

Strukturní krystalografie

Krystalické látky, symetrie,
krystalové mřížky, Bravaisovy buňky

Skupenství látek

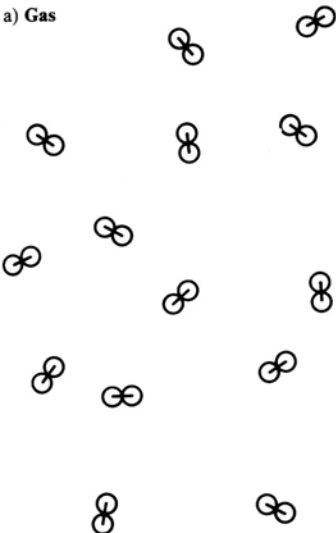
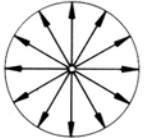

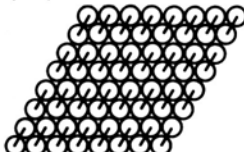
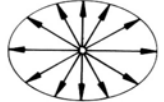
Je-li kinetická energie tepelného pohybu částic (atomy, molekuly) v látce tak velká, že vzájemnou interakci můžeme zanedbat, mluvíme o *plynném skupenství* látky.

S klesající teplotou klesá kinetická energie a mezi částicemi se začínají více uplatňovat vazebné interakce a látka přechází do *skupenství kapalného*. V prostoru můžeme najít uspořádané oblasti, které odpovídají vazbám v molekulách plynu – tedy jedná se o lokální uspořádání na krátkou vzdálenost.

Při dalším ochlazení pod bod tuhnutí, je kinetická energie částic tak nízká, že jednotlivé stavební prvky jsou navzájem spojeny - vzniknou *stabilní chemické vazby*. Mluvíme potom o *skupenství pevném* (tuhém).

Skupenství látek

Schematické
znázornění hlavních
rozdílů ve skupenství
látek.

Representation of the state	Retention of shape	Retention of volume	Distribution of molecules	Physical properties
<p>a) Gas</p>  <p>Boiling point</p>	No	No	Statistically homogeneous ¹	 <p>Isotropic²</p>
<p>b) Liquid</p>  <p>Melting point</p>	Yes	No		
<p>c) Crystal</p> 	Yes	Yes	Periodically homogeneous ¹	 <p>Anisotropic³</p>

Látky amorfní

Seskupení částic v pevném stavu může být nejen uspořádané ale i náhodné. Při náhodném uspořádání, kdy se strukturní stav podobá kapalinám, mluvíme o látkách amorfních. Pro tyto látky je příznačná izotropie fyzikálních i chemických vlastností a nejednoznačná teplota tání. Podle Nickela (1995) lze tyto látky rozdělit do dvou skupin:

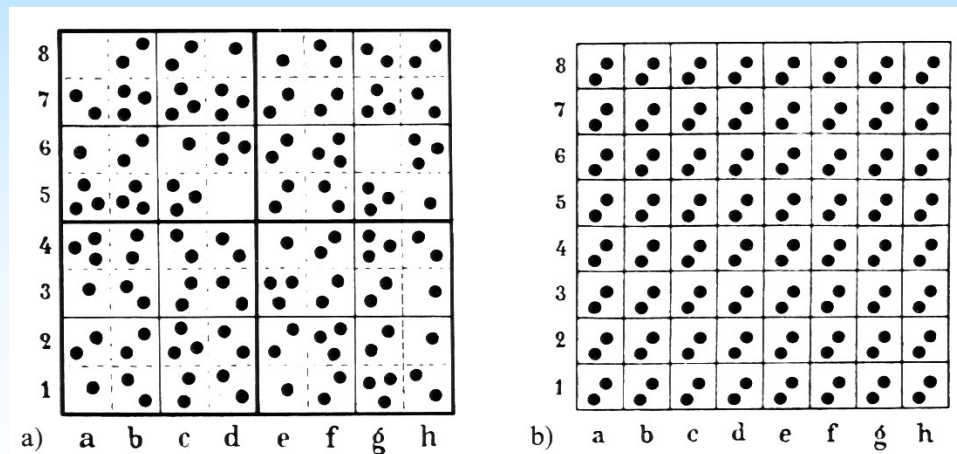
- **amorfní substance**, které nikdy nebyly krystalické a nedifraktují RTG záření nebo elektrony
- **metamiktní substance**, které původně byly krystalické, ale jejich struktura byla zničena rozpadem radioaktivních prvků.

Látky krystalické, krystaly

Látky krystalické jsou pevné látky, jejichž stavební částice jsou ve většině případů spojovány do *stavebních jednotek* a ty jsou v prostoru rozmístěny uspořádaně. Většina látek má tendenci při dostatečně nízké teplotě krystalizovat a tím se dostat do stavu s nejnižší vnitřní energií.

Krystal lze charakterizovat takto:

Krystal je homogenní anizotropní prostředí a je fyzikálně dobře definován.



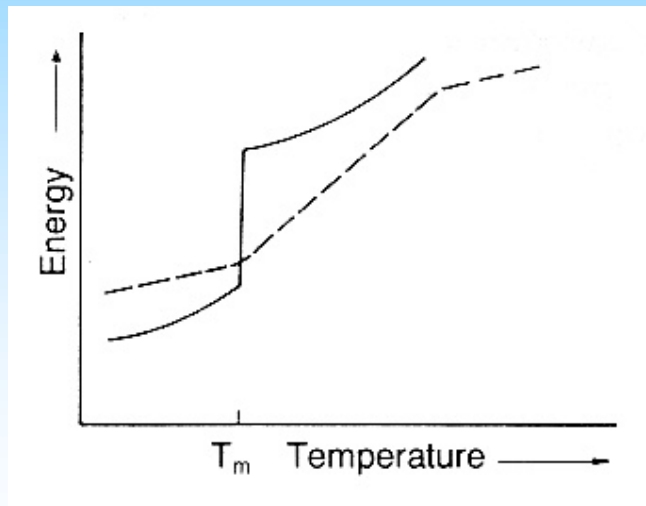
Statistical (a) and periodic (b) homogeneity.

Látky krystalické, krystaly

Pro krystal rovněž platí:

- krystal má pevné chemické složení a ostrý bod tání, který je pro danou látku charakteristický.
- krystal má schopnost omezit svůj vnější tvar plochami, které se sbíhají v hranách a rozích.

Rozhodujícím kritériem, zda je látka krystalická, je však její vnitřní stavba.



Změny vnitřní energie při vzrůstu teploty pro krystal (plná linie) a pro amorfni substanci (čárkovaná linie). T_m je bod tání krystalu.

Základní pojmy, ideální krystal

Krystalový prostor je prostor, který krystal zaujímá.

Krystal *uspořádaný* a *neuspořádaný* se liší mírou periodicity.

Těleso, tvořené jediným krystalem nebo kompaktním agregátem několika krystalů se stejnou orientací, označujeme jako *monokrystal*.

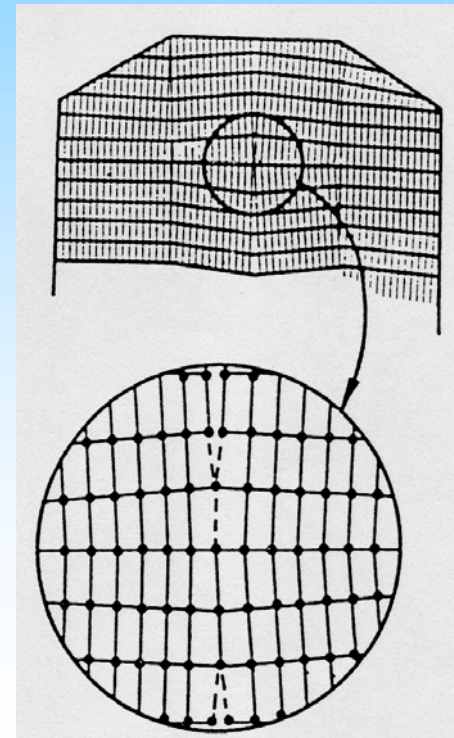
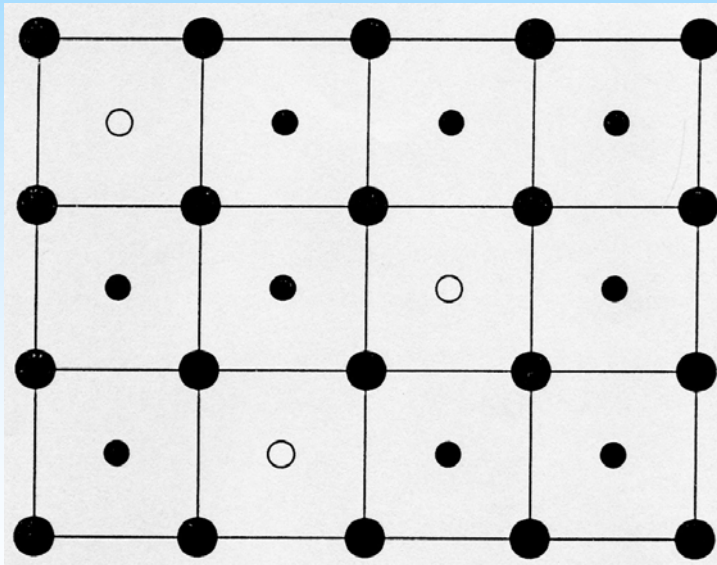
Z hlediska přítomnosti lokálních poruch, nečistot a teplotních kmitů atomů rozlišujeme krystaly *ideální* a *reálné*.

Ideální krystal lze definovat jako homogenní anizotropní prostředí s ostrým bodem tání a trojrozměrně periodickým uspořádáním stavebních částic.

Reálný krystal

U reálného krystalu dochází k porušování trojrozměrné periodicity zejména:

- ✓ ohraničením povrchu
- ✓ na některých atomárních pozicích dochází k substituci jiným atomem
- ✓ během růstu krystalu vznikají poruchy v krystalové struktuře
- ✓ ve vrstevných strukturách bývá periodicitu narušena odlišným nebo zcela nepravidelným kladem vrstev.



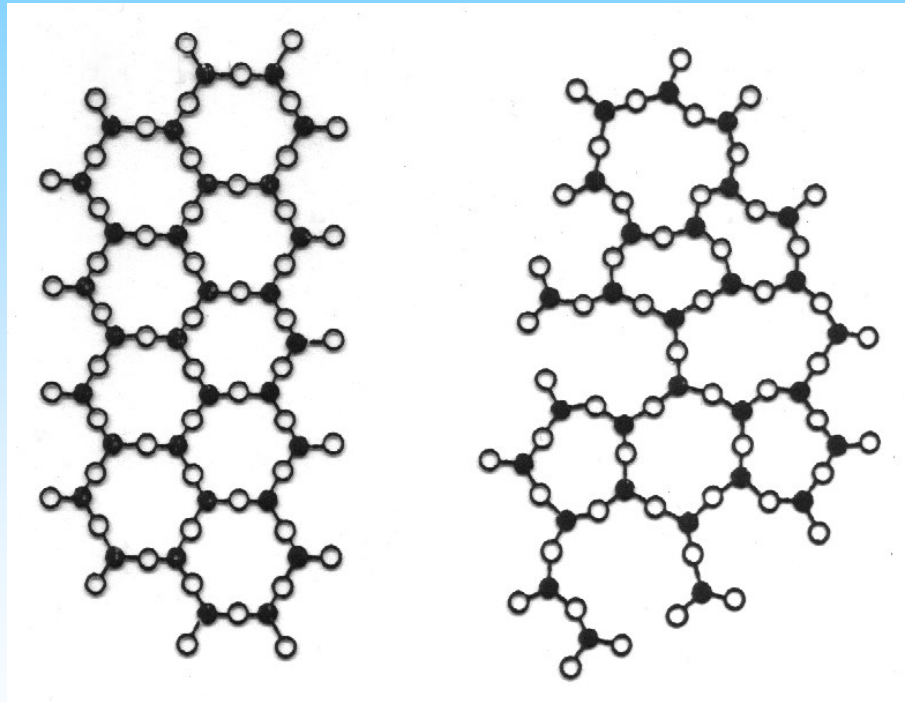
Definice reálného krystalu - pojmy

Je zřejmé, že pro reálné krystaly definice ideálního krystalu neplatí. Proto byla navržena nová definice krystalu (Dornberger - Schiffová, Grellová, 1982). Pro její pochopení je třeba objasnit některé pojmy:

- ❑ *krystalová struktura*
- ❑ *lokální uspořádání částic*
- ❑ *celkové uspořádání částic*

Definice reálného krystalu - pojmy

Rozdíl v uspořádání stavebních částic vidíme na strukturách krystalických modifikací SiO_2 a amorfního SiO_2 .



Definice reálného krystalu - pojmy

Stavební jednotka je disjunktní (nesouvislou) částí struktury. Pro výběr stavební jednotky platí některá pravidla:

1. výběr volíme tak, aby byli optimálně charakterizovány všechny podstatné rysy v uvažované struktuře
2. žádná část stavební jednotky nemůže zároveň náležet další jednotce
3. vybereme-li určitou část struktury jako stavební jednotku, bude každá další ekvivalentní část struktury stavební jednotkou
4. stavební jednotky vybíráme tak, aby počet druhů stavebních jednotek byl co nejmenší
5. výběr stavební jednotky má pokud možno respektovat stereochemickou strukturní jednotku (např. koordinační polyedr).

Definice reálného krystalu - pojmy

Konfigurace stavebních jednotek - u výše uvedeného příkladu krystalických modifikací SiO_2 lze stavební jednotku (tetraedr SiO_4) převést do druhého pomocí dvou transformací - existují dvě možné konfigurace párů stavebních jednotek. U amorfního skla je nekonečný počet konfigurací párů - struktura nemá uspořádání na „dlouhou vzdálenost“.

Definice reálného krystalu

Pomocí stavebních jednotek a konfigurací jejich stavebních párů definujeme krystal takto:

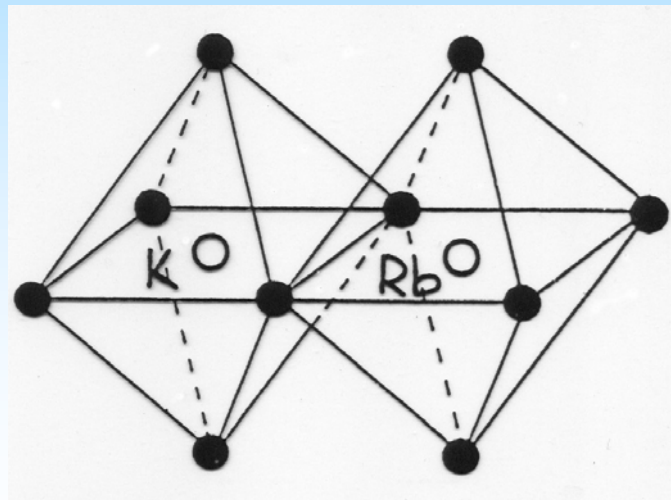
Látku považujeme za krystalickou, když jsou pro stavební jednotky, které jsou pro ni charakteristické, splněny tyto podmínky:

- 1. Všechny stavební jednotky jsou geometricky ekvivalentní, nebo počet druhů stavebních jednotek je malý v porovnání s celkovým počtem stavebních jednotek obsažených v uvažovaném krystalu.**
- 2. Počet druhů párů sousedících stavebních jednotek je také malý v porovnání s celkovým počtem těchto párů v krystalu.**

Definice reálného krystalu – příklad

Příkladem může být směsný krystal (K,Rb)Cl, kde jsou dva druhy stavebních jednotek - K-oktaedry a Rb-oktaedry. Páry stavebních jednotek jsou možné pouze tři:

- 1) K-oktaedr - Rb-oktaedr
- 2) K-oktaedr - K-oktaedr
- 3) Rb-oktaedr - Rb-oktaedr



Symetrie - transformace základních vektorů

Mějme dvě trojice nekomplanárních mřížkových vektorů $\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, \mathbf{c}_1$ a $\mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2, \mathbf{c}_2$.
Mezi těmito trojicemi platí následující vztahy:

$$\mathbf{a}_2 = s_{11}\mathbf{a}_1 + s_{12}\mathbf{b}_1 + s_{13}\mathbf{c}_1$$

$$\mathbf{b}_2 = s_{21}\mathbf{a}_1 + s_{22}\mathbf{b}_1 + s_{23}\mathbf{c}_1$$

$$\mathbf{c}_2 = s_{31}\mathbf{a}_1 + s_{32}\mathbf{b}_1 + s_{33}\mathbf{c}_1$$

$$\mathbf{a}_1 = t_{11}\mathbf{a}_2 + t_{12}\mathbf{b}_2 + t_{13}\mathbf{c}_2$$

$$\mathbf{b}_1 = t_{21}\mathbf{a}_2 + t_{22}\mathbf{b}_2 + t_{23}\mathbf{c}_2$$

$$\mathbf{c}_1 = t_{31}\mathbf{a}_2 + t_{32}\mathbf{b}_2 + t_{33}\mathbf{c}_2$$

Symetrie - transformace základních vektorů

Maticově lze rovnice vyjádřit:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{c}_1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{c}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{c}_2 \end{pmatrix}$$

Symetrie - transformace základních vektorů

Obě matice pak můžeme pro zjednodušení označit:

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} = \mathbf{S} , \quad \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{pmatrix} = \mathbf{T}$$

Matice \mathbf{T} je inverzní k matici \mathbf{S} , tedy platí $\mathbf{T} = \mathbf{S}^{-1}$.

Krystalografické transformace můžeme chápat jako změnu polohy bodu o souřadnicích x, y, z díky operaci symetrie do nové polohy x', y', z' v rámci jedné ortogonální souřadné soustavy.

Z lineárních transformací se zde uplatňují pouze **transformace izometrické**. Postačující podmínkou je, aby transformační matice byla ortogonální.

Matice

Maticí \mathbf{A} typu nazýváme schéma (m,n) reálných čísel $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{mn}$, sestavených v m řádcích a n sloupcích. Je-li $m = n$, pak \mathbf{A} se nazývá *čtvercová matice* n -tého řádu. Prvky $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$ matice \mathbf{A} tvoří její hlavní diagonálu.

Hodnosti matice označujeme h lineárně nezávislých řádků a je-li každý další řádek matice jejich lineární kombinací.

Matice, která vznikne překlopením matice \mathbf{A} kolem hlavní diagonály (výměna řádků za sloupce) se nazývá *transponovaná matice* k matici \mathbf{A} (je typu n,m) a značí se \mathbf{A}^T .

Matice \mathbf{B} (k,n) , kde $b_{11} b_{22} \dots b_{kk} \neq 0$ a kde prvky pod hlavní diagonálou jsou rovny nule, má hodnotu k .

Matice

Pro ortogonální matici $\mathbf{A} = (a_{ij})$ n -tého řádu platí, že součet součinů prvků libovolného řádku s odpovídajícími prvky jiného řádku je roven nule a součet čtverců prvků libovolného řádku je roven jedné. Determinant ortogonální matice je $+1$ nebo -1 . Součin ortogonálních matic je opět matice ortogonální. Inverzní matice k ortogonální matici je opět ortogonální matice.

Inverzní maticí ke čtvercové matici \mathbf{A} n -tého řádu nazýváme čtvercovou matici \mathbf{A}^{-1} n -tého řádu, pro niž platí $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$, kde \mathbf{I} je jednotková matice. K matici \mathbf{A} existuje inverzní matice \mathbf{A}^{-1} tehdy a jen tehdy, je-li \mathbf{A} *regulární*. Čtvercová matice $\mathbf{A} = (a_{ij})$ n -tého řádu se nazývá regulární, je-li její determinant $|a_{ij}|$ různý od nuly (\mathbf{A} má hodnost n).

Matice

Determinant matice n-tého stupně vypočteme: pro matici $n = 2$ jako

$$A = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \text{ a pro matici } n = 3 \text{ jako}$$

$$A = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{21}a_{32}a_{13} + a_{31}a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{23}a_{32}a_{11} - a_{33}a_{12}a_{21}.$$

Determinant se nezmění, přičteme-li jednomu jeho řádku lineární kombinaci ostatních řádků. Determinant je roven nule, je-li jeden z jeho řádků lineární kombinací ostatních. Determinant změní znaménko, vyměníme-li mezi sebou dva řádky. Determinant, který vznikne z determinantu A vynecháním i -tého řádku a j -tého sloupce se nazývá subdeterminant $(n-1)$ -ního stupně determinantu A příslušný k prvku a_{ij} . Čtverec determinantu ortogonální matice je roven jedné.

Příklad

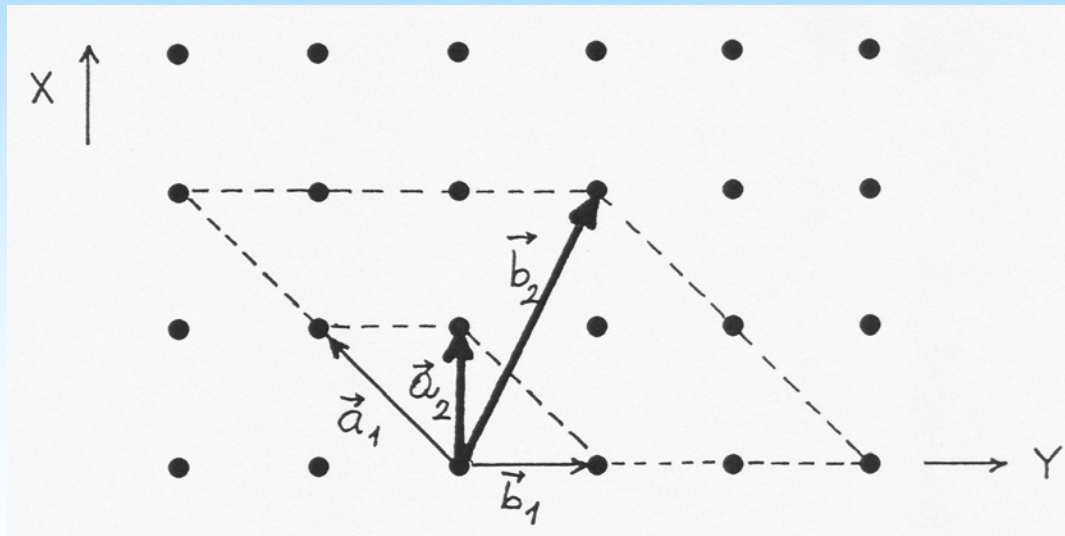
Zadání: Vyjádřeme „nové“ vektory přímé mřížky \mathbf{a}_2 \mathbf{b}_2 \mathbf{c}_2 pomocí starých vektorů \mathbf{a}_1 \mathbf{b}_1 \mathbf{c}_1 .

Z následujícího obrázku snadno odvodíme transformační rovnice, kdy vektor \mathbf{c}_1 je kolmý na nákresnu (xy) a je totožný s \mathbf{c}_2 .

$$\mathbf{a}_2 = 1\mathbf{a}_1 + 1\mathbf{b}_1 + 0\mathbf{c}_1$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\mathbf{a}_1 + 3\mathbf{b}_1 + 0\mathbf{c}_1$$

$$\mathbf{c}_2 = 0\mathbf{a}_1 + 0\mathbf{b}_1 + 1\mathbf{c}_1$$



Příklad

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{c}_1 \end{pmatrix}$$

V maticovém vyjádření označíme námi vytvořenou matici jako transformační matici \mathbf{S} . Známe-li transformační matici \mathbf{S} , můžeme užitím inverzní matice $\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{T}$ vyjádřit vektory \mathbf{a}_1 , \mathbf{b}_1 a \mathbf{c}_1 pomocí \mathbf{a}_2 , \mathbf{b}_2 a \mathbf{c}_2 . K sestavení matice \mathbf{T} stanovíme potřebné doplňky S_{ij} a $\det \mathbf{S}$. Výsledná matice bude mít tvar:

$$\mathbf{T} = \mathbf{S}^{-1} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Operace symetrie

Operace symetrie je geometrická transformace, která zachovává vzájemné vzdálenosti v tělese a po jejím provedení nerozlišíme, zda byla s tělesem nějaká transformace provedena.

Rozlišujeme tyto základní operace symetrie:

- **Inverze (I)**
- **Zrcadlení (M)** - $M(o_1, o_2)$, kde o_1 a o_2 jsou osy definující rovinu zrcadlení, např. $M(x, y)$
- **Rotace (R)** - $R(\alpha, o)$, kde α je úhel otáčení a o je osa kolem níž se otáčí, např. $R(\pi, z)$. Může se značit $R_n(o)$, kde $n = 2\pi/\alpha$.
- **Translace (T)**

Operace symetrie můžeme rozdělit na uzavřené, které neobsahují translaci a otevřené, ve kterých je nutná přítomnost translace.

Operace symetrie

Úplná množina operací symetrie se označuje jako grupa operací, což je neprázdná množina G na níž je definována binární algebraická operace $(*)$ – *grupová operace*. Množinu G nazveme grupou, jsou-li splněny tyto postuláty:

1. Ke každé uspořádané dvojici $A, B \in G$ je přiřazen jednoznačně prvek $C \in G$, psáno jako $A*B = C$
2. Pro každé $A, B, C \in G$ platí: $A*(B*C) = (A*B)*C$
3. Existuje takový prvek $E \in G$, že platí: $A*E = E*A = A$, kde A je libovolný prvek grupy G
4. Ke každému prvku $A \in G$ existuje $A^{-1} \in G$ takový, že $A*A^{-1} = A^{-1}*A = E$

Operace symetrie

Operace symetrie jsou prvky grupy operací. Výsledky aplikace grupové operace (*) „násobení“ mezi všemi dvojicemi prvků konečné grupy $G = \{A, B, C, \dots\}$ zapisujeme do formy *multiplikační tabulky*.

	A	B	C	...
A	$A * A$	$A * B$	$A * C$...
B	$B * A$	$B * B$	$B * C$...
C	$C * A$	$C * B$	$C * C$...
⋮	⋮	⋮	⋮	
⋮	⋮	⋮	⋮	
⋮	⋮	⋮	⋮	

Uzavřené operace symetrie - inverze

Bod o souřadnicích (x, y, z) se inverzí transformuje na bod se souřadnicemi (x', y', z') tak, že platí:

$$x' = -x$$

$$y' = -y$$

$$z' = -z$$

Maticově vyjádřeno:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Uzavřené operace symetrie - zrcadlení

Bod o souřadnicích (x, y, z) se zrcadlením transformuje na bod se souřadnicemi (x', y', z') tak, že platí (rovina zrcadlení x,y):

$$x' = x$$

$$y' = y$$

$$z' = -z$$

Maticově vyjádřeno:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$M(x, y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

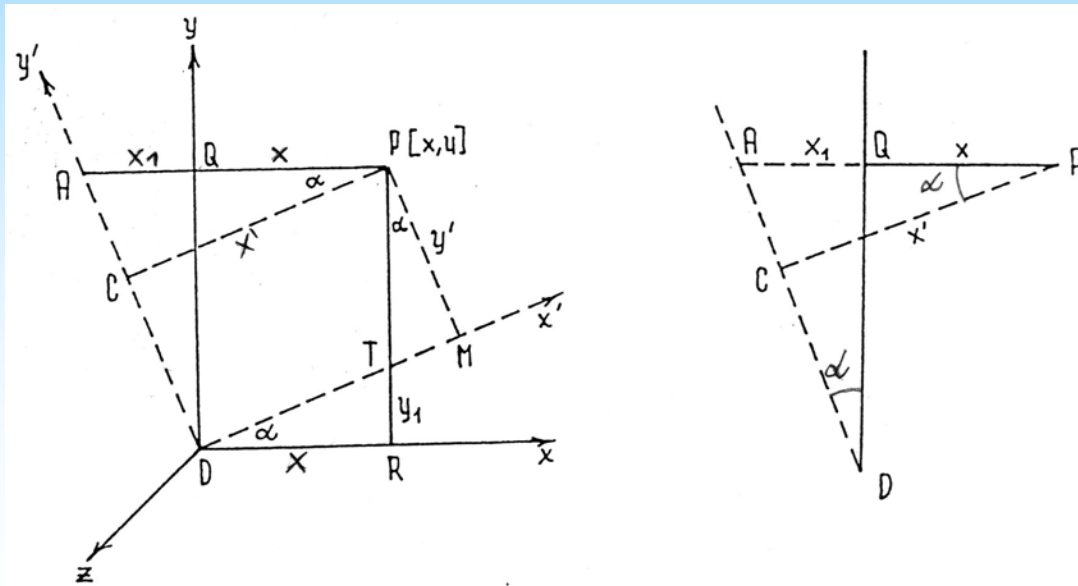
Rotace

Je dán bod $P [x,y,z]$ v ortogonální soustavě souřadnic. Odvodíme transformační rovnice pro souřadnice (x', y', z') tohoto bodu v transformované soustavě, která vznikne otočením o úhel α kolem osy z v kladném smyslu (proti směru hodinových ručiček).

Z trojúhelníku ACP vyplývá: $x' = (x_1 + x) \cos \alpha$ a z trojúhelníku DQA pak: $x_1 = y \operatorname{tg} \alpha$ což po dosazení je $x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha$.

