

Přednáška č. 2

Morfologická krystalografie

Krystalové osy a osní kříže, Millerovy symboly, stereografická projekce, Hermann-Mauguinovy symboly

Morfologická krystalografie

Krystalové soustavy

Krystalové soustavy - soubory krystalových tvarů, které zahrnují krystaly se stejnými prvky souměrnosti a stejným typem osního kříže. Rozeznáváme tři skupiny krystalových soustav:

soustavy nižší kategorie - (triklinická, monoklinická, rombická)

soustavy střední kategorie - (tetragonální, hexagonální, trigonální)

soustava vyšší kategorie - (kubická).

Krystal zařadíme do soustavy podle prvků souměrnosti.

Morfologická krystalografie

Krystalové soustavy

Soustava

Triklinická

Monoklinická

Rombická

Tetragonální

Trigonální

Hexagonální

Kubická

Souměrnost

Maximálně: C

Maximálně: g_2 , m, C

Maximálně: $3g_2$, 3m, C

g_4 nebo ($\overline{g_4}$)

g_3 nebo ($\overline{g_3}$)

g_6 nebo ($\overline{g_6}$)

Všechny směry jsou stejnocenné

Symetrie krystalů

Vnější forma krystalů odráží přítomnost nebo nepřítomnost prvků symetrie.

- Na základě kombinace prvků symetrie lze odvodit 32 bodových grup (oddělení souměrnosti), které vyjadřují symetrii všech přírodních krystalů.
- Každá bodová grupa je určena jménem nebo symbolem.
- Jména grup vychází z názvů obecných tvarů.
- Obecný tvar – tvar jehož plochy mají v dané grupě obecnou polohu vůči prvkům souměrnosti (tj. neleží kolmo nebo rovnoběžně s rovinami ani s osami)
- Symboly vyjadřují prvky souměrnosti a jejich pozici v prostoru. Nejčastěji používané symboly jsou Hermann – Mauguinovy nebo Schoenfliesovy.
- Bodové grupy se společnými charakteristikami se spojují do krystalových soustav.

Krystalové osy

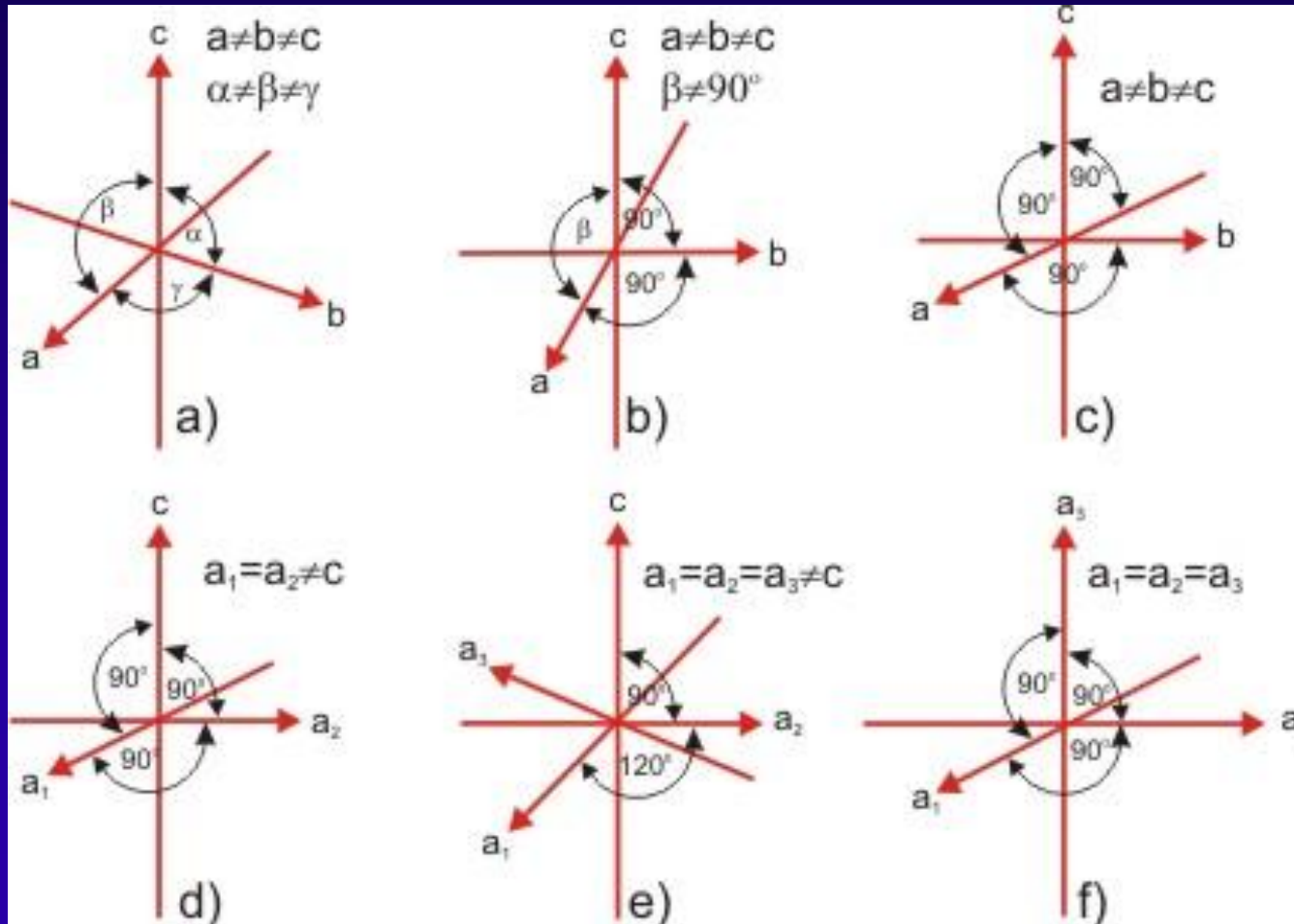
Popis každého krystalu (nebo krystalové struktury) se provádí vzhledem k referenčním osám, které se běžně označují jako krystalografické osy

U většiny krystalových soustav se osy označují jako **a**, **b**, **c**. Obecně má každá osa jinou délku a konec každé osy je označen plus nebo minus; pozitivní je přední část osy a, pravá část osy b a horní část osy c - opačné strany jsou negativní.

Úhly mezi osami jsou konvenčně značeny jako α , β , γ . Modelem, který znázorňuje symetrii v každé soustavě je krystalografický osní kříž

