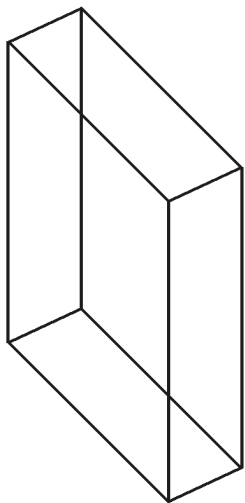
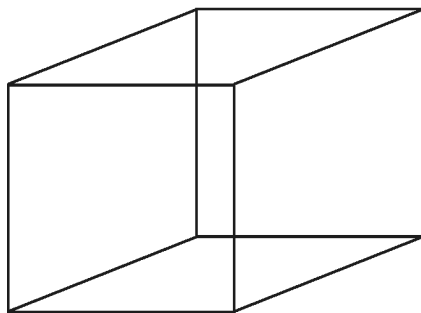


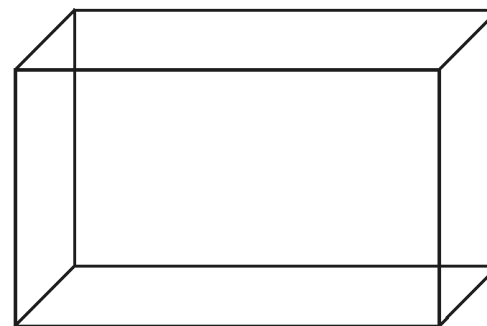
Kształty komórek elementarnych



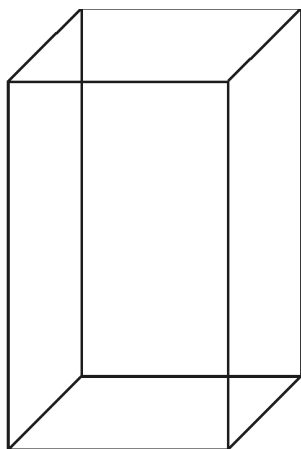
równoległościan
ukośnokątny



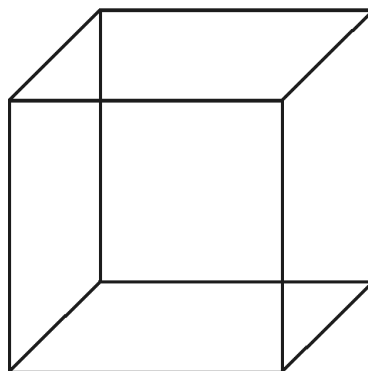
równoległościan
o kącie $\gamma \neq 90^\circ$



