

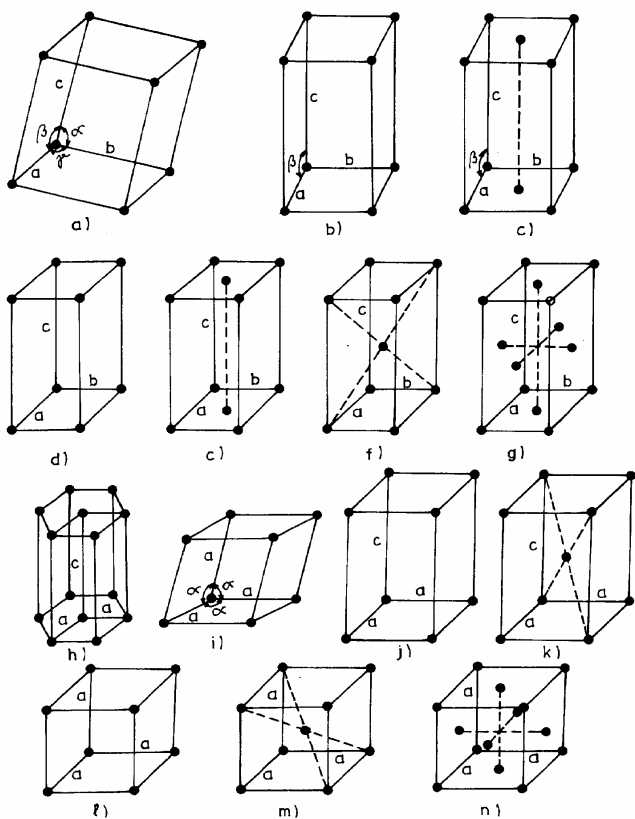
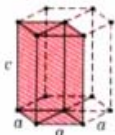
KRYSTALOGRAFIE

Autor textu: Ing. Lubomír Stránský, CSc., doplnila Ing. Simona Pospíšilová, Ph.D.

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

Tab. 1 Krystalografické soustavy

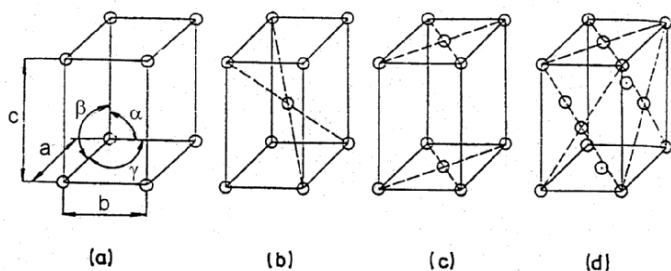
Soustava	Hlavní prvky souměrnosti	Elementární buňka
triklinická	žádné roviny, žádné osy	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
monoklinická	jedna dvojitá osa nebo jedna rovina	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
ortorombická (rombická)	tři navzájem kolmé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



- a) triklinická prostá (trojklonná),
- b) monoklinická prostá (jednoklonná),
- c) monoklinická bazálně centrovaná,
- d) ortorombická prostá (kosočtverečná),
- e) ortorombická bazálně centrovaná,
- f) ortorombická prostorově centrovaná,
- g) ortorombická plošně centrovaná,
- h) hexagonální (šesterečná),
- i) romboedrická (klencová),
- j) tetragonální prostá (čtverečná),
- k) tetragonální prostorově centrovaná,
- l) krychlová prostá (kubická),
- m) krychlová prostorově centrovaná,
- n) krychlová plošně centrovaná.

Obr. 1 Čtrnáct Bravaisových mřížek

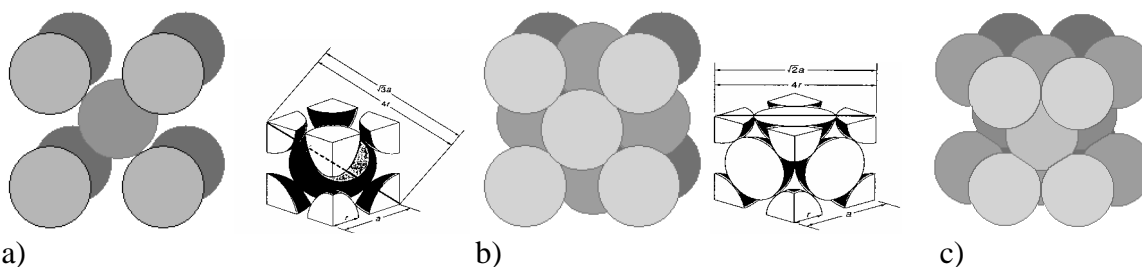
Rozeznáváme elementární buňky **prosté**, **prostorově středěné**, **plošně středěné** a **bazálně středěné** (obr. 2). Důležitou charakteristikou krystalových mřížek je jejich koordinační číslo, tzn. počet atomů, které jsou v dané mřížce stejně vzdáleny od libovolného atomu a pravidelně kolem něho uspořádány.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