Krystalové osy

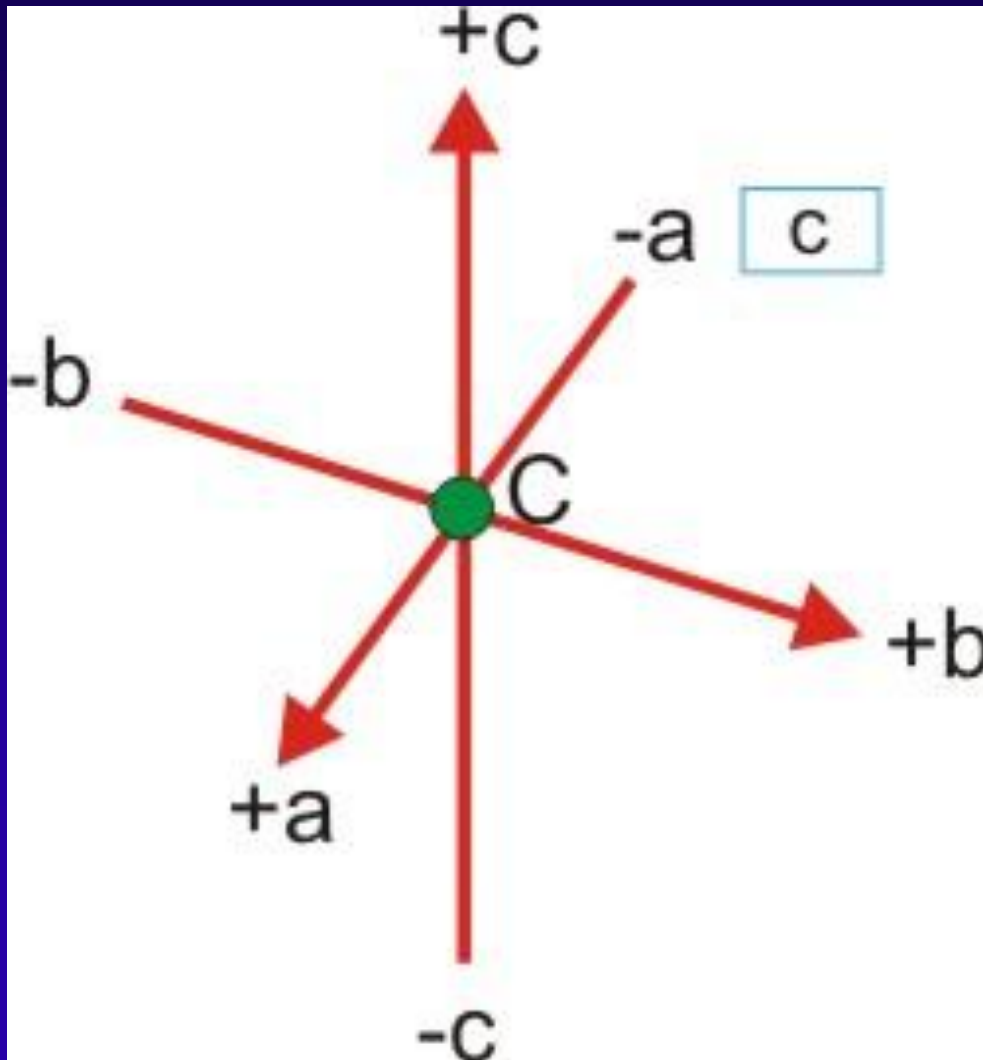
Modely krystalografických osních křížů všech soustav



- a) triklinická
- b) monoklinická
- c) rombická
- d) tetragonální
- e) hexagonální, trigonální
- f) kubická