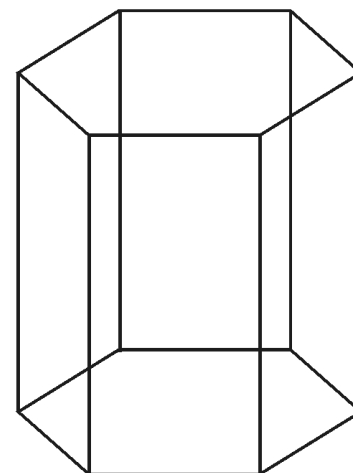
prostopadłościan



prostopadłościan
o podstawie kwadratu

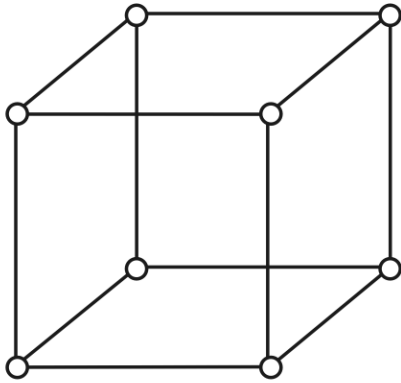


sześcian

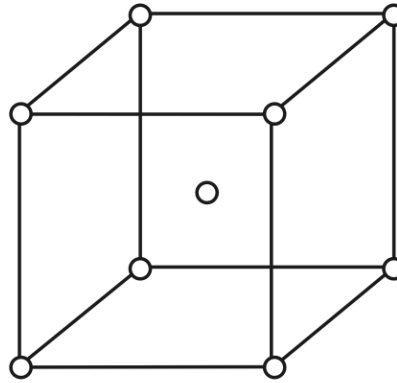


graniastosłup o podstawie
sześciokąta foremnego

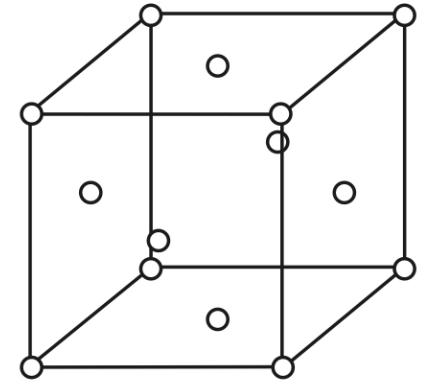
Komórki elementarne Bravais



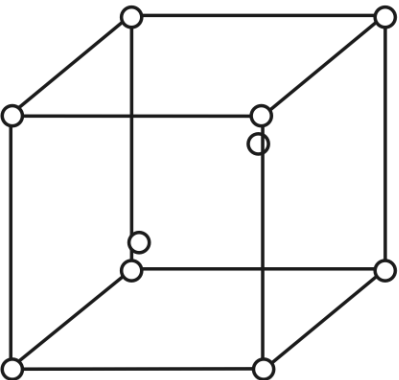
komórka prymitywna (P)



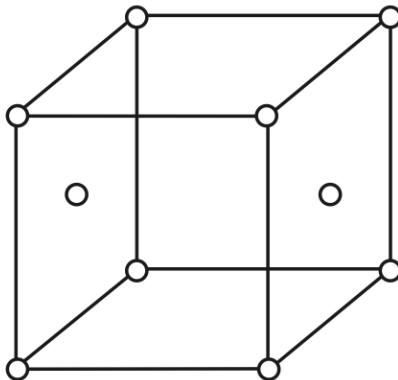
komórka
przestrzennie centrowana (I)



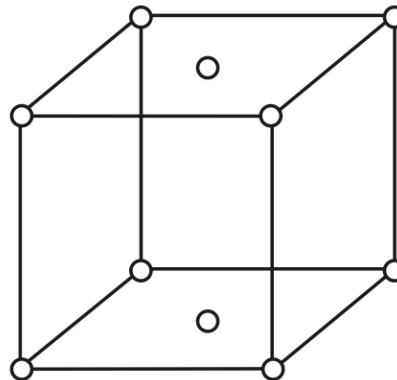
komórka
płasko centrowana (F)