Obdobně plyne i z trojúhelníků TMP a DQA :

$y' = (y - y_1) \cos \alpha$ a $y_1 = x \operatorname{tg} \alpha$. Po dosazení $y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha$



Rotace

Soustava transformačních rovnic bude mít tento tvar:

$$x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha$$

$$y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha$$

$$z' = z$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$R(\alpha, z) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Osa otáčení je rovnoběžná s osou	X			Y			Z		
Otáčení bodu proti směru pohybu hodinových ručiček	1	0	0	$\cos \varphi$	0	$\sin \varphi$	$\cos \varphi$	$-\sin \varphi$	0
	0	$\cos \varphi$	$-\sin \varphi$	0	1	0	$\sin \varphi$	$\cos \varphi$	0
	0	$\sin \varphi$	$\cos \varphi$	$-\sin \varphi$	0	$\cos \varphi$	0	0	1
Otáčení bodu ve směru pohybu hodinových ručiček	1	0	0	$\cos \varphi$	0	$-\sin \varphi$	$\cos \varphi$	$\sin \varphi$	0
	0	$\cos \varphi$	$\sin \varphi$	0	1	0	$-\sin \varphi$	$\cos \varphi$	0
	0	$-\sin \varphi$	$\cos \varphi$	$\sin \varphi$	0	$\cos \varphi$	0	0	1

Rotační inverze

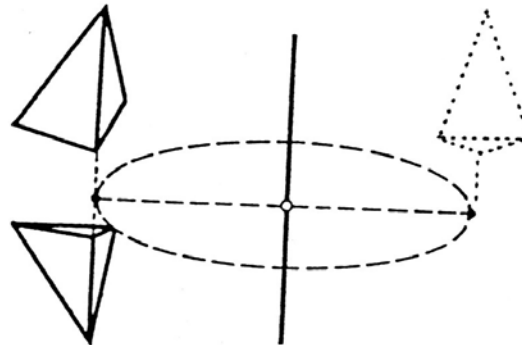
Tato složená operace symetrie vznikla kombinací rotace s inverzí. Kombinuje se rotace o úhel α (podle osy o) s inverzí: $R_i(\alpha, z) = R(\alpha, z) * I$.

$$R_i(\alpha, z) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$R_i(\alpha, z) = \begin{pmatrix} -\cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & -\cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Rotační inverze

Snadno odvodíme např., že rotační inverze o 180° podle osy z je totéž jako operace zrcadlení podle roviny (x,y) .

$$\begin{aligned} R_i(\pi, z) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= M(x, y) \end{aligned}$$



Rotační zrcadlení

Tato operace symetrie je kombinací rotace se zrcadlením v rovině kolmé na osu rotace. Provádíme-li rotaci o úhel α podle osy z , zrcadlíme podle roviny (x,y) :

$$\mathbf{R}_m(\alpha, z) = \mathbf{R}(\alpha, z) * \mathbf{M}(x, y)$$

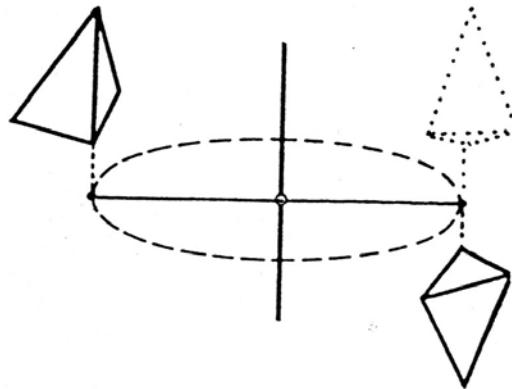
$$R_m(\alpha, z) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$R_m(\alpha, z) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Rotační zrcadlení

Provedeme-li např. operaci rotačního zrcadlení podle osy z o 180° , dostaneme inverzi:

$$R_m(\pi, z) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = I$$



Otevřené operace symetrie - translace

Tato operace symetrie netransformuje původní objekt do výchozí polohy. Aplikujeme-li na bod o souřadnicích (x,y,z) translaci, vyjádřenou vektorem \mathbf{t} , pak pro transformovaný bod (x',y',z') bude platit:

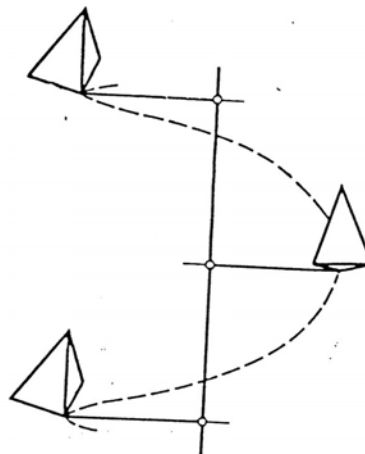
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + t_1 \\ y + t_2 \\ z + t_3 \end{pmatrix}$$



Šroubová operace

Operace symetrie, která vzniká složením rotace a translace podél osy rotace. Translace \mathbf{t} je vyjádřena zlomkem celkového stoupání šroubového pohybu. Jde-li např. o rotaci o π , pak je $\mathbf{t} = \pi/2\pi = 1/2$ a výslednou operaci lze zapsat jako $S(\pi, z, 1/2)$. Zapsáno v maticovém tvaru:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$



Skluzová operace

Operace symetrie, která vzniká kombinací zrcadlení v definované rovině a translace podél této roviny. Velikost posunutí je vyjádřena zlomkem periody identity.

- $G(x, y, x/2)$ je zrcadlení v rovině x, y a posunutí o $1/2$ ve směru x
 - $G(x, y, y/2)$ je zrcadlení v rovině x, y a posunutí o $1/2$ ve směru y
- První z těchto operací aplikovaná na bod (x, y, z) dává bod (x', y', z') :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Prvky symetrie

Prvek symetrie je geometrický prvek (bod, přímka, rovina), vůči němuž provádíme s tělesem příslušnou operaci symetrie. Samotný prvek je invariantní vůči operaci symetrie.

Prvek symetrie	Operace symetrie
Střed symetrie i	Inverze I
Rovina symetrie m	Zrcadlení $M(o_1, o_2)$
Osy rotace n	Rotace $R(\alpha, o)$
Inverzní osy \bar{n}	Rotace s inverzí $R_i(\alpha, o)$
Zrcadlové osy \tilde{n}	Rotace se zrcadlením $R_m(\alpha, o)$
Šroubové osy $n_j \quad (j=1,2,\dots,n-1)$	Rotace s translací $S(\alpha, o, t)$
Skluzné roviny g	Zrcadlení s translací $G(o_1, o_2, t)$

Střed symetrie, střed inverze ($i, \bar{1}, C_i$)

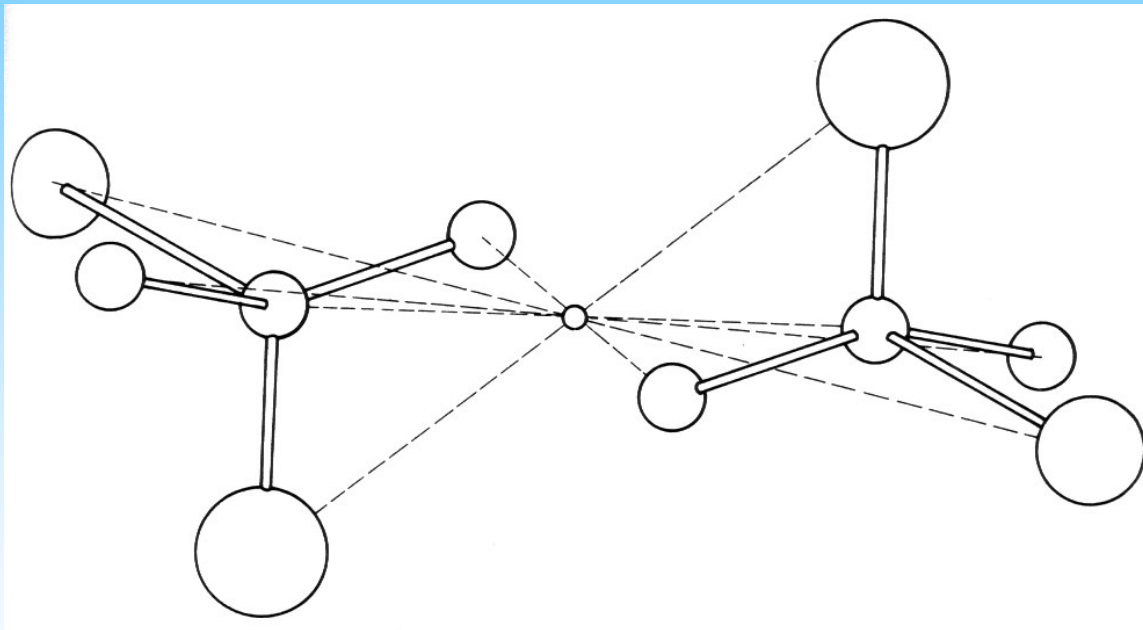
Operace symetrie náležející tomuto prvku symetrie jsou:

1. I
2. $I * I = E$ (identita)

$$\begin{aligned} I * I = I^2 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = E \end{aligned}$$

Střed symetrie

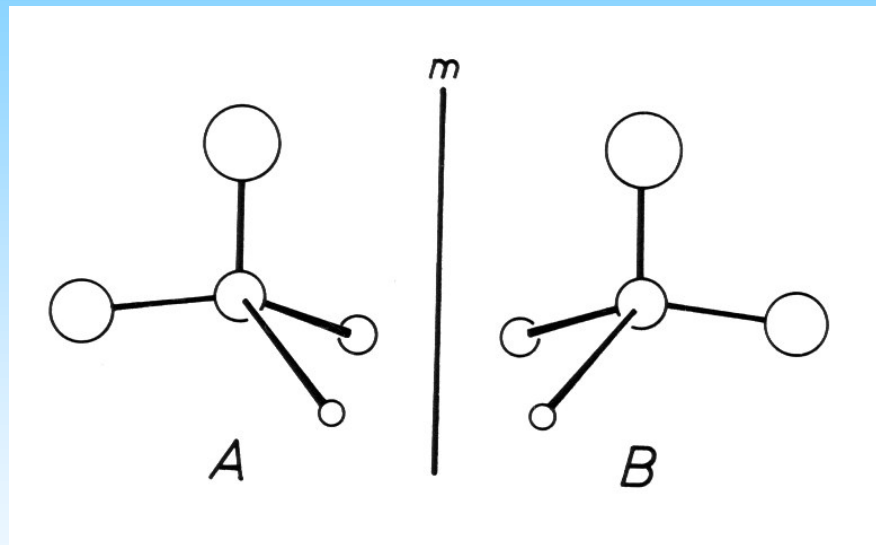
Každá prostorová mřížka, která obsahuje střed symetrie, se označuje jako centrosymetrická. Střed inverze na krystalovém tvaru dává vzniknout paralelní ploše na opačné straně krystalu, opačně orientované.



Rovina symetrie (m, σ)

Operace symetrie náležející tomuto prvku symetrie jsou:

1. $M(o_1, o_2)$
2. $M(o_1, o_2) * M(o_1, o_2) = M^2(o_1, o_2) = E$ (identita)



Osy rotace (n)

Rozlišují se podle velikosti úhlu $\alpha = 2\pi/n$, o který je nutné n-krát otočit tělesem (bodem) kolem osy, abychom se přes nerozlišitelné ekvivalentní polohy vrátili zpět do výchozí pozice. Číslo n je **četnost osy** rotace.

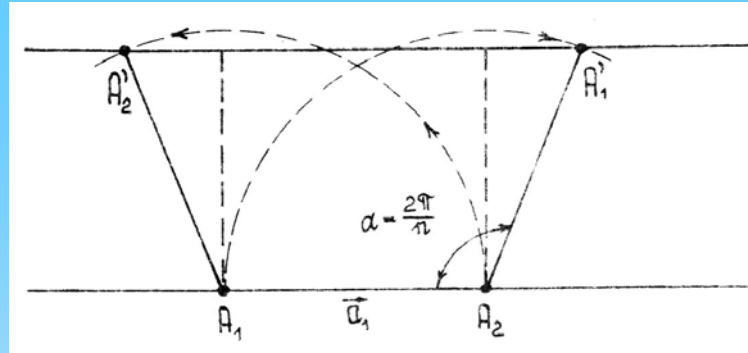
Odvození možných četností rotačních os

Pro osy rotace obecně platí $n \cdot \alpha = 2\pi$, kde

- n je četnost osy
- α je úhel rotace.

Body A_1 a A_2 jsou sousední uzly rovinné mřížky a uzlem A_1 prochází kolmo na rovinu mřížky n-četná osa symetrie. Rovněž translačně identickým bodem A_2 prochází n-četná osa. Otočením os o $\alpha = 2\pi/n$ převedeme bod A_1 do A'_1 a bod A_2 do A'_2 . Mřížkový translační vektor \mathbf{a}_1 převádí A_1 do A_2 . Jelikož jsou obě osy zároveň osami symetrie rovinné mřížky, jsou body A'_1 a A'_2 uzly této mřížky. Vektor převádějící bod A'_1 do A'_2 musí být rovněž mřížkovým vektorem rovnoběžným s \mathbf{a}_1 . Jeho velikost bude k-násobkem velikosti vektoru \mathbf{a}_1 .

Osy rotace (n)



$$A_1'A_2' = k A_1A_2$$

$$A_1'A_2' = A_1A_2 + 2 A_1A_2 \cos(\pi - 2\pi/n) = A_1A_2 (1 - 2\cos 2\pi/n)$$

Z obou vztahů pak dostaneme: $k = 1 - 2\cos(2\pi/n) = 1 - 2\cos\alpha$

$$\cos\alpha = (1-k)/2$$

Jelikož k je celé číslo a absolutní hodnota cosinu nepřesáhne 1, dostaneme:

$k = -1$	$\cos\alpha = 1$	$\alpha = 2\pi$	$n = 1$
$k = 0$	$\cos\alpha = 1/2$	$\alpha = \pi/3$	$n = 6$
$k = 1$	$\cos\alpha = 0$	$\alpha = \pi/2$	$n = 4$
$k = 2$	$\cos\alpha = -1/2$	$\alpha = 2\pi/3$	$n = 3$
$k = 3$	$\cos\alpha = -1$	$\alpha = \pi$	$n = 2$

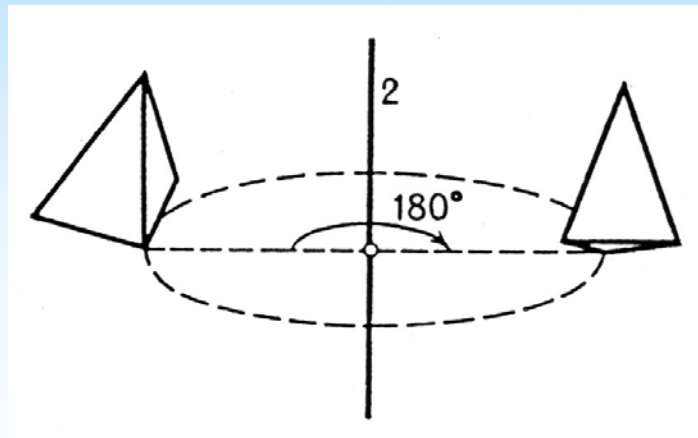
Dvojčetná osa ($2, C_2$)

Dvojčetná osa obsahuje tyto operace symetrie (osa se směrem z):

1. $R(\pi, z)$
2. $R(\pi, z) * R(\pi, z) = R^2(\pi, z) = E$

Maticově lze vyjádřit osy $R(\pi, x)$, $R(\pi, y)$, $R(\pi, z)$ takto:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



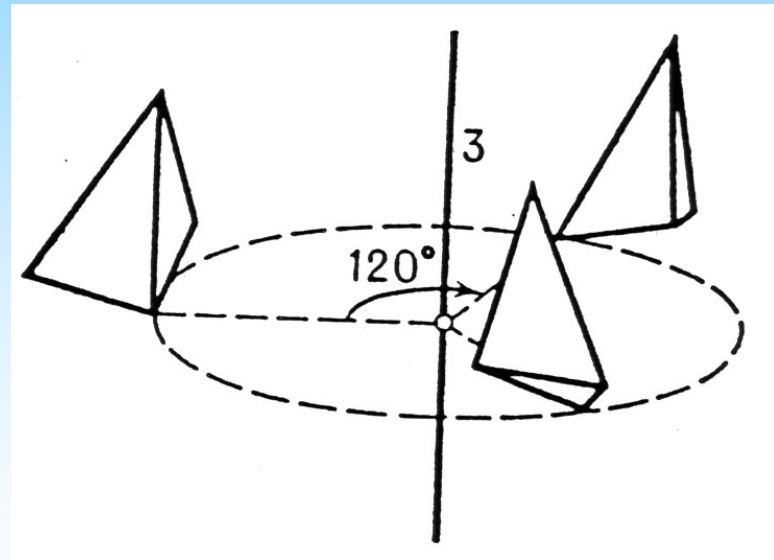
Trojčetná osa ($3, C_3$)

Pro trojčetnou osu je $n = 3$ a $\alpha = 2\pi/3$.

Trojčetná osa totožná se směrem z obsahuje tyto operace symetrie:

1. $R(2\pi/3, z)$
2. $R(2\pi/3, z) * R(2\pi/3, z) = R^2(2\pi/3, z) = R(4\pi/3, z)$
3. $R(2\pi/3, z) * R(2\pi/3, z) * R(2\pi/3, z) = R^3(2\pi/3, z) = E$

$$R\left(\frac{2\pi}{3}, z\right) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Čtyřčetná osa ($4, C_4$)

Pro čtyřčetnou osu platí: $n = 4, \alpha = 2\pi/4 = \pi/2$.

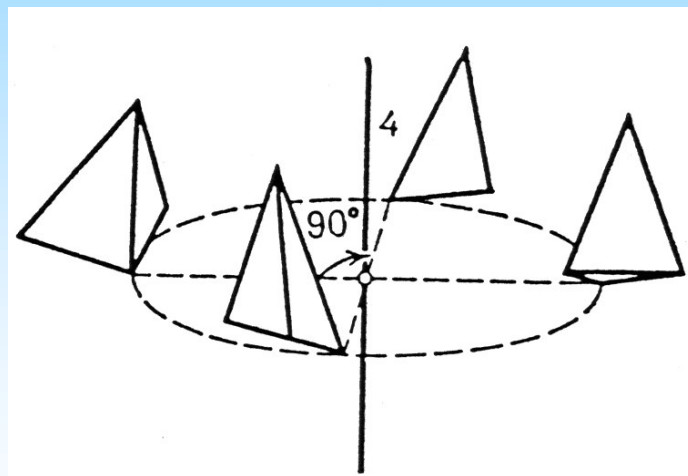
Čtyřčetná osa totožná se směrem z obsahuje tyto operace symetrie:

$$R(\pi/2, z)$$

$$R(\pi/2, z) * R(\pi/2, z) = R^2(\pi/2, z) = R(\pi, z)$$

$$R(\pi/2, z) * R(\pi/2, z) * R(\pi/2, z) = R^3(\pi/2, z) = R(3\pi/2, z)$$

$$R^4(\pi/2, z) = R(2\pi, z) = E$$



Příklad – grupové postuláty

Na čtyřčetné ose můžeme ukázat, že příslušné operace symetrie tvoří cyklickou grupu (vyhovuje grupovým postulátům) s označením C_4 . Grupová operace je skládání operací symetrie (symbol $*$), což v maticovém vyjádření znamená násobení matic.

$$R\left(\frac{\pi}{2}, z\right) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R^2\left(\frac{\pi}{2}, z\right) = R\left(\frac{\pi}{2}, z\right) * R\left(\frac{\pi}{2}, z\right)$$

$$\begin{aligned} R^2\left(\frac{\pi}{2}, z\right) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = R(\pi, z) \end{aligned}$$

Příklad – grupové postuláty

$$R^3\left(\frac{\pi}{2}, z\right) = R^2\left(\frac{\pi}{2}, z\right) * R\left(\frac{\pi}{2}, z\right)$$

$$\begin{aligned} R^3\left(\frac{\pi}{2}, z\right) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = R\left(\frac{3\pi}{2}, z\right) \end{aligned}$$

Příklad – grupové postuláty

$$R^4\left(\frac{\pi}{2}, z\right) = R^3\left(\frac{\pi}{2}, z\right) * R\left(\frac{\pi}{2}, z\right)$$

$$\begin{aligned} R^4\left(\frac{\pi}{2}, z\right) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = E \end{aligned}$$

Příklad – grupové postuláty

Aby byla C_4 grupou, musí množina všech operací symetrie $\{R(\pi/2, z), R^2(\pi/2, z), R^3(\pi/2, z), R^4(\pi/2, z) = E\}$ vyhovovat grupovým postulátům:

1. Ke každé uspořádané dvojici operací symetrie z C_4 je jednoznačně přiřazena operace, patřící do C_4 např. $R(\pi/2, z) * R^3(\pi/2, z) = R^4(\pi/2, z) = E$
2. Skládání operací je asociativní
3. Jednotkovým prvkem je identita E
4. Inverzním prvkem C_4 je inverzní operace symetrie, tj. rotace v opačném smyslu: $R^{-1}(\pi/2, z) = R^3(\pi/2, z)$

Jelikož jsou postuláty splněny, je C_4 grupou.

Příklad – grupové postuláty

Multiplikační tabulka grupy C_4 .

	E	$R(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^2(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^3(\frac{\pi}{2}, z)$
E	E	$R(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^2(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^3(\frac{\pi}{2}, z)$
$R^3(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^3(\frac{\pi}{2}, z)$	E	$R(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^2(\frac{\pi}{2}, z)$
$R^2(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^2(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^3(\frac{\pi}{2}, z)$	E	$R(\frac{\pi}{2}, z)$
$R(\frac{\pi}{2}, z)$	$R(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^2(\frac{\pi}{2}, z)$	$R^3(\frac{\pi}{2}, z)$	E

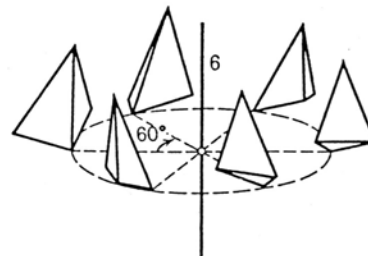
Šestičetná osa ($6, C_6$)

Pro šestičetnou osu platí: $n = 6$, $\alpha = 2\pi/6$. Šestičetná osa totožná se směrem z obsahuje tyto operace symetrie:

1. $R(\pi/3, z)$
2. $R(\pi/3, z) * R(\pi/3, z) = R^2(\pi/3, z) = R(2\pi/3, z)$
3. $R(\pi/3, z) * R(\pi/3, z) * R(\pi/3, z) = R^3(\pi/3, z) = R(\pi, z)$
4. $R^4(\pi/3, z) = R(4\pi/3, z) = R^2(2\pi/3, z)$
5. $R^5(\pi/3, z) = R(5\pi/3, z)$
6. $R^6(\pi/3, z) = E$

$$R\left(\frac{\pi}{3}, z\right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R^5\left(\frac{\pi}{3}, z\right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Inverzní osy

Jde o složené prvky symetrie, jejichž operacemi symetrie je rotace kombinovaná s inverzí. Na pořadí operací nezáleží, musí se však vždy provádět jako celek. Dále se rozlišují podle velikosti úhlu rotace $\alpha = 2\pi/n$. Označují se jako rotační osy symbolem četnosti, ale s pruhem nad číslicí.

Dvojčetná inverzní osa ($\bar{2}, C_{2i}$)

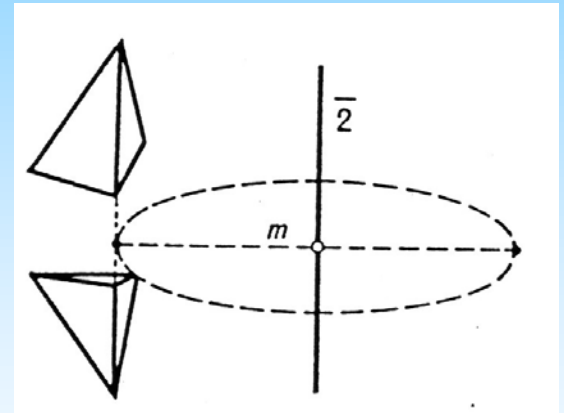
Dvojčetná osa totožná se směrem z obsahuje tyto operace symetrie (rotace):

1. $R(\pi, z) * I = R_i(\pi, z)$
2. $[R(\pi, z) * I]^2 = R_i^2(\pi, z) = E$

Operace dvojčetné inverzní osy jsou stejné jako operace roviny symetrie:

$$R_i(\pi, z) = M(x, y), R_i^2(\pi, z) = E$$

$$\begin{aligned} R_i(\pi, z) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = M(x, y) \end{aligned}$$



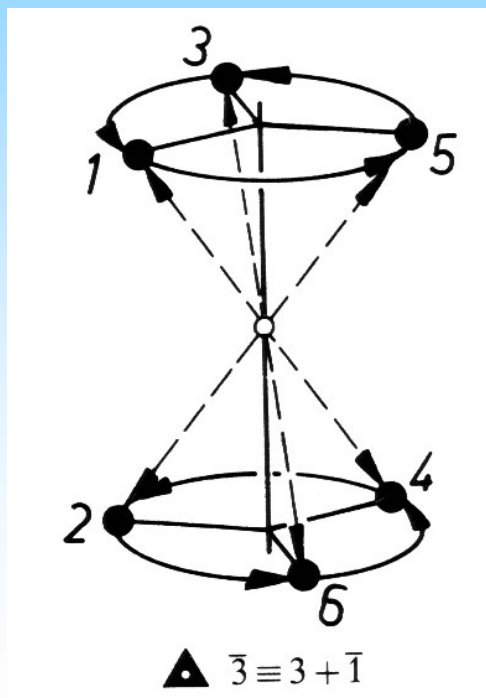
Trojčetná inverzní osa ($\bar{3}, C_{3,i}$)

Osa totožná se směrem z obsahuje kombinace těchto operací symetrie:

$$\{R(2\pi/3, z), R^2(2\pi/3, z), E, I\}$$

Operace jsou stejné jako ty, které vzniknou kombinací dvou samostatných prvků symetrie $\bar{3}$ a i :

$$-\bar{3} = \bar{3} * i$$

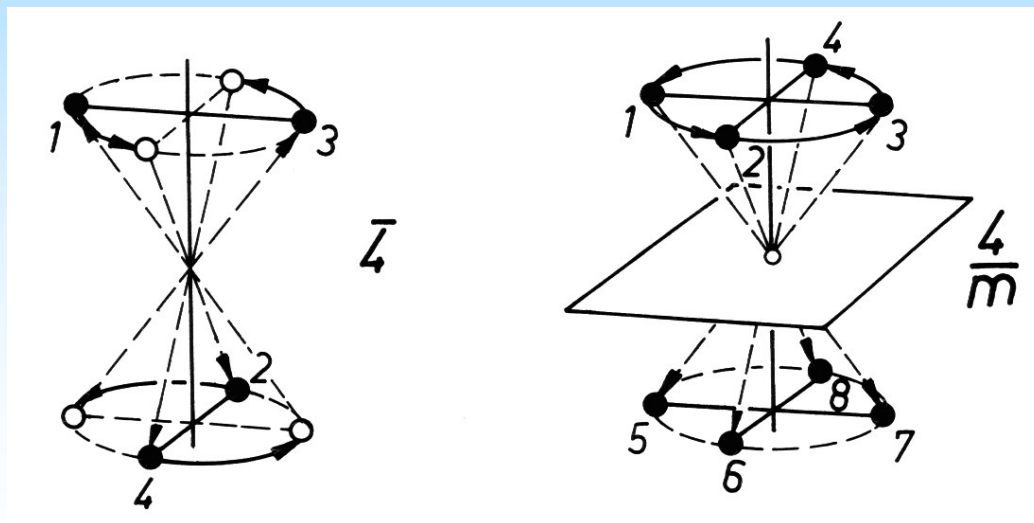


Čtyřčetná inverzní osa ($\bar{4}, C_{4i}$)

Osa totožná se směrem z obsahuje následujících operace symetrie:

1. $R_i(\pi/2, z)$
2. $R_i^2(\pi/2, z) = R(\pi, z)$
3. $R_i^3(\pi/2, z)$
4. E

Obsaženy jsou dvě nové operace $R_i(\pi/2, z)$ a $R_i^3(\pi/2, z)$ a proto je -4 samostatným prvkem symetrie.



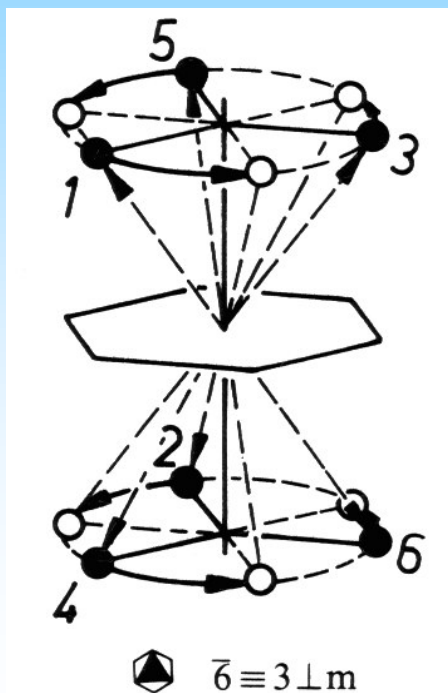
Šestičetná inverzní osa ($\bar{6}, C_{6i}$)

Osa totožná se směrem z obsahuje kombinace následujících prvků symetrie:

$$\{R(2\pi/3, z), R^2(2\pi/3, z), E, M(x, y)\}$$

Operace jsou stejné jako ty, které vzniknou kombinací dvou samostatných prvků symetrie 3 a m (kolmé na osu):

$$\bar{6} = 3 * m$$



Šroubové osy

Jde o složené prvky symetrie, jejichž operacemi je kombinace rotace a translace ve směru osy rotace. Na rozdíl od rotačních a rotoinverzních os, je směr rotace šroubové osy velmi důležitý. Vychází se zde zásadně z pravotočivého systému os, takže pravotočivá šroubová osa ve směru z má translační vektor ve stejném směru vzhůru.

Jedná-li se o n -četnou rotační osu, pak n otočení doprovázených n translacemi τ podél šroubové osy musí vést k translačnímu pohybu výchozího objektu o celočíselný násobek (m) mřížové translace t :

$$n \tau = m t \quad \text{nebo} \quad \tau = (m/n) t,$$

kde m , n jsou celá čísla. Symbol šroubové osy je n_m .

