

Co je to krystal? Jak ho definujeme? Je krystal anisotropický? Proč je důležité udávat fyzikální vlastnosti v daném směru.

<https://www.youtube.com/watch?v=lky6-lqab4c>

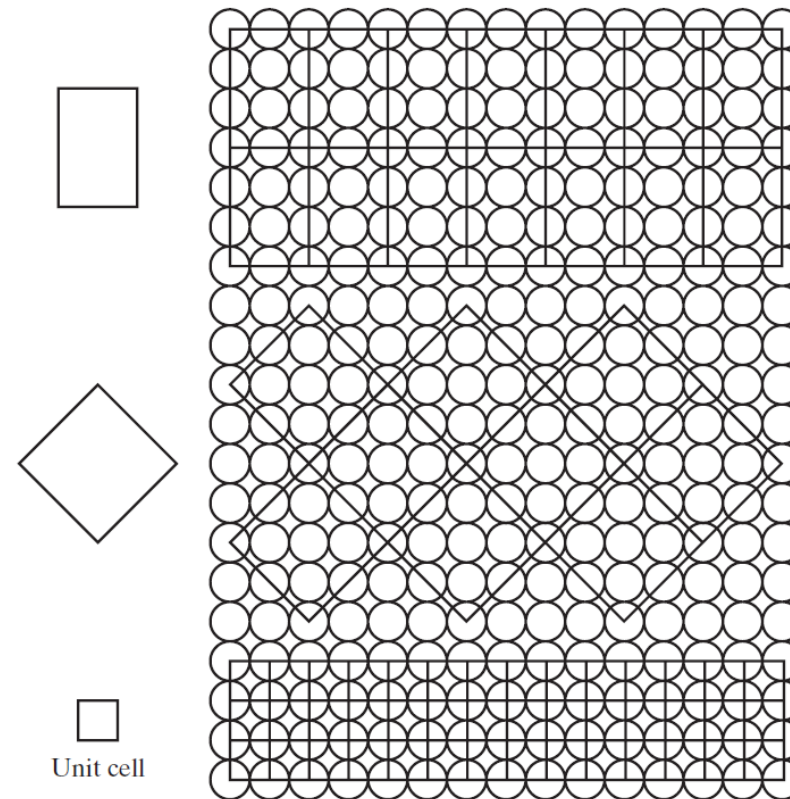
Jak vznikají krystaly? Jak nastavením podmínek růstu mohu ovlivnit výsledný tvar krystalů?

<https://www.youtube.com/watch?v=GPIImqW2QDPA>

Existuje jeden jediný způsob, jak rozdělit objekt do buněk, které se opakují? Co je to elementární buňka.

Elementární (základní) buňka je nejmenší část krystalické struktury. Je to rovnoběžnostěn, který je jednoznačně určen třemi translačními vektory a , b , c a úhly, jimi sevřenými. Mnohonásobným opakováním této buňky se beze zbytku vyplní prostor krystalu.

https://www.youtube.com/watch?v=eSXIh_INP8o



Krystal = mřížka + základní motiv (základní motiv se umísťuje do uzlových bodů)

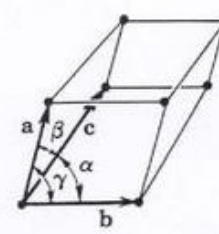
https://www.youtube.com/watch?v=Z69LldxLL_U

Jak zvolit mřížku, buňku co nejlépe. Jak z mnoho možností vybrat tu, co se s ní bude nejlépe pracovat?

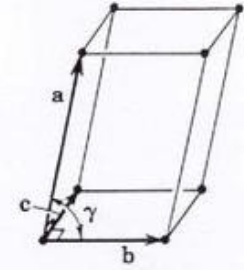
Bravaisovy mřížky jsou nejlepší volba.

<https://www.youtube.com/watch?v=s4rRMmToGBQ>

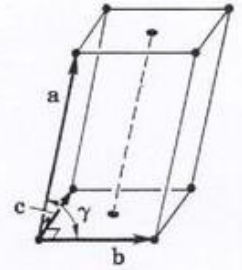
https://www.youtube.com/watch?v=o6qKr_OZ1vw



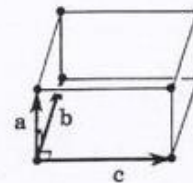
trojklonná
(triklinická)
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
 $a \neq b \neq c$



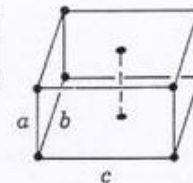
prostá
jednoklonná
(monoklinická)
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma \neq 90^\circ$
 $a \neq b \neq c$



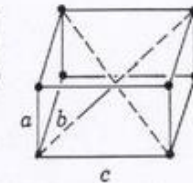
bazálně centrovaná



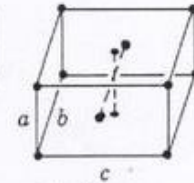
prostá



bazálně centrovaná

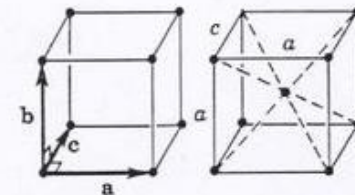


prostorově c.

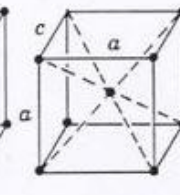


plošně centrovaná

kosočtverečná
(rombická)
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
 $a \neq b \neq c$

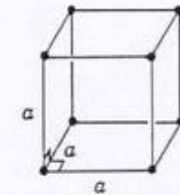


prostá

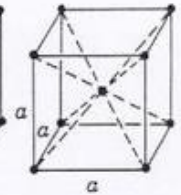


prostorově c.