Krystalové osy

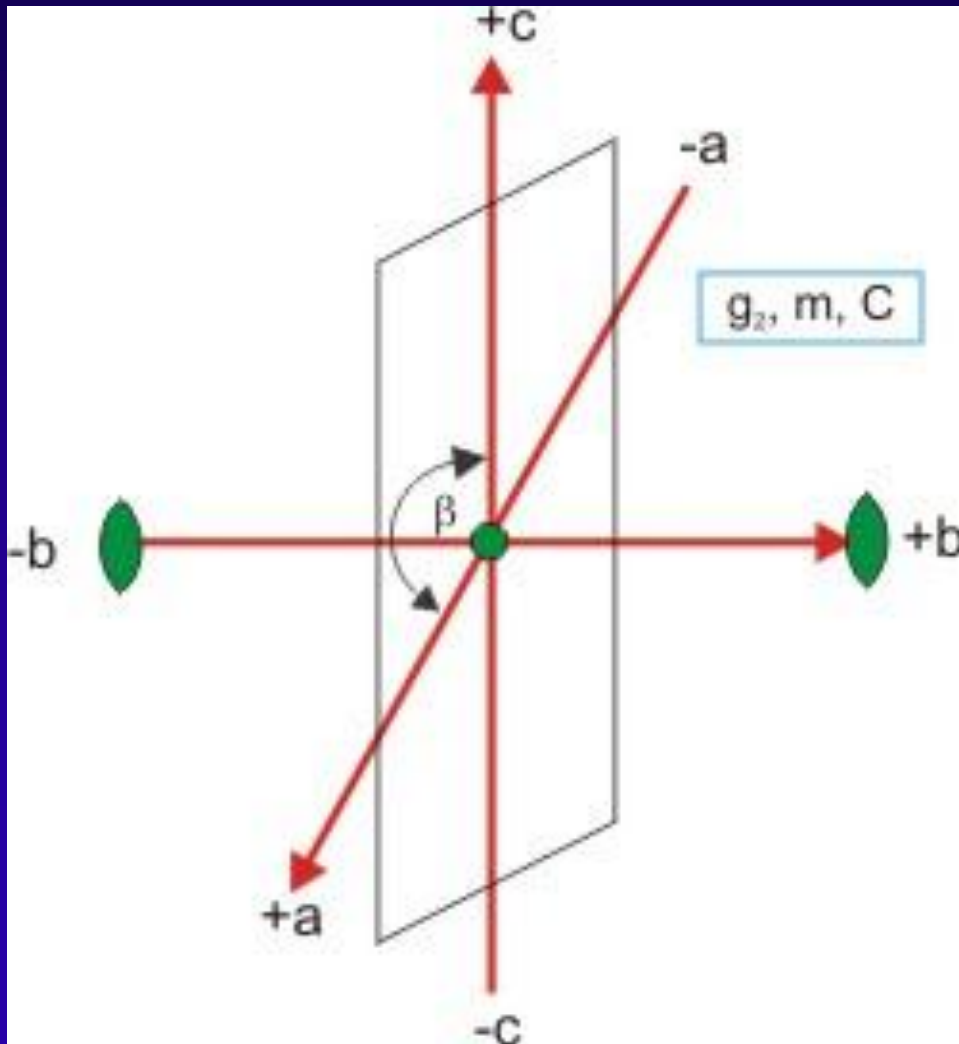
Souměrnost osních křížů



Triklinická soustava

Krystalové osy

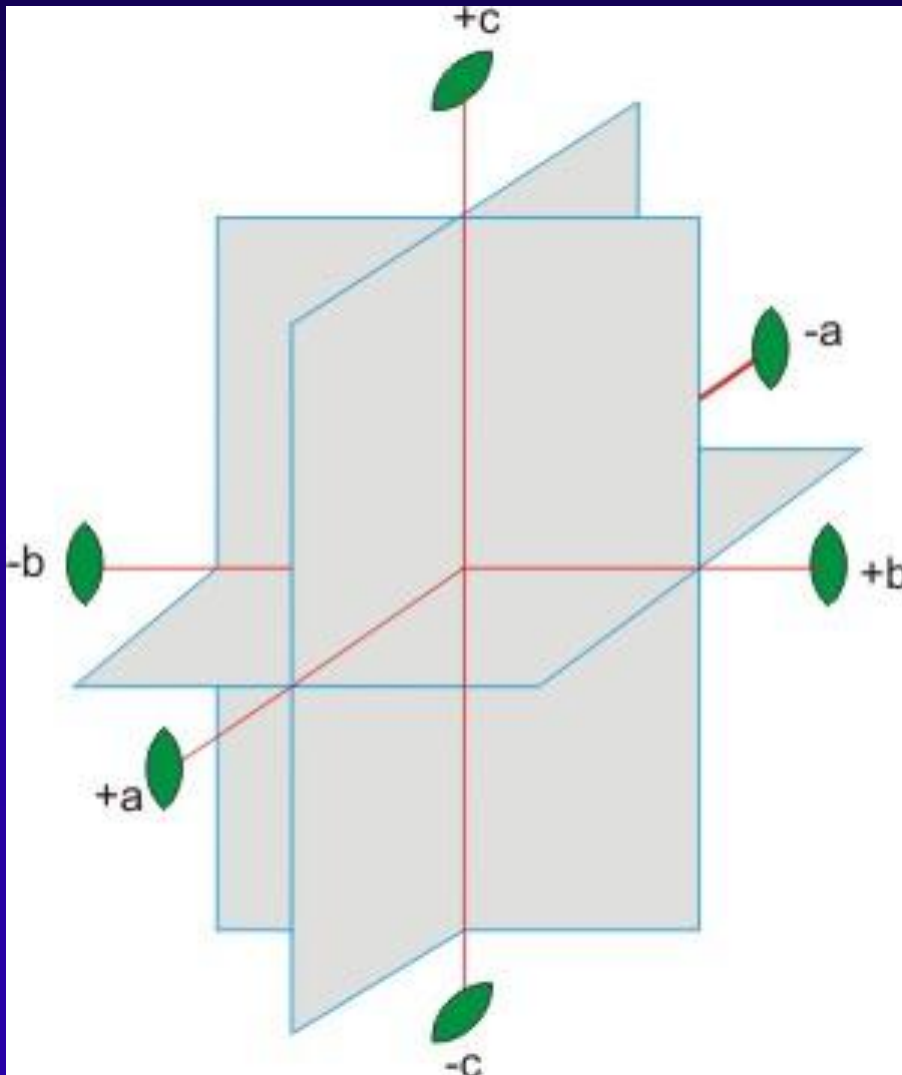
Souměrnost osních křížů



Monoklinická soustava

Krystalové osy

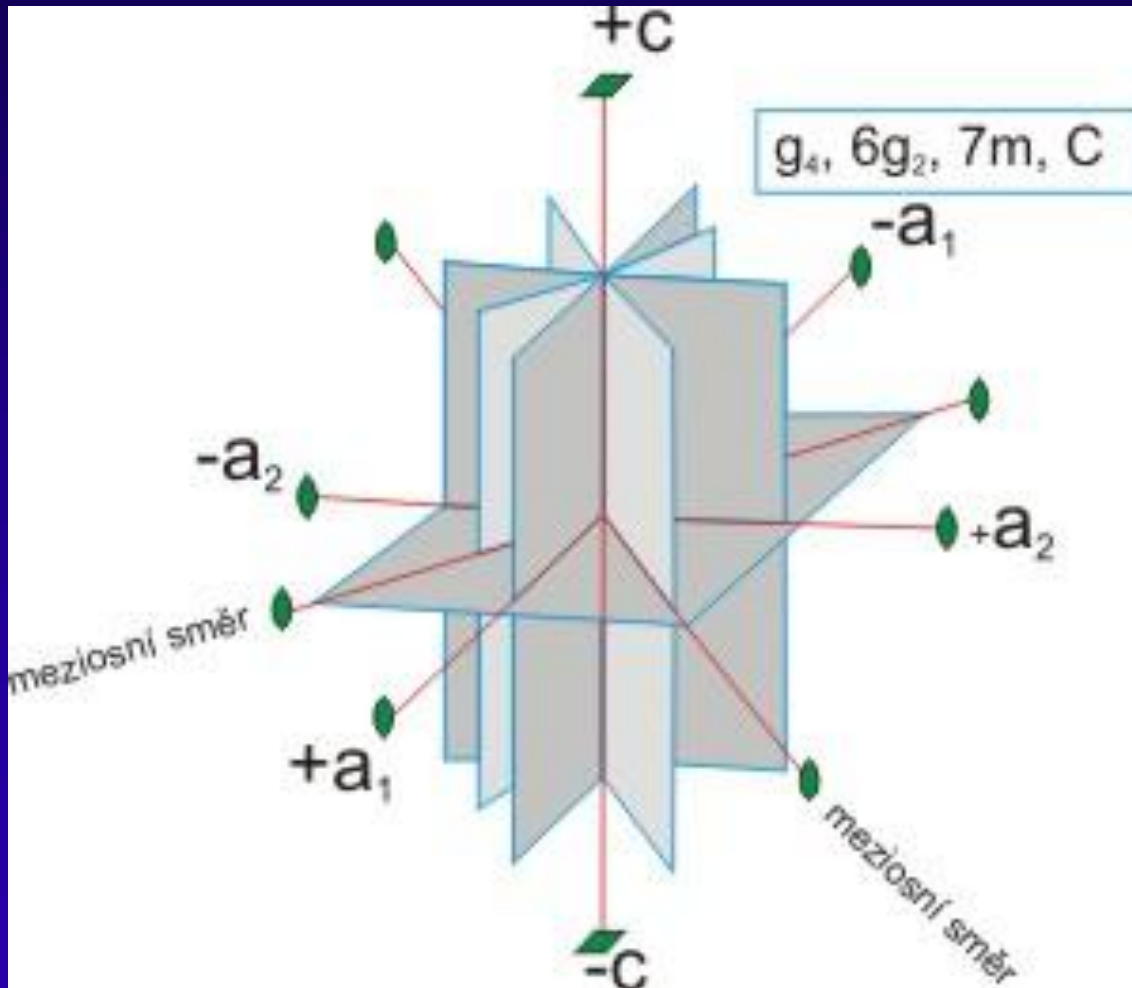
Souměrnost osních křížů



Rombická soustava

Krystalové osy

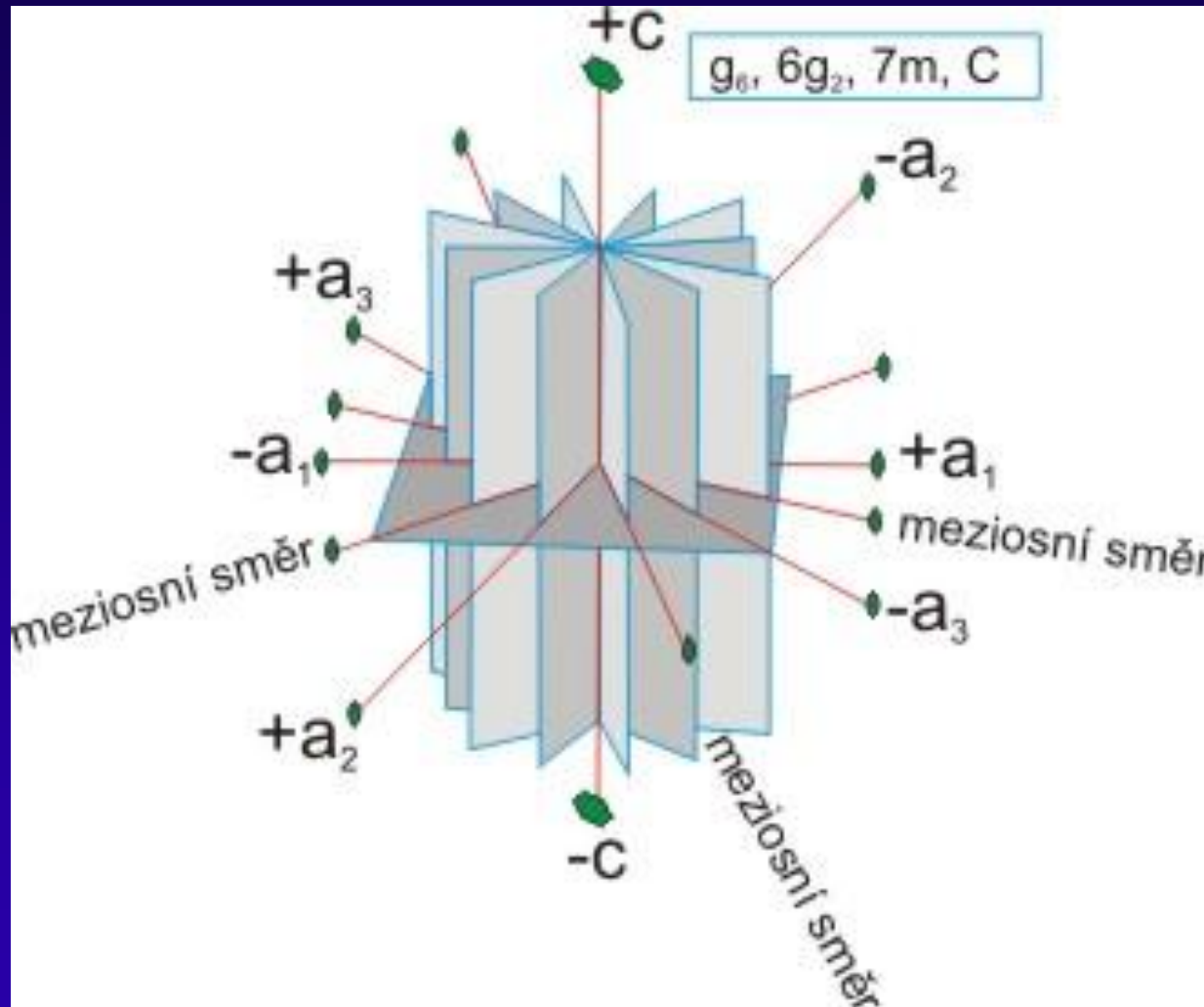
Souměrnost osních křížů



Tetragonální soustava

Krystalové osy

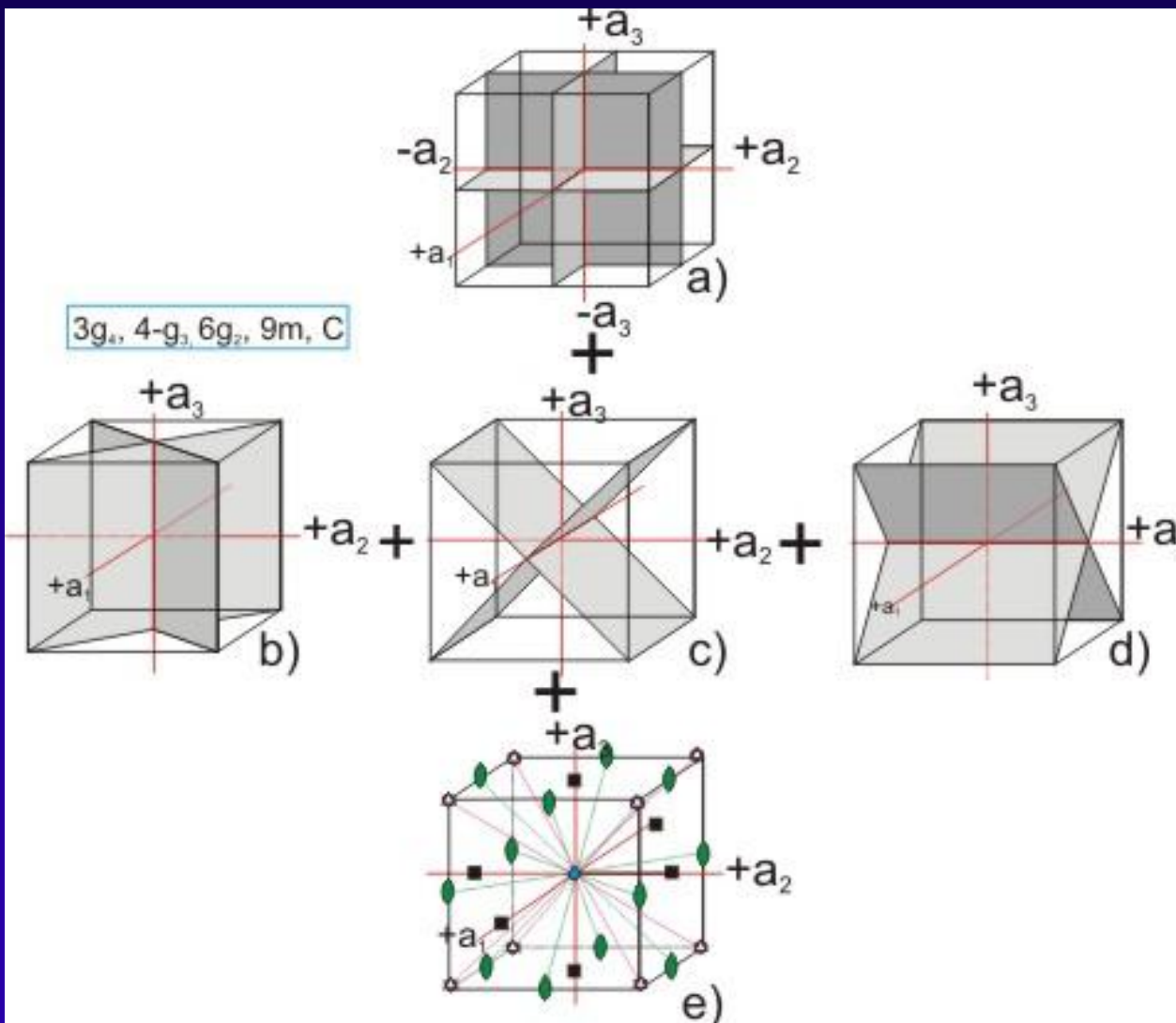
Souměrnost osních křížů



Hexagonální soustava

Krystalové osy

Souměrnost osních křížů



Kubická soustava

a) Osní kříž a roviny souměrnosti v osních směrech

b, c, d) Roviny souměrnosti v meziosních směrech

e) Osy souměrnosti

Úseky na krystalových osách

Poměry délek krystalografických os můžeme určit pomocí RTG metod.

Příklad:

Síra soustava - rombická

$$a = 10,47 \cdot 10^{-10}\text{m},$$

$$b = 12,87 \cdot 10^{-10}\text{m},$$

$$c = 24,49 \cdot 10^{-10}\text{m}$$

Vezmeme-li osu b jako jednotkovou, stanovíme poměr délek jako: $a/b : b/b : c/b$

$$\text{tj. } a : b : c = 0,813 : 1 : 1,903.$$



Úseky na krystalových osách

Určení polohy plochy v prostoru se určuje pomocí úseků, které daná plocha utíná na krystalových osách.