A

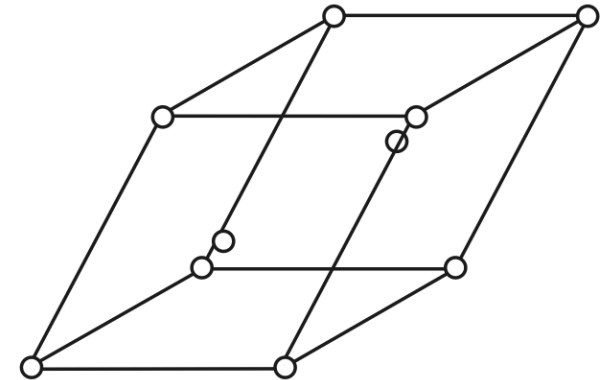


B



C

komórki centrowane na jednej parze ścian



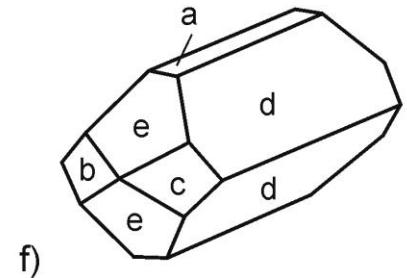
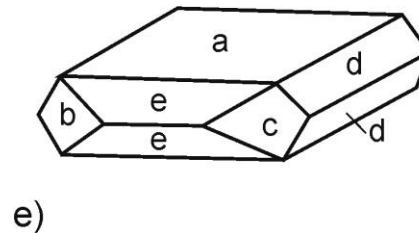
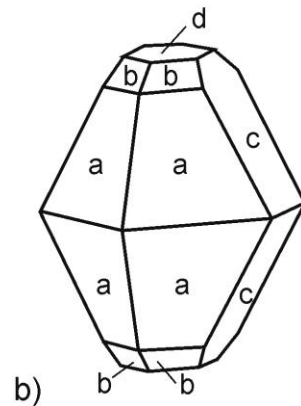
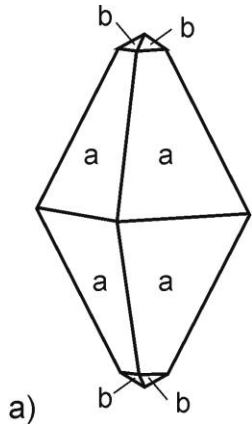
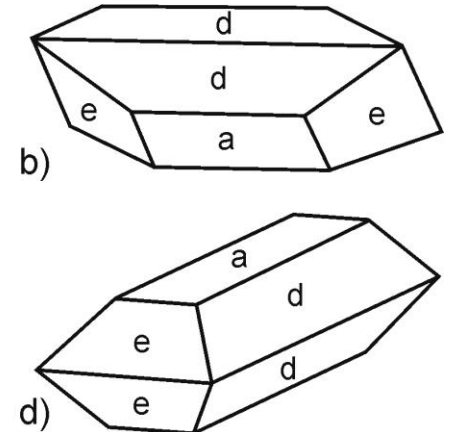
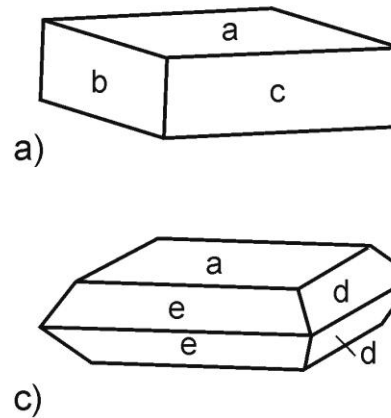
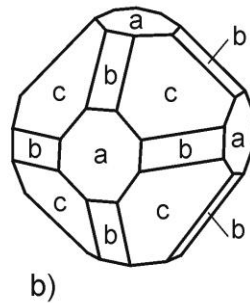
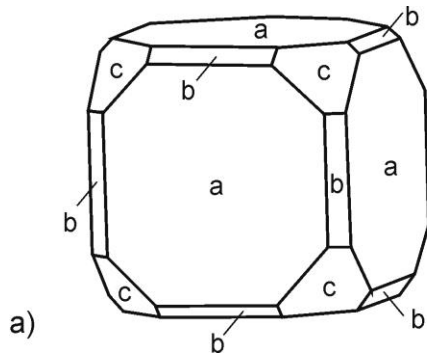
komórka romboedryczna (R)

Grupy translacyjne Bravais

Układ	Grupa translacyjna
regularny	P, I, F
tetragonalny	P, I
rombowy	P, C, I, F
jednoskośny	P, C,
trójskośny	P
trygonalny	R
heksagonalny	P

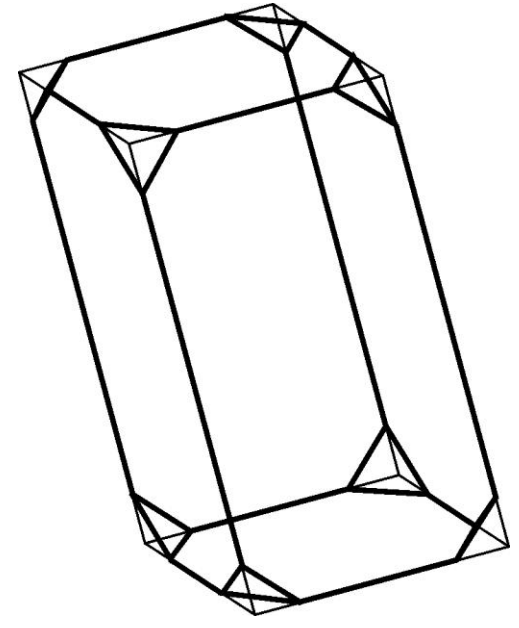
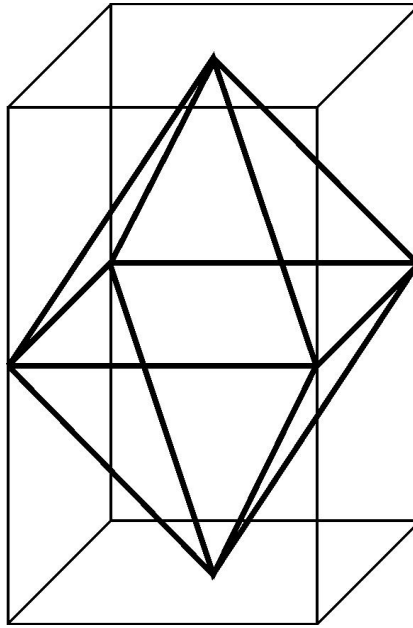
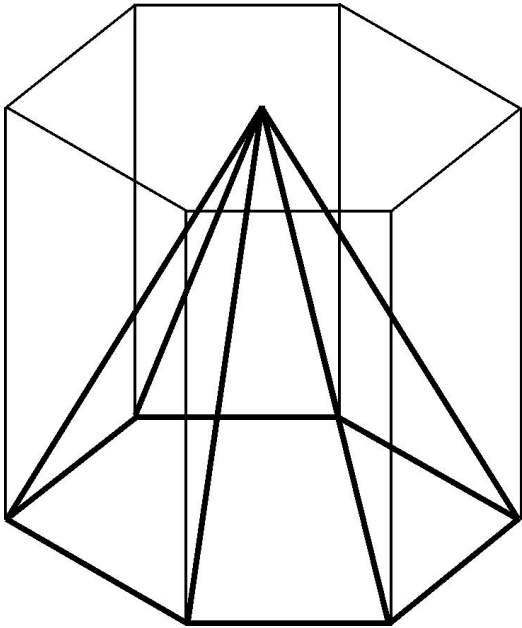
Prawo Steno