čtverečná
(tetragonální)
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
 $a = b \neq c$

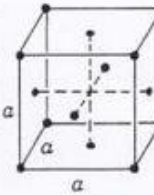


prostá

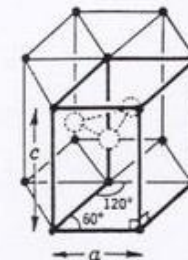


prostorově c.

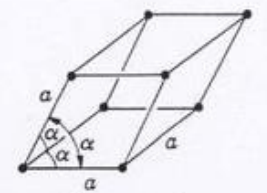
krychlová
(kubická)



plošně centr.



šesterečná
(hexagonální)

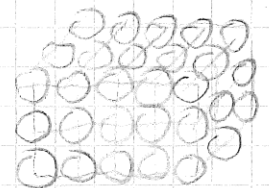
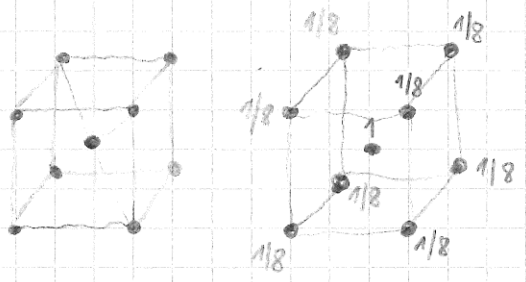


klencová
(trigonální)
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

Kovy – těsné uspořádání



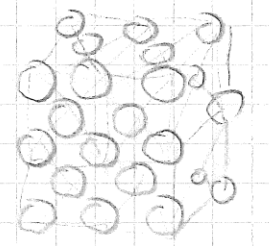
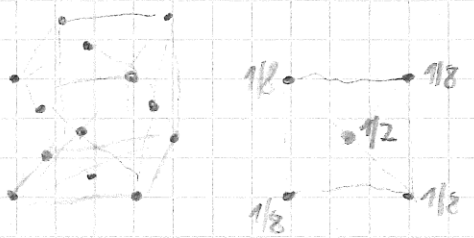
Kovy - v přírodě se nejčastěji vyskytují ve třech typech mřížky



pohled z boku
ahora, jeden vedle druhého

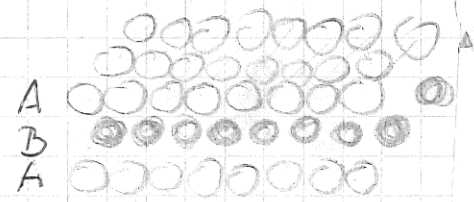
- 2 atomy - 1 + 8 · 1/8 na jednovrstvu
- 68% objemu je obsazeno atomy
- α -Fe (do pokojové teploty), V, Cr, Mo, W a jejich slitiny, kde jsou dominantními prvky

prostorově centrováná mřížka
1 atom ve středu a 1/8 atomu v roších elementární buňky



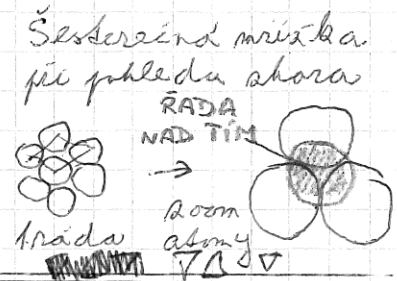
- 4 atomy na jednovrstvu
 - 74% je zaplněno jsou-li atomy stejné (nejde se co kde dosáhnout)
 - γ -Fe (912-1394°C), Al, Ni, Cu, Ag, Pb, Au
- $\Delta \Delta \Delta$ doly
A-B-C struktura

plóšně centrováná mřížka
4 atomy na mřížku - 6 · 1/2 + 8 · 1/8 ve středu v rohu

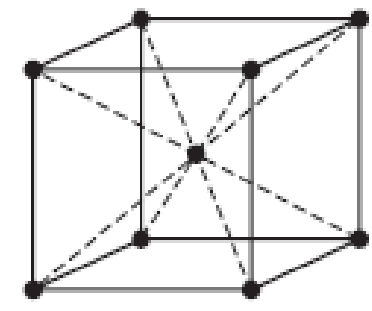


je to uspořádání, kde se střídají roviny atomů, vždy ob jedné leží nad sebou a mezi je posunutá rovina (šesterečná mřížka) A-B-A

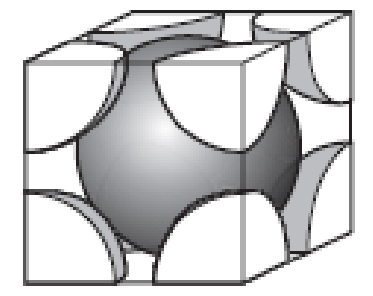
- 2 atomy na jednovrstvu
- 74% je zaplněno
- Be, Mg, α -Ti, Zn, Zr



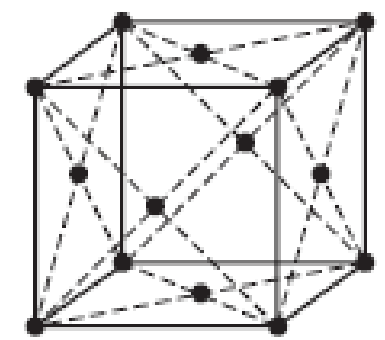
hexagonální těsně uspořádaná struktura - dva atomy v uspořádané řadě!