Základní tvar - určuje měřítko, protíná osy v základních parametrech $a : b : c$

Polohu všech ostatních ploch odvozujeme od základního tvaru $ma : nb : pc$ (tzv. Weissovy symboly)

Weissovy symboly nejsou praktické, proto se používají převrácené hodnoty odvozovacích čísel - **Millerovy symboly** - h, k, l

$$h = 1/m$$

$$k = 1/n$$

$$l = 1/p$$

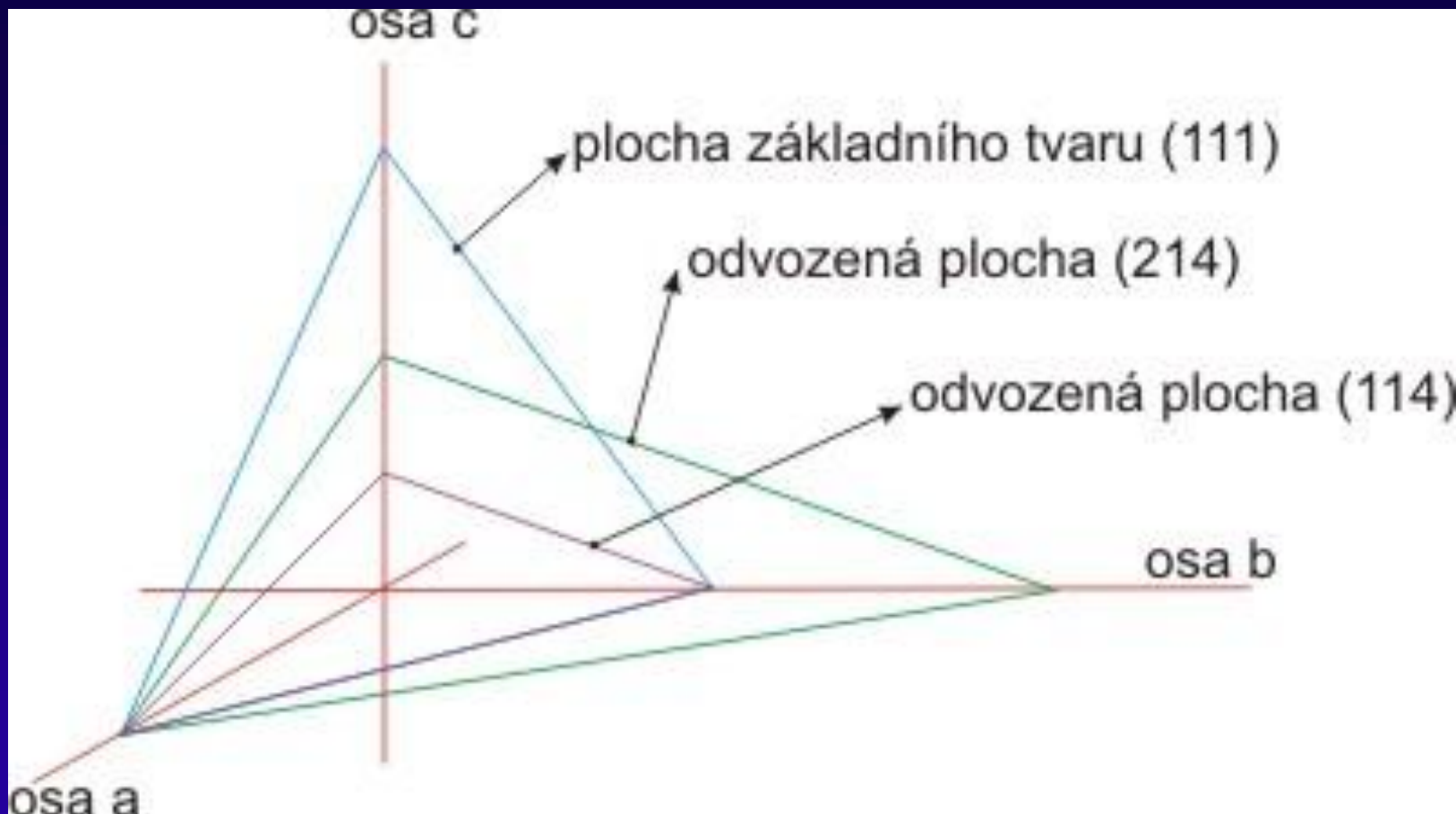
Používaná symbolika:

(hkl) - symbol označující plochu

$\{hkl\}$ - symbol označující jednoduchý tvar

$\bar{h}, \bar{k}, \bar{l}$ - záporné indexy

Úseky na krystalových osách

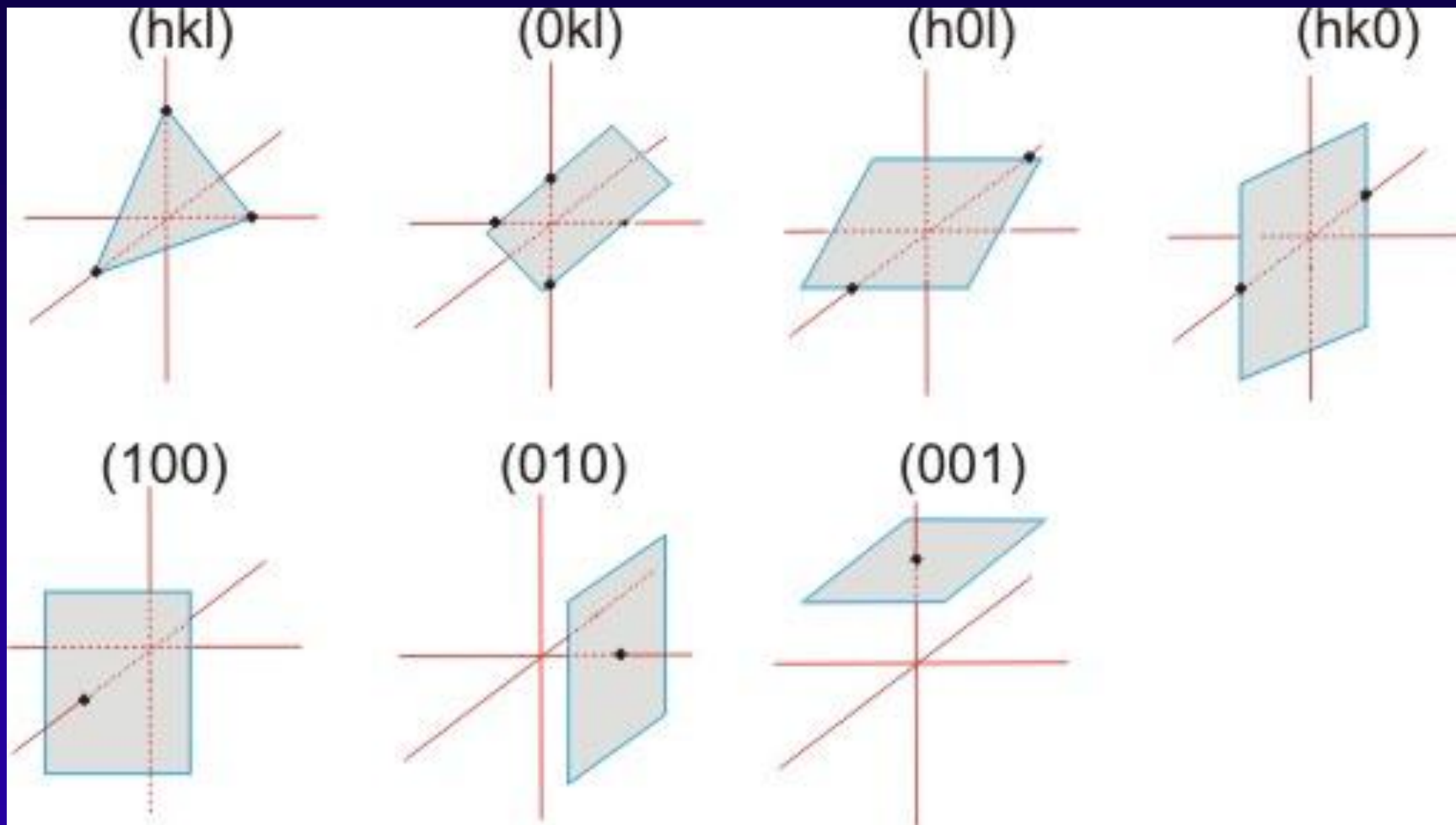


Modrá plocha - základní tvar (111)

Fialová plocha - odvozovací čísla 1 : 1 : 1/4, Millerův symbol (114)

Zelená plocha - odvozovací čísla 1 : 2 : 1/2, převrácené hodnoty 1 : 1/2 : 2, Millerův symbol (214)

Úseky na krystalových osách



Sedm základních obecných postavení krystalové plochy vzhledem k osnímu kříži.