Kąty między analogicznymi ścianami, zmierzone na różnych egzemplarzach kryształu tej samej substancji w jednakowych warunkach fizykochemicznych są stałe, niezależne od wielkości kryształu.

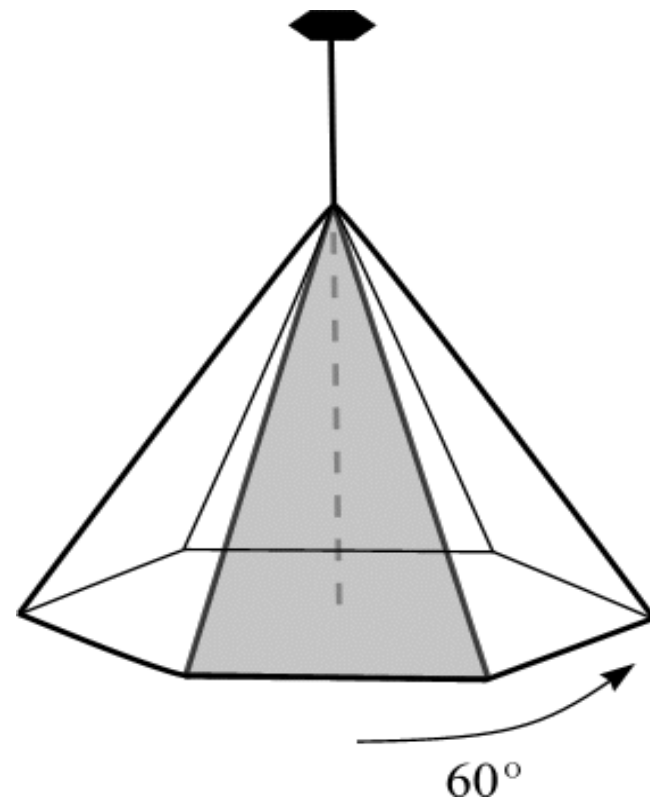
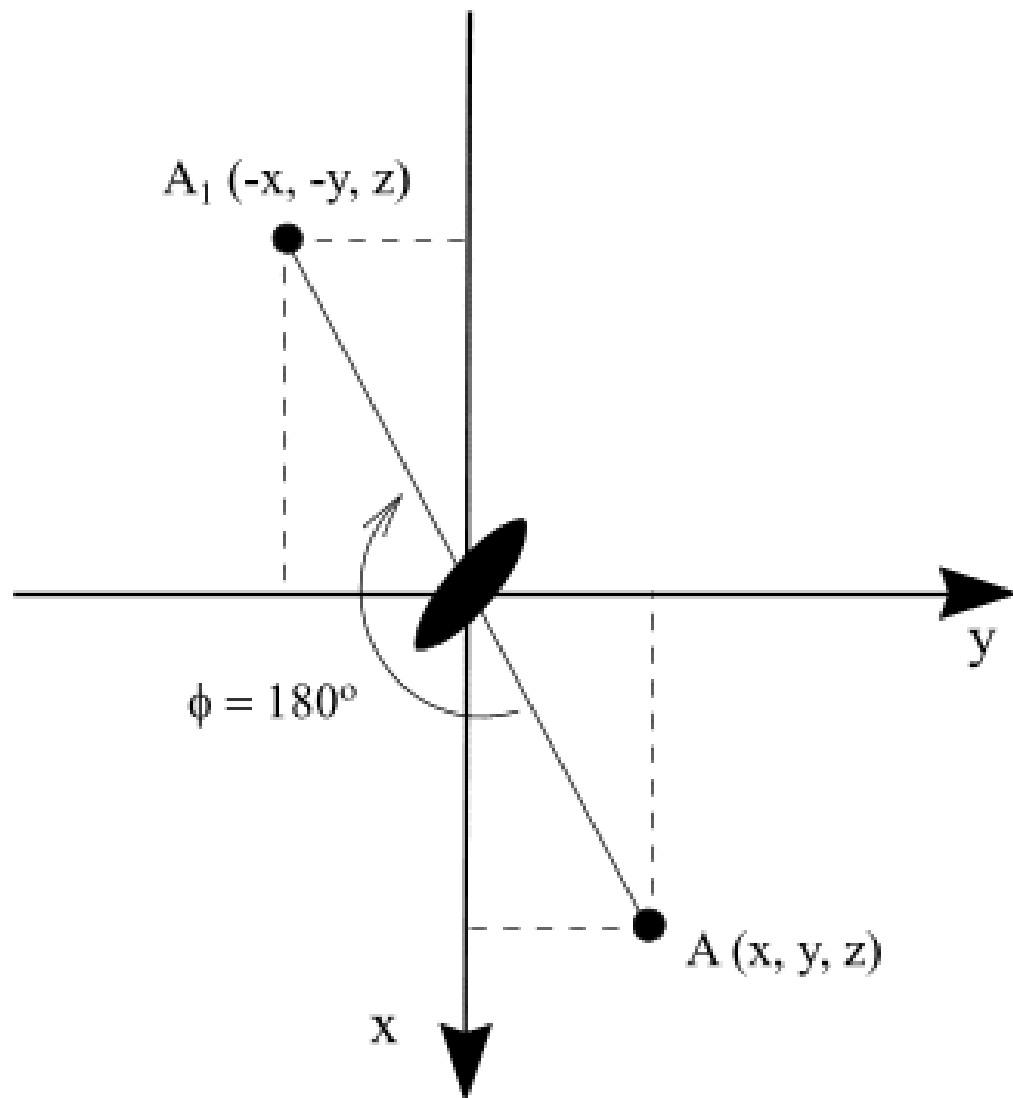