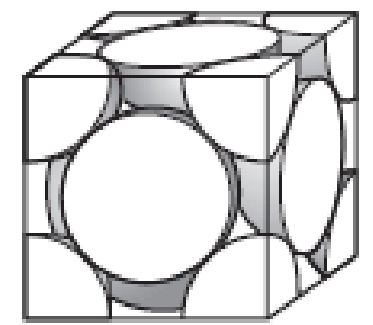
(a)



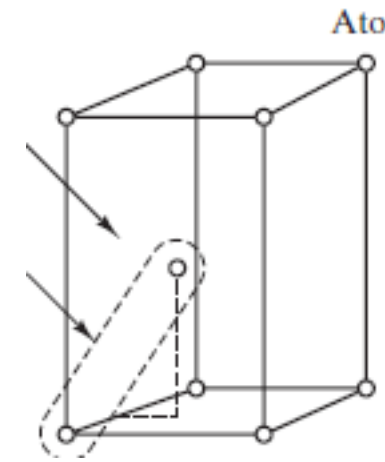
(b)



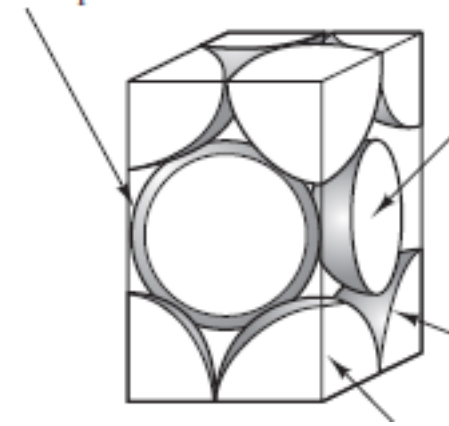
(a)



(b)



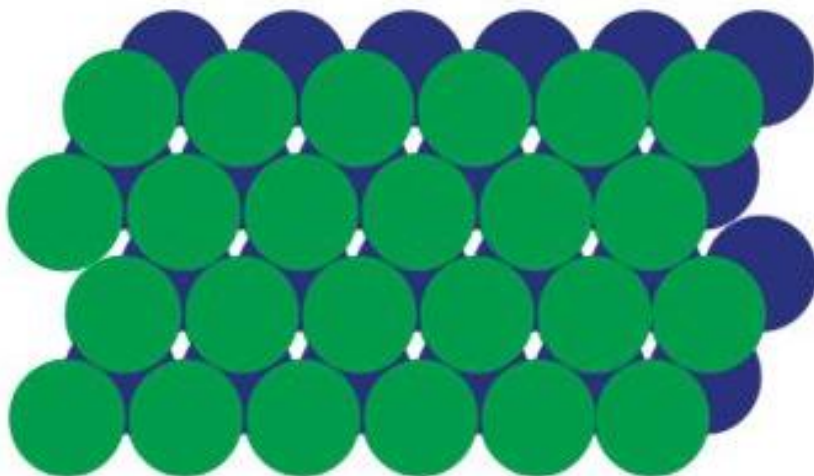
Atom in midplane



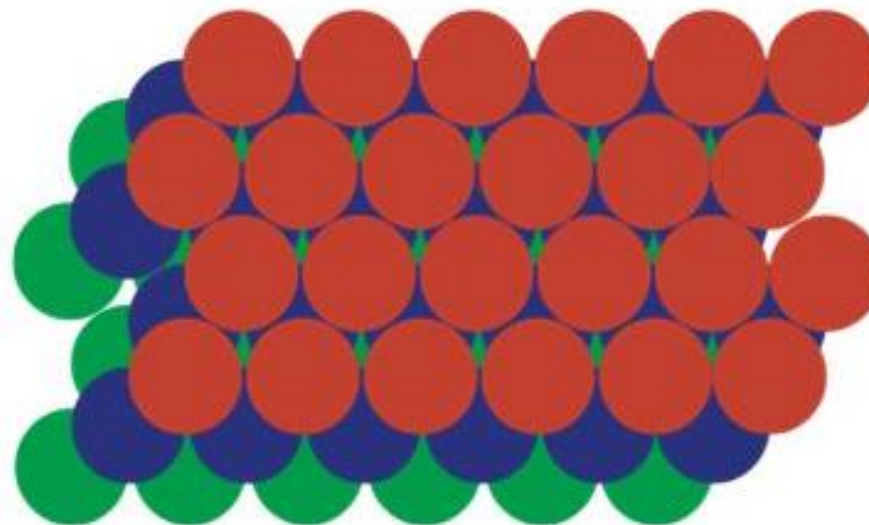
<https://www.youtube.com/watch?v=7TdNbg3Kt2c>

Podívejte se do jakého tvaru děr mezi atomy se umísťují atomy u hcp a fcp

hcp
ABABAB...



fcc
ABCABCABC...