Úseky na krystalových osách

Odlišná situace v soustavě hexagonální a trigonální

Proč?

Osní kříž je tvořen čtyřmi osami: a_1 , a_2 , a_3 , c

Používáme čtyři symboly (tzv. Bravaisovy symboly)

$(h \ k \ \bar{l} \ l)$

Princip jejich určování se nemění. Platí pravidlo, že $h + k + \bar{l} = 0$

Úseky na krystalových osách

Zákon o racionalitě Millerových symbolů

Millerovy symboly krystalových ploch h , k , l jsou čísla malá a racionální.

Důkazy:

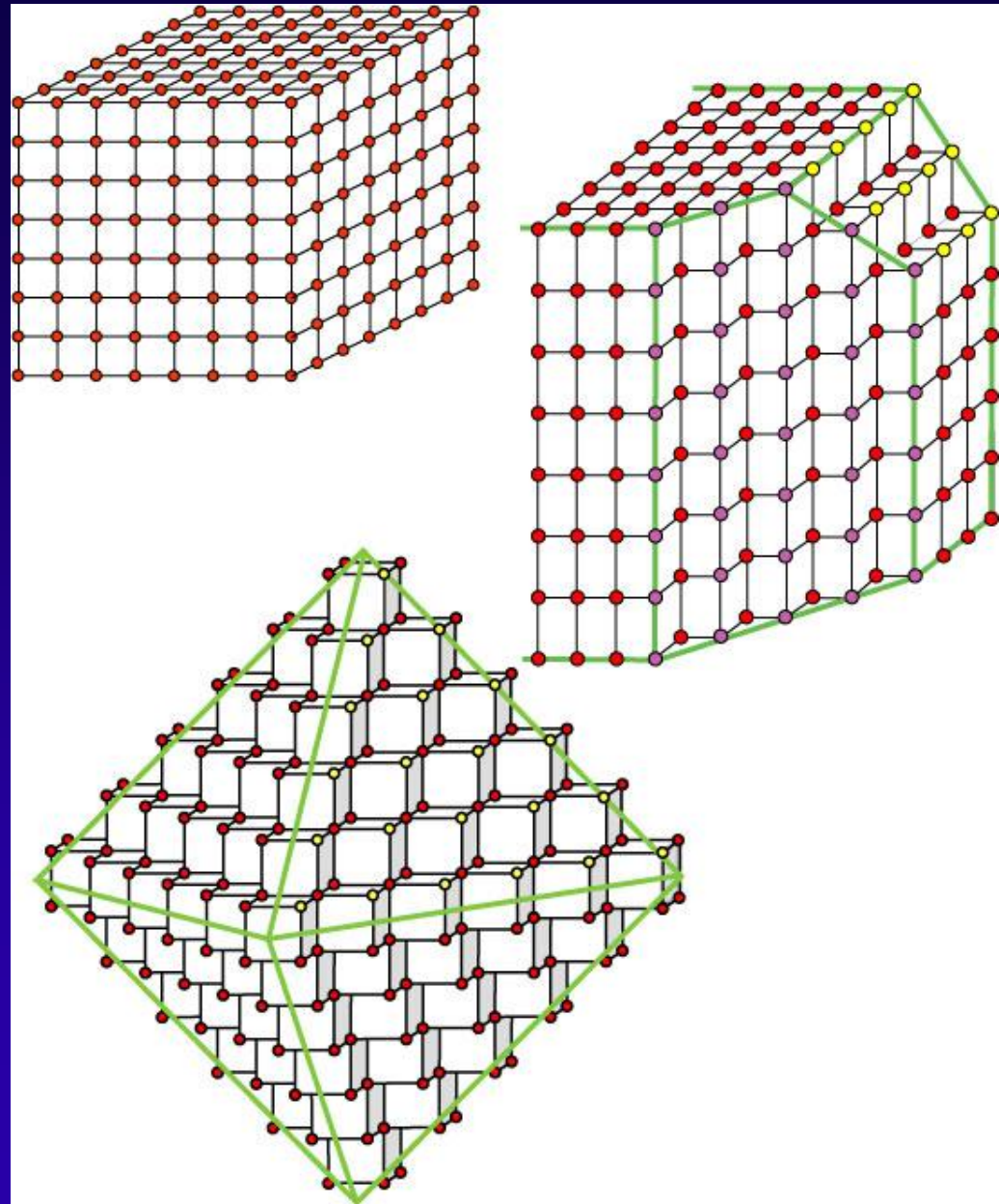
- 1) Ze statistických zjištění plyne, že plochy jsou tím větší a častější, čím jednodušší jsou jejich symboly.
- 2) Z vnitřní stavby krystalů - geometrie krystalové mřížky - plyne, které plochy, hrany a rohy jsou krystalograficky možné.

Úseky na krystalových osách

Zákon o racionalitě Millerových symbolů

•Pozorování:

•Pravděpodobnost výskytu krystalových ploch je úměrná hustotě uzlů mřížky v dané ploše.

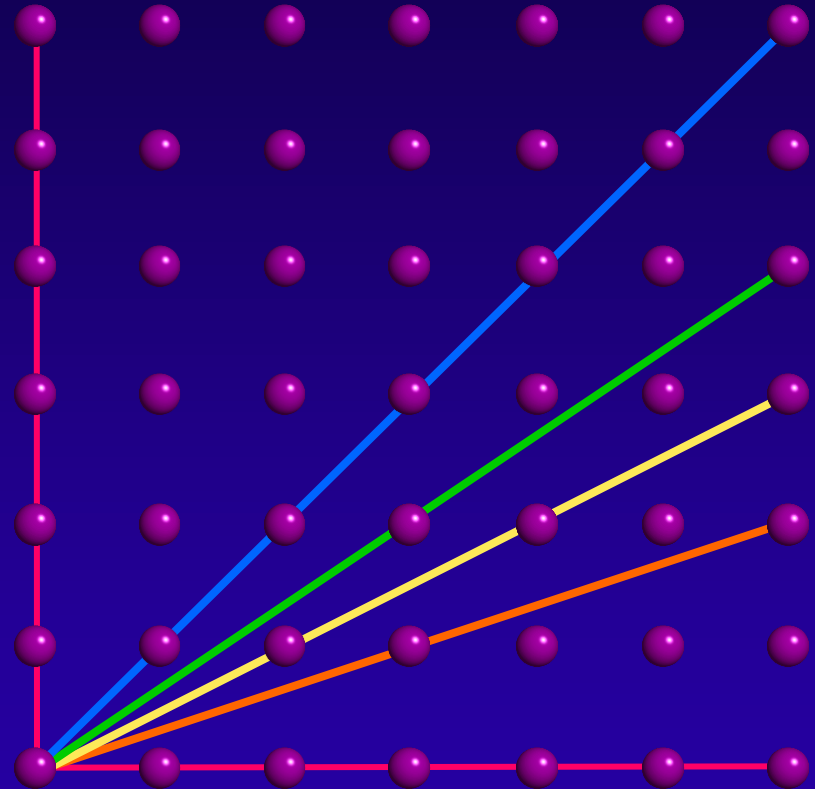


Úseky na krystalových osách

Zákon o racionalitě Millerových symbolů

•Pozorování:

•Pravděpodobnost výskytu krystalových ploch je úměrná hustotě uzlů mřížky v dané ploše.