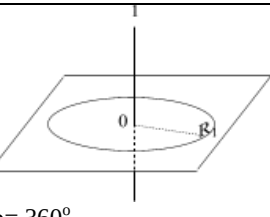
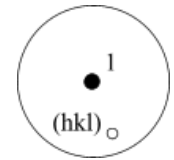
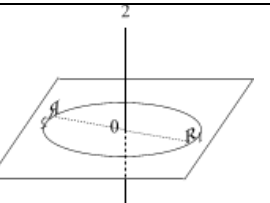
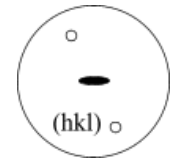
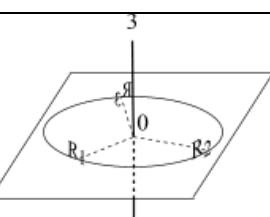
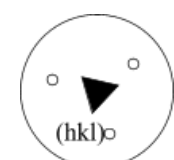
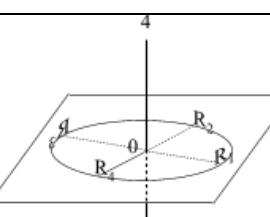
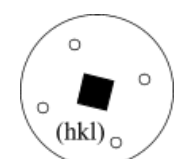
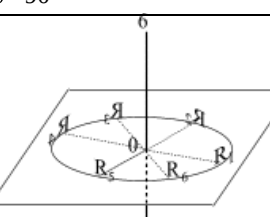
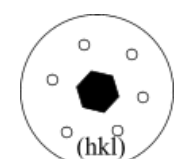
Prawo równoległości ścian

Naturalne ściany zewnętrzne kryształu (jeżeli są wykształcone) są zawsze równoległe do płaszczyzn sieciowych, a krawędzie tych ścian - do prostych sieciowych kryształu.