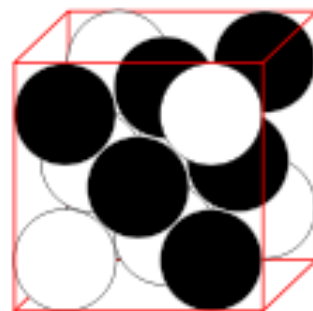
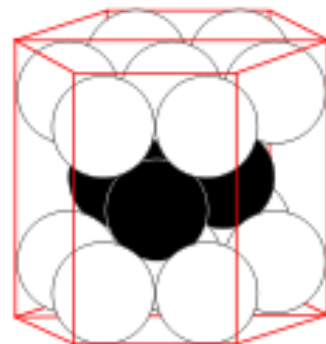
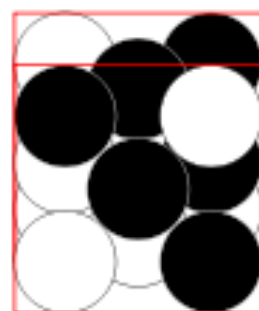
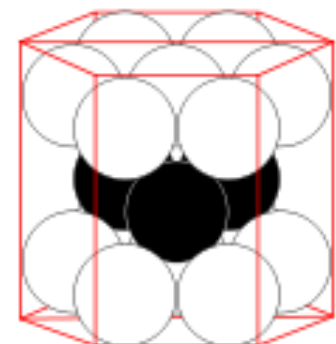
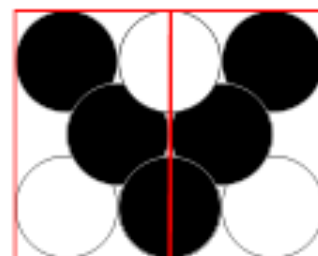
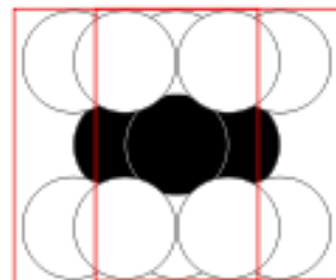
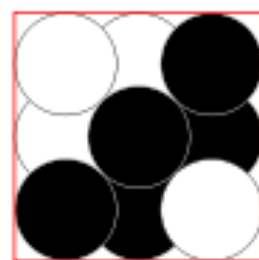
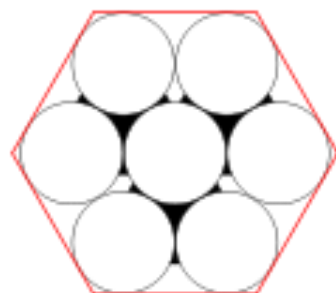
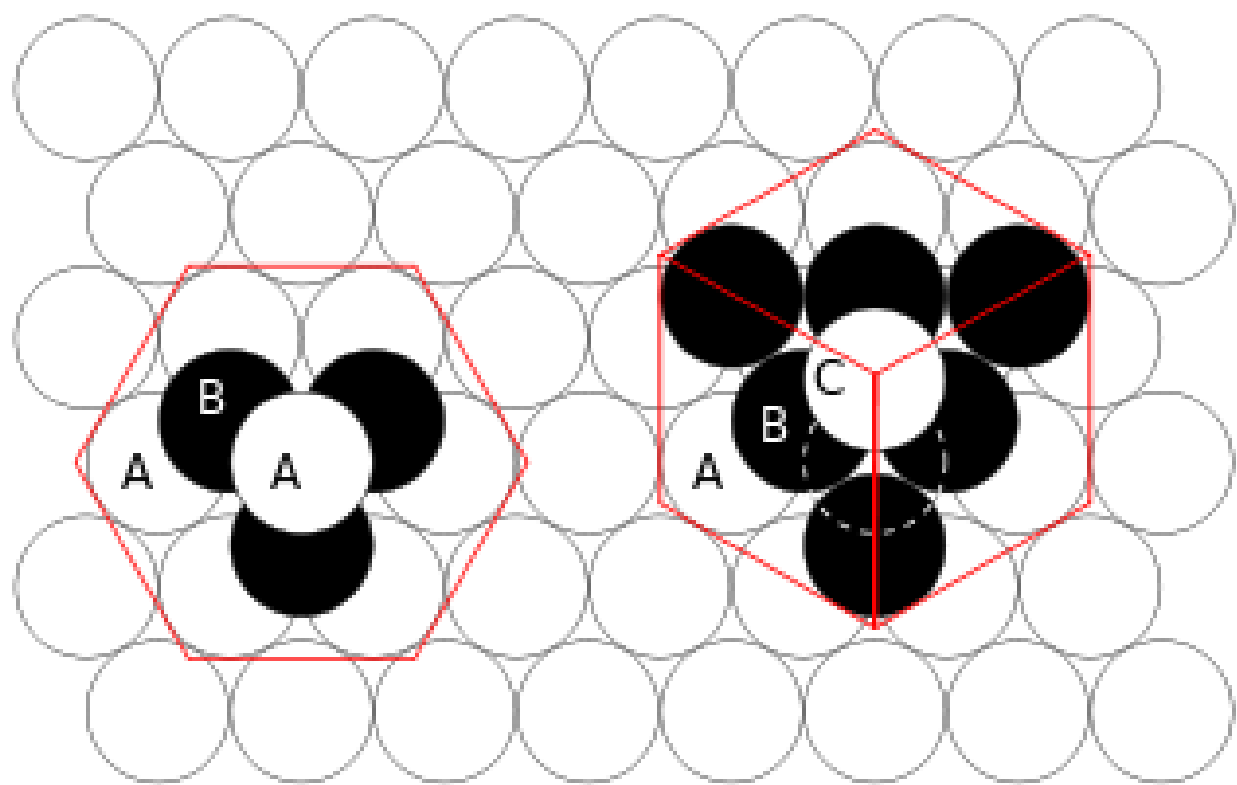
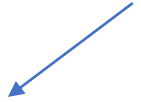
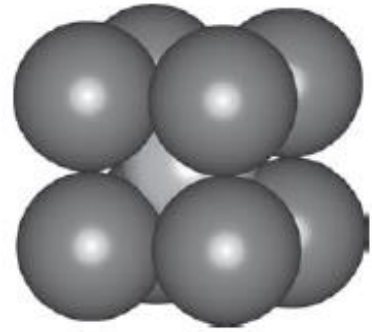
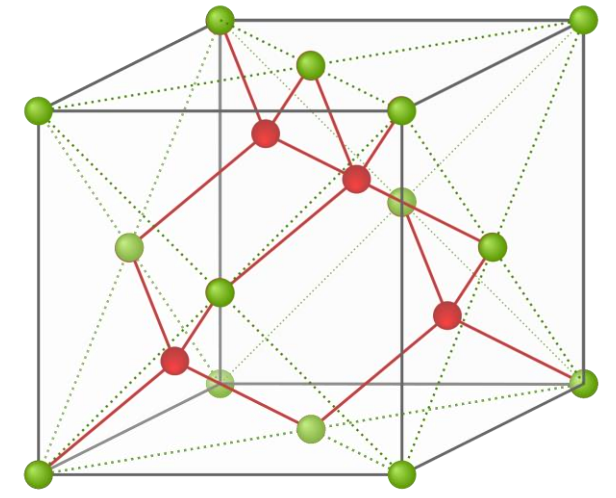
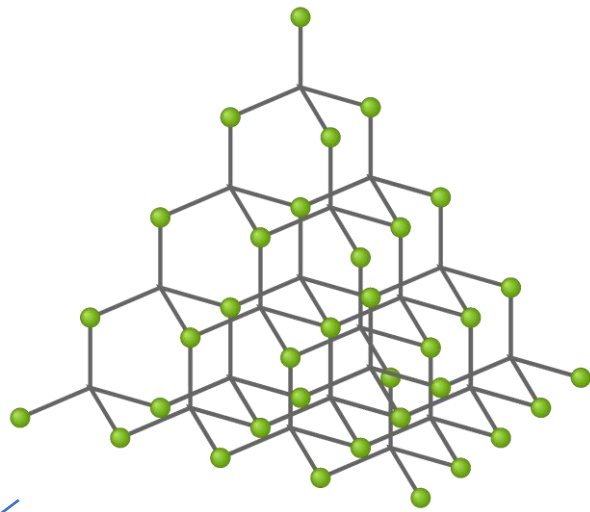