Úseky na krystalových osách

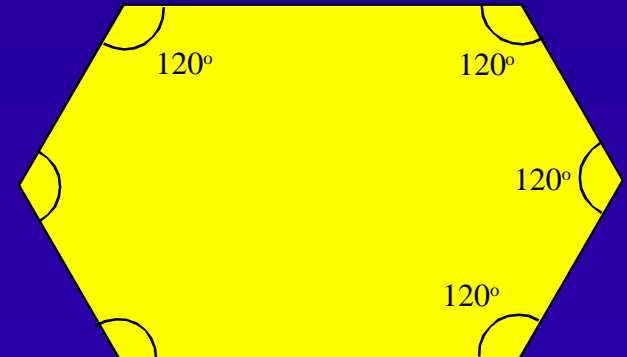
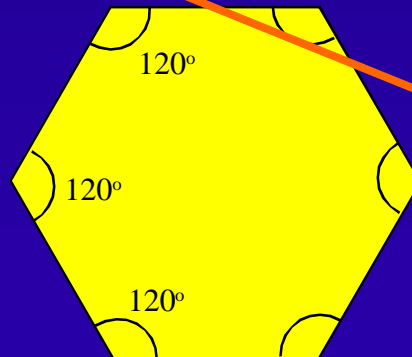
Zákon o stálosti úhlů mezi stejnými plochami (Nicholas Steno 1669)

Krystaly křemene →

Úhly mezi stejnými plochami (plochami se stejnými Millerovými symboly) jsou na dvou různě vyvinutých krystalech stejné.

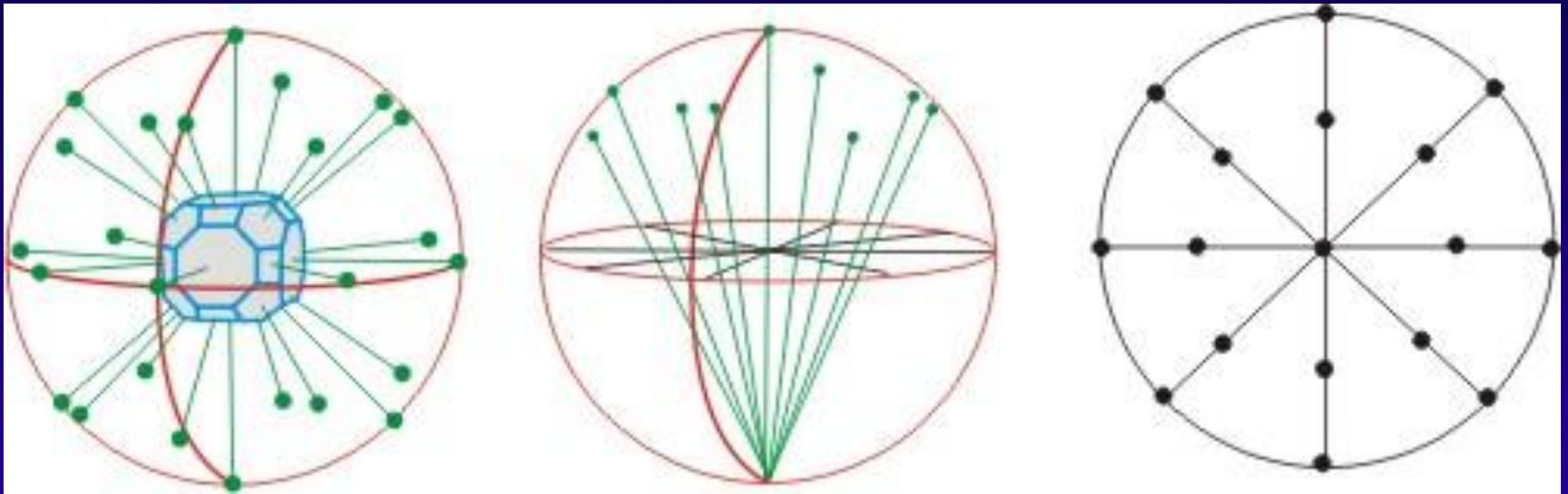


Tzn.: Velikost ploch může být různá, ale úhly zůstávají stejné.



Stereografická projekce

grafické znázornění polohy krystalových ploch v prostoru

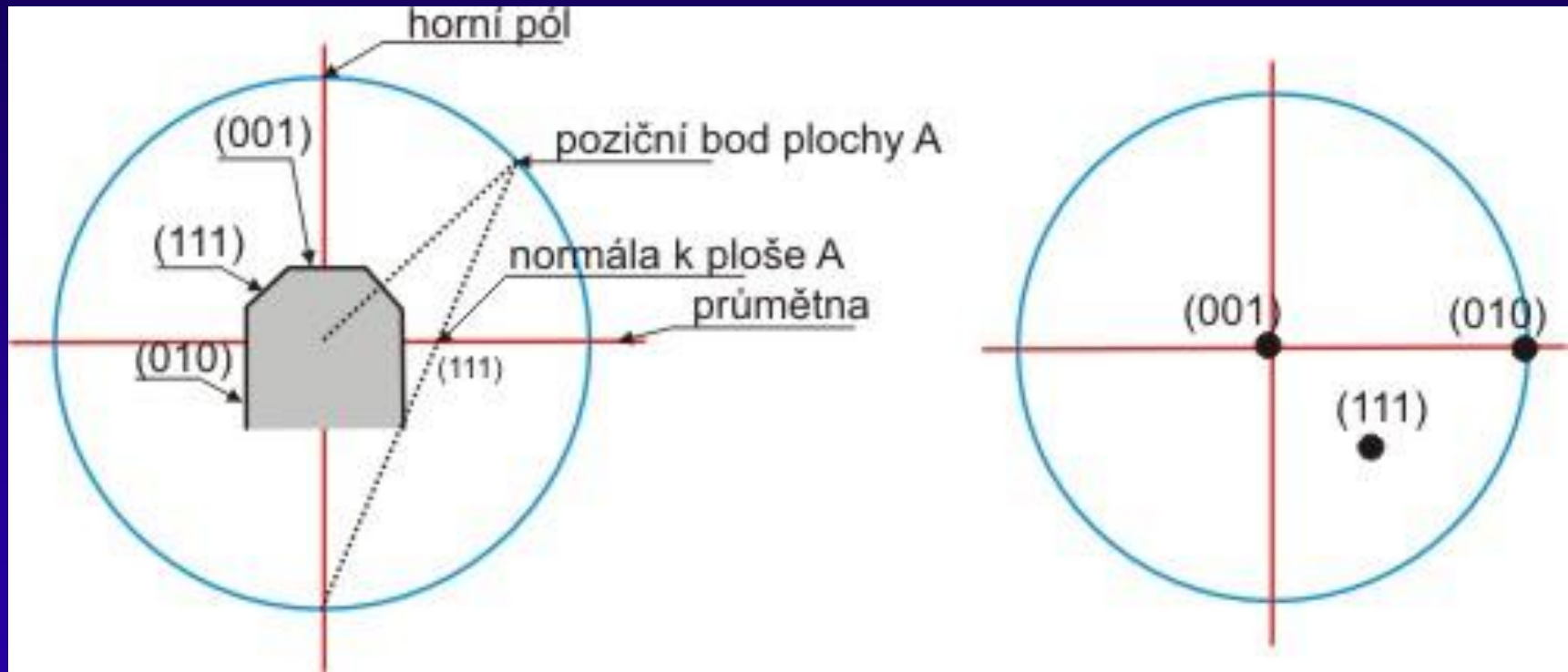


K projekci používáme projekční kouli sestavenou kolem krystalu. Její střed je totožný se středem krystalu.

Krystalové plochy znázorňujeme průmětem jejich pozičních bodů z povrchu projekční koule do roviny jejího rovníku.