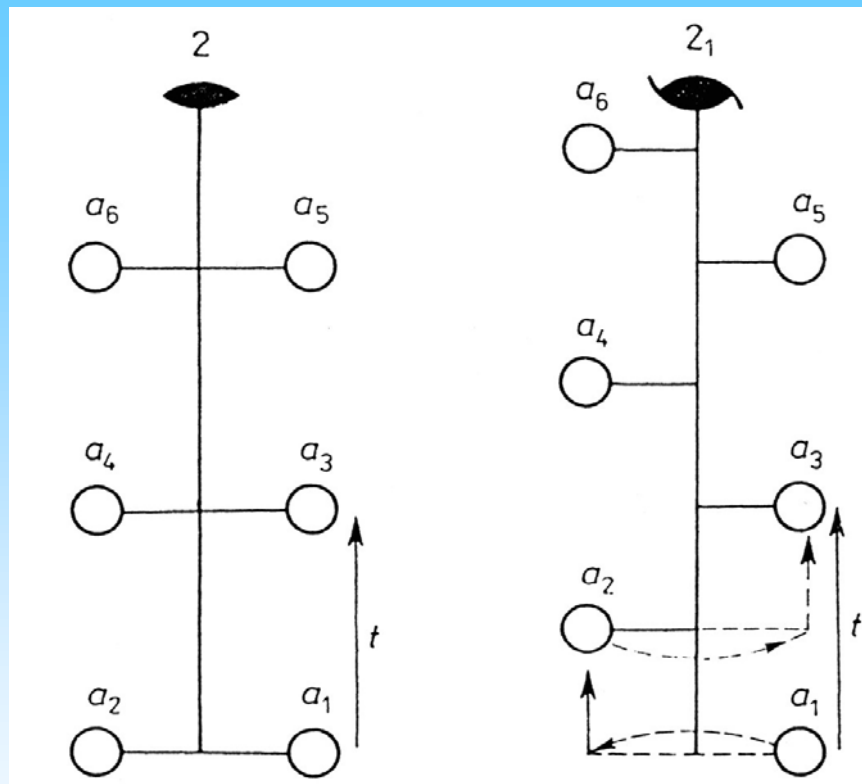
Translační složka šroubové osy tedy závisí na četnosti osy a mohou nabývat jen určitých hodnot: $2_0, 2_1, 2_2, 3_0, 3_1, 3_2, 3_3, 4_0, 4_1, 4_2, 4_3, 4_4, 6_0, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5, 6_6$ (dolní index značí hodnotu m z výše uvedeného vztahu, je-li $m = 0$ jde o čistou rotaci, v případě, že by bylo $m = n$, jde o čistou translaci).

Šroubové osy

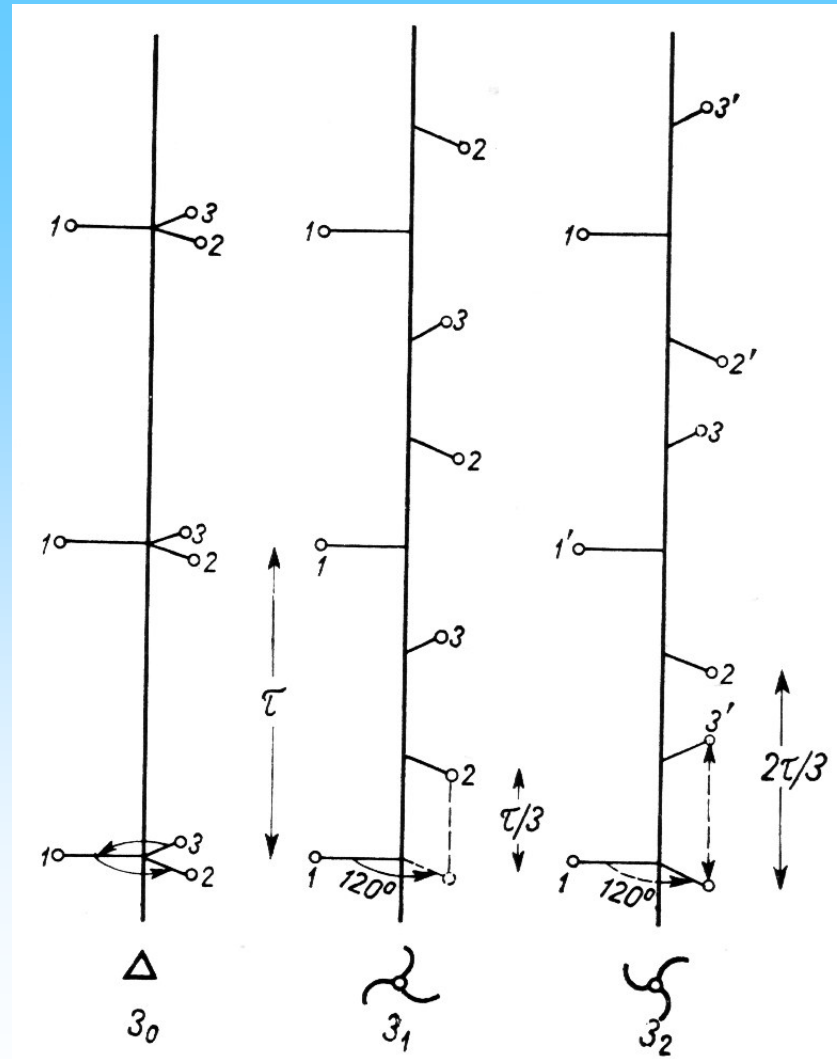
Typ šroubové osy	Symbol	Translace podél osy
Dvojčetná osa	2_1	$1/2$
Trojčetná osa	3_1	$1/3$
	3_2	$2/3$
Čtyřčetná osa	4_1	$1/4$
	4_2	$2/4$
	4_3	$3/4$
Šestičetná osa	6_1	$1/6$
	6_2	$2/6$
	6_3	$3/6$
	6_4	$4/6$
	6_5	$5/6$

Šroubové osy $3_1 - 3_2$, $4_1 - 4_3$, $6_1 - 6_5$, $6_2 - 6_4$ jsou navzájem **enantiomorfní** - můžeme rozlišit pravotočivou a levotočivou. Za pravotočivou osu (3_1 , 4_1 , 6_1 , 6_2) se považuje taková, jejíž otáčivý pohyb je ve směru prstů pravé ruky, když palec míří podél osy.

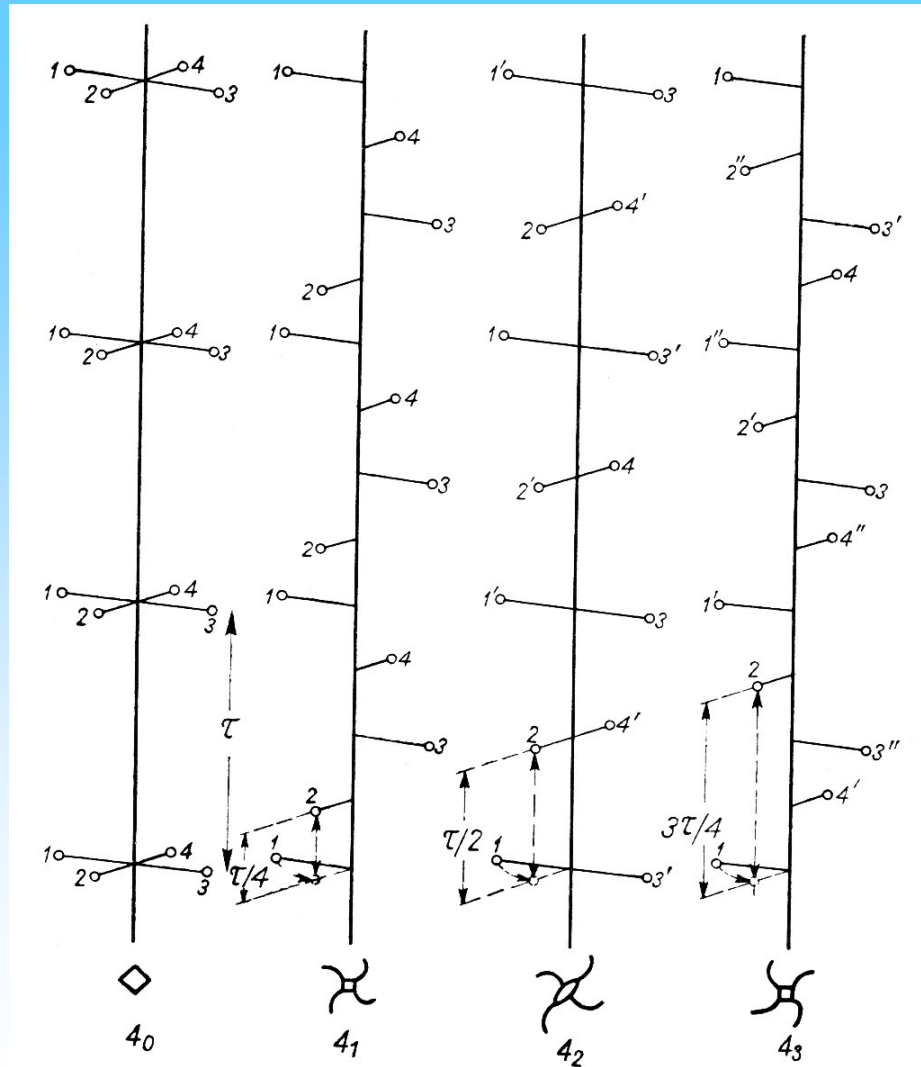
Dvojčetná šroubová osa $2_0, 2_1$



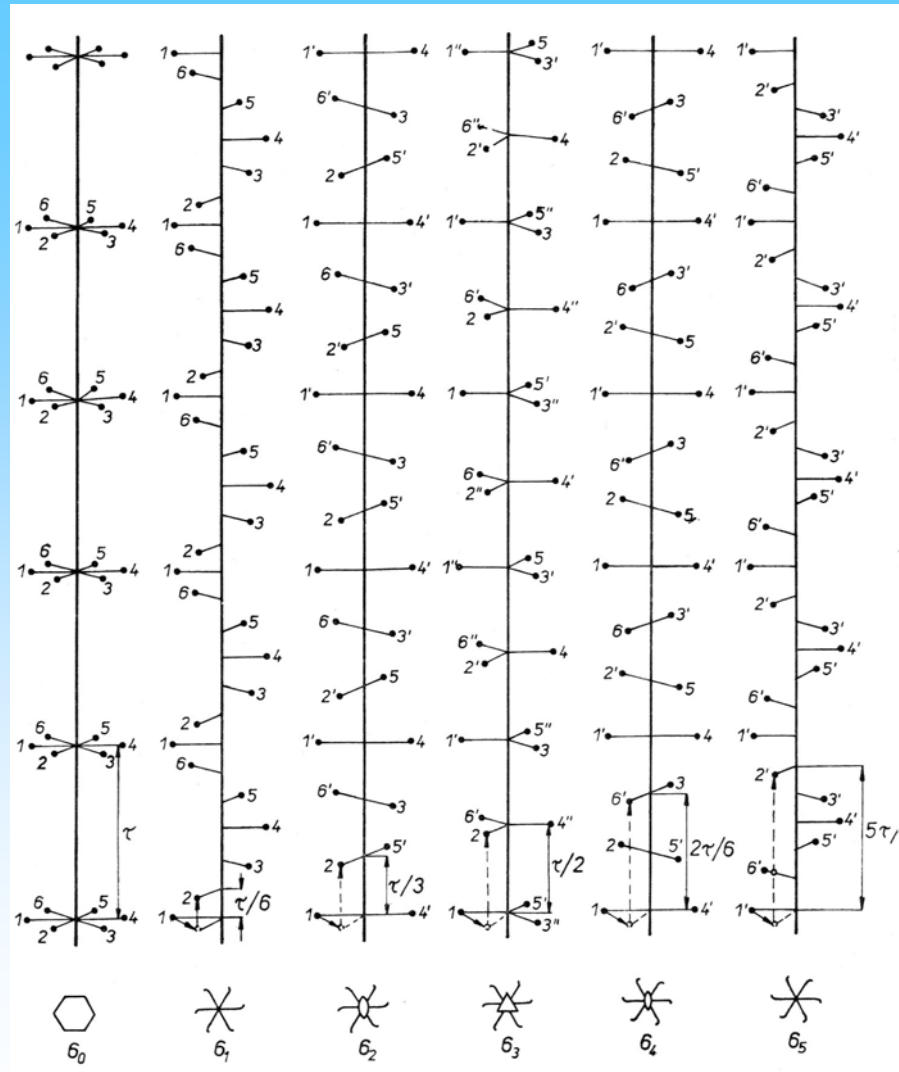
Trojčetné šroubové osy 3_0 , 3_1 , 3_2



Čtyřčetné šroubové osy 4_0 , 4_1 , 4_2 , 4_3



Šestičetné šroubové osy $6_0, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$

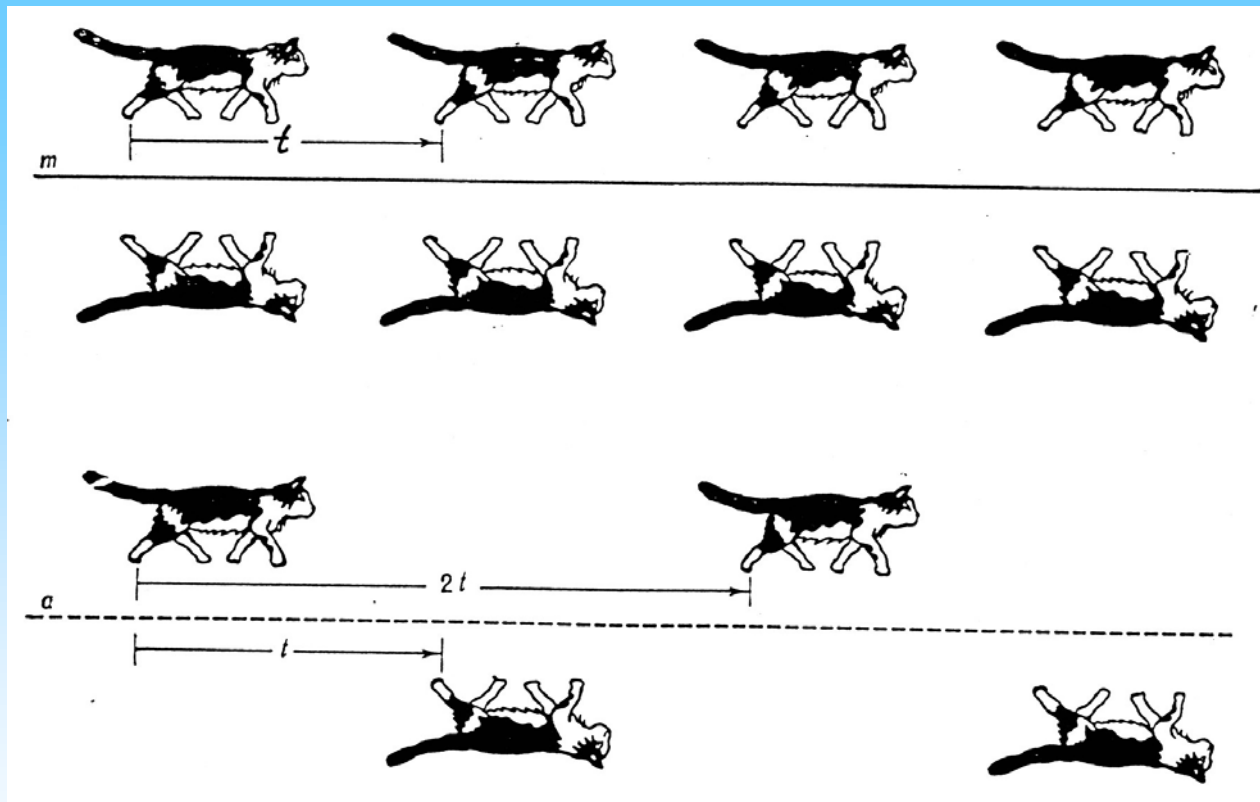


Skluzové roviny

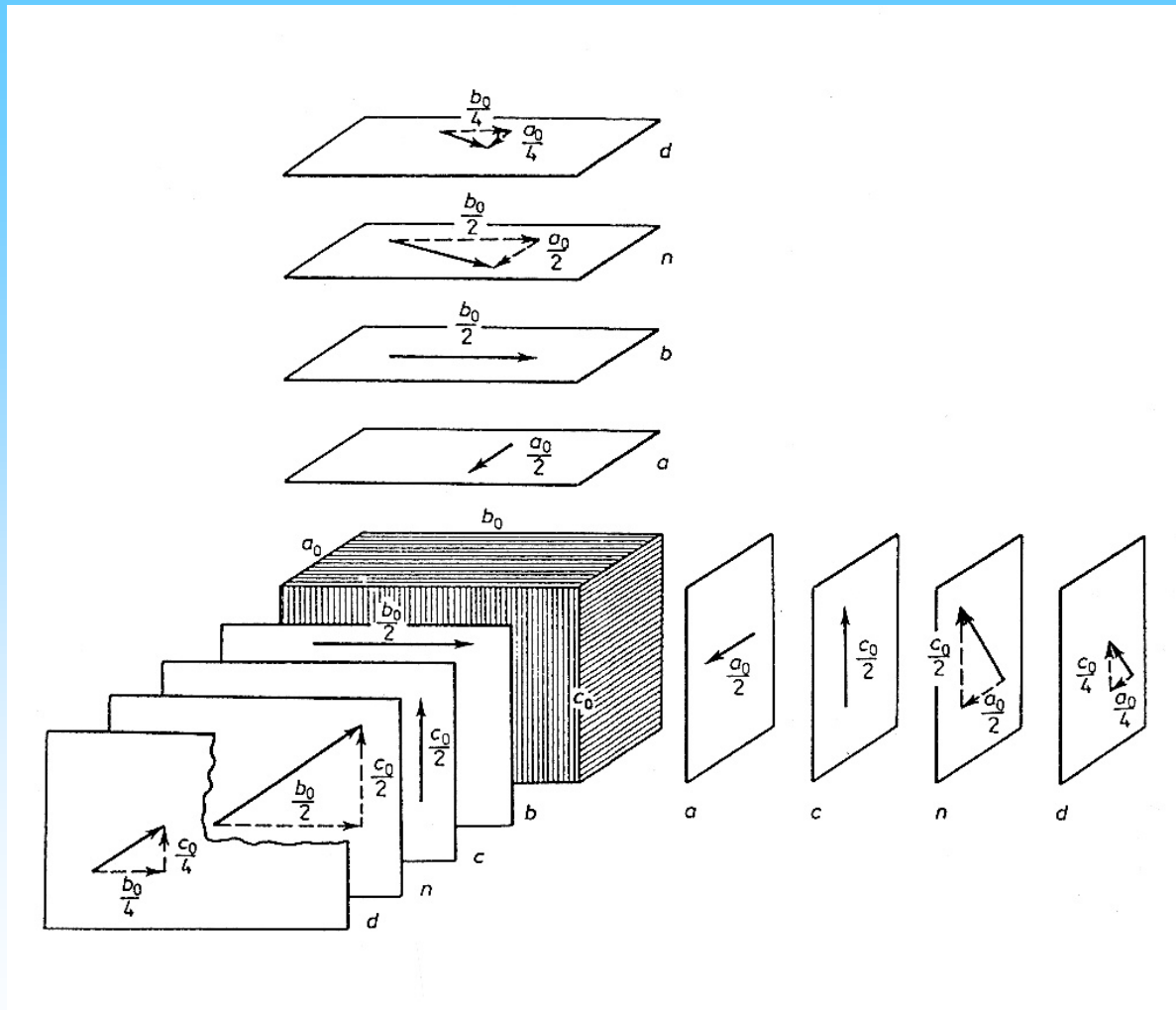
Jsou to prvky symetrie, jejichž operacemi je zrcadlení kombinované s translací podél roviny zrcadlení. Skluz podél osy a má translační složku $\tau = (1/2) \mathbf{t}$ a označuje se jako a -skluz (obdobně pro směry b , c).

typ skluzu	sym.	orientace skluz. roviny	translační složky τ
osový	a	$\perp \mathbf{b}$ nebo $\perp \mathbf{c}$	$1/2\mathbf{a}$
osový	b	$\perp \mathbf{c}$ nebo $\perp \mathbf{a}$	$1/2\mathbf{b}$
osový	c	$\perp \mathbf{a}$ nebo $\perp \mathbf{b}$	$1/2\mathbf{c}$
úhlopříčný	n	$\perp \mathbf{c}; \perp \mathbf{a}; \perp \mathbf{b}$	$1/2(\mathbf{a}+\mathbf{b}); 1/2(\mathbf{b}+\mathbf{c}); 1/2(\mathbf{a}+\mathbf{c})$
diamantový	d	$\perp \mathbf{c}; \perp \mathbf{a}; \perp \mathbf{b}$	$1/4(\mathbf{a}\pm\mathbf{b}); 1/4(\mathbf{b}\pm\mathbf{c}); 1/4(\mathbf{a}\pm\mathbf{c})$

Skluzové roviny



Skruzové roviny



Krystalová mřížka

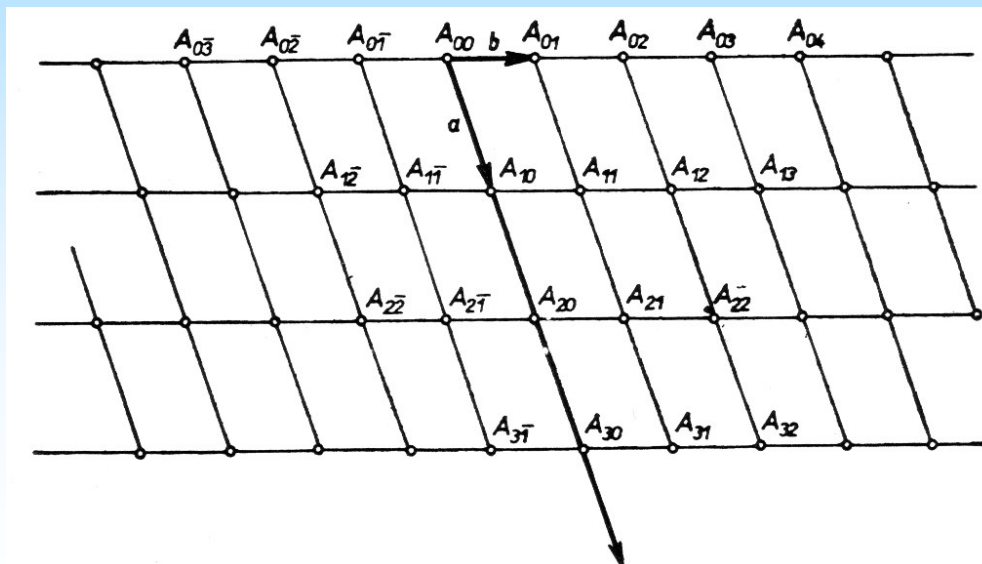
Prostorová mřížka představuje schéma translační periodicity rozložení částic ve struktuře krystalu. *Krystalová mřížka* je tedy abstraktní pojem, který vyjadřuje translační periodicitu rozmístění identických bodů v krystalu.

Pojem *reálná struktura* krystalu představuje konkrétní prostorové rozložení částic a je dána fyzikálními zákonitostmi, takže symetrické rozložení atomů není příčinou, ale důsledkem konfigurace fyzikálních sil v prostoru.

Konstrukce krystalové mřížky

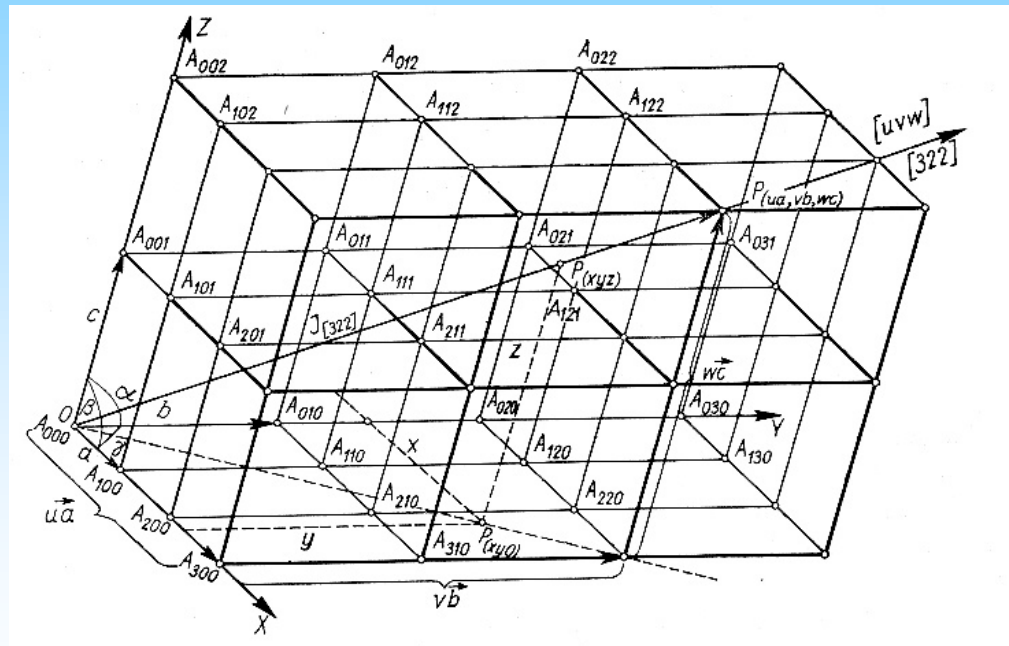
Mějme bod A_0 , který podrobíme translaci \mathbf{a} (posunutí o úsek a) tak, že dostaneme bod A_1 . Opakováním postupu pro translaci $+a$ a také $-a$, dostaneme množinu identických bodů $A_{-n} \dots A_{+n}$. Body leží na jedné přímce, kterou označujeme jako **uzlová (mřížková) přímka**. Vzdálenost dvou libovolných identických bodů se označuje jako perioda identity.

Podrobíme-li uzlovou přímku translaci \mathbf{b} (která není rovnoběžná s danou přímkou) v kladném i záporném směru, dostaneme **mřížkovou rovinu**.



Konstrukce krystalové mřížky

Získanou mřížkovou rovinu podrobíme translaci \mathbf{c} (která neleží v mřížkové rovině) v kladném i záporném směru a dostaneme prostorovou mřížku. Uzlové body mřížky A_{ijk} jsou translačně identické s výchozím bodem A_{000} , od něhož konstrukce začala. Prostorová mřížka je na rozdíl od krystalu nekonečná.



Základní pojmy v prostorové mřížce

Vektor, který spojuje dva libovolné uzly, se označuje jako *mřížkový vektor*:

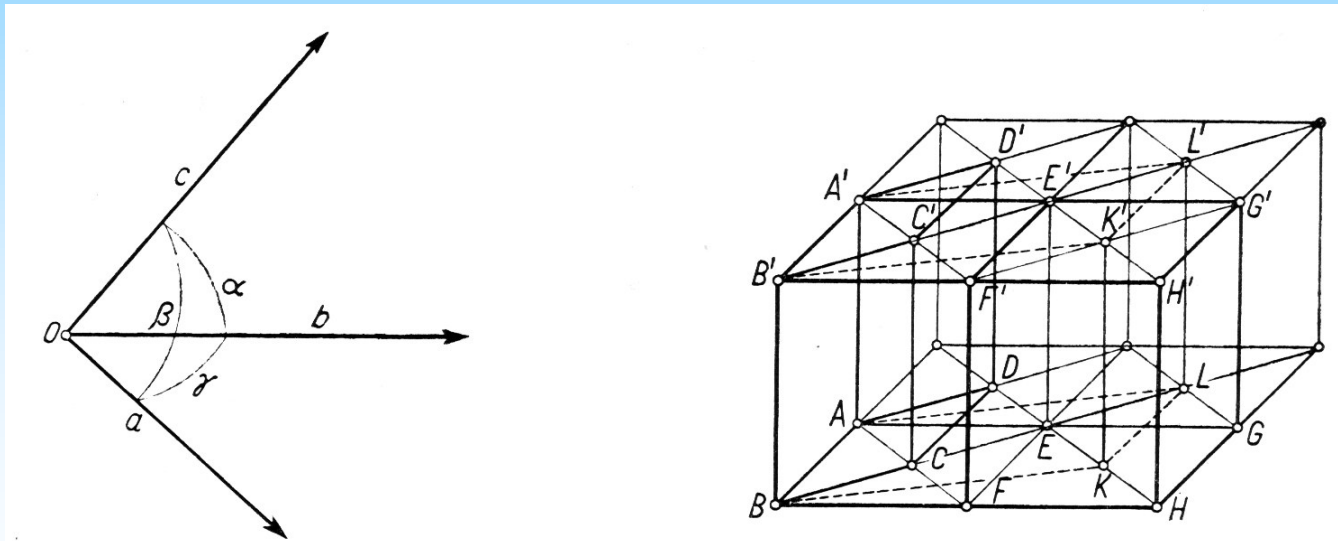
$$\mathbf{t}_i = m\mathbf{t}_1 + n\mathbf{t}_2 + p\mathbf{t}_3,$$

kde m, n, p jsou celá čísla a jeho délka je periodou identity.

- *Mřížková přímka*
- *Mřížková rovina*

Buňka mřížky

Buňka mřížky je libovolný rovnoběžnostěn, jehož vrcholy jsou mřížkové uzly. Tato buňka je určena velikostí mřížkových vektorů umístěných do hran rovnoběžnostěnu a třemi úhly, které tyto vektory svírají. Tyto hodnoty a , b , c , α , β , γ se označují jako parametry buňky.



Bravaisovy mřížky

Tento typ mřížek se běžně používá k popisu krystalových struktur. Bravaisovy mřížky mohou být *jednorozměrné* (lineární), *dvojměrné* (rovinné) a *trojměrné* (prostorové).

Obecná prostorová mřížka bez omezení tvaru základní buňky může být použita k popisu libovolného krystalu. Nicméně ve většině případů se používá mřížek se speciálními charakteristikami. Zcela obecná mřížka nemá žádný prvek symetrie, kromě středu inverze. Přítomnost rotačních os nebo rovin symetrie určitým způsobem ovlivňuje charakteristiku mřížky a vzniká mřížka speciální.

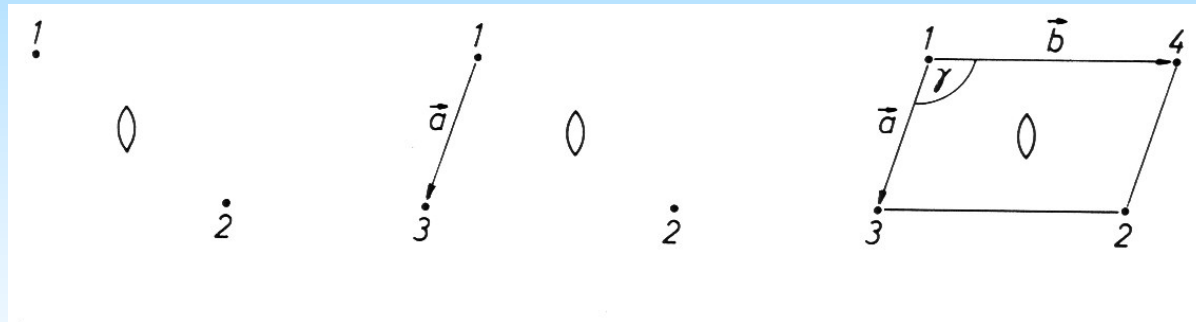
Pokud jsou si mřížkové translace ve dvou směrech rovny, budou si rovny i fyzikální vlastnosti v týchž směrech.