- a) prostá,
- b) prostorově středěná (centrovaná),
- c) bazálně středěná (centrovaná),
- d) plošně středěná (centrovaná),

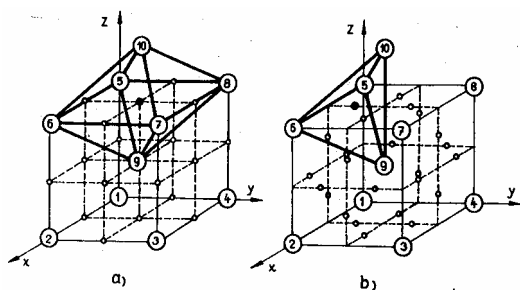
Obr. 2 Typy elementárních buněk

Kovy krystalizují nejčastěji v **krychlové plošně (fcc) nebo prostorově (bcc) středěné mřížce** a v **mřížce šesterečně těsně uspořádané (hcp)**, viz. obr. 3. Jsou to prostorové mřížky s vysokou souměrností a jednotlivé atomy se v určitých směrech (v geometrickém modelu) vzájemně dotýkají.

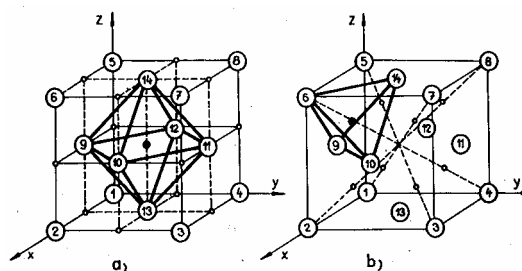


Obr. 3 Nejčastější typy krystalových mřížek, a) bcc, b) fcc, c) hcp

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



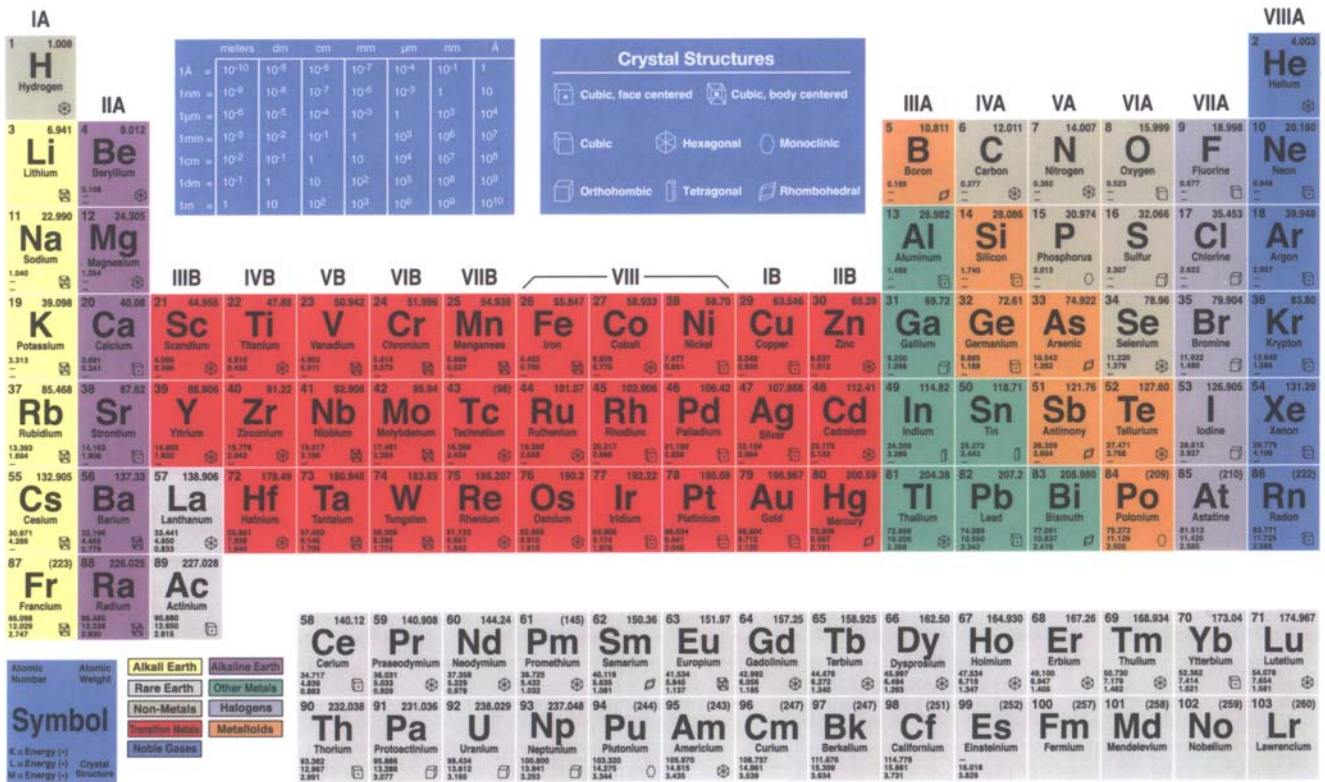
Obr. 4 Intersticiální dutiny v mřížce bcc
a) oktaedrické, b) tetraedrické



