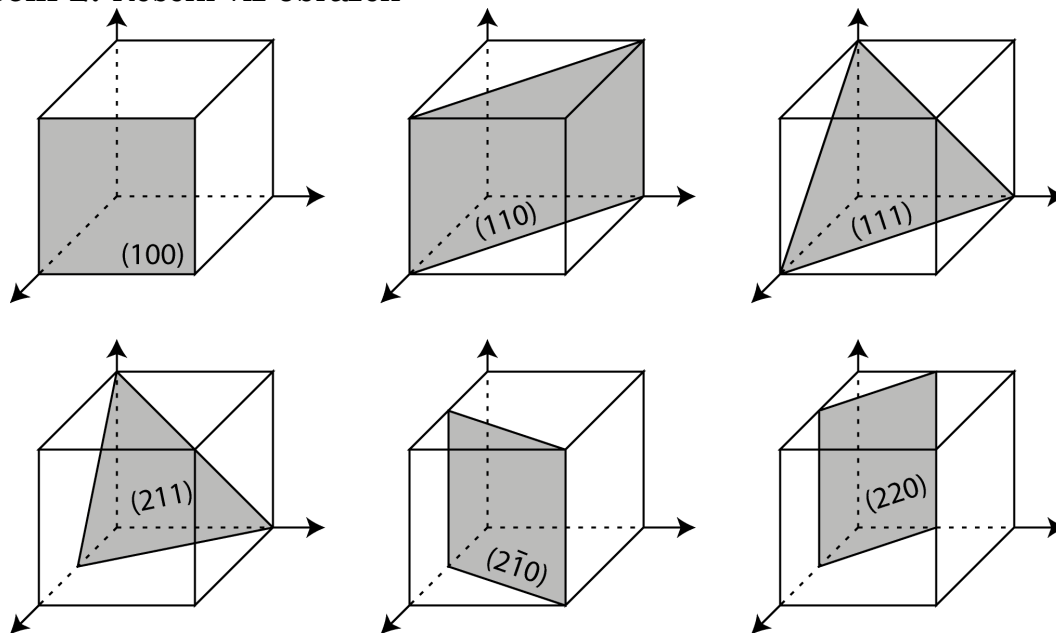
Cipra, B. "Packing Challenge Mastered at Last", *Science* **281**, 1267, 1998
Hales, T. et al. "A formal proof of the Kepler conjecture", Forum of Mathematics, Pi 5 (2017), e2.

Řešení cvičení z textu:

Cvičení 1.

- 3
- primitivní buňky: B, C, D, I, J; složené buňky G, H (řádu 2); A, E, F nemohou sloužit jako základní buňka
- všechny
- 4, 1, ano
- hexagonální, čtvercová, hexagonální, čtvercová.

Cvičení 2. Řešení viz obrázek



Cvičení 3. Ve 2D existuje 5 Bravaisových mřížek.

Cvičení 4. $\bar{a}' = \frac{a}{2} \langle 111 \rangle$, $\alpha = 70^\circ 32'$

Cvičení 5.

1	(123)	($\bar{1}2\bar{3}$)		5	(132)	($\bar{1}\bar{3}\bar{2}$)		9	(213)	($\bar{2}\bar{1}\bar{3}$)
2	($\bar{1}23$)	($1\bar{2}\bar{3}$)		6	($\bar{1}32$)	($1\bar{3}\bar{2}$)		10	($\bar{2}13$)	($2\bar{1}\bar{3}$)
3	($1\bar{2}\bar{3}$)	($\bar{1}23$)		7	($1\bar{3}\bar{2}$)	($\bar{1}\bar{3}2$)		11	($2\bar{1}3$)	($\bar{2}1\bar{3}$)
4	($12\bar{3}$)	($12\bar{3}$)		8	($\bar{1}\bar{3}2$)	($13\bar{2}$)		12	($\bar{2}\bar{1}3$)	($21\bar{3}$)
13	(231)	($\bar{2}\bar{3}\bar{1}$)		17	(312)	($\bar{3}\bar{1}\bar{2}$)		21	(321)	($\bar{3}\bar{2}\bar{1}$)
14	($\bar{2}31$)	($2\bar{3}\bar{1}$)		18	($\bar{3}12$)	($3\bar{1}\bar{2}$)		22	($\bar{3}21$)	($3\bar{2}\bar{1}$)
15	($2\bar{3}1$)	($\bar{2}3\bar{1}$)		19	($3\bar{1}2$)	($\bar{3}1\bar{2}$)		23	($3\bar{2}1$)	($\bar{3}2\bar{1}$)
16	($\bar{2}\bar{3}1$)	($23\bar{1}$)		20	($\bar{3}\bar{1}2$)	($31\bar{2}$)		24	($\bar{3}\bar{2}1$)	($32\bar{1}$)

Cvičení 6: $\bar{a}' = \frac{a}{2} \langle 110 \rangle$, $\alpha = 60^\circ$

Cvičení 7: rovina I = $(1 \bar{1} 00)$
 rovina II = $(10 \bar{1} 0)$
 rovina III = $(01 \bar{1} 0)$

Jsou to tři ekvivalentní roviny typu $\{1 \bar{1} 00\}$.

Cvičení 8: Nejprve je nutné oindexovat směry v zápisu se třemi indexy a pak přejít k zápisu se 4 indexy:

$$\text{směr I: } 1/2\bar{a} + \bar{b} + \bar{c} = \frac{1}{2}[1 \ 2 \ 2] \rightarrow [1 \ 2 \ 2] = [0 \ 1 \ \bar{1} \ 2]$$

$$\text{směr II: } [1 \ \bar{2} \ 1 \ 3]$$

$$\text{směr III: } [1 \ \bar{1} \ 0 \ 1]$$

$$\text{směr } \bar{a}: [2 \ \bar{1} \ \bar{1} \ 0]$$

$$\text{směr } \bar{b}: [\bar{1} \ 2 \ \bar{1} \ 0]$$

$$\text{směr } \bar{c}: [0 \ 0 \ 0 \ 1]$$

$$\text{vektor I: } \frac{1}{2}[1 \ 2 \ 2] = \frac{1}{6}[0 \ 3 \ \bar{3} \ 6] = \frac{1}{2}[0 \ 1 \ \bar{1} \ 2] \text{ (u vektoru musíme zachovat jeho velikost)}$$

$$\text{vektor II: } \frac{1}{3}[1 \ \bar{2} \ 1 \ 3]$$

$$\text{vektor III: } \frac{1}{2}[1 \ \bar{1} \ 0 \ 1]$$

Cvičení 9: 40° .