Table 12.2 Coordination Numbers and Geometries for Various Cation-Anion Radius Ratios (r_c/r_a)

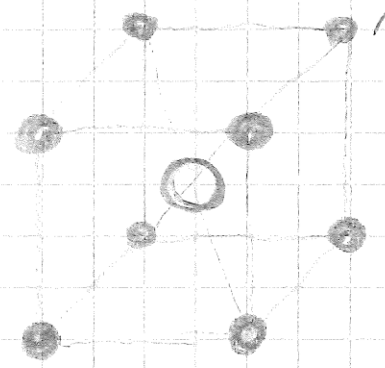
CN	r_c/r_a	Geometry	Crystal structure/Namesake
2	<0.155		
3	0.155-0.225		
4	0.225-0.414		"Zinc blend" (ZnS) "Diamond cubic" (Diamond)
6	0.414-0.732		"Rock salt" (NaCl)
8	0.732-1.0		For AX: "Cesium chloride" (CsCl) For AX ₂ : "Fluorite" (CaF ₂) For A ₂ X: "Anti-fluorite"



Atomic number	Symbol	Atomic radius	Ion	Ionic radius
		(nm)		(nm)
3	Li	0.152	Li ⁺	0.078
4	Be	0.114	Be ²⁺	0.054
5	B	0.097	B ³⁺	0.02
6	C	0.077	C ⁴⁺	< 0.02
7	N	0.071	N ⁵⁺	0.01–0.02
8	O	0.060	O ²⁻	0.132
9	F	—	F ⁻	0.133
11	Na	0.186	Na ⁺	0.098
12	Mg	0.160	Mg ²⁺	0.078
13	Al	0.143	Al ³⁺	0.057
14	Si	0.117	Si ⁴⁺	0.039
15	P	0.109	P ⁵⁺	0.03–0.04
16	S	0.106	S ²⁻	0.174
17	Cl	0.107	Cl ⁻	0.181
19	K	0.231	K ⁺	0.133
20	Ca	0.197	Ca ²⁺	0.106
21	Sc	0.160	Sc ²⁺	0.083
22	Ti	0.147	Ti ⁴⁺	0.064
23	V	0.132	V ⁴⁺	0.061
24	Cr	0.125	Cr ³⁺	0.064
25	Mn	0.112	Mn ²⁺	0.091
26	Fe	0.124	Fe ²⁺	0.087
27	Co	0.125	Co ²⁺	0.082
28	Ni	0.125	Ni ²⁺	0.078
29	Cu	0.128	Cu ⁺	0.096
30	Zn	0.133	Zn ²⁺	0.083
31	Ga	0.135	Ga ³⁺	0.062
32	Ge	0.122	Ge ⁴⁺	0.044
35	Br	0.119	Br ⁻	0.196
39	Y	0.181	Y ³⁺	0.106
40	Zr	0.158	Zr ⁴⁺	0.087
41	Nb	0.143	Nb ⁴⁺	0.074
42	Mo	0.136	Mo ⁴⁺	0.068
46	Pd	0.137	Pd ²⁺	0.050
47	Ag	0.144	Ag ⁺	0.113
48	Cd	0.150	Cd ²⁺	0.103
50	Sn	0.158	Sn ⁴⁺	0.074