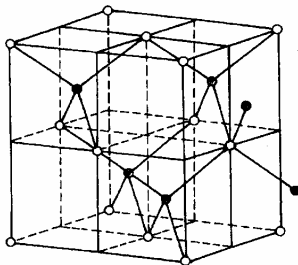
Obr. 5 Intersticiální dutiny v mřížce fcc
a) oktaedrické, b) tetraedrické

Typ krystalové mřížky ovlivňuje i vlastnosti kovových materiálů. Kovy s mřížkou fcc (Ni, Al, Ag, Pb, Au aj.) se např. vyznačují dobrou tvárností za tepla i za studena, kovy s mřížkou bcc (mezi něž patří i Fe α) mají tvařitelnost i houževnatost horší. Různá hustota obsazení jednotlivých směrů a rovin atomy v témže krystalu vede k anizotropii vlastností krystalických látek (např. modulu pružnosti, teplotní roztažnosti, tepelné a elektrické vodivosti, magnetických vlastností aj.). Na obr. 6. je uvedena **Mendělejevova periodická tabulka** prvků, ve které je ke každému prvku v tabulce přiřazena krystalografická mřížka. V případě polymorfních kovů se jedná o krystalografickou mřížku, ve které jsou atomy daného prvku umístěny za pokojových a nižších teplot.

Kromě krystalografických mřížek (elementárních buněk) existují i tzv. **krystalografické struktury**. Mřížkové uzly v elementární buňce jsou tvořeny jedním atomem (iontem). V případě složitějších krystalografických struktur jsou atomové uzly nahrazeny tzv. **bází**, tj. soustavou atomů. Typickým představitelem je **diamantová kubická struktura**. Krystalizuje v ní např. Si, Ge apod. Jedná se o kubickou mřížku plošně centrovanou (fcc), kde jsou mřížkové uzlové body tvořeny dvěma atomy; jeden leží v mřížkovém uzlovém bodě a druhý atom je posunut o $\frac{1}{4}$ do všech směrů ($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$), viz. obr. 7.



Obr. 6 Mendělejevova periodická tabulka prvků s vyznačenými krystalografickými mřížkami
 Pozn: Cubic face centered (fcc – kubická plošně středěná), Cubic, body centered (bcc – kubická prostorově středěná), Cubic (prostá kubická), Hexagonal (hexagonální, šesticelá), Monoclinic (monoklinická, jednoklonná), Orthorhombic (orthorombická, kosočtverečná), Tetragonal (tetragonální, čtverečná), Rhombohedral (romboedrická, klencová).



Obr. 7 Diamantová kubická struktura

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

Millerovými indexy roviny (hkl) jsou reciproké hodnoty úseků, které tato rovina vytíná na osách (x, y, z) převedené na nejmenší nesoudělná čísla. Millerův index krystalografického směru $[uvw]$ (tj. směr který prochází libovolným uzlovým bodem) získáme tak, že s daným směrem vedeme rovnoběžku z počátku souřadného systému. Určíme souřadnice bodu, který rovnoběžka vytné na jednotkových hranách základní buňky a převedeme je na nejmenší nesoudělná čísla. Roviny stejného typu (soubor rovin) se uzavírají do závorek $\{hkl\}$ a krystalograficky rovnocenné směry (soubor směrů) do závorek $\langle uvw \rangle$.

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

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