Obrót wokół osi

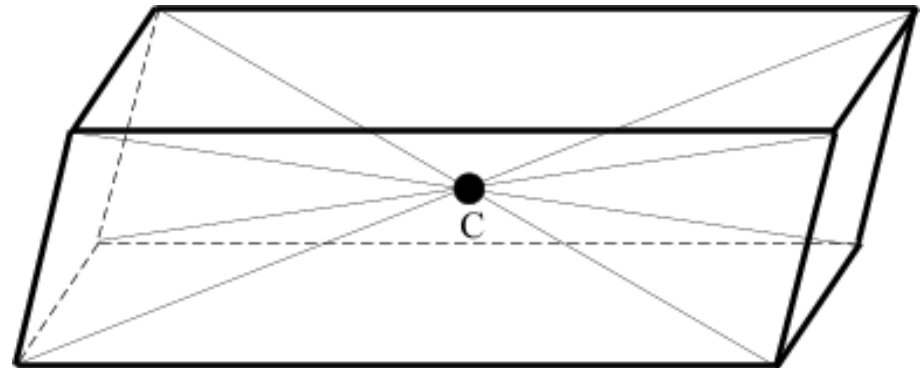
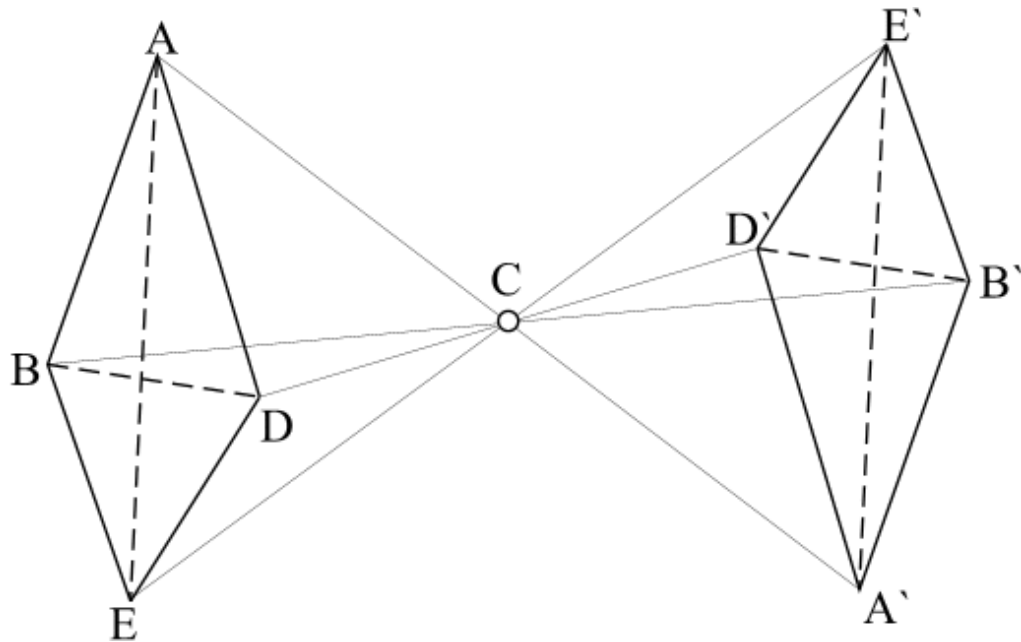


Właściwa oś symetrii X	Działanie właściwej osi symetrii X na element „R”	Projekcja stereograficzna bieguna ściany (hkl) przekształcanego względem właściwej osi symetrii X
 $\varphi = 360^\circ$		
 $\varphi = 180^\circ$		
 $\varphi = 120^\circ$		
 $\varphi = 90^\circ$		
 $\varphi = 60^\circ$		