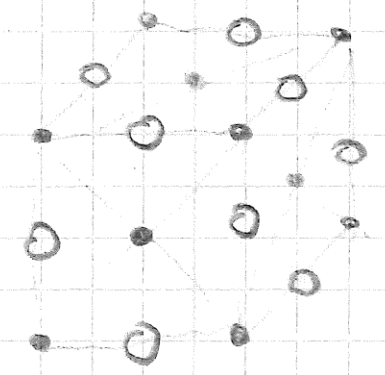
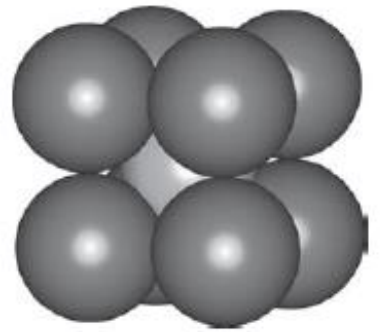
Keramicky

- keramicky maji mnoho typu mrazek a take se liši priten atomu v valcovych bodech
- vetsina bernich systemu krystalizuje v prosti kubicke nebo plošne centrovane mrazce



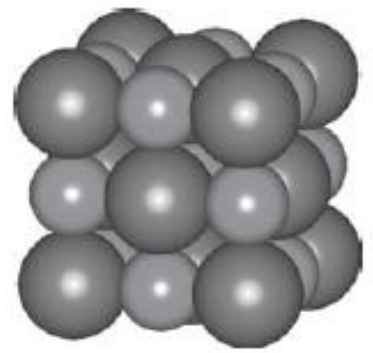
kubicka mrazka - v valcovych bodech $8 \times \frac{1}{8}$ aniontu a ve stredu 1 kationt

- jsou to jakoby propletené do sebe 2 prosti mrazky



kubicka mrazka plošne centrovana

- NaCl struktura
- jsou to jakoby dvě fce struktury propletené do sebe - jedna pro Na^+ a jedna pro Cl^-
- nebo
- jedna fce struktura s dvěma atomy Na^+ a Cl^- v každém valcovém bodě
- 4 Na^+ a 4 Cl^- na jednu buňku
- mají to např. MgO , CaO , FeO , NiO

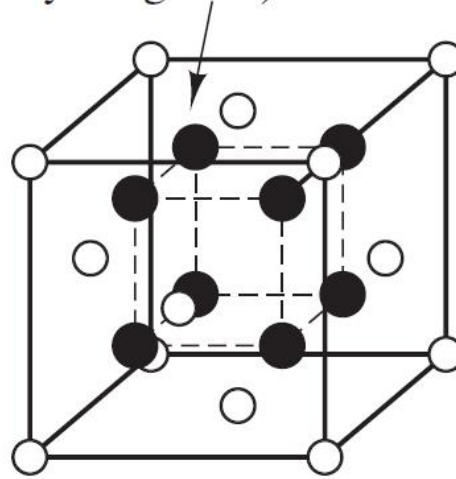


Fluorite CaF_2

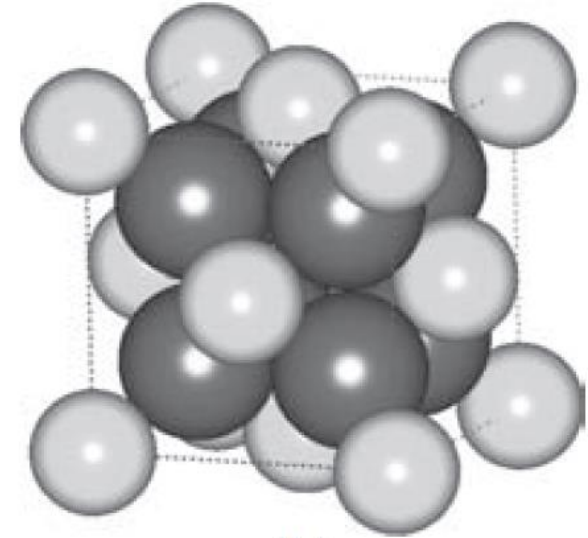
Ca + 2F atomy v uzlovém bodě

F^- ions located at corners of a cube (at one-quarter of the distance along the body diagonal)

○ Ca^{2+}
● F^-



(a)



(b)