Rovinné Bravaisovy mřížky

Rovinná mřížka je jednoznačně určena dvojicí nekolineárních mřížkových vektorů, které mohou mít obecně libovolnou délku a svírat různé úhly. Počet typů rovinných mřížek je shodný s počtem druhů trojúhelníků. Protože existuje pět typů trojúhelníků, existuje i pět typů rovinných Bravaisových mřížek.

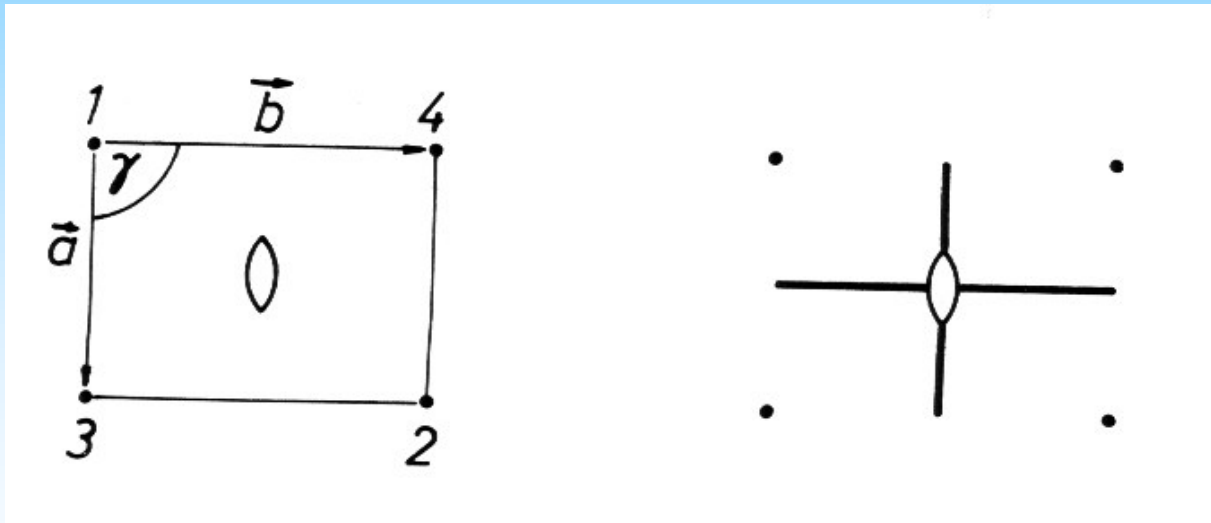
Obecná (kosoúhlá) rovinná mřížka

Vezmeme-li v rovině bod 1, můžeme pomocí dvojčetné osy vytvořit ekvivalentní bod 2. Aplikací mřížkové translace \mathbf{a} na bod 1, vznikne identický bod 3 a podle dvojčetné osy z bodu 3 i bod 4. Vznikne tak *základní buňka* rovinné mřížky ve tvaru kosoúhelníku, kde $a_0 \neq b_0$ a $\gamma \neq 90^\circ$. Tento typ rovinné mřížky je zcela obecný.



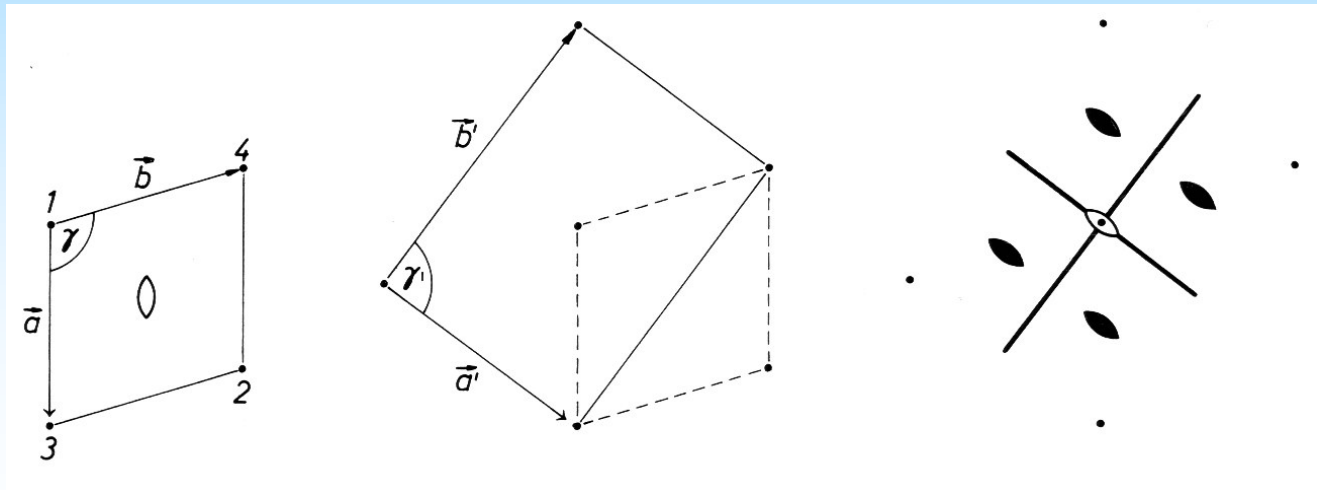
Speciální rovinná mřížka - pravoúhlá

Bod 1, 2 a 3 tvoří v rovině vrcholy pravoúhlého trojúhelníku s pravým úhlem u bodu 3. Operace podle dvojčetné osy dá vzniknout *pravoúhlé primitivní základní buňce*, kde $a_0 \neq b_0$ a $\gamma = 90^\circ$. Uspořádání uzlových bodů je speciální, protože vznikly další prvky symetrie a to dvě kolmé osy zrcadlení.



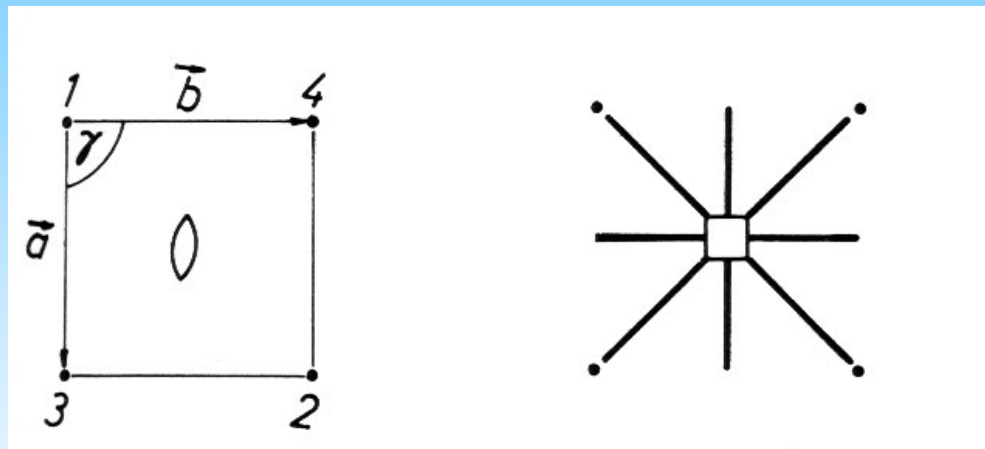
Speciální rovinná mřížka - romboedrická

Další možností je vybrat polohu bodu 3 tak, že body 1, 2 a 3 tvoří rovnoramenný trojúhelník, jehož shodné strany se sbíhají v bodě 3. Základní buňka je kosočtverec, kde $a_0=b_0$ a $\gamma \neq 60^\circ, 90^\circ$ nebo 120° . Může vzniknout alternativní jednotková buňka. Je pravoúhlá ($a_0 \neq b_0$ a $\gamma=90^\circ$) a označuje se jako **centrovaná**. V buňce je dvojice rovin symetrie a pět dvojčetných os. Tato rovinná mřížka se někdy označuje jako **pravoúhlá centrovaná**.



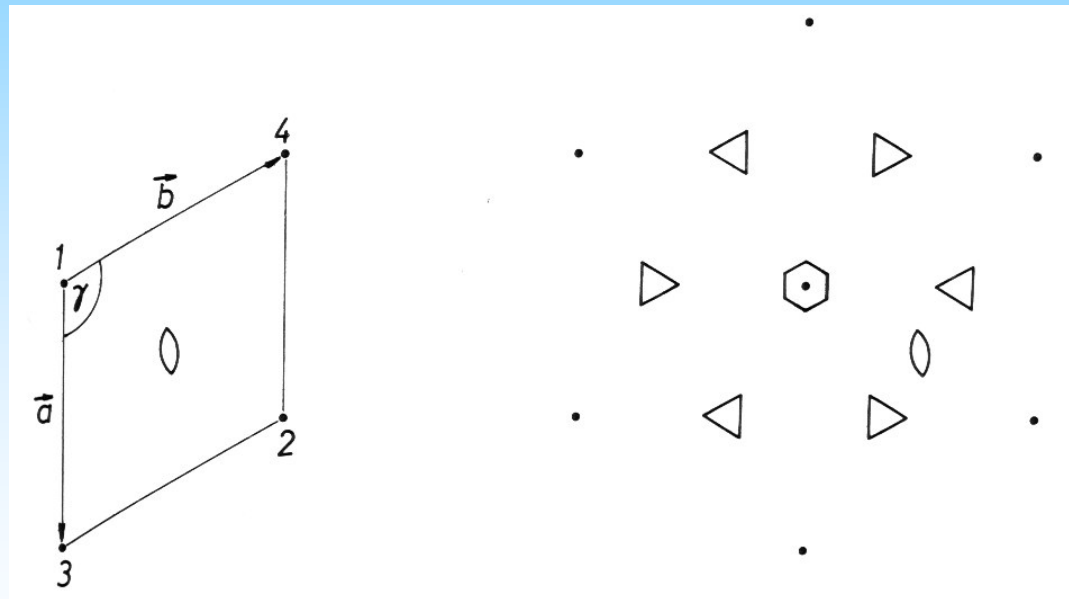
Speciální rovinná mřížka - tetragonální

Tvoří-li body 1, 2 a 3 rovnoramenný pravoúhlý trojúhelník s pravým úhlem u bodu 3, vznikne *čtvercová síť*, kde $a_0=b_0$ a $\gamma=90^\circ$. Ve středu buňky je tak čtyřčetná osa symetrie a s ní paralelní čtyři roviny symetrie.



Speciální rovinná mřížka - hexagonální

Poslední možností je výběr bodů 1, 2 a 3 ve tvaru rovnostranného trojúhelníku. Vznikne *hexagonální mřížka* se základní buňkou ve tvaru kosočtverce, kde $a_0=b_0$ a $\gamma=120^\circ$. V celkové symetrii najdeme šestičetnou rotační osu, 6 trojčetných rotačních os a několik rovin symetrie.



Prostorové Bravaisovy mřížky

V prostoru se základní motiv rovinných mřížek opakuje ve třetím nekomplanárním směru. Lze dokázat, že existuje pouze 14 typů prostorových Bravaisových mřížek.

Základní buňka je jedna z možných buněk mřížky, jejíž výběr se řídí podle těchto Bravaisových pravidel:

1. Počet pravých úhlů v základní buňce musí být maximální.
2. Symetrie základní buňky musí být shodná se symetrií celé mřížky.
3. Při dodržení předchozích podmínek musí být objem základní buňky minimální.
4. V případě, kdy symetrie nemůže rozhodnout, vybírá se základní buňka, tak aby její hrany byly co nejkratší.

Základní vektory (**a**, **b**, **c**) jsou definovány hranami základní buňky a jejich délky jsou základní periody identity (a , b , c). Společně se třemi úhly (α , β , γ), které základní vektory svírají, tvoří *mřížkové parametry*.

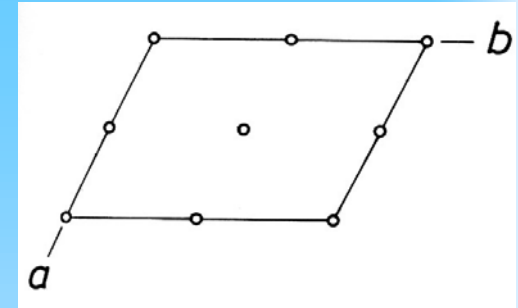
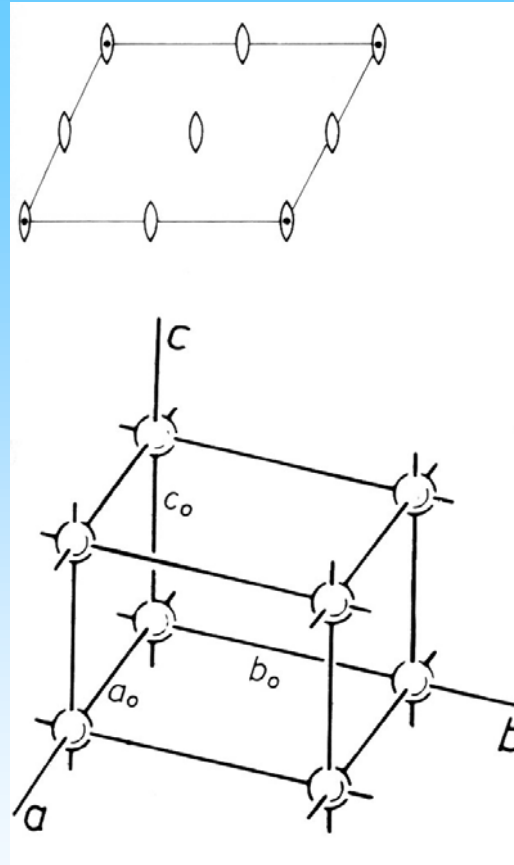
Primitivní prostorové mřížky (P-mřížky)

Vztah mezi mřížkou a prvky symetrie je v trojrozměrném prostoru podobný situaci v prostoru dvojrozměrném. Z obecné prostorové mřížky můžeme odvodit speciální prostorové mřížky, ve kterých jsou shodné roviny vrstveny nad sebou. Pokud zůstává nezměněna symetrie rovinné mřížky, vznikne pět, resp. sedm prostorových mřížek s primitivní základní buňkou.

Triklinická P-mřížka

Vrstvením rovinných kosoúhlých (obecných) sítí s uzlovými body nad sebou, vznikne monoklinická primitivní mřížka. Pokud mřížkové body v jednotlivých vrstvených rovinách neleží na dvojčetných osách, tyto se v symetrii neuplatní a vznikne **triklinická primitivní mřížka**. Mřížkové parametry triklinické P-mřížky jsou: $c_0 \neq a_0 \neq b_0$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$.

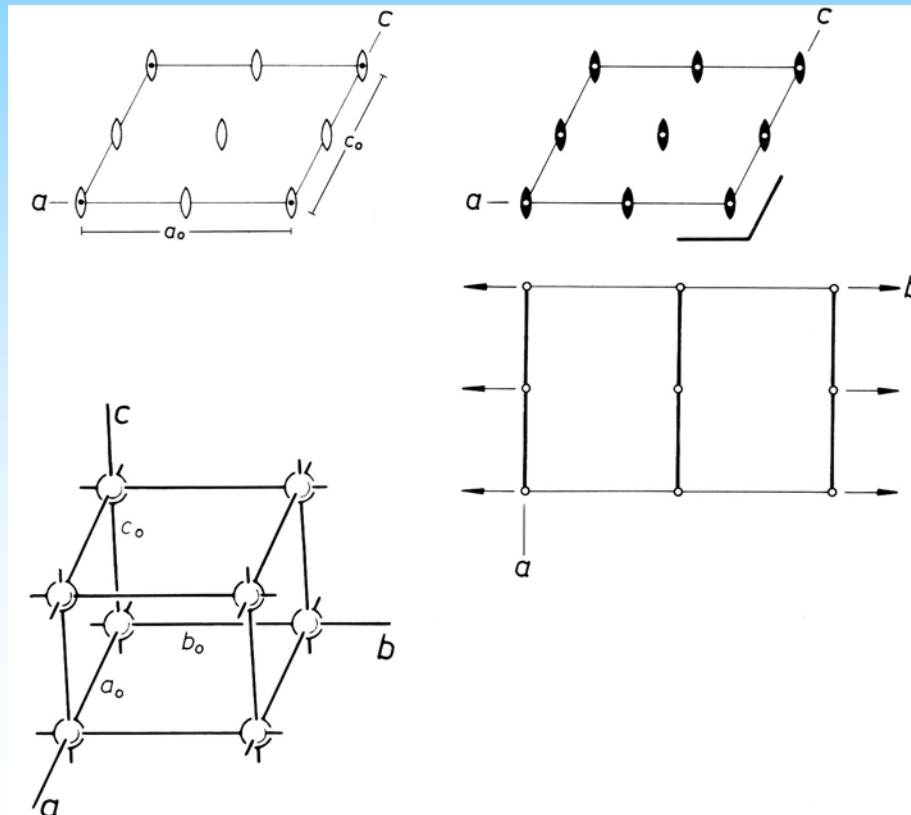
Projekce prvků symetrie triklinické primitivní mřížky rovnoběžně s c na rovinu $x, y, 0$.



Monoklinická P-mřížka

Vrstvení rovinných mřížek s kosoúhlou základní buňkou přímo nad sebe s mezivrstevní vzdáleností b_0 vede ke vzniku **monoklinické primitivní mřížky**.

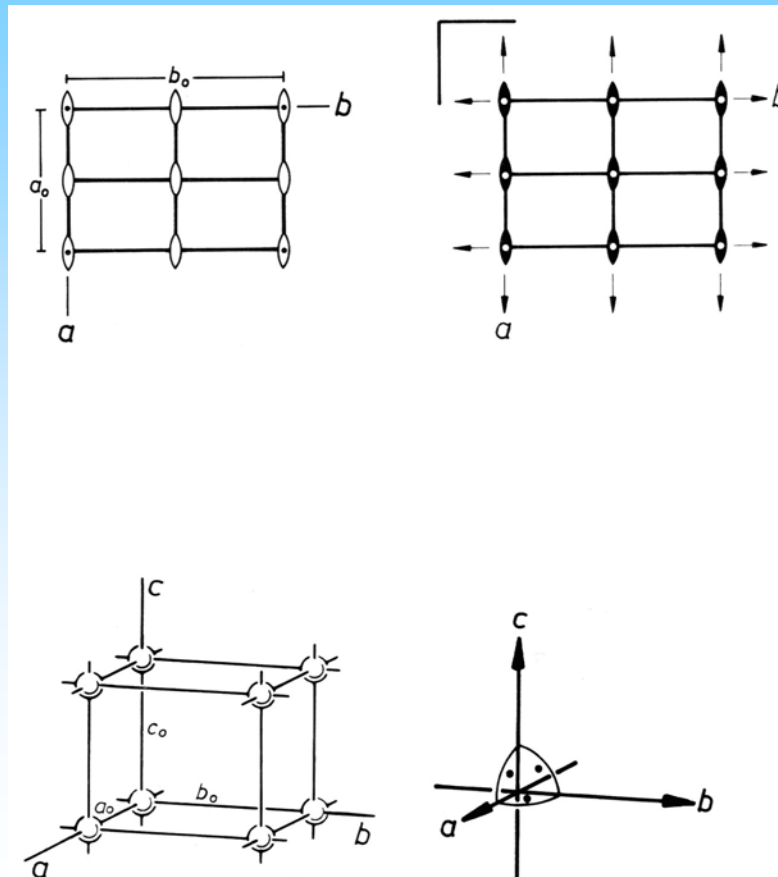
Mřížkové parametry monoklinické P-mřížky jsou: $c_0 \neq a_0 \neq b_0$, $\alpha = \gamma$, $\beta > 90^\circ$



Rombická P-mřížka

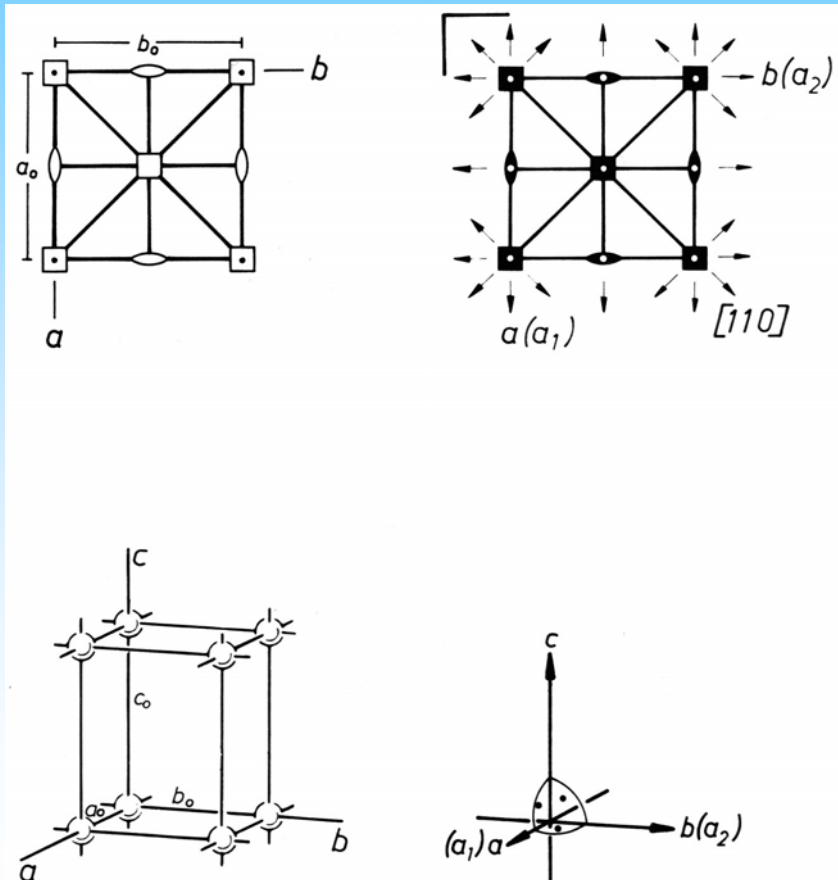
Vrstvením rovinných sítí s pravouhloú základní buňkou přímo nad sebe s mezirovinnou vzdáleností c_0 vede ke vzniku **rombické primitivní mřížky**.

Mřížkové parametry v rombické P-mřížce jsou: $a_0 \neq b_0 \neq c_0$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



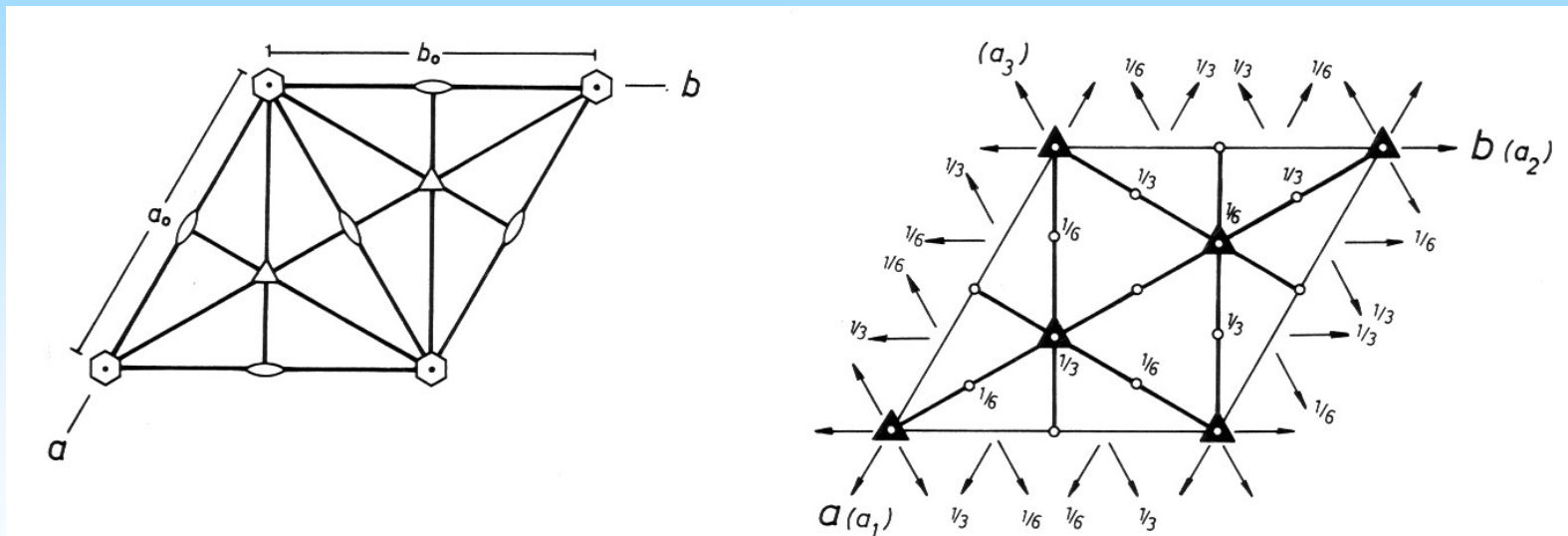
Tetragonální P-mřížka

Vrstvením rovinných sítí se čtvercovou základní buňkou přímo nad sebe s mezirovinnou vzdáleností $c_0 \neq a_0 = b_0$ vede ke vzniku tetragonální primitivní mřížky. Mřížkové parametry v tetragonální P-mřížce jsou: $c_0 \neq a_0 = b_0$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.



Hexagonální P-mřížka

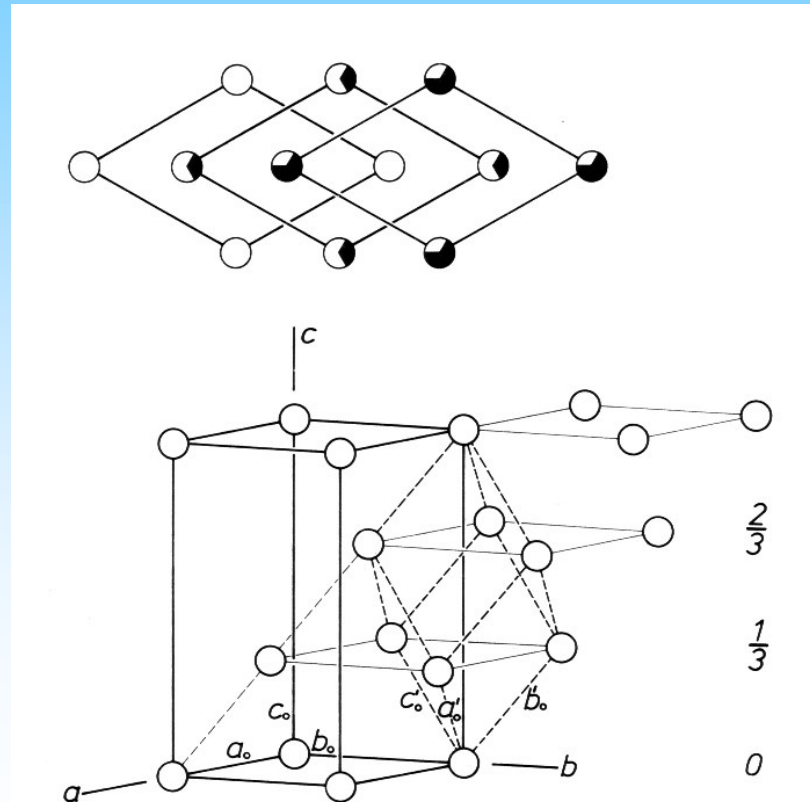
Hexagonální síť s kosočtverečnou základní buňkou ($\gamma = 120^\circ$) vrstvíme tak, že další síť je ve výšce $c_0/3$ a mřížkový bod leží na trojčetné ose. Třetí rovina ve výšce $2/3 c_0$ má mřížkový bod rovněž na trojčetné ose. Čtvrtá rovina leží přímo nad první. Takové uspořádání redukuje šestičetné osy na trojčetné a jsou odstraněny roviny symetrie $x,0,z$; $0,y,z$ a x,x,z a rovněž tak dvojčetné osy rovnoběžné s c .



Hexagonální P-mřížka

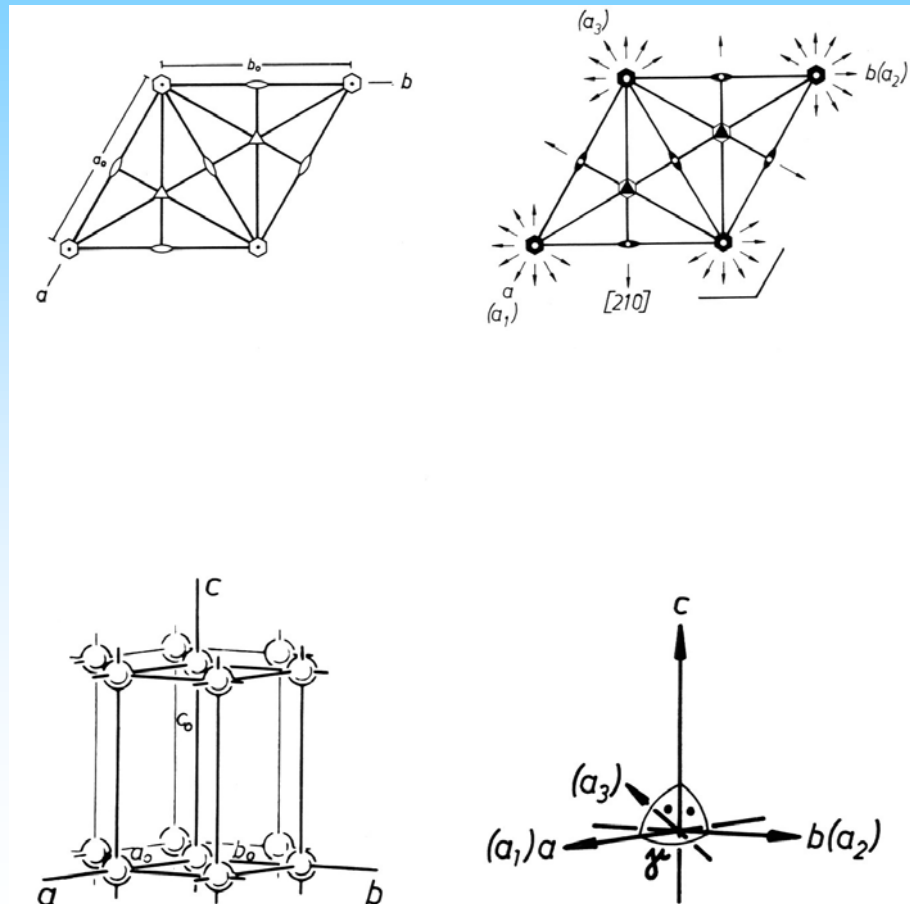
Z prostorového uspořádání mřížkových bodů lze vybrat dvě základní buňky:

- „neprimitivní“ s parametry: $a_0=b_0 \neq c_0$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$
- a trigonální R-mřížku s parametry: $a'_0=b'_0=c'_0$, $\alpha'=\beta'=\gamma'$.



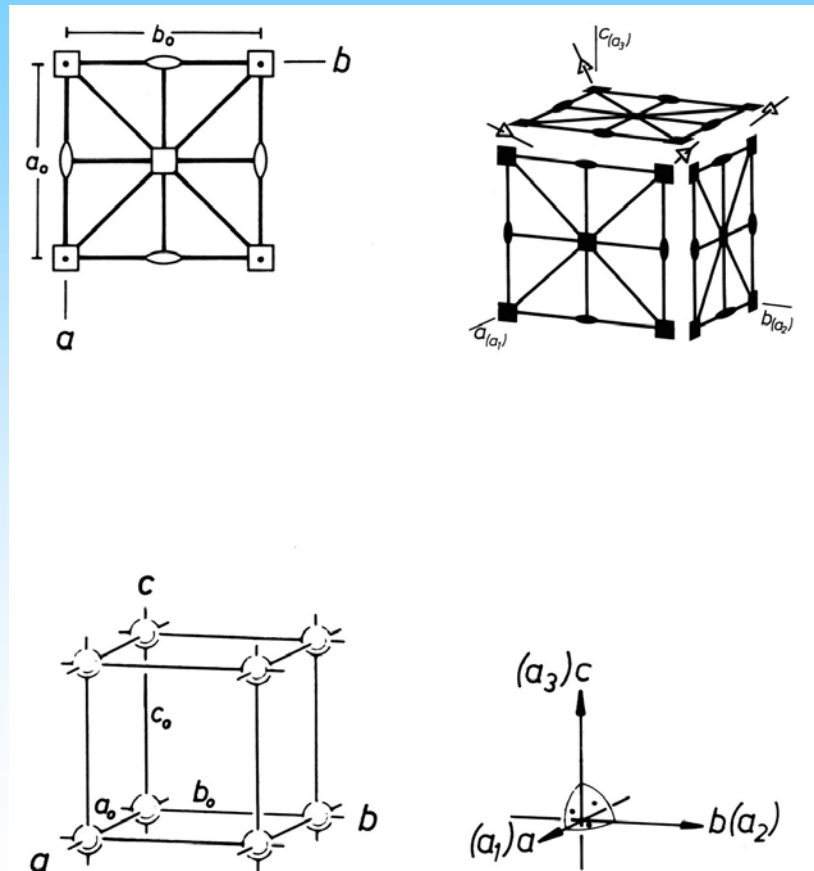
Hexagonální P-mřížka

Vrstvením hexagonálních sítí s kosočtverečnou základní buňkou ($\gamma = 120^\circ$) přímo nad sebe s mezivrstevní vzdáleností c_0 získáme hexagonální primitivní buňku. Mřížkové parametry v hexagonální P-mřížce jsou: $c_0 \neq a_0 = b_0$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.



Kubická P-mřížka

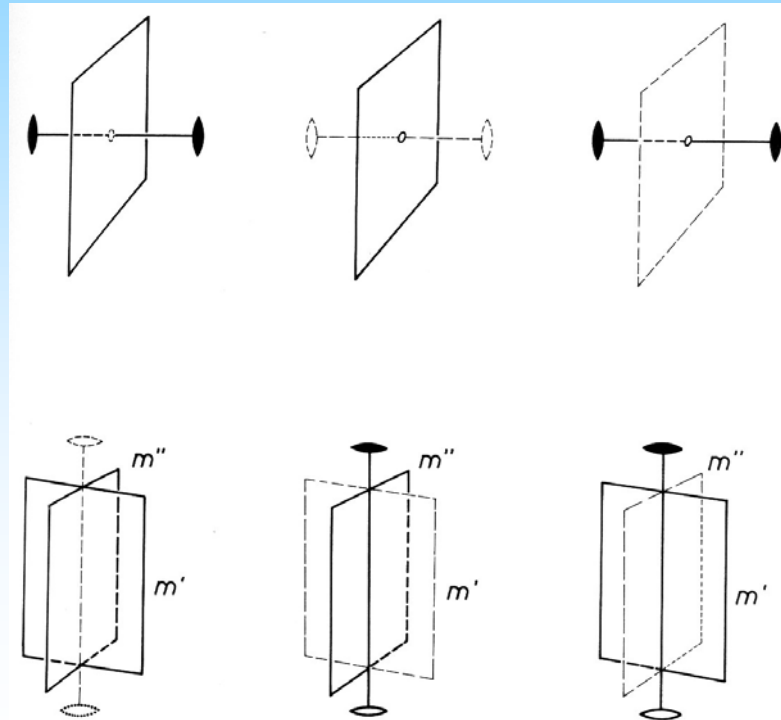
Vrstvením rovinných sítí se čtvercovou základní buňkou nad sebe s mezivrstevní vzdáleností $c_0 = a_0 = b_0$ získáme kubickou primitivní mřížku. Mřížkové parametry kubické P-mřížky jsou: $a_0 = b_0 = c_0$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.



Symetrie primitivních mřížek

Přítomnost určitých dvou prvků symetrie dává vzniknout třetímu prvku symetrie.

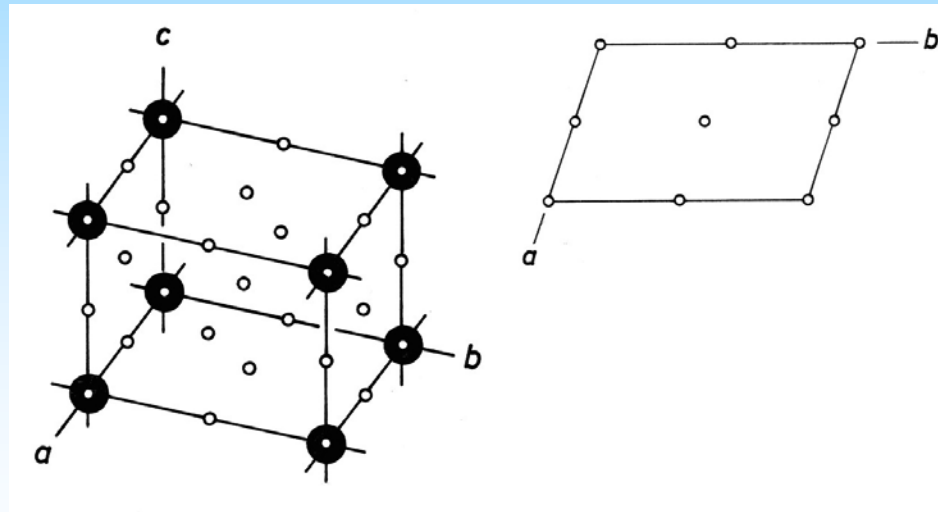
- I. Rotační osa libovolného sudého řádu ($n = 2, 4$ nebo 6) a rovina symetrie kolmá k této ose indikuje přítomnost středu symetrie v bodě jejich průtnutí.
- II. Dvě vzájemně kolmé roviny symetrie indikují dvojčetnou rotační osu v jejich průniku.



Symetrie primitivních mřížek

Každá mřížka je centrosymetrická se středem symetrie v mřížkovém bodě a na středu jejich spojnice. V P-mřížce existují středy inverze v $0,0,0$; $\frac{1}{2}, 0, 0$; $0, \frac{1}{2}, 0$; $0, 0, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$; $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.

Symetrie triklinické P-mřížky. Jedinými prvky symetrie mřížky jsou středy inverze ve výše uvedených souřadnicích. Projekce prvků symetrie podél c do roviny $x,y,0$ je na obrázku. Souřadnice z středů symetrie je 0 nebo $\frac{1}{2}$. Prostorová grupa mřížky se označuje P-1.



Symetrie primitivních mřížek

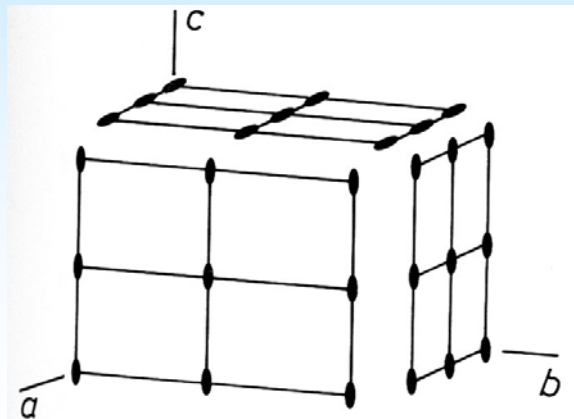
Symetrie monoklinické P-mřížky. Soubor mřížkových rovin, ze kterých se skládá monoklinická primitivní mřížka, obsahuje soubor dvojčetných rotačních os rovnoběžných s b . Navíc jsou přítomny roviny symetrie $x,0,z$ a $x,1/2,z$. Umístění roviny symetrie vyplývá z pravidla I: $n=2$ spolu se středem inverze generuje $m\perp 2$ ve středu inverze.

Prostorová grupa monoklinické P-mřížky je $P2/m$, kde konvenčně je dvojčetná osa paralelní s b a rovina symetrie je na b kolmá. Osa b se označuje jako krystalograficky významný směr. Tato orientace se označuje jako „druhé postavení“.

Symetrie primitivních mřížek

Symetrie rombické P-mřížky. K symetrii rombické P-mřížky se přidávají roviny symetrie kolmé na c v $x,y,0$ a $x,y, \frac{1}{2}$ a středy symetrie. Aplikací pravidla I nebo II jsou generovány dvojčetné osy v $x,0,0$; $x,0, \frac{1}{2}$; $x,\frac{1}{2},0$; $x,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$; $0,y,0$; $0,y, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2},y,0$ a $\frac{1}{2},y,\frac{1}{2}$.

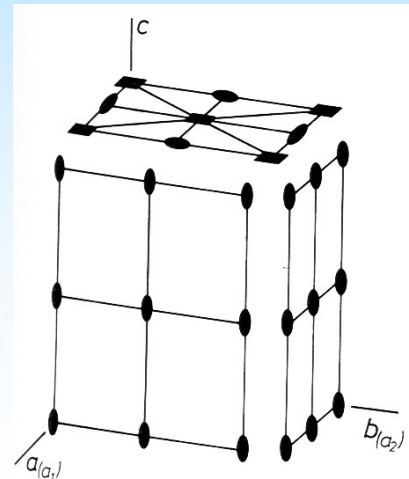
Alternativní přístup, který vede ke stejnému výsledku je následující: základní buňka rombické P-mřížky je pravoúhlý rovnoběžnostěn, který je ohraničen třemi páry mřížkových rovin s primitivní pravoúhlou základní buňkou. Jejich prvky symetrie jsou uspořádány ve směru tří krystalografických os. Každá osa je rovnoběžná s dvojčetnou rotační osou a na ní kolmou rovinou symetrie. Symbol prostorové grupy je $P 2/m 2/m 2/m$. Směry os x,y,z jsou označovány jako krystalograficky významné směry.



Symetrie primitivních mřížek

Symetrie tetragonální P-mřížky. K symetrii zaplněných rovin tetragonální P-mřížky se přidávají roviny zrcadlení kolmé na c v $x,y,0$ a $x,y,1/2$ a středy inverze. Podle pravidel I a II je generováno několik dvojčetných os. Základní buňka tetragonální P-mřížky má tvar tetragonálního prismatu – je tvořena dvěma mřížkovými rovinami se čtvercovou základní buňkou a čtyřmi rovinami s pravoúhlou základní buňkou.

Čtyřčetná osa zobrazuje směry a , b jako ekvivalentní a jsou proto označovány jako a_1 , a_2 . Podobně ekvivalentní jsou i směry $[110]$ a $[1-10]$. V prostorové grupě jsou symboly uvedeny v pořadí: $\langle c \rangle$, $\langle a \rangle$, $\langle 110 \rangle$, tzv. směry symetrie. Prostorová grupa se značí $P 4/m 2/m 2/m$.



Symetrie primitivních mřížek

Symetrie hexagonální P-buňky. Podobně jako rombická a tetragonální, má i tato buňka roviny zrcadlení kolmé na c v $x,y,0$ a $x,y,1/2$ a středy inverze. Aplikací pravidel I a II vzniká několik dvojčetných os. Šestičetná osa převádí a , b na rovnocenné směry a_1 , a_2 . Další ekvivalentní směr, označovaný jako a_3 , svírá s ostatními dvěma směry úhel 120° . Symbol $\langle a \rangle$ reprezentuje a_1 , a_2 , a_3 . Prvky symetrie jsou v symbolu prostorové grupy uspořádány: $\langle c \rangle$, $\langle a \rangle$, směr diagonál $\langle a \rangle$. Symbol prostorové grupy je tedy $P 6/m 2/m 2/m$.

Symetrie primitivních mřížek

Symetrie kubické P-mřížky. Výsledkem vrstvení v základní buňce je situace, kdy $a_0 = b_0 = c_0$. To znamená, že mřížkové roviny $0,x,y$ a $x,0,z$ mají stejnou symetrii jako $x,y,0$. Tato ekvivalence rovin umožňuje existenci čtyř trojčetných os ve směru diagonál základní buňky a v kombinaci se středem symetrie vznikají osy trojčetné inverzní. Aplikací pravidel I a II vznikají dvojčetné osy ve směru $\langle 110 \rangle$.

Symboly prvků symetrie v prostorové grupě jsou řazeny v pořadí: $\langle a \rangle$, $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$. Symbol prostorové grupy je $P 4/m -3 2/m$.

Centrované mřížky

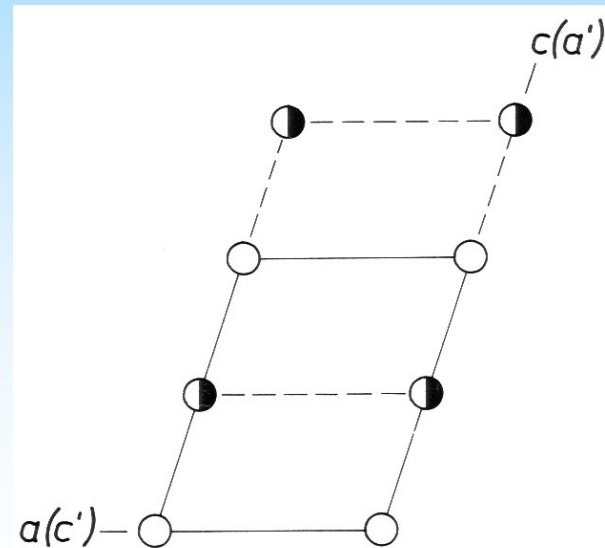
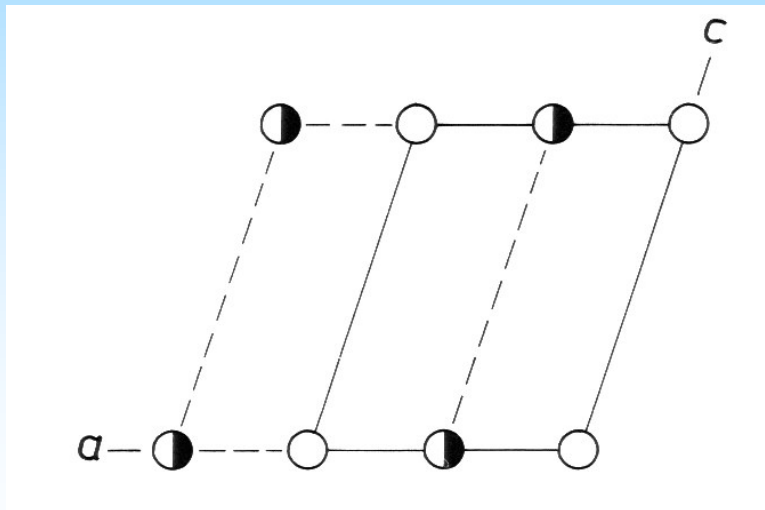
Každý bod monoklinické P-mřížky má symetrii $2/m$, což znamená přítomnost středu symetrie v daném bodě. Vložení nové mřížkové roviny do mřížky ve směru rovnoběžném s (010) je možné tehdy, pokud mřížkové body padnou do pozic se symetrií $2/m$, tj. na $\frac{1}{2}, 0, 0$; $0, \frac{1}{2}, 0$; $0, 0, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$; $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ nebo $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.

Buňky s centrovanou základnou se označují jako *bazálně centrované* a značí se A (B, C), buňky s uzlem v průsečíku tělesových úhlopříček jsou *prostorově centrované* (I), buňky centrované v těžišti všech ploch jsou *plošně centrované* (F).

Monoklinické centrované mřížky

Mřížková rovina s mřížkovým bodem v $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$. Nový mřížkový bod centruje plochu a, b základní buňky. Mluvíme o bazálně centrované C-mřížce nebo jednoduše o C-mřížce.

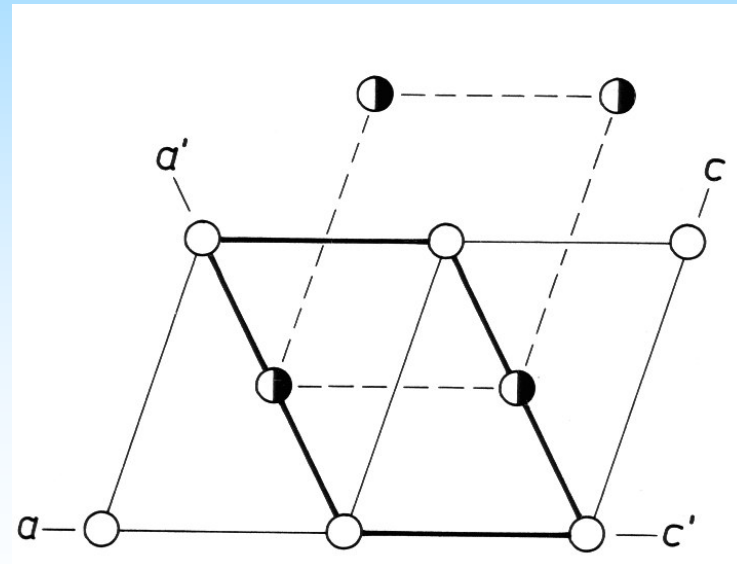
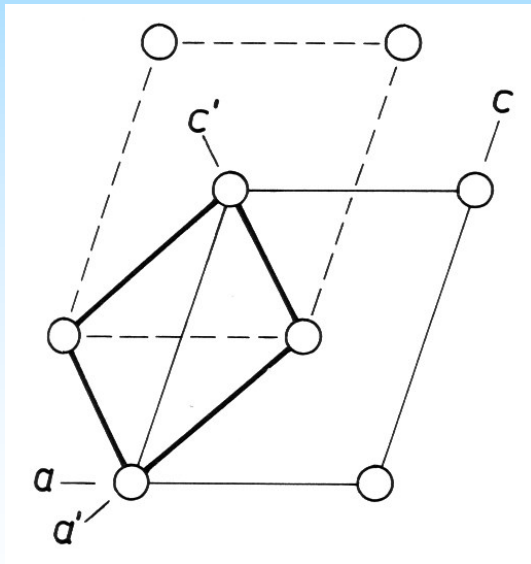
*Mřížková rovina s mřížkovým bodem v $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Pokud bod nové roviny centruje plochu b, c , výsledkem bude bazálně centrovaná A-mřížka. Jelikož v monoklinické soustavě směry a i c ležet kdekoliv v rovině zrcadlení, mohou být zaměněny a **A-mřížka se konvertuje na C-mřížku**.*



Monoklinické centrované mřížky

Mřížková rovina s mřížkovým bodem v $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$. Výsledkem je bazálně centrovaná B-mřížka, ze které lze vhodným výběrem udělat menší primitivní základní buňku s monoklinickou symetrií.

Mřížková rovina s mřížkovým bodem v $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Mřížka vznikne s mřížkovým bodem v těžišti základní buňky. Označuje se jako tělesově centrovaná základní buňka, krátce I-mřížka. Podobně jako u A-mřížky ji lze vhodným výběrem souřadnic konvertovat na monoklinickou C-mřížku.

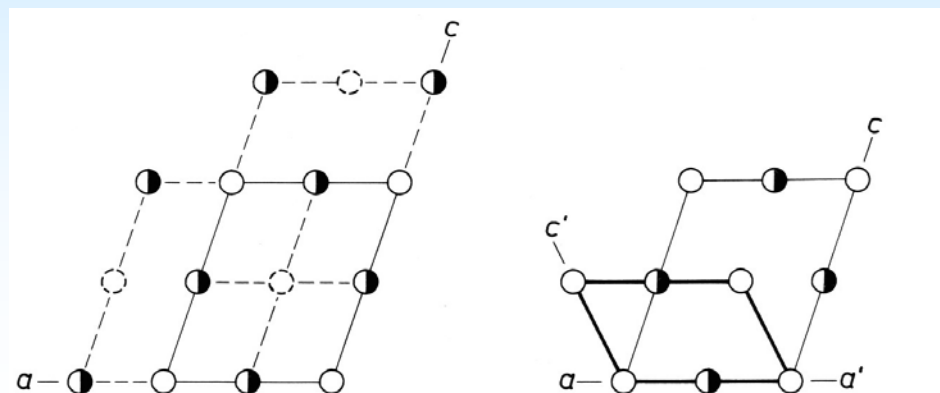


Monoklinické centrované mřížky

Mřížková rovina s mřížkovým bodem v $\frac{1}{2}, 0, 0$; $0, \frac{1}{2}, 0$ nebo $0, 0, \frac{1}{2}$. Výsledkem je prosté rozpůlení základní buňky a nevznikne žádný nový typ buňky.

Je také možné vložit dvě mřížkové roviny současně, např. jako u C- a A-mřížky. Přibudou nám mřížkové body v $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ a $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Jelikož je nezbytné, aby všechny mřížkové body měli stejné okolí a rovnoběžné mřížkové přímky stejnou periodu identity, musí být přidány další mřížkové body do $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$. Tím jsou všechny plochy buňky centrované a jedná se o plošně centrovanou F-mřížku. Monoklinickou F-mřížku lze redukovat na C-mřížku s polovičním objemem.

V rámci monoklinických centrovaných mřížek lze redukovat A,I,F-mřížky na C-mřížku a B-mřížku na P-mřížku.



Centrované mřížky

Stejným způsobem můžeme rozebrat rombickou P mřížku a dojdeme k rombickým A-, B-, C-, I- a F-mřížkám. I- a F-mřížky nelze redukovat jako v případě monoklinických. A, B a C mřížky jsou zaměnitelné v závislosti na výběru souřadných os. Existuje několik prostorových grup, které tradičně mají A-mřížku. C-mřížka může také vzniknout vertikálním vrstvením rovin, které mají pravoúhlou základní buňku.

Podobné postupy vedou k transformaci tetragonální P mřížky na I mřížku a kubické P mřížky na I a F mřížku.

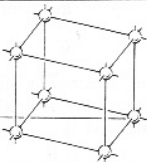
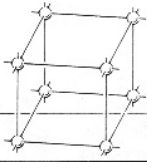
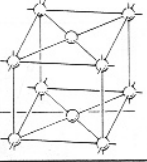
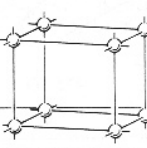
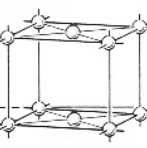
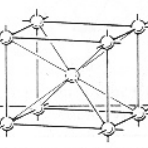
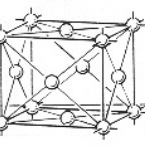
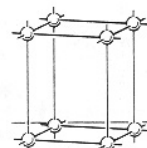
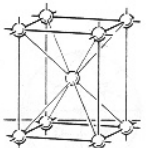
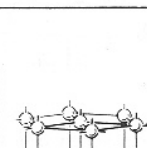
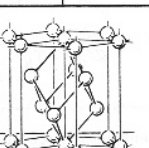
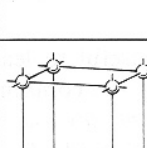
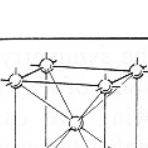
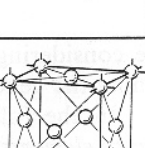
Symetrie centrovaných mřížek

S výjimkou trigonální R-mřížky je u centrovaných mřížek vždy věnována pozornost zachování celkové symetrie primitivní mřížky. Všechny prvky symetrie zůstanou zachovány, pokud jsou změněny pouze translační operace. Centrace mřížky skutečně vkládá nové prvky symetrie jako šroubové osy a skluzové roviny. Navzdory tomu jsou symboly prostorových grup centrovaných mřížek jednodušší, jelikož se v nich nevyskytují nové prvky symetrie.

14 Bravaisových prostorových mřížek reprezentuje 14 jedinečně možných způsobů, jak je možné vyplnit prostor body při zachování periodického uspořádání.

Všechny krystalické látky mají za základ jednu z těchto mřížek. Každá krystalová struktura má pouze jednu Bravaisovu mřížku.

Bravaisovy základní buňky

	P	C	I	F
Triclinic				
Monoclinic				
Orthorhombic				
Tetragonal				
Trigonal				
Hexagonal				
Cubic				

Grupy symetrie

Analýzou kombinací prvků symetrie (a operací jim příslušejících) lze odvodit grupy symetrie. Podle toho, které prvky symetrie zahrneme do analýzy, lze rozlišit tři hlavní typy grup:

- ✓ bodové grupy
- ✓ rovinné grupy
- ✓ prostorové grupy

Bodové grupy

Bodové grupy jsou tvořeny bodovými operacemi symetrie a jejich kombinací. Bodová grupa je definována jako množina bodových operací symetrie, jejichž operace ponechávají alespoň jeden bod v prostoru nepohyblivým.

Těmto požadavkům vyhovuje 8 prvků symetrie: 1, 2, 3, 4, 6, -4, i, m. Tyto prvky a jejich možné kombinace tvoří 32 **krystalografických bodových grup**, jimiž lze charakterizovat symetrii vnějšího tvaru krystalů.

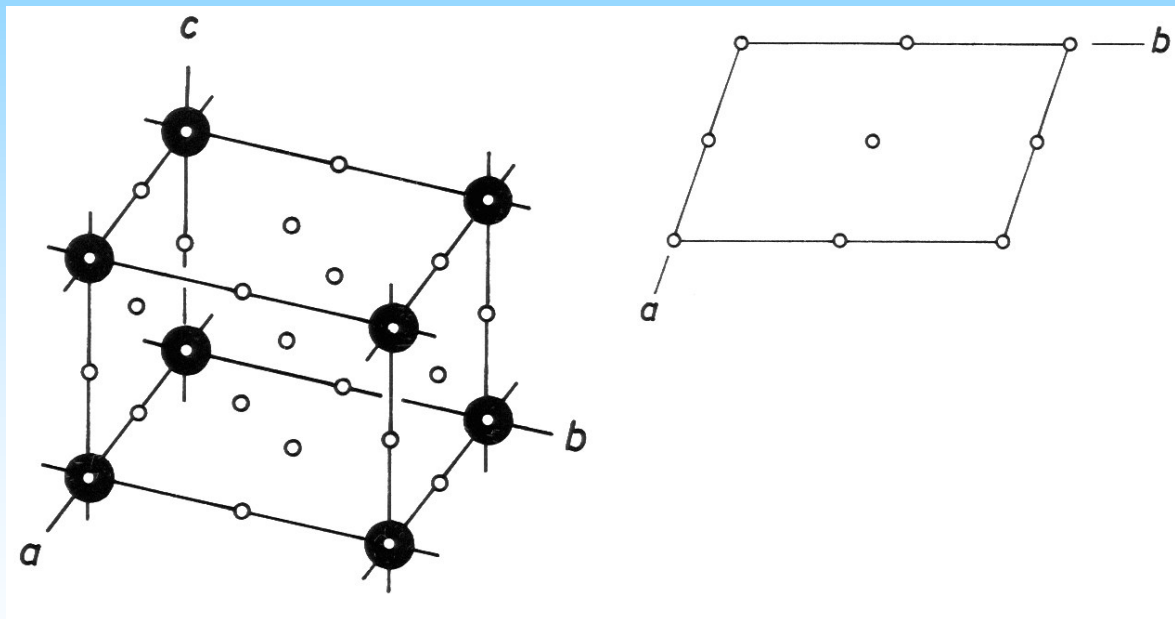
Bodové grupy odvozené od maximálně symetrických prostorových grup, mají rovněž maximální symetrii možnou v dané krystalové soustavě. Všechny tyto bodové grupy obsahují všechny prvky symetrie bodových grup s nižší symetrií (subgrupy).

Krystalograficky významné směry mají v bodových grupách stejný vztah k prvkům symetrie jako v grupách prostorových.

Triklinická soustava

Jediná subgrupa bodové grupy -1 je bodová grupa 1 . Vyjdeme-li z prostorové grupy $P-1$, tak všechny body, které neleží na středu inverze mají bodovou symetrii 1 .