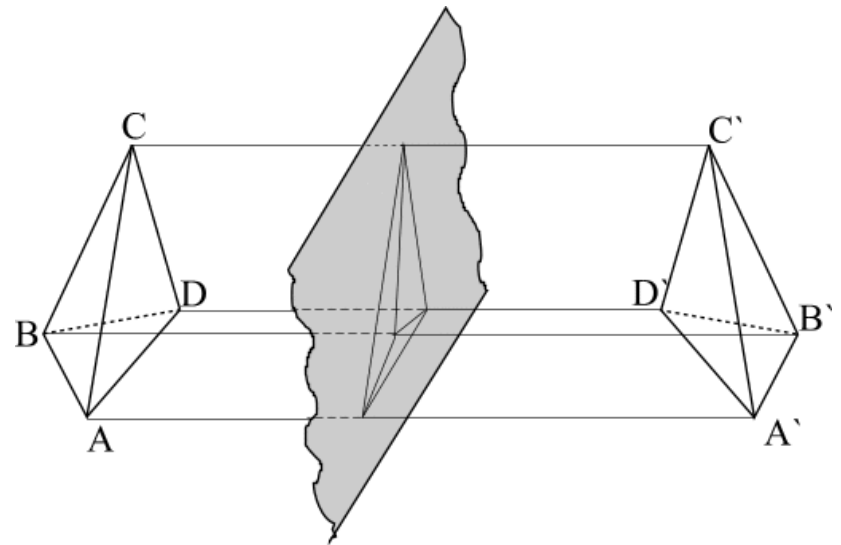
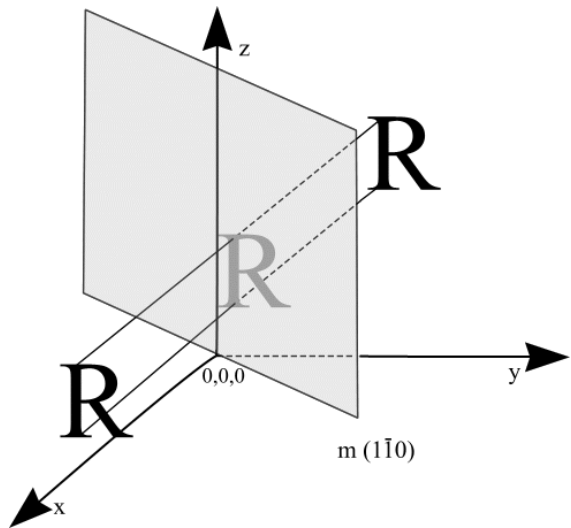
Krotności osi dozwolone w sieci

k	$\cos\varphi$	φ	krotność osi
3	-1	180°	2
2	$-\frac{1}{2}$	120°	3
1	0	90°	4
0	$\frac{1}{2}$	60°	6
-1	1	360°	1

Centrum inwersji (symetrii)



Płaszczyzna symetrii



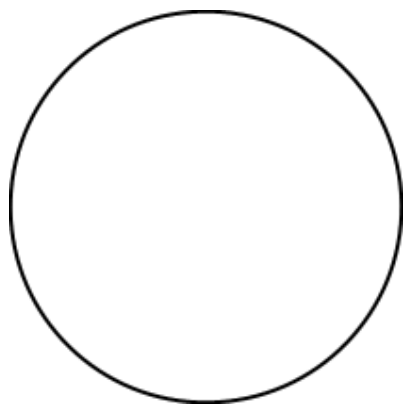
Zamknięte operacje symetrii

PROSTE		
obrót	obrót o 360° obrót o 180° obrót o 120° obrót o 90° obrót o 60°	oś jednokrotna oś dwukrotna oś trójkrotna oś czterokrotna oś sześciokrotna
odbicie względem płaszczyzny		płaszczyzna symetrii
odbicie inwersji (inwersja)	względem centrum	centrum inwersji
ZŁOŻONE		
obrót z inwersją	obrót o 360° i inwersja obrót o 180° i inwersja obrót o 120° i inwersja obrót o 90° i inwersja obrót o 60° i inwersja	oś jednokrotna inwersyjna $\equiv$ centrum inwersji oś dwukrotna inwersyjna $\equiv$ płaszczyzna symetrii oś trójkrotna inwersyjna oś czterokrotna inwersyjna oś sześciokrotna inwersyjna