Stereografická projekce

Princip a postup



Stereografická projekce

Princip stereografické projekce je možno použít rovněž pro **zobrazení prvků souměrnosti**, jejich vzájemné pozice a funkce.

Roviny souměrnosti

Protože roviny souměrnosti procházejí středem projekční koule, protínají se v ní v kružnicích. Tyto **kružnice se v průmětně zobrazí jako úsečky** (je-li rovina kolmá k průmětně), nebo jako **oblouky** (je-li rovina v obecné poloze vzhledem k průmětně), případně jako **kružnice** (jediný případ tzv. **pasné roviny** ležící v průmětně).

Osy souměrnosti

Osy souměrnosti protínají projekční kouli ve **dvojitých bodech**, které se promítají do průmětny stejně jako poziční body krystalografických ploch. Každá osa souměrnosti se tedy zobrazí jako dvojice bodů (**četnost se označí smluvenou značkou**). Jediným bodem uprostřed kružnice se zobrazí vertikální gyra.

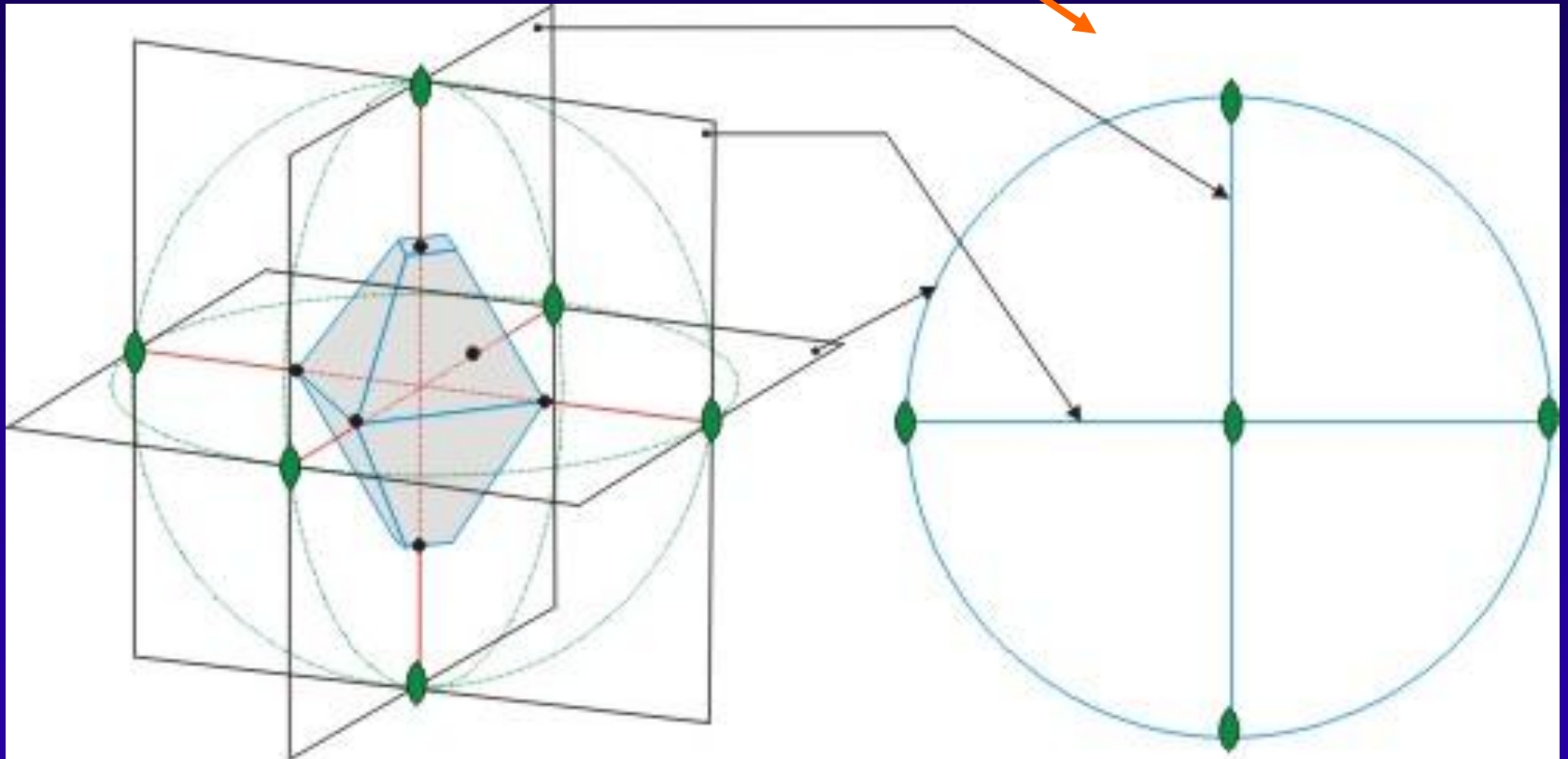
Gadolinův diagram

je stereografickou **projekcí prvků souměrnosti krystalu**, myšlených jako roviny a přímky v projekční kouli. Průměty rovin souměrnosti se rýsují plně, průměty os souměrnosti čárkovaně, výchozy os se kreslí příslušnou značkou četnosti.

Stereografická projekce

Stereografická projekce prvků souměrnosti krystalu z rombické soustavy

Gadolinův diagram



Hermann-Mauguinovy symboly

Symboly vyjadřující prvky souměrnosti a jejich pozici v prostoru.

Nejčastěji používané symboly jsou Hermann – Mauguinovy nebo Schoenfliesovy.

Každé oddělení krystalové souměrnosti má svůj H.-M. symbol.

Proč?

V každém oddělení krystalové souměrnosti se vyskytuje daná kombinace prvků souměrnosti.

Kolik takových kombinací je v krystalografii možných?

32

Hermann-Mauguinovy symboly

Symboly vyjadřující prvky souměrnosti a jejich pozici v prostoru.

Nejčastěji používané symboly jsou Hermann – Mauguinovy nebo Schoenfliesovy.

Každé oddělení krystalové souměrnosti má svůj H.-M. symbol.

Proč?

V každém oddělení krystalové souměrnosti se vyskytuje daná kombinace prvků souměrnosti.

Tzn. že můžeme vytvořit pouze 32 H.-M. symbolů (a také 32 Gadolinových diagramů).

Hermann-Mauguinovy symboly

Osy souměrnosti se značí číslem vyjadřujícím četnost

1, 2, 3, 4, 6, $\bar{1}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$

roviny souměrnosti značkou

m

Symbol **2/m** znamená, že v daném směru je digyra a kolmo na ni rovina souměrnosti.

Symbol **m** značí, že kolmo na daný směr se nachází rovina souměrnosti.

H - M symboly se určují v krystalograficky význačných směrech.

Pořadí těchto směrů je různé v různých soustavách.

Hermann-Mauguinovy symboly

Soustava triklinická - symbol vyjadřuje přítomnost středu souměrnosti (jednočetné inverzní osy)

Soustava monoklinická - symbol se určuje ve směru osy b (jednočlenné symboly).

Soustava rombická - symbol se určuje v pořadí:

1. Směr osy a
2. Směr osy b
3. Směr osy c (trojčlenné symboly)

Soustavy střední kategorie - symbol se určuje v pořadí

1. Směr osy c (vertikály)
2. Směr osní (osy a)
3. Směr meziosní

Soustava kubická - symboly se určují v pořadí:

1. Osní směr
2. Směr tělesové úhlopříčky krychle
3. Směr meziosní

Konec přednášky. Děkuji za pozornost.