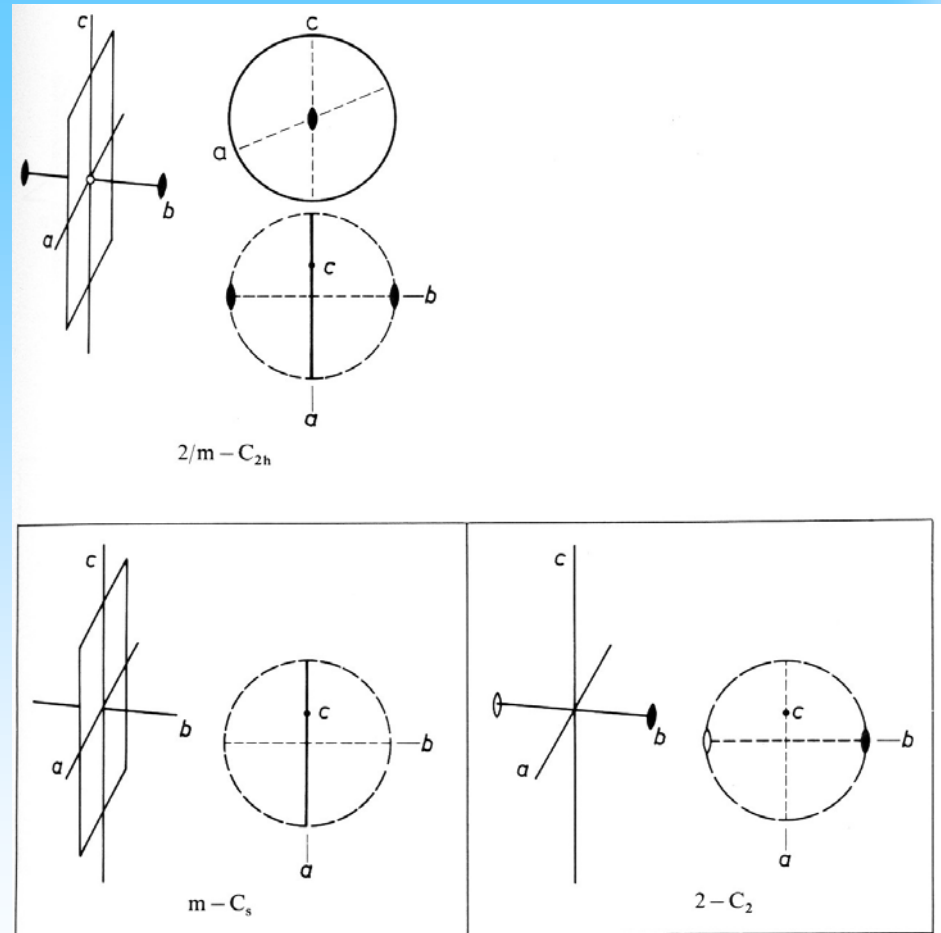
Triklinická P -mřížka s prvky symetrie prostorové grupy $P-1$ a projekce prvků symetrie na rovinu $x,y,0$. Souřadnice osy z středů symetrie jsou 0 a $\frac{1}{2}$.



Monoklinická soustava

V monoklinické soustavě má bodová grupa $2/m$ subgrupy 2 , m , -1 a 1 . Poslední dvě patří do soustavy triklinické. Ostatní monoklinické mají postačující symetrii k definování monoklinické soustavy: m kolmé na b v rovině a,c a dvojčetná osa rovnoběžná s b , kolmá na rovinu a,c .

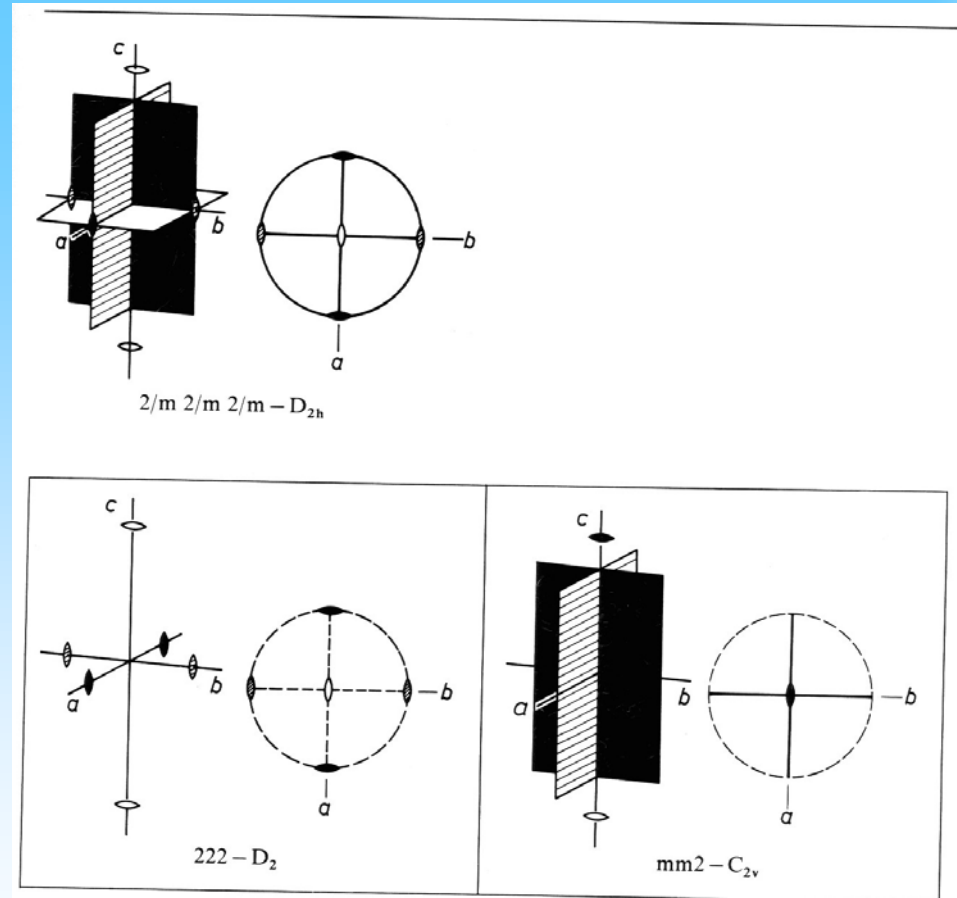
Stereogramy a prvky symetrie bodových grup monoklinické soustavy.



Rombická soustava

Pokud vyjmeme inverzi z bodové grupy $2/m\ 2/m\ 2/m$ dojde k redukci každého $2/m$ na m nebo 2 . Možné rombické subgrupy jsou tedy: mmm , $mm2$ (totéž $m2m$ a $2mm$), $m22$ (totéž $2m2$ a $22m$) a 222 .

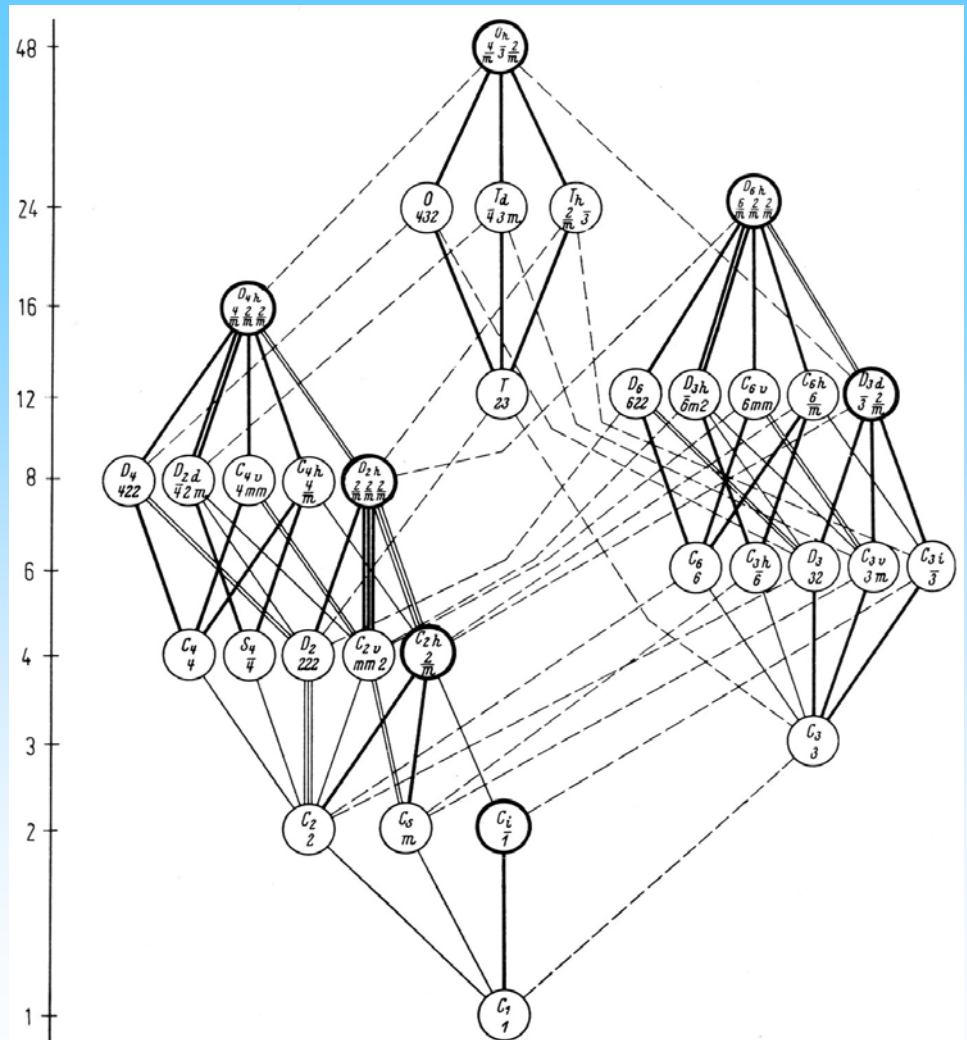
Stereogramy a prvky symetrie rombických subgrup.



Krystalové bodové grupy

Podobným způsobem lze odvodit 32 bodových grup v 7 krystalových odděleních, které se označují jako krystalografické bodové grupy. Všechny bodové grupy jsou subgrupou $4/m\bar{3}2/m$ nebo $6/m2/m2/m$.

Krystalové bodové grupy a jejich subgrupy.



Bodové grupy v Schoenfliesově značení

Grupy obsahující pouze jednu n -četnou rotační osu se nazývají **cyklické** (symbol C_1 , C_2 a pod.). Grupy tvořené n dvojčetnými osami, kolmými na osu n -tého řádu jsou grupy **diedrické** (symbol D_2 , D_3 a pod.). Spolu s grupami O a T (popisují symetrii oktaedru a tetraedru) máme celkem 11 axiálních grup. Doplníme-li je středem nebo rovinami souměrnosti, obdržíme dalších 20 grup; s bodovou grupou S_4 je celkový počet 32. Přehled Schoenfliesových symbolů je následující:

- C_n - grupy obsahující pouze vertikální polární osu n -tého řádu (C_1 , C_2 , C_3 , C_4 , C_6)
- D_n - grupy obsahující vertikální osy n -tého řádu a k nim n kolmých os 2. řádu (D_2 , D_3 , D_4 , D_6).
- S_4 - rotačně reflexní osa 4. řádu
- O - grupa oktaedru nebo krychle; obsahuje 3 osy 4. řádu, 4 osy 3. řádu a 6 os 2. řádu
- O_h - grupa oktaedru doplněná o inverzi

Bodové grupy v Schoenfliesově značení

T - grupa tetraedru; obsahuje 4 osy 3. řádu a 3 osy 2. řádu

T_h - grupa tetraedru doplněná o inverzi

T_d - grupa tetraedru doplněná o diagonální roviny symetrie

C_{ni} - grupy C_n doplněná o inverzi ($C_i = i, C_{3i}$)

C_{nh} - grupy C_n obsahující rovinu souměrnosti kolmou na osu n-tého řádu ($C_{1h} = C_s, C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}$)

C_{nv} - grupy obsahující n rovin souměrnosti procházejících vertikální polární osou n-tého řádu ($C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$)

D_{nh} - grupy obsahující všechny prvky D_n a navíc horizontální rovinu souměrnosti kolmou k ose n-tého řádu ($D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{6h}$)

D_{nd} - grupy obsahující všechny prvky D_n a navíc roviny souměrnosti protínající se v ose n-tého řádu a půlí úhly mezi osami 2. řádu (D_{2d}, D_{3d})

Mimo jiné např. platí: $C_{4i} = S_4, C_{6i} = C_{3h}$ a pod.

Bodové grupy v mezinárodním (Hermann - Mauguin) značení

Tyto symboly se skládají ze symbolů prvků symetrie v tzv. význačných směrech. Symboly mohou být nejvýše trojčlenné. Znaky v symbolech jsou uvedeny v pořadí význačných směrů a vztahují se na osy souměrnosti rovnoběžné s význačným směrem a na roviny souměrnosti kolmé k význačnému směru. Je-li na některou osu kolmá rovina souměrnosti, označujeme to zlomkem např. $2/m$. Pro jednotlivé soustavy jsou význačné tyto směry:

soustava	1. směr	2. směr	3. směr
triklinická	žádný směr není význačný; grupa je označena jedním symbolem, který může odpovídat libovolnému směru		
monoklinická	význačným směrem je směr osy dvojčetné nebo dvojčetné inverzní, který volíme podél souřadnicové osy y nebo z		
rombická	směry tří navzájem kolmých os x, y, z		
trigonální	směr trojčetné osy, podél z	směr \perp k 1.směru, podél osy y	směr \perp k 1.směru, svírá úhel 30° s 2. směrem
tetragonální	směr čtyřčetné osy, podél osy z	směr \perp k 1.směru, podél osy y	směr \perp k 1.směru, svírá úhel 45° s 2. směrem
hexagonální	směr šestičetné osy, podél osy z	směr \perp k 1.směru, podél osy y	směr \perp k 1.směru, svírá úhel 30° s 2. směrem
kubická	směr jedné ze tří navzájem kolmých os x, y, z	směr jedné z tělesových úhlopříček krychle	směr některé ze stěnových úhlopříček krychle

Vlastnosti bodových grup

Jako příklad bodové grupy uveďme rombickou grupu $mm2$, která má roviny m kolmé k osám x , y a osu z rovnoběžnou s osou z . Místo úplných symbolů se často používají symboly zkrácené, které jsou odvozeny od úplných tak, že ve význačných směrech zůstanou jen znaky prvků, z nichž vyplývá existence všech dalších. Např. symbol $2/m\ 2/m\ 2/m$ je zkrácen na mmm , protože ze tří rovin souměrnosti na sebe kolmých vyplývají tři navzájem kolmé dvojčetné osy.

V bodových grupách se středem inverze nemohou existovat polární směry.

V odděleních bez středu souměrnosti jsou polární všechny směry s výjimkou směrů kolmých na osy sudého řádu nebo roviny souměrnosti a směrů splývajících s inverzními osami. Střed souměrnosti má 11 tzv. *centrických* bodových grup: -1 , -3 , $4/m$, $6/m$, $m3$, $2/m$, mmm , $-3m$, $4/mmm$, $6/mmm$, $m-3m$. Ostatní bodové grupy se označují jako *acentrické*.

Laueho grupy

Bodové grupy, které se navzájem liší jen přítomností nebo nepřítomností středu souměrnosti a prvků, které v důsledku tohoto středu vznikly, zahrnujeme do stejné skupiny - tzv. *Laueho grupy*. Jeho symbol je dán symbolem té bodové grupy, která má střed symetrie (centrické grupy). Jelikož Laueho grupy hrají významnou roli při určování symetrie krystalů difrakčními metodami, nazývají se někdy *grupami difrakční symetrie*. Symetrie difrakčního obrazu všech bodových grup příslušejících k jedné Laueho grupě je stejná a je dána symetrií příslušné centrické grupy.

Laueho grupa	příslušné bodové grupy
-1	1, -1
2/m	2, m, 2/m
mmm	222, mm2, mmm
-3	3, -3
-3m	32, 3m, -3m
4/m	4, -4, 4/m
4/mmm	422, 4mm, -42m, 4/mmm
6/m	6, -6, 6/m
6/mmm	622, 6mm, -6m2, 6/mmm
m3	23, m3
m-3m	432, -43m, m-3m

Enantiomorfní bodové grupy

Dva zrcadlově shodné objekty, které popisuje bodová grupa obsahující pouze osy souměrnosti, se nazývají *enantiomorfní*. Takové objekty mají tvar a symetrii identické, ztotožněny mohou být jen zrcadlením v rovině souměrnosti. Souměrnost v enantiomorfních odděleních popisují tzv. **enatiomorfní grupy** (nemají střed symetrie a nemají roviny zrcadlení): 1, 2, 3, 4, 6, 222, 32, 422, 622, 23, 432.

Krystalové symetrie

Prostorové grupy popisují úplnou symetrii krystalové struktury. Pokud uvažujeme pouze o morfologii krystalu, jsou mřížkové translace typické pro prostorové grupy zrušeny a zůstane bodová grupa, která je odvozena z prostorové grupy. Je-li krystal omezen plochami, symetrie jeho morfologie bude symetrií odpovídající bodové grupy.

Prvky symetrie v bodových grupách

V bodových grupách se setkáme pouze s operacemi a prvky symetrie, které neobsahují translaci. Vzájemné kombinace prvků symetrie v bodových grupách se řídí přesně stanovenými zákonitostmi, které jsou uvedeny v následujícím výčtu.

- V hlavních a význačných směrech krystalu se mohou vyskytovat samostatné rotační osy (1 = monogyra, 2 = digyra, 3 = trigyra, 4 = tetragyra a 6 = hexagyra). V takovém případě jsou **osy polární** a na morfologii se to může projevit různopolárním vývojem.
- V průniku n rovin symetrie existuje n -četná rotační osa. Její násobnost závisí na úhlu ($n = \pi/\alpha$), který svírají protínající se roviny symetrie. Vzniklé rotační osy jsou polární (2mm, 3m, 4mm, 6mm).
- Analogicky platí, že prochází-li rovina symetrie n -četnou osou symetrie, bude se v této ose protínat dalších $n-1$ rovin symetrie.
- N -četné osy symetrie sudého řádu sdružené s kolmou rovinou symetrie podmiňují přítomnost středu symetrie.

Prvky symetrie v bodových grupách

- Leží-li 2-četná osa v rovině symetrie kolmé na n-četnou osu symetrie, je přítomno dalších n-1 2-četných os, které svírají úhel $\alpha = \pi/n$.
- Nalezneme-li dvě 2-četné osy svírající úhel α , existuje na ně kolmá n-četná osa symetrie, kde $n = \pi/\alpha$ a počet 2-četných os se doplní na n (222, 32, 422, 622, 432). 2-četné osy kolmé na sudé rotační osy podmiňují střed symetrie.
- V hlavních a význačných směrech krystalu se mohou vyskytovat rotačně inverzní osy symetrie (-1 = inverze, -2 = digyroida, -3 = trigyroida, -4 = tetragyroida, -6 = hexagyroida). Tyto inverzní osy symetrie jsou vždy dipolární a liché z nich podmiňují střed symetrie.
- Stejnocenné 2-četné osy v osním směru kolmém na inverzní osu symetrie podmiňují přítomnost meziosních rovin symetrie (-32/m).
- Pokud inverzní osu symetrie protínají roviny symetrie, je podmíněna existence 2-četných os v osových směrech.

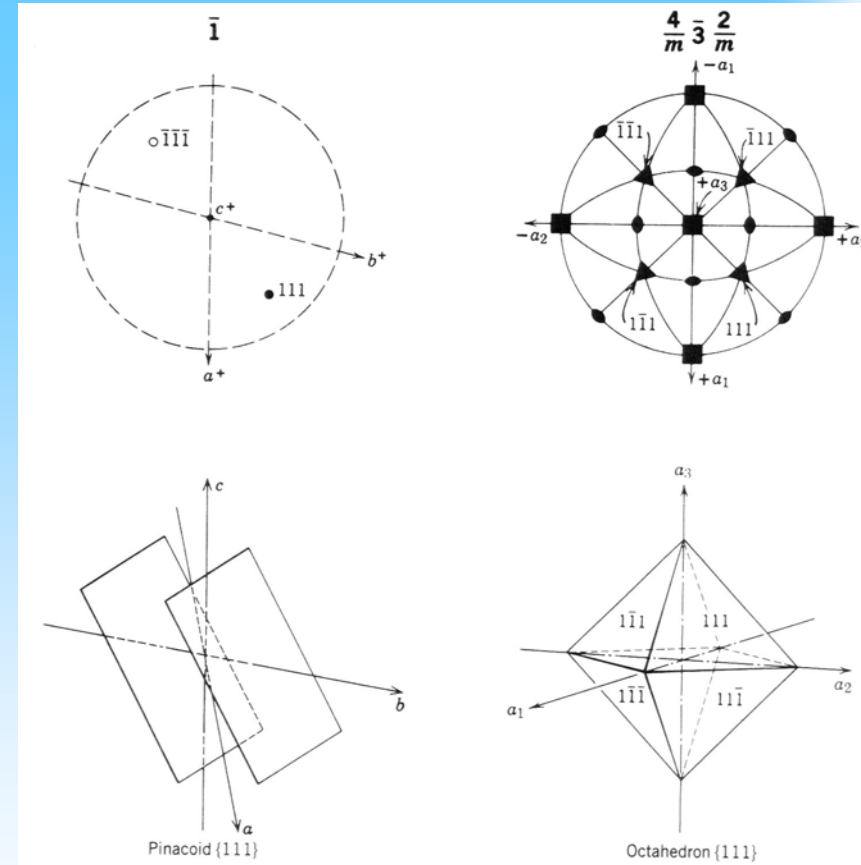
Krystalové tvary

Pokud jsou operace symetrie bodové grupy aplikovány na vybranou krystalovou plochu, vznikne určitý počet ekvivalentních ploch.

Soubor ekvivalentních ploch se označuje jako krystalový tvar.

Krystalový tvar jako celek je definován Milerovým indexem jedné plochy náležející danému tvaru.

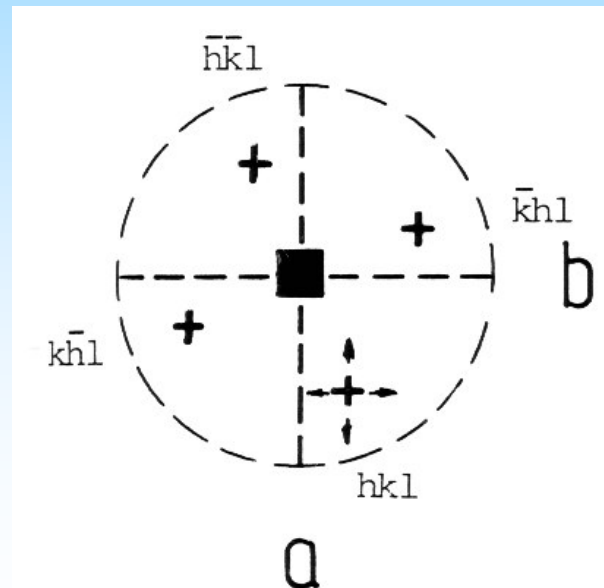
Krystalové tvary lze rozdělit na **obecné, speciální a limitní**.



Obecný krystalový tvar

Obecný tvar je soubor ekvivalentních ploch, kdy každá z nich má plošnou symetrii 1. Obecný tvar má index $\{hkl\}$. Póly ploch obecného tvaru mají dva stupně volnosti. Můžeme jimi pohybovat ve dvou směrech, beze změny na jiný krystalový tvar. Změna indexů $\{hkl\}$ může dát vzniknout nekonečnému množství obecných krystalových tvarů. Prakticky ale existují na reálných krystalech jen některé z těchto možných ploch.

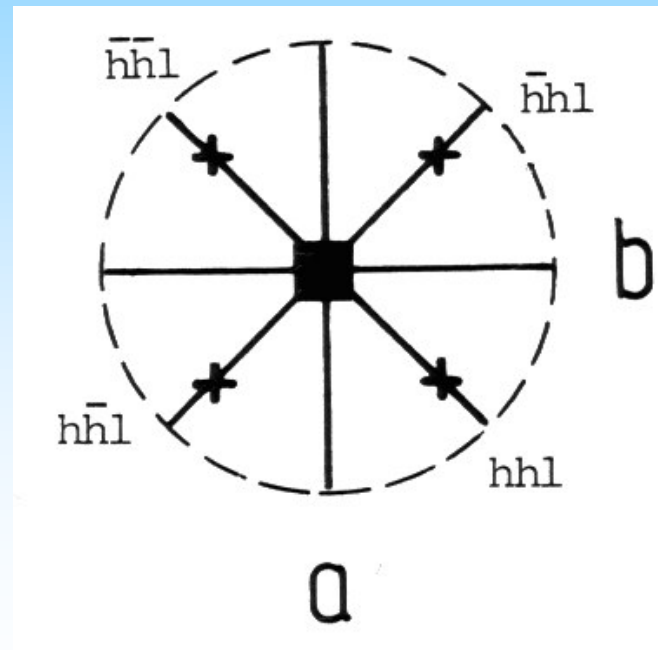
Stereogram bodové grupy 4.
Vyznačeny jsou polohy obecného tvaru tetragonální pyramidy $\{hkl\}$.



Speciální krystalový tvar

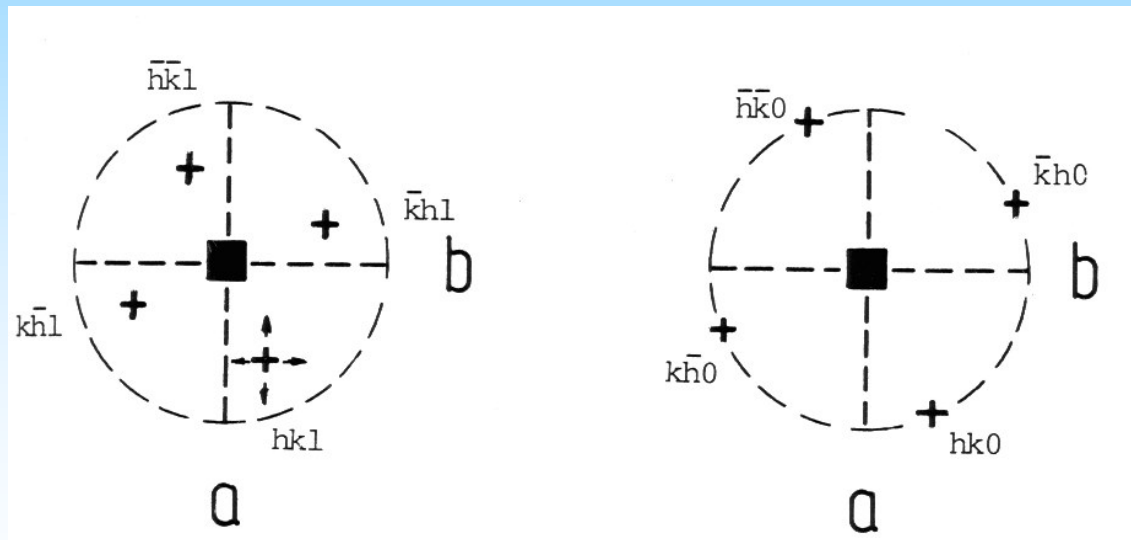
Speciální tvar je soubor ekvivalentních krystalových ploch, které mají svoji symetrii vyšší než 1. Pokud pól dané plochy leží na jediném prvku symetrie má jeden stupeň volnosti, můžeme s ním pohybovat v jednom směru, aniž bychom změnili charakter krystalového tvaru. Pokud pól plochy leží na více prvcích symetrie, nemá žádný stupeň volnosti, je definován jednoznačně.

Sterogram bodové grupy $4mm$.
Vyznačeny jsou polohy speciálního tvaru tetragonální pyramidy $\{hhl\}$.



Limitní krystalový tvar

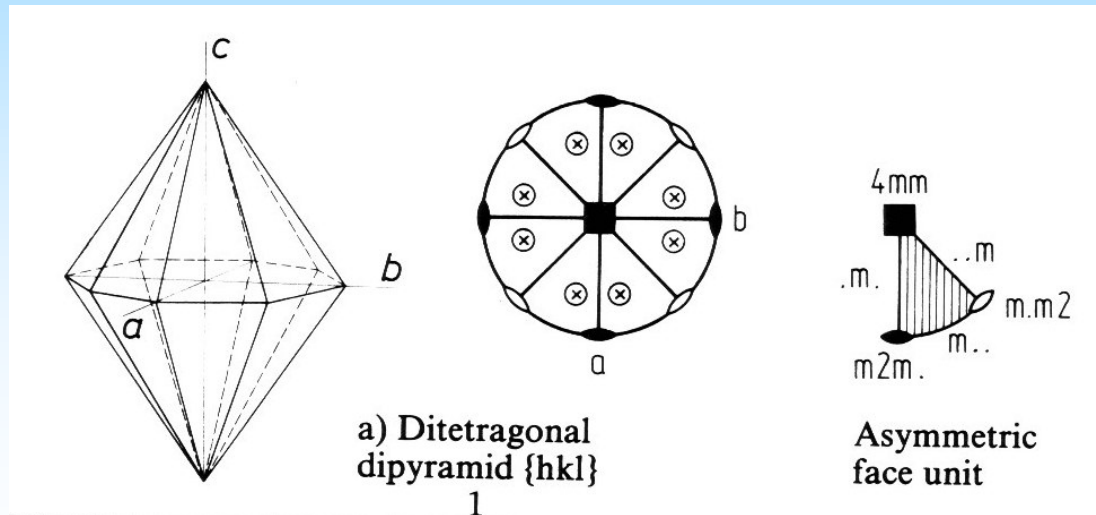
Limitní tvar je zvláštní případ buď speciálního nebo obecného tvaru. Má stejný počet ploch se stejnou plošnou symetrií, ale plochy jsou jinak uspořádány. Na obrázku je stereogram bodové grupy 4, kdy se póly tetragonální pyramidy posunou na okraj pasné roviny a vznikne tak tetragonální prizma $\{hk0\}$ jako limitní tvar obecného tvaru tetragonální pyramidy s plošnou symetrií 1.



Asymetrická plošná jednotka

Asymetrická plošná jednotka bodové grupy z pohledu sférické projekce, je nejmenší část z povrchu projekční koule, pomocí které je možno operacemi symetrie dané bodové grupy generovat zbylou plochu projekční koule.

Ve stereogramu bodové grupy $4/m\ 2/m\ 2/m$ je asymetrická základní plošná jednotka omezena rovinami $m..$, $.m.$ a $..m.$ Pokud pól plochy leží v asymetrické základní plošné buňce, vznikne operacemi symetrie ditetragonální dipyramida $\{hkl\}$. Tento tvar má dva stupně volnosti a plošnou symetrii 1 – je to obecný tvar.



Asymetrická plošná jednotka

Rozměr asymetrické základní buňky je prostý poměr plochy kruhu ve stereografické projekci k počtu ploch obecného tvaru:

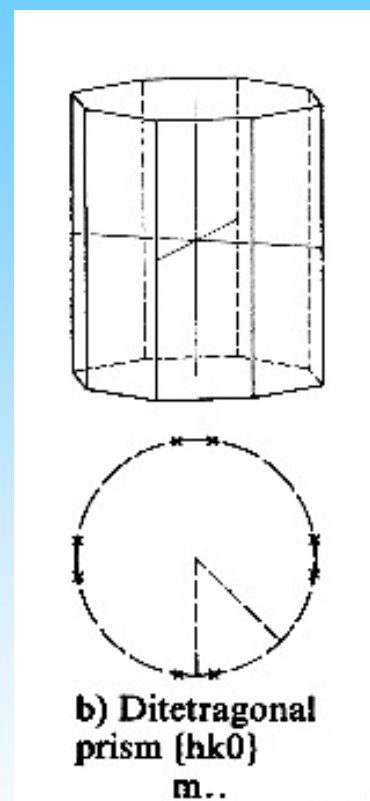
$$f_{\text{asym. face unit}} = f_{\text{surface area of the sphere}} / \text{počet ploch}$$

V případě výše uvedené bodové grupy je velikost asymetrické plošné základní jednotky 1/16.

Asymetrická plošná základní jednotka bodové grupy obsahuje všechny informace nezbytné k úplnému popisu krystalového tvaru v dané bodové grupě.

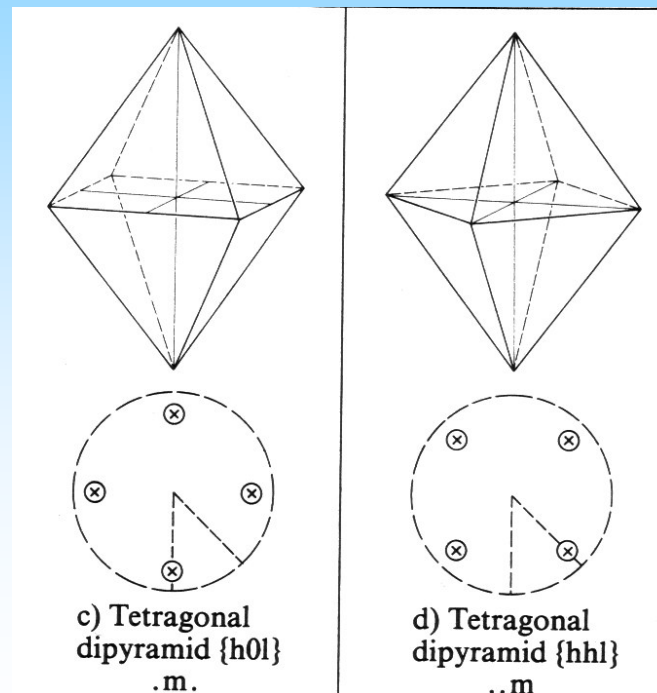
Asymetrická plošná jednotka

Pokud se pól obecné plochy (hkl) bude posunovat na rovinu zrcadlení $m..$, bude se tento pól a s ním všechny další v obecném tvaru měnit. Úhel mezi (hkl) a $(hk-1)$ bude postupně menší a v rovině zrcadlení bude nulový. V tomto bodě obě plochy splynou v jednu plochu $\{hk0\}$ – ditetragonální prizma.



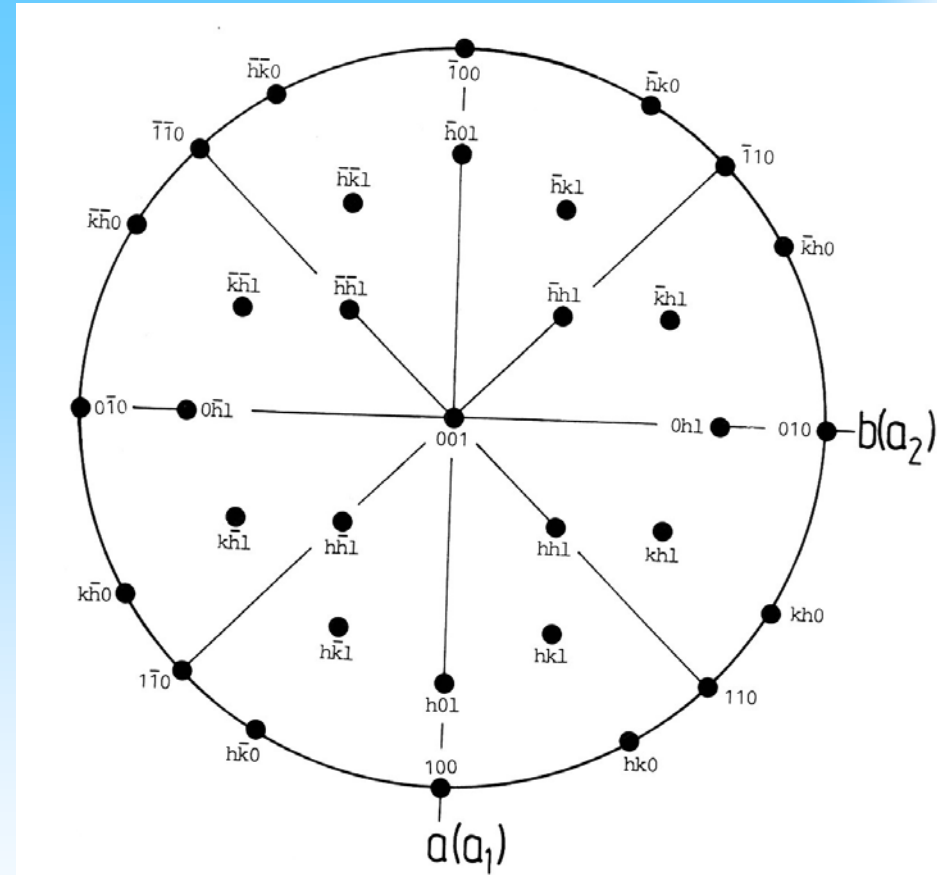
Asymetrická plošná jednotka

Póly ploch na rovině zrcadlení $.m$ umožní po aplikaci prvků symetrie vznik tetragonální deuterodipyramidy $\{h0l\}$ a pól na rovině symetrie $..m$ tetragonální protodipyramidě $\{hhl\}$. Plochy $\{hk0\}$, $\{h0l\}$ a $\{hhl\}$ mají poloviční počet ploch oproti obecnému tvaru a mají také jen jeden stupeň volnosti. Každý tvar zůstane nezměněn, pokud jeho poloha zůstane na dané hraně plošné asymetrické základní buňky.



Asymetrická plošná jednotka

Na stereogramu bodové grupy $4/mmm$ jsou vyznačeny krystalové tvary. Silné čáry dělí povrch na 16 plošných asymetrických jednotek. Póly, které leží na rozích jednotky, nemají žádný stupeň volnosti. Póly ležící na hranách asymetrických jednotek mají jeden stupeň volnosti a reprezentují i ostatní póly, ležící na těchto hranách. Póly uvnitř asymetrických jednotek mají dva stupně volnosti a reprezentují všechny ostatní póly tohoto typu. Ve všech případech jsou to ale póly ditetragonálních dipyramid.



Asymetrická plošná jednotka

Z bodové grupy nejvyšší symetrie dané krystalové soustavy můžeme odvodit subgrupy. Existuje vztah mezi obecným krystalovým tvarem bodové grupy nejvyšší symetrie a tvary v subgrupách dané krystalové soustavy. To lze demonstrovat na stereogramu $4/mmm$. Pokud ponecháme prvky symetrie pro oddělení $4mm$, zůstane nám asymetrická jednotka dvojnásobné velikosti (chybí pasná rovina, spojí se část z jižní a severní polokoule stereografické projekce). Pól plochy v obecné poloze $\{hkl\}$ je danými operacemi symetrie $4mm$ zmnožen do tvaru ditetragonální pyramidy $\{hkl\}$ a pól $\{hk-l\}$ patřící stejné asymetrické jednotce pak dává vzniknout ditetragonální pyramidě $\{hk-l\}$.

Stejným způsobem lze odvodit obecné tvary v ostatních bodových grupách tetragonální soustavy. Asymetrická základní buňka v grupách 4 a -4 je čtyřikrát větší než v $4/mmm$.

Odvozování krystalových tvarů

Bodové grupy (oddělení symetrie), lze rozdělit podle určitých společných znaků do sedmi krystalových soustav. Vždy jedno oddělení symetrie v dané soustavě vykazuje maximální možnou symetrii. Takové oddělení označujeme jako holodrické (plnoploché) a krystalový tvar s maximálním počtem krystalových ploch se označuje jako holodtr (plnotvar).

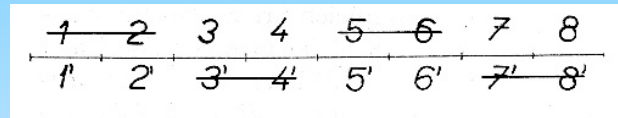
V ostatních odděleních jednotlivých krystalových soustav (oddělení s nižší symetrií) můžeme krystalové tvary geometricky odvodit od holodtrů meroedrickou operací (jde o částečnou redukci krystalových ploch).

Snížíme-li meroedrickou operací počet krystalových ploch holodtru na polovinu, dostáváme vůdčí tvary oddělení s nižší symetrií, tzv. polotvary čili hemiedry a příslušné oddělení je hemiedrické.

Při snížení počtu ploch hemiedru na čtvrtinu, dostáváme čtvrtitvar, tetartoedr a oddělení se označuje jako tetartoedrické.

Odvozování hemiedrických tvarů

Hemiedr skalenoedrického typu vznikne z holodru {hkl} vynecháním dvojic ploch střídavě nad horními a dolními oktanty resp. dodekanty. Hemiedr se formuje rozšířením nových ploch a protnutím v nových hranách.



Skalenoedrická meroedrická operace může vést k pozitivnímu hemiedru, kdy se zachovají plochy v pozitivním oktantě, plochy 1, 2 vytínají kladnou část vertikály. Negativní hemiedr vznikne ze zachovaných ploch 1', 2', které vytínají negativní část vertikály. Oba typy hemiedru jsou kongruentní.

Odvozování krystalových tvarů

Hemiedr trapezoedrického typu vzniká, když střídavě vynecháváme po jedné ploše v horní a dolní části holodru $\{hkl\}$.

1	2	3	4	5	6	7	8
1'	2'	3'	4'	5'	6'	7'	8'

Pokud zachováme v pozitivním oktantě pravou plochu 2, získáme **hemiedr pravý**, pokud ponecháme v novém tvaru levou plochu 1 (redukujeme plochu 2), získáme **hemiedr levý**. Oba tvary jsou vzájemně enantiomorfní.

Odvozování krystalových tvarů

Hemiedr dipyramidálního typu odvodíme střídavým vynecháváním vždy horního a dolního páru ploch holodru.

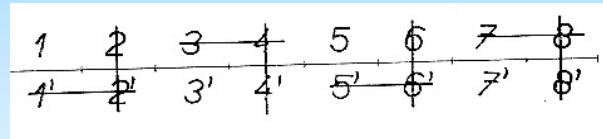
1	2	3	4	5	6	7	8
1'	2'	3'	4'	5'	6'	7'	8'

Při dipyramidální meroedrické operaci obdržíme opět pravý nebo levý hemiedr podle toho, z kterého oktantu, resp. dodekantu začneme s redukcí ploch. Oba hemiedry jsou kongruentní.

Odvozování krystalových tvarů

Tetartoedrický vývoj krystalového tvaru získáme uplatněním dvou meroedrických operací popsaných u hemiedrie.

Příkladem může být kombinace skalenoedrické a dipyramidální meroedrie. Výsledkem je disfenická tetartoedrie, kdy vznikají čtyři tetartoedry: pozitivní a negativní pravý a pozitivní a negativní levý.



Stanovení bodových grup

Pro zařazení krystalu do bodové grupy není vždy nutné znát všechny prvky symetrie. Potřebné informace získáme při zodpovězení vhodně volených otázek. Prakticky je nejlépe začít od rotačních os. Ty jsou vždy polární tzn., že mají různé vlastnosti na paralelní a antiparalelní straně. Některé prvky symetrie mohou tuto polaritu zcela eliminovat: střed symetrie (-1), $m \perp n$ a $2 \perp n$.

Crystal system	Point groups ^a	Characteristic symmetry elements
Cubic	$4/m \bar{3} 2/m$ $\bar{4}3m, 432, 2/m\bar{3}, 23$	4 ▲
Hexagonal	$6/m 2/m 2/m$ $\bar{6}m2, \bar{6}mm, \bar{6}22,$ $\bar{6}/m, \bar{6}, \bar{6}$	● or ▲
Tetragonal	$4/m 2/m 2/m$ $\bar{4}2m, 4mm, 422,$ $4/m, \bar{4}, \bar{4}$	1 ■ or 1 ▣ (3 ■ or 3 ▣ ⇒ cubic)
Trigonal	$\bar{3} 2/m$ $3m, \bar{3}2, \bar{3}, \bar{3}$	1 ▲ (remember that m normal to 3 gives $\bar{6}$ ⇒ hexagonal)
Orthorhombic	$2/m 2/m 2/m$ $mm2, 222$	2 and/or m in three orthogonal directions
Monoclinic	$2/m$ $m, \bar{2}$	2 and/or m in one direction
Triclinic	$\bar{1}$ 1	$\bar{1}$ or 1 only

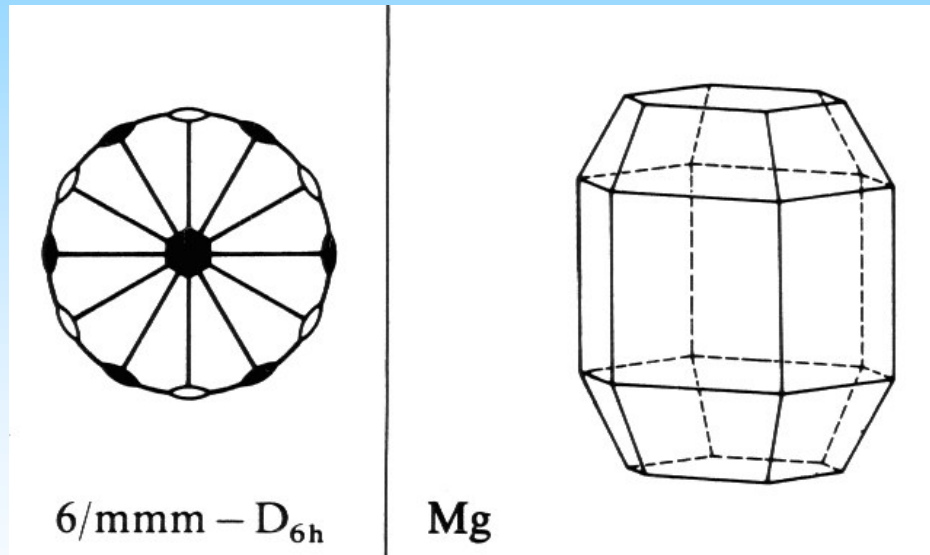
Stanovení bodových grup

Důležitými otázkami při určování bodové grupy jsou následující:

1. Je přítomna rotační osa vyšší než dvojitá (3,4,6)?
2. Je tato osa polární? nebo
Je přítomen střed symetrie? (krystaly se středem symetrie mají soubory ekvivalentních paralelních ploch na opačných stranách krystalu)
3. Je přítomna rovina symetrie a v jakém je vztahu k výše zjištěným rotačním osám?

Příklad určení bodové grupy

Krystal hořčíku obsahuje jednu šestičetnou rotační osu, takže musí patřit do hexagonální soustavy. Snadno lze nalézt střed symetrie, což omezuje výběr bodových grup na $6/m$ nebo $6/mmm$. Ty pak mohou být rozlišeny na základě rovin zrcadlení paralelních s šestičetnou osou. Jelikož jsou přítomny, výsledná bodová grupa je $6/mmm$.



Stanovení bodových grup

Určení symetrie krystalu nemusí být vždy jednoznačné. Příkladem může být hexaedr, který se jako tvar vyskytuje ve všech pěti kubických bodových grupách. Určíme-li prvky symetrie hexaedru, povede to vždy k bodové grupě nejvyšší symetrie $m-3m$. Pyrit (bodová grupa $m-3$) má krystaly velmi často omezené hexaedrem, ale plochy hexaedru jsou velmi často rýhované, což značí nižší symetrii dané bodové grupy.

Jiné dvojznačné případy jsou například leptové obrazce, které indikují skutečnou symetrii krystalové plochy. Obrazce jsou zpravidla spojeny s plochami s vysokými Millerovými indexy a jsou patrné až po působení rozpouštědla na tyto plochy.

Bodové grupy a optická aktivita krystalů

Optická aktivita je schopnost některých krystalů a molekul stáčet rovinu polarizovaného světla. Je to možné pouze v bodových grupách, které jsou enantiomorfní. Můžeme rozlišit dvě třídy optické aktivity:

- a) optická aktivita jakožto vlastnost krystalu. Krystal je opticky aktivní a jeho aktivita se ztrácí, pokud je roztaven nebo rozpuštěn. Příkladem může být nižší křemen nebo NaClO_3 . Ve dvou enantiomorfních formách není jen morfologický tvar, ale i celá struktura.
- b) optická aktivita jako vlastnost molekul. Některé molekuly jsou enantiomorfní a jsou opticky aktivní ve formě roztoku i krystalu. Příkladem je kyselina D - a L – tartarová.

Optická aktivita není omezena pouze na 11 enantiomorfních oddělení, ale je známa i z grup m , $mm2$, -4 nebo $-42m$.

Bodové grupy a piezoelektrické vlastnosti

V některých krystalech, jsou-li podrobeny tlaku nebo tahu, vzniká v určitých směrech elektrický náboj. Jev lze demonstrovat na destičce křemene (bodová grupa 32), seříznuté kolmo k polární ose. Směr působení tlaku nebo tahu musí být podél polární osy. Polární osa má na své paralelní a antiparalelní straně rozdílné fyzikální vlastnosti a proto se budou na opačných stranách destičky hromadit opačné náboje. Při změně tlaku za tah nebo obráceně se bude měnit polarita elektrického pole.

Piezoelektrické vlastnosti se projeví jen u látek z bodových grup s polární osou a bez středu symetrie. Vlastnost má reverzibilní charakter – pokud aplikujeme na krystal elektrické pole, dojde k jeho kompresi nebo expanzi.

Rovinné grupy

Rovinná grupa je množina prvků symetrie, jejichž operace jsou omezeny na transformace v rovině x, y . Na rozdíl od bodových grup množina obsahuje zrcadlové přímky m a skluzové přímky g s velikostí skluzu $1/2$ periody identity. Skluzové přímky mohou být osové (a, b) a neosové (g_{ab}). Jedná se tedy o následující prvky symetrie:

1, 2, 3, 4, 6, m , g

Tyto prvky symetrie a jejich možné kombinace tvoří 17 krystalografických rovinných grup.

Rovinné grupy

Symbole rovinných grup jsou nejvýše čtyřčlenné a obsahují symboly prvků symetrie. Pořadí je následující:

První člen - udává typ rovinné buňky (p = primitivní, c = centrovaná)

Druhý člen - vertikální prvek symetrie

Třetí a čtvrtý člen - v kosoúhlé a pravoúhlé buňce je třetím prvek symetrie $\perp x$, čtvrtým pak prvek $\perp y$. Ve čtvercové a hexagonální buňce jsou na třetím a čtvrtém místě prvky symetrie ležící v osních a meziosních směrech.

Rovinné grupy

Typ buňky	Grupa	Prvky symetrie
Kosoúhlá	$p1$	1
Pravouhlá	$p2$	1, 2
	pm	1, m
	pg	1, b
	cm	1, m, b
	$p2mm$	1, 2, m
	$p2mg$	1, 2, m, a
	$p2gg$	1, 2, a, b
	$c2mm$	1, 2, m, a, b
Čtvercová	$p4$	1, 2, 4
	$p4mm$	1, 2, 4, m, g_{ab}
	$p4gm$	1, 2, 4, m, a, b, g_{ab}
Hexagonální	$p3$	1, 3
	$p3m1$	1, 3, m, b, g_{ab}
	$p31m$	1, 3, m, a, g_{ab}
	$p6$	1, 2, 3, 6
	$p6mm$	1, 2, 3, 6, m, a, b, g_{ab}

Prostorové grupy

Prostorová grupa je množina prvků symetrie, jejichž operace jsou realizovány v trojrozměrném prostoru. Jedná se o kombinaci všech možných transformací krystalové struktury, takže prostorová grupa charakterizuje souměrnost struktury krystalu asi tak, jako bodová grupa charakterizuje souměrnost vnějšího tvaru.

Prvky symetrie prostorové grupy mají v prostoru základní buňky určitou polohu a orientaci. Jejich celkový počet 230 zahrnuje všechny kombinace translačních i beztranslačních prvků symetrie, které jsou přípustné ve 14 Bravaisových mřížkách.

Ke každé bodové grupě náleží několik prostorových grup. Prostorové grupy odvozené od určité bodové grupy jsou s touto bodovou grupou *izogonální*, tedy zachovávají úhlové vztahy mezi operacemi symetrie výchozí bodové grupy.

Prostorové grupy

Prostorové grupy jsou podobně jako bodové označovány buď symboly Schoenfliesovými nebo Hermannovými - Mauguinovými. Podle Schoenfliesova značení se symbol prostorové grupy skládá ze symbolu bodové grupy, z níž byla prostorová odvozena a z pořadového indexu. Např. O_h^9 značí devátou grupu krystalografického oddělení O_h .

V mezinárodním značení se používají čtyři znaky. První je písmeno, označující typ mříže (P, A, B, C, F, I, R), a za ním následuje trojice symbolů označujících prvky symetrie, které byly kombinovány s translacemi mříže při vytváření prostorové grupy.

Příkladem může být bodová grupa C_2 k níž náleží prostorové grupy C_2^1 , C_2^2 , C_2^3 . Zvolíme-li orientaci dvojčetné osy ve směru hrany b , má úplný symbol grupy C_2^1 tvar P121; jestliže bude osa 2 orientována podél hrany c , potom $C_2^1 = P112$. Analogicky k tomu bude C_2^2 buď P12₁1 nebo P112₁ a C_2^3 buď C121 (centrování stěn v rovině xy) nebo B112 (centrování stěn v rovině xz).

Vlastnosti prostorových grup

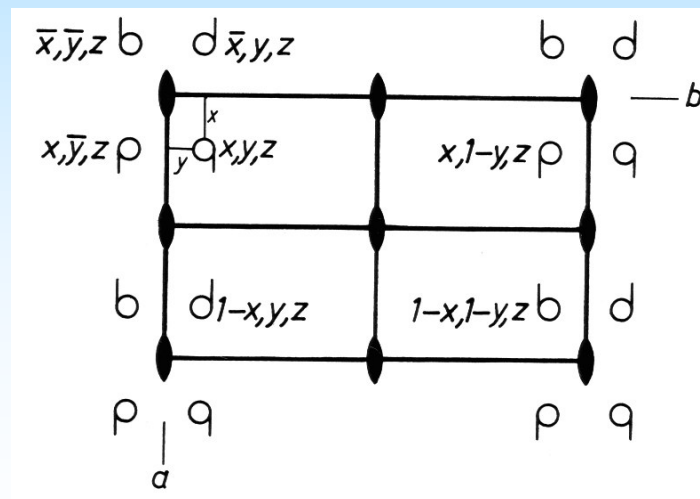
Studium jednotlivých prostorových grup není nezbytné, ale je dobré vědět, jak se jednotlivé grupy navzájem liší.

Na obrázku jsou prvky symetrie bodové grupy Pmm2. Aplikací všech operací symetrie na bod x,y,z vzniknou body $x,-y,z$; $-x,y,z$ a $-x,-y,z$ a rovněž ekvivalentní body jako $x,1-y,z$; $1-x,y,z$ a $1-x,1-y,z$.

Počet ekvivalentních bodů v základní buňce se označuje jako její multiplicita.

Výchozí bod x,y,z má multiplicitu 4. Tato pozice nemá ve své poloze žádná omezení – má tři stupně volnosti a je označována jako pozice obecná.

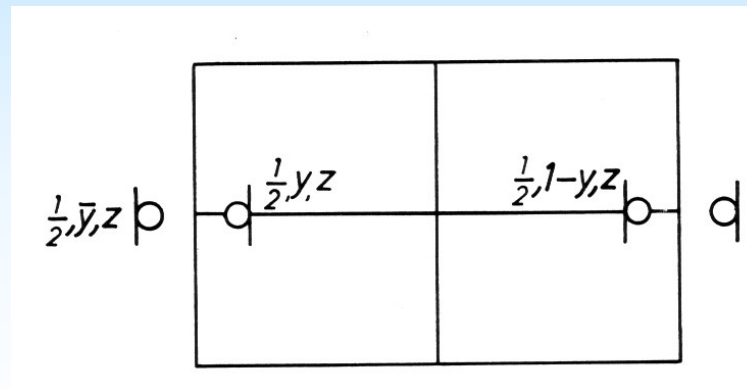
Obecná pozice je asymetrická, což na obrázku indikuje čárka na kruhu.



Vlastnosti prostorových grup

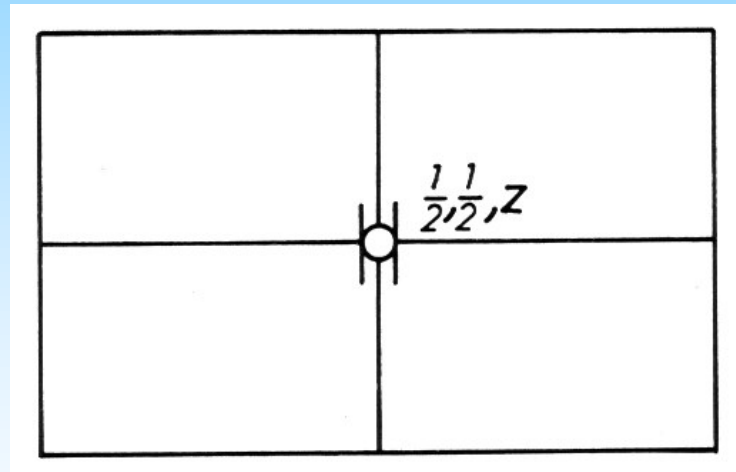
Pokud posuneme bod z obecné polohy x,y,z na rovinu symetrie v $\frac{1}{2},y,z$, dostane se bod $1-x,y,z$ přímo na tuto rovinu – dva body splynou díky této rovině v jediný bod $\frac{1}{2},y,z$. Zároveň body $x,1-y,z$ a $1-x,1-y,z$ splynou v jediný bod $\frac{1}{2},1-y,z$. Z původně čtyřčetné obecné pozice získáme dvojčetnou speciální pozici.

Tato částečně speciální pozice má stupeň volnosti 2. Pokud bod zůstane na rovině symetrie, je jeho multiplicita stálá. Jiné speciální pozice vzniknou z rovin symetrie v $x,0,z$; $x,\frac{1}{2},z$ a $0,y,z$.



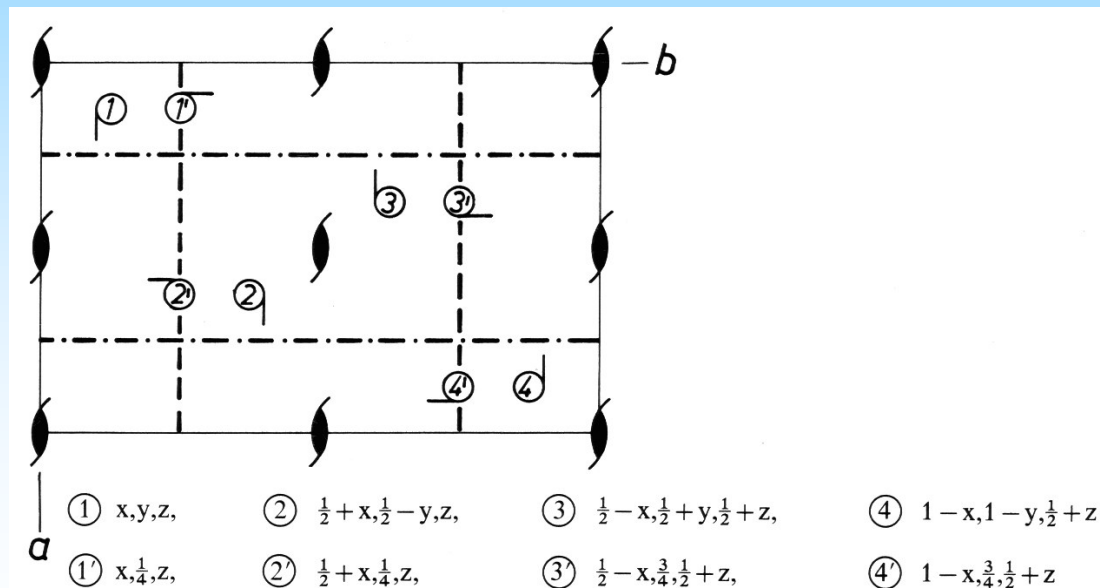
Vlastnosti prostorových grup

Pokud se bod $\frac{1}{2}, y, z$ posune na dvojčetnou osu $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$, pak dva body $\frac{1}{2}, y, z$ a $\frac{1}{2}, 1-y, z$ splynou do bodu $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$. Této speciální pozici zůstane pouze jeden stupeň volnosti. Bodová symetrie pozice vzroste na $mm2$ a multiplicita klesne na 1. Podobné pozice jsou $0, 0, z$; $\frac{1}{2}, 0, z$ a $0, \frac{1}{2}, z$. Některé bodové grupy mají speciální polohy bez jediného stupně volnosti, příkladem může být střed inverze.