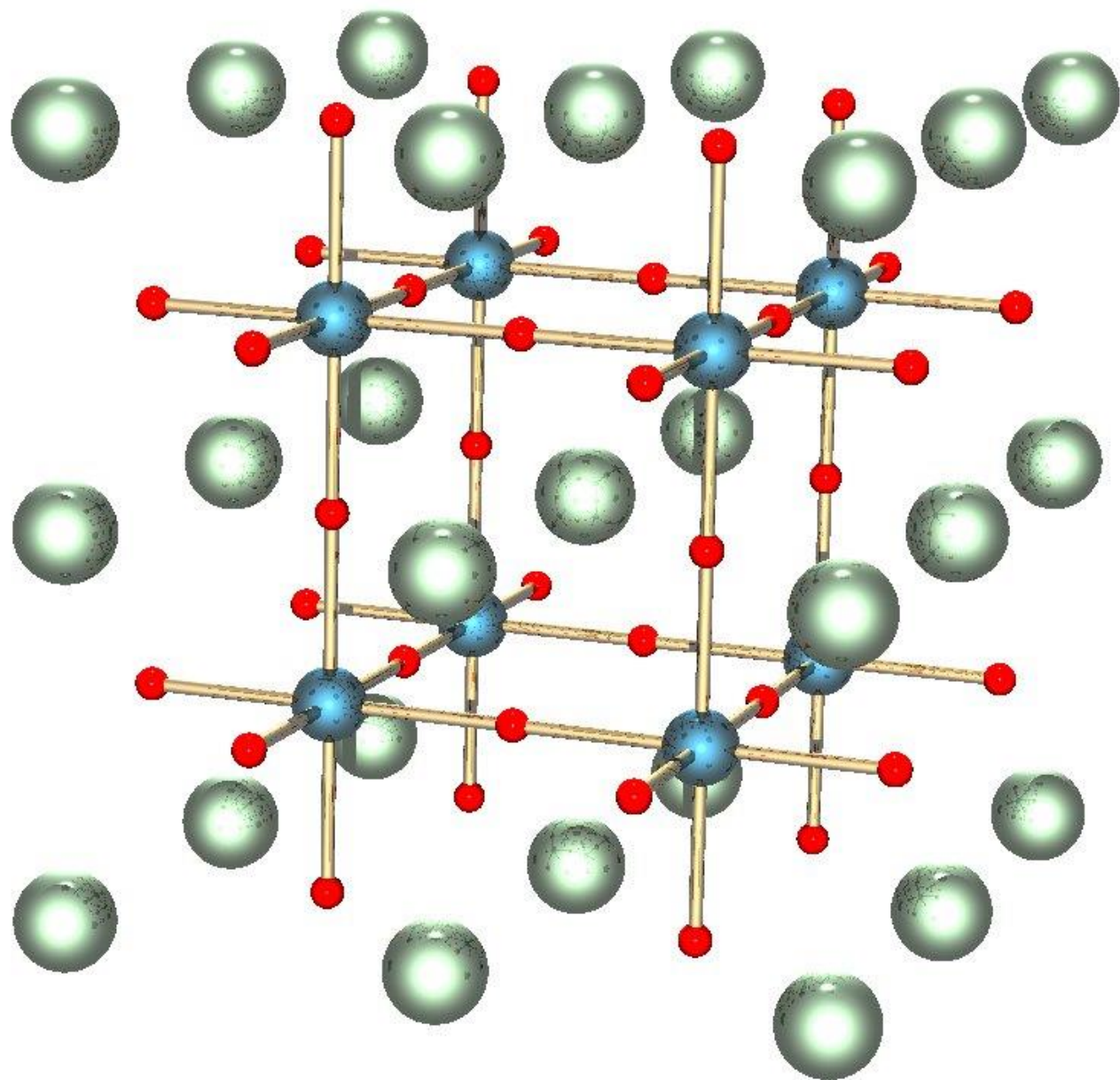
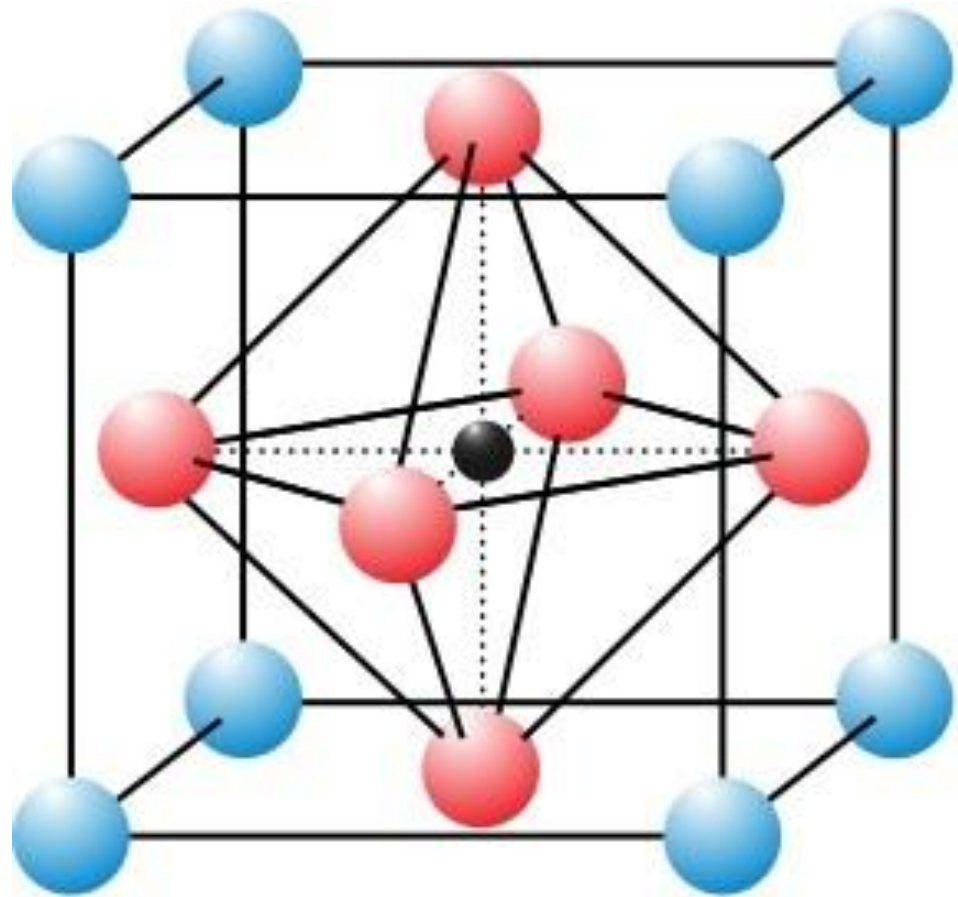
Structure: fluorite (CaF_2) type