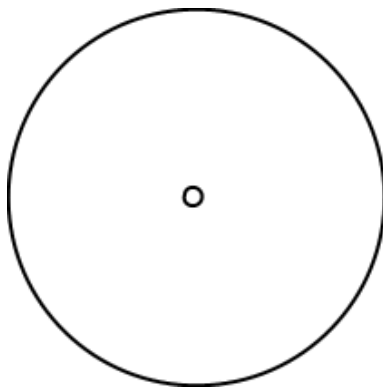
Symbole elementów symetrii

Element symetrii	Symbol graficzny:	Kreutzta – Zaremby	Schoenfliesa	Hermann - Mauguina
<i>Oś jednokrotna- identyczność (obrót o 360°)</i>		$L^1 = E$	C_1	1
<i>Oś jednokrotna inwersyjna (obrót o 360° i inwersja)</i>		C	i	$\bar{1}$
<i>Oś dwukrotna (obrót o 180°)</i>		L^2_z	C_2	2
<i>Oś dwukrotna inwersyjna – płaszczyzna zwierciadlana (obrót o 180° i inwersja)</i>		P_y	C_s	m
<i>Oś trójkrotna (obrót o 120°)</i>		L^3_z, L^3_{111}	C_3	3
<i>Oś trójkrotna inwersyjna (obrót o 120° i inwersja)</i>		A_3	S_3	$\bar{3}$
<i>Oś czterokrotna (obrót o 90°)</i>		L^4_z	C_4	4
<i>Oś czterokrotna inwersyjna (obrót o 90° i inwersja)</i>		A^4_z	S_4	$\bar{4}$
<i>Oś sześciokrotna (obrót o 60°)</i>		L^6_z	C_6	6
<i>Oś sześciokrotna inwersyjna (obrót o 60° i inwersja)</i>		A^6_z	S_6	$\bar{6}$

Układ trójskośny i jednoskośny

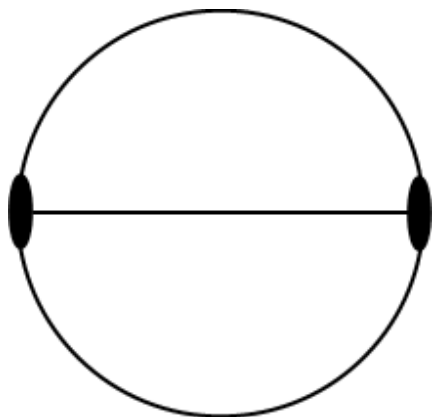


1

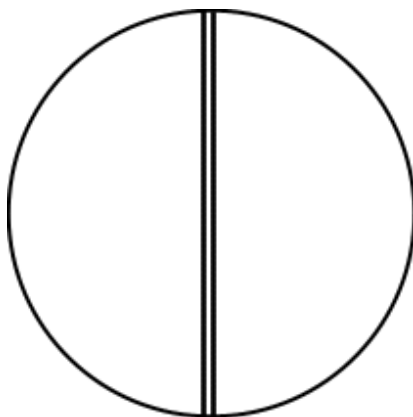


$\bar{1}$

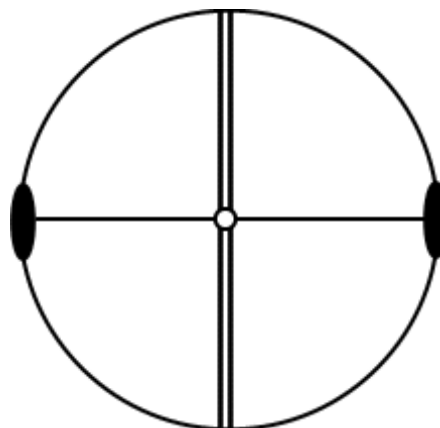
trójskośny



2



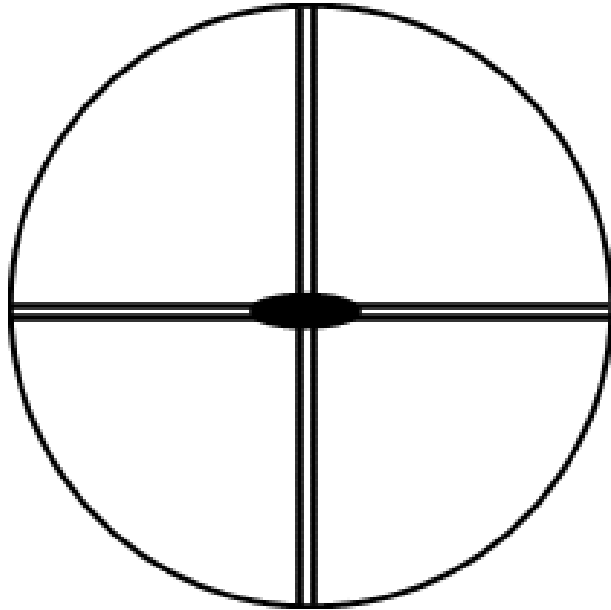
m