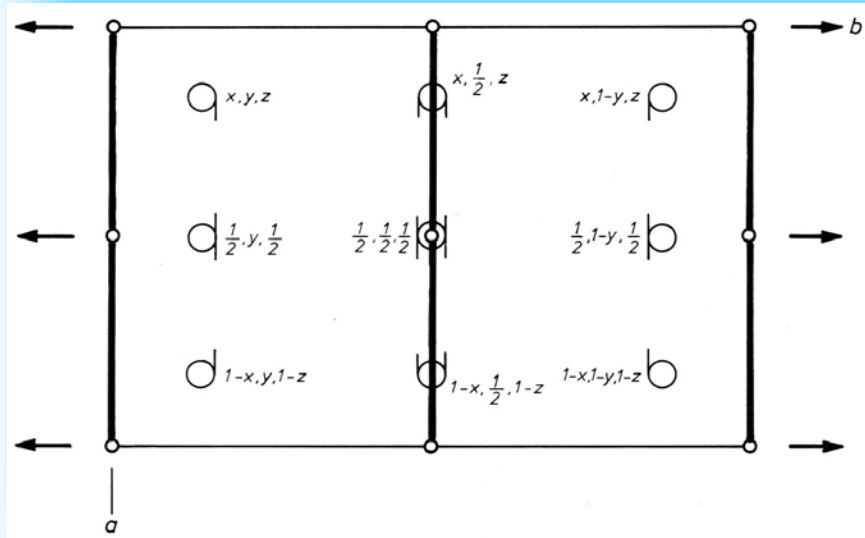
Vlastnosti prostorových grup

Jiným příkladem může být bodová grupa $Pna2_1$. Symbol grupy ukazuje, že základní buňka je rombická se skluzovou rovinou n kolmou k ose a a skluzovou složkou $1/2(\mathbf{b}+\mathbf{c})$, skluzovou rovinou a kolmou k ose b a šroubovou osou 2_1 paralelní s osou c . Obecná pozice x,y,z je čtyřčetná. Pokud posuneme bod na a skluzovou rovinu v $x, 1/4, z$, multiplicita se nezmění. Nevznikne speciální pozice, jelikož skluzová rovina a šroubová osa nezmění multiplicitu bodu. Prostorová grupa $Pna2_1$ nemá speciální pozice.



Vlastnosti prostorových grup

V projekci $P2/m$ v rovině $x,y,0$ jsou kromě obecných pozic také pozice speciální s bodovou symetrií m , 2 a $2/m$. V tabulce jsou pak označeny stupně volnosti, multiplicita, bodová symetrie a souřadnice ekvivalentních bodů každého typu pozice. Pokud stoupá bodová symetrie pozice, její multiplicita klesá.



Position	Degrees of freedom	Multiplicity	Site symmetry	Coordinates of equivalent points
general	3	4	1	x, y, z $x, 1-y, z$ $1-x, y, 1-z$ $1-x, 1-y, 1-z$
special	2	2	m	$x, \frac{1}{2}, z$ $1-x, \frac{1}{2}, 1-z$
	1	2	2	$\frac{1}{2}, y, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, 1-y, \frac{1}{2}$
	0	1	$2/m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Asymetrická jednotka prostorové grupy

Asymetrická jednotka (základní buňka) prostorové grupy je nejmenší část základní buňky, ze které může být celá mřížka vyplněna aplikací všech dostupných operací symetrie.

Její objem je definován: objem zákl. buňky / multiplicita obecné pozice

Žádné dva body uvnitř ní nejsou spojeny žádnou operací symetrie.

Asymetrická jednotka obsahuje všechny informace nezbytné k úplnému popisu krystalové struktury.

Asymetrická jednotka prostorové grupy $P2/m$ má objem limitovaný $0 \leq x \leq 1/2$; $0 \leq y \leq 1/2$; $0 \leq z \leq 1$. Její objem je $1/4$ základní buňky, takže multiplicita obecné pozice musí být 4.

Obecný tvar ver. obecná pozice

Existuje jednoduchý vztah mezi počtem ploch obecného krystalového tvaru bodové grupy a multiplicitou obecné pozice prostorové grupy v této bodové grupě. V prostorové grupě s P-mřížkou je multiplicita obecné pozice rovna počtu ploch obecného tvaru bodové grupy. V prostorových grupách s C-, A- a I-mřížkou je multiplicita obecné pozice dvakrát větší než počet ploch obecného tvaru a u F-mřížky čtyřikrát vyšší.

Pokud bodová grupa obsahuje střed symetrie, všechny odpovídající prostorové grupy budou centrosymetrické.

Ekvivalentní polohy

Umístíme-li výchozí bod do obecné polohy, bude operacemi prostorové grupy opakován tolikrát, kolik operací tato prostorová grupa obsahuje. Umístíme-li však bod do speciální polohy, bude počet symetricky sdružených (ekvivalentních) poloh menší, neboť se některé ztotožní. Počet ekvivalentních poloh dané skupiny symetricky sdružených poloh se nazývá **obor**. V krystalové struktuře je počet atomů v buňce určen právě tímto oborem skupiny ekvivalentních bodů. Pro označení skupiny ekvivalentních poloh se udává:

1. Obor skupiny, tj. počet vzájemně ekvivalentních poloh.
2. Wyckoffův symbol skupiny ekvivalentních poloh. Toto značení začíná písmenem *a* u nejspeciálnější polohy (s nejmenším oborem) a postupuje podle abecedy až k obecné poloze.
3. Bodová symetrie výchozí (i ekvivalentní) polohy
4. Souřadnice ekvivalentních poloh vzhledem ke krystalografickým osám

Ekvivalentní polohy

<i>Obor</i>	<i>Wyckoffovo značení</i>	<i>Symetrie umístění</i>	<i>Souřadnice bodů ekvivalentních poloh</i>
8	j	1	x,y,z; -x,y,-z; -x,-y,-z; x,-y,z
4	i	m	x,0,z; -x,0,-z
4	h	2	0,y,1/2; 0,-y,1/2
4	g	2	0,y,0; 0,-y,0
4	f	-1	1/4,1/4,1/2; 3/4,1/4,1/2
4	e	-1	1/4,1/4,0; 3/4,1/4,0
2	d	2/m	0,1/2,1/2
2	c	2/m	0,0,1/2
2	b	2/m	0,1/2,0
2	a	2/m	0,0,0

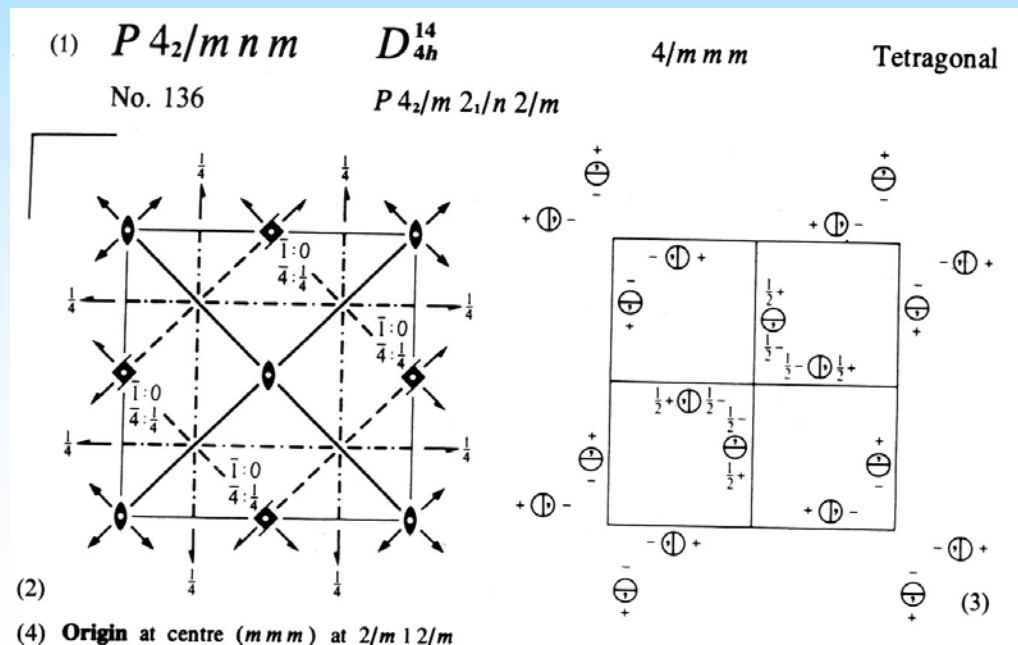
Tabulka ekvivalentních poloh prostorové grupy C₁₂/m1.

Wyckoffův symbol slouží především k rozlišení poloh se stejným oborem a stejnou symetrií. Polohy označené zlomky jsou pevně fixovány symetrií krystalu, zatímco souřadnice x, y, z se mohou v jednotlivých krystalech lišit. Jelikož určují polohy atomů, označují se jako atomové parametry.

Mezinárodní krystalografické tabulky

Je v nich souhrn důležitých vlastností 230 bodových grup. Informace jsou uspořádány následovně:

1. Krátký symbol grupy, Schoenfliesův symbol, bodová grupa, krystalový systém, číslo prostorové grupy, plný symbol prostorové grupy.
2. Projekce prvků symetrie dané grupy na $x, y, 0$, počátek v levém horním rohu.
3. Projekce obecných pozic na $x, y, 0$ s osovým systémem jako v předchozím případě. Prázdný kroužek označuje bod, svisle přeškrtnutý kroužek označuje bod nad jiným bodem a svisle přeškrtnutý s čárkou uvnitř značí bod odvozený operací symetrie. Souřadnice z je vyznačena.



Mezinárodní krystalografické tabulky

4. Informace o výběru počátku
5. Omezení asymetrické jednotky v základní buňce
6. Operace symetrie dané prostorové grupy
7. Obecné a speciální pozice:
 - sl.1. multiplicita pozice
 - sl.2. Wyckoffův symbol odpovídající pozici
 - sl.3. bodová symetrie pozice v pořadí $c, \langle a \rangle, \langle 110 \rangle$
 - sl.4. souřadnice ekvivalentních bodů pozice

(4) **Origin at centre (mmm) at $2/m\ 12/m$**

(5) **Asymmetric unit** $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq \frac{1}{2}; x \leq y$

(6) **Symmetry operations**

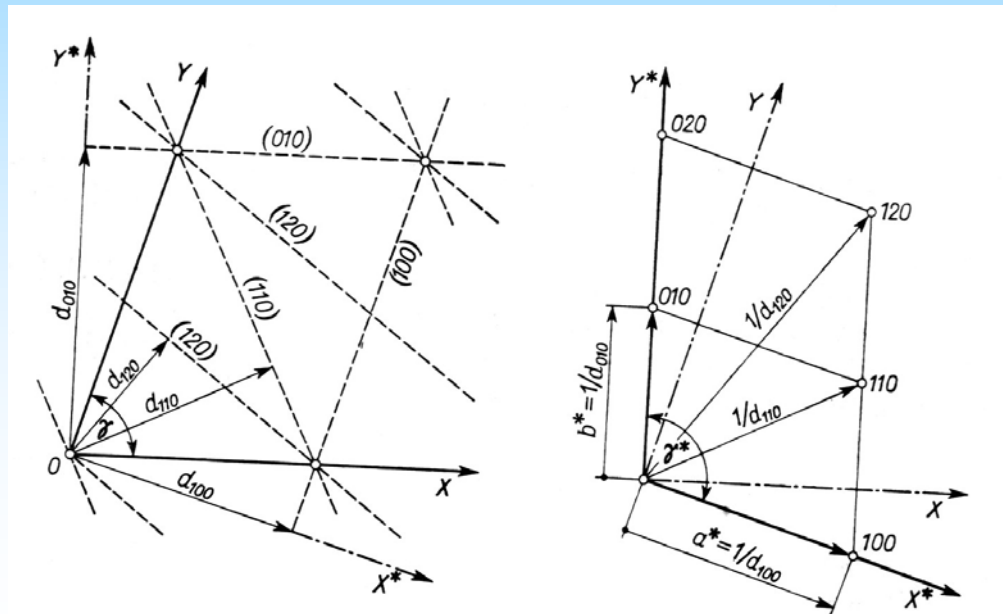
(1) 1	(2) 2 $0,0,z$	(3) $4^+(0,0,\frac{1}{2})$ $0,\frac{1}{2},z$	(4) $4^-(0,0,\frac{1}{2})$ $\frac{1}{2},0,z$
(5) $2(0,\frac{1}{2},0)$ $\frac{1}{2},y,\frac{1}{2}$	(6) $2(\frac{1}{2},0,0)$ $x,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	(7) 2 $x,x,0$	(8) 2 $x,\bar{x},0$
(9) $\bar{1}$ $0,0,0$	(10) m $x,y,0$	(11) 4^+ $\frac{1}{2},0,z; \frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$	(12) 4^- $0,\frac{1}{2},z; 0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$
(13) $n(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$ $x,\frac{1}{2},z$	(14) $n(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ $\frac{1}{2},y,z$	(15) m x,\bar{x},z	(16) m x,x,z

(7) **Positions**

	Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates			
16	k 1	(1) x,y,z	(2) \bar{x},\bar{y},z	(3) $\bar{y}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	(4) $y+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$
		(5) $\bar{x}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	(6) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	(7) y,x,\bar{z}	(8) \bar{y},\bar{x},\bar{z}
		(9) \bar{x},\bar{y},\bar{z}	(10) x,y,\bar{z}	(11) $y+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	(12) $\bar{y}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$
		(13) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	(14) $\bar{x}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	(15) \bar{y},\bar{x},z	(16) y,x,z
8	j $..m$	x,x,z	\bar{x},\bar{x},z	$\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$
		$\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	x,x,\bar{z}	\bar{x},\bar{x},\bar{z}
8	i $m..$	$x,y,0$	$\bar{x},\bar{y},0$	$\bar{y}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$y+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$
		$\bar{x}+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$y,x,0$	$\bar{y},\bar{x},0$
8	h $2..$	$0,\frac{1}{2},z$	$0,\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,\bar{z}+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,\bar{z}$
		$0,\frac{1}{2},\bar{z}$	$0,\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,z+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,z$
4	g $m.2m$	$x,\bar{x},0$	$\bar{x},x,0$	$x+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$
4	f $m.2m$	$x,x,0$	$\bar{x},\bar{x},0$	$\bar{x}+\frac{1}{2},x+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{2},\bar{x}+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$
4	e $2.mm$	$0,0,z$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	$0,0,\bar{z}$
4	d $\bar{4}..$	$0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$
4	c $2/m..$	$0,\frac{1}{2},0$	$0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,0$
2	b $m.mm$	$0,0,\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$		
2	a $m.mm$	$0,0,0$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$		

Reciproká mřížka

Abstraktní trojrozměrná konstrukce reciproké mřížky se zavádí pro zjednodušení interpretace některých difrakčních experimentů. Její konstrukce je následující: ze zvoleného počátku vedeme normály ke každé osnově rovin (hkl) a na každé z nich nanese se vzdálenost $1/d_{hkl}$. Získané body vytvoří reciprokou mřížku, jejíž uzly odpovídají rovinám přímé mřížky. Každý bod reciproké mříže reprezentuje vlastnosti osnov rovin, tj. orientaci a mezirovinné vzdálenosti. *Veličiny reciproké mřížky* označujeme hvězdičkou: vektory základní buňky \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* ; mřížkové parametry a^* , b^* , c^* , α^* , β^* , γ^* .



Skalární součin vektorů

Skalárním součinem vektorů \mathbf{a} (a_1, a_2, a_3) a \mathbf{b} (b_1, b_2, b_3) nazýváme číslo $a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3$. Je-li \mathbf{a}, \mathbf{b} nenulové a φ je jejich úhel, pak pro skalární součin platí: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos \varphi$. Nenulové vektory \mathbf{a}, \mathbf{b} jsou k sobě kolmé právě tehdy, když $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$. Jsou-li α, β, γ směrové úhly vektoru \mathbf{a} (a_1, a_2, a_3), pak pro směrové kosiny platí tyto vztahy:

$$\cos \alpha = a_1 / |\mathbf{a}|; \quad \cos \beta = a_2 / |\mathbf{a}|; \quad \cos \gamma = a_3 / |\mathbf{a}|$$

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$$

Vektorový součin

Vektorovým součinem (označení $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$) vektorů \mathbf{a} (a_1, a_2, a_3) a \mathbf{b} (b_1, b_2, b_3) nazýváme vektor

$$\mathbf{w} = \begin{vmatrix} \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \\ \mathbf{b}_2 & \mathbf{b}_3 \end{vmatrix} \mathbf{e}_1 - \begin{vmatrix} \mathbf{a}_3 & \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_3 & \mathbf{b}_1 \end{vmatrix} \mathbf{e}_2 + \begin{vmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_1 & \mathbf{b}_2 \end{vmatrix} \mathbf{e}_3$$

Vektorový součin $\mathbf{w} = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$ má tyto vlastnosti:

- ✓ je kolmý k oběma daným vektorům ($\mathbf{w} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{w} \cdot \mathbf{b} = 0$)
- ✓ jeho délka je číselně rovna obsahu rovnoběžníka určeného vektory \mathbf{a} , \mathbf{b} :
 $|\mathbf{w}| = |\mathbf{a}| \cdot |\mathbf{b}| \cdot \sin \varphi$

Smíšeným součinem tří vektorů \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} se nazývá číslo $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$, které značíme $[\mathbf{abc}]$. Platí:

$$[\mathbf{abc}] = [\mathbf{bca}] = [\mathbf{cab}] = -[\mathbf{acb}] = -[\mathbf{cba}] = -[\mathbf{bac}]$$

Absolutní hodnota smíšeného součinu tří vektorů je rovna objemu rovnoběžnostěny, jehož tři hrany vycházející z téhož vrcholu jsou určeny danými třemi vektory.

Podle tzv. Lagrangeovy identity platí: $(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})$

Vztahy v reciproké mřížce

Na základě definic skalárního součinu vektorů a vektorového součinu vektorů můžeme vyvodit některé vztahy pro reciproký prostor. Jelikož vektor \mathbf{a}^* je kolmý k vektorům \mathbf{c} a \mathbf{b} , vektor \mathbf{b}^* kolmý k vektorům \mathbf{a} a \mathbf{c} (atd.) platí:

$$\mathbf{a}\mathbf{b}^* = \mathbf{a}\mathbf{c}^* = \mathbf{b}\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\mathbf{c}^* = \mathbf{c}\mathbf{a}^* = \mathbf{c}\mathbf{b}^* = 0$$

$$\mathbf{a}^* = \mathbf{b} \times \mathbf{c}, \mathbf{b}^* = \mathbf{c} \times \mathbf{a}, \mathbf{c}^* = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$$

Z konstrukce reciproké mřížky dále vyplývá, že velikost reciprokého vektoru je dána vztahy:

$$|\mathbf{a}^*| = a^* = 1 / d_{100}; \quad \mathbf{b}^* = 1 / d_{010}; \quad \mathbf{c}^* = 1 / d_{001}.$$

Pro skalární součin stejného vektoru reciproké a přímé mřížky platí vztah : $\mathbf{a}^* \mathbf{a} = a^* a \cos \psi$, kde ψ je úhel mezi vektory \mathbf{a}^* a \mathbf{a} . Lze odvodit , že platí:

$$\mathbf{a}\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\mathbf{b}^* = \mathbf{c}\mathbf{c}^* = 1$$

Vztahy v reciproké mřížce

Protože vektor \mathbf{a}^* je kolmý k vektorům \mathbf{b} , \mathbf{c} platí, že $\mathbf{a}^* = \mathbf{b} \times \mathbf{c}$. Po dosazení do podmínky $\mathbf{a}\mathbf{a}^* = 1$ dostaneme výraz vyplývající i z definice pro smíšený součin vektorů: V (objem buňky přímé mřížky) = $\mathbf{a}(\mathbf{b} \times \mathbf{c})$.

Chceme-li vyjádřit reciproký vektor pomocí vektorů přímé mřížky, vyjdeme z toho, že objem primitivní buňky lze vyjádřit také jako $V = |\mathbf{b} \times \mathbf{c}| \cdot d_{100}$. Po dosazení za d_{100} můžeme psát: $\mathbf{a}^* = |\mathbf{b} \times \mathbf{c}| / V = \mathbf{b} \times \mathbf{c} / \mathbf{a}(\mathbf{b} \times \mathbf{c})$.

Analogicky $\mathbf{b}^* = \mathbf{c} \times \mathbf{a} / \mathbf{b}(\mathbf{c} \times \mathbf{a})$; $\mathbf{c}^* = \mathbf{a} \times \mathbf{b} / \mathbf{c}(\mathbf{a} \times \mathbf{b})$.

Pro velikost základních reciprokých vektorů tedy platí:

$$a^* = bc \sin \alpha / V$$

$$b^* = ca \sin \beta / V$$

$$c^* = ab \sin \gamma / V$$

Toto vyjádření je obecné - platí tedy i pro triklinickou symetrii.

Defekty krystalových struktur

V 1 cm^3 krystalu můžeme najít řádově 10^{23} atomů. Atomy obsazují pravidelné pozice a mohou být uspořádány podle 230 prostorových grup. Ekvivalentní pozice budou obsazovány atomy stejného typu. Tato modelová situace je dosažena pouze v ideálním krystalu.

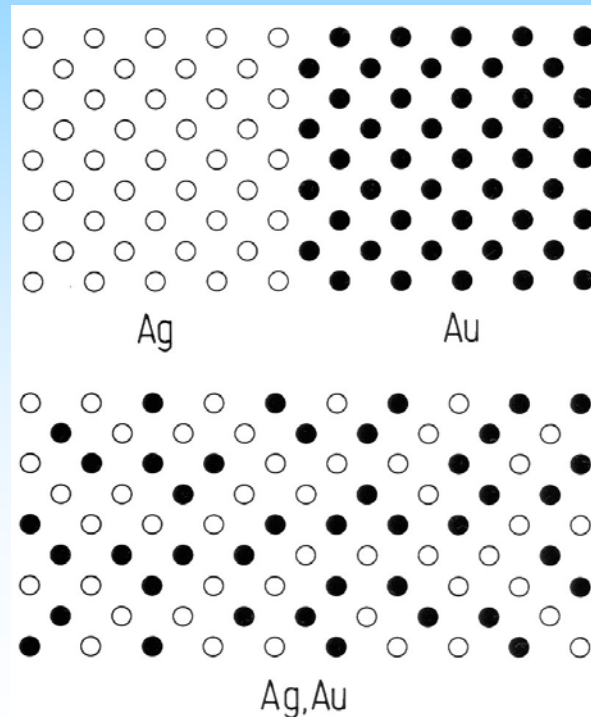
Ve struktuře reálného krystalu najdeme řadu poruch a nepravidelností nejrůznějšího typu. Všechny takové odchylky od ideálního stavu můžeme označit jako krystalové defekty. Řada vlastností typických pro krystaly se právě od těchto defektů odvíjí – luminiscence, odlučnost a další.

Defekty v krystalech můžeme obecně rozdělit na:

- ✓ bodové
- ✓ lineární
- ✓ rovinné

Bodové defekty krystalů

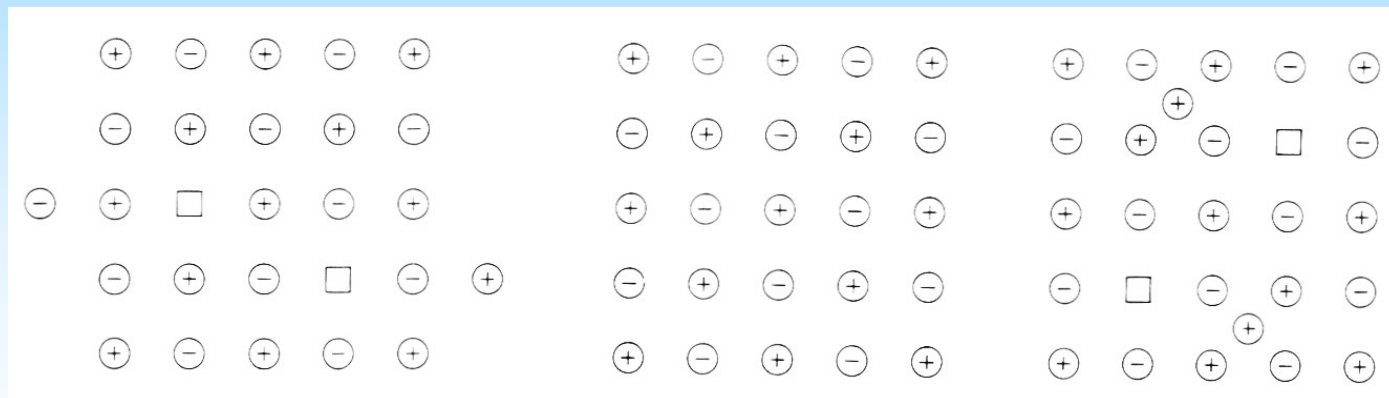
- Substituční defekt. V reálném krystalu se na některých pozicích objevují „cizí“ atomy, jejichž rozměr je odlišný od atomu původního. Kromě toho mohou substituující atomy vytvářet jiný typ vazby nebo být v jiné valenci. V některých případech se speciální typ „nečistot“ v krystalech přímo vyžaduje, např. v některých polovodičích.
- Pevné roztoky. Statistická distribuce atomů v pevných roztocích je rovněž bodová porucha.



Bodové defekty krystalů

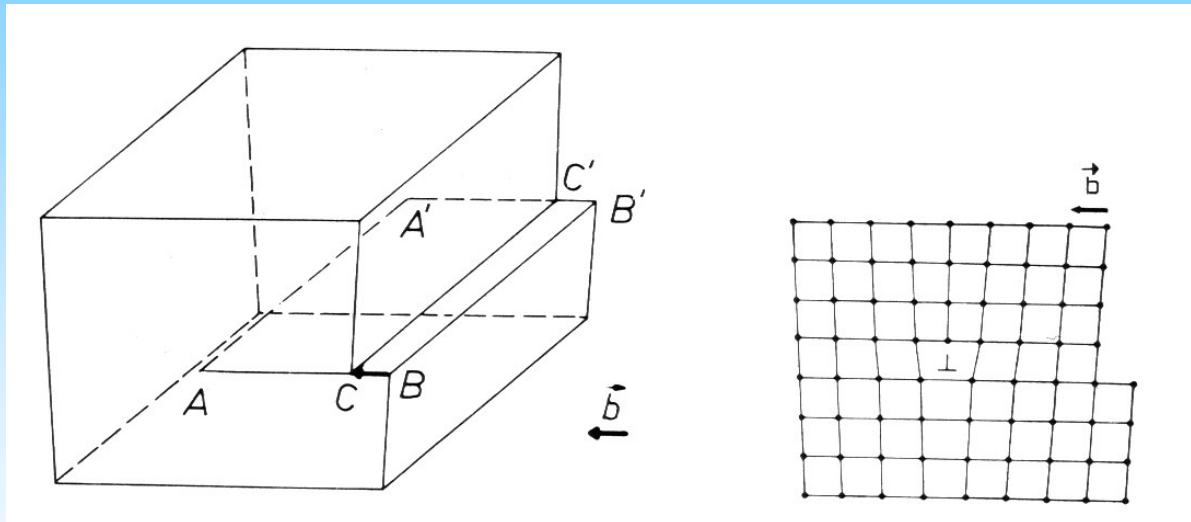
Schottkyho a Frenkelův defekt. Každý krystal obsahuje vakance, což jsou místa, kde chybí očekávaný atom. Pokud se chybějící atom pohybuje směrem k okraji krystalu, označujeme jev jako **Schottkyho defekt**, pokud má tendenci se posunout do prostoru mezi atomy (intersticiální pozice), výsledek se označuje jako **Frenkelův defekt**.

Obě poruchy mohou významně ovlivnit řadu vlastností krystalu. Jedná se především o difuzi, při vyšších teplotách pak mohou některé iontové krystalové struktury vykazovat elektrickou vodivost.



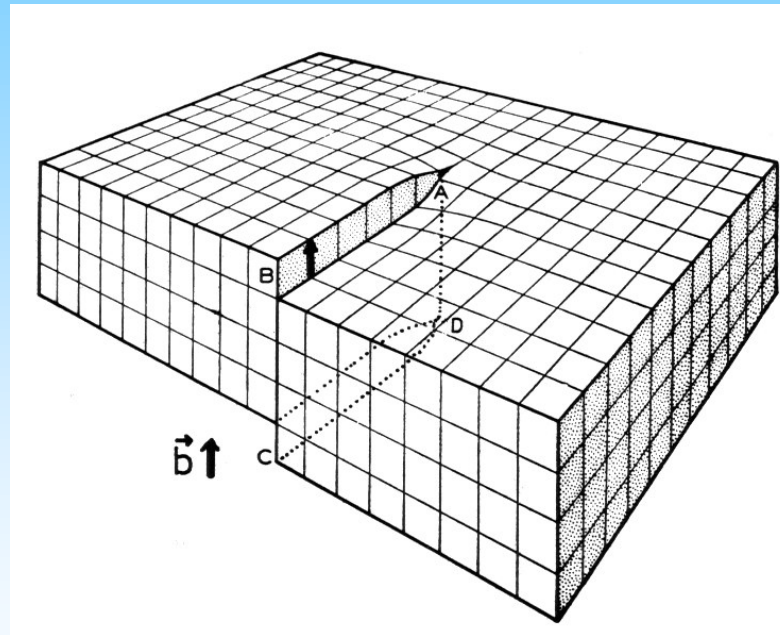
Lineární defekty

Hranová dislokace. Pokud je část krystalu posunuta o určitý vektor vzhledem ke zbylé části krystalu vznikne lineární dislokace. Řez kolmý na tuto linii s vyznačením vektoru posunu je vidět na obrázku.



Lineární defekty

Šroubová dislokace. Vzniká ze systematického rozmístění původně lineární dislokace a je vzhledem k hranové dislokaci druhým limitním případem. Důležitou roli hrají šroubové dislokace při růstu krystalů.



Rovinné defekty

Svírají-li dvě krystalové domény svými hraničními plochami velmi malý úhel vzniká rovinná dislokace.

Jiný typ dislokace vzniká při kladu vrstev. Může docházet k různým nepravidelnostem a projevuje se to především u vrstevnatých struktur a struktur typu ccp a hcp.

Při růstu krystalu nebo při mechanickém tlaku může dojít ke vzniku dvojčatění, hranice mezi oběma krystaly je rovinným defektem.