Bravais lattice: fcc

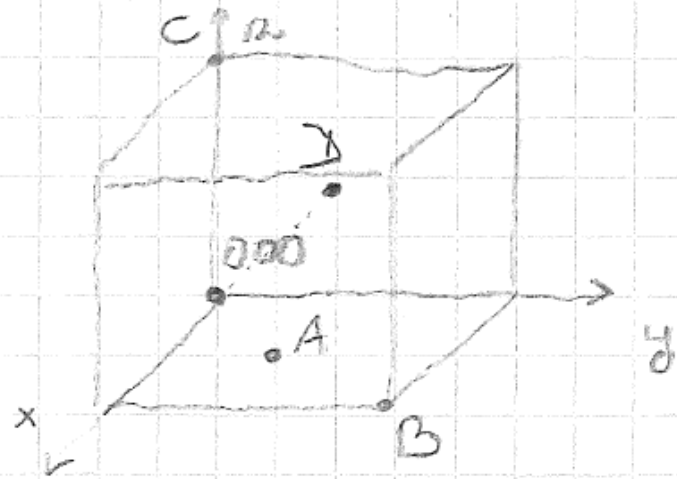
Ions/unit cell: $4\text{Ca}^{2+} + 8\text{F}^-$

Typical ceramics: UO_2 , ThO_2 , and TeO_2

Perovskitová struktura TiCaO_3



- Směry se udávají v atomické nebo masové směrnici



$$A \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad 0$$

$$B \quad 1 \quad 1 \quad 0$$

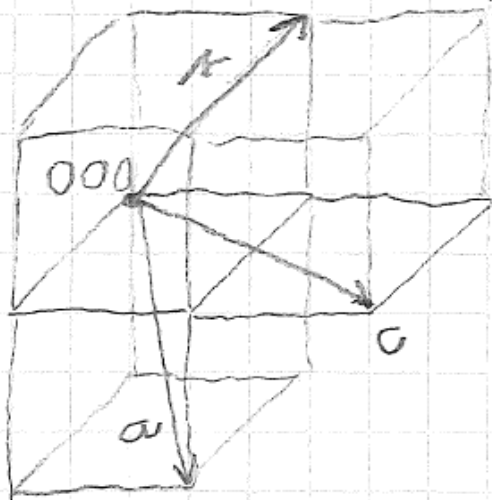
$$C \quad 0 \quad 0 \quad 1$$

$$D \quad \bar{1} \quad 0 \quad 0$$

jakto se značí
záporné směry

Vzhledem k periodicitě v krystalu
existují ekvivalentní směry

- Směry v krystalografii



Směry se udávají

v celých číslech, které představují souřadnice
příslušného bodu a jeho souřadnice
číslo se dá do hranatých závorek

$$a \quad [1 \ 1 \ \bar{1}]$$

$$b \quad [0 \ 1 \ 1]$$

$$c \quad [1 \ 2 \ 0]$$

Diagramy v kubické mřížce

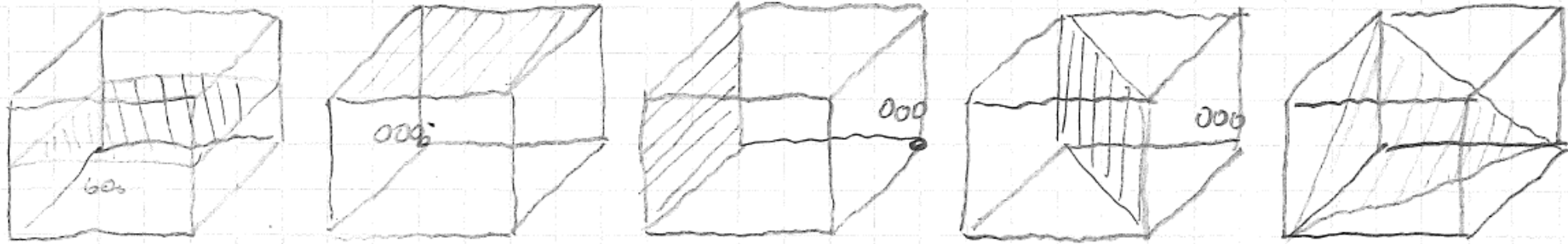
jsou v kubické mřížce

identické, jsou rodinné směry

$$\langle 111 \rangle = [\bar{1} \ 1 \ 1], [1 \ \bar{1} \ 1], [\bar{1} \ \bar{1} \ 1] \dots$$

Práce s rovinami v krystalografii - Millerovy indexy

- zjistíme, kde probíhá rovina osu x, y, z
- uděláme průřezovou kresbu
- pokud rovina prochází počátkem, posuneme si ho



průřez: $\infty \infty \frac{1}{2}$
rovina: (002)

$\infty \infty 1$
 (001)

$\infty \bar{1} \infty$
 $(0\bar{1}0)$

$1 \bar{1} \infty$
 $(1\bar{1}0)$

111
 (111)

Děsť roviny s strukturálně identickými rovinami, např. stejné krychle

$$\{100\} = (100), (010), (0\bar{1}0), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$$

Noncrystal vs. polykrystal

<https://www.youtube.com/watch?v=KaJfI3IjcA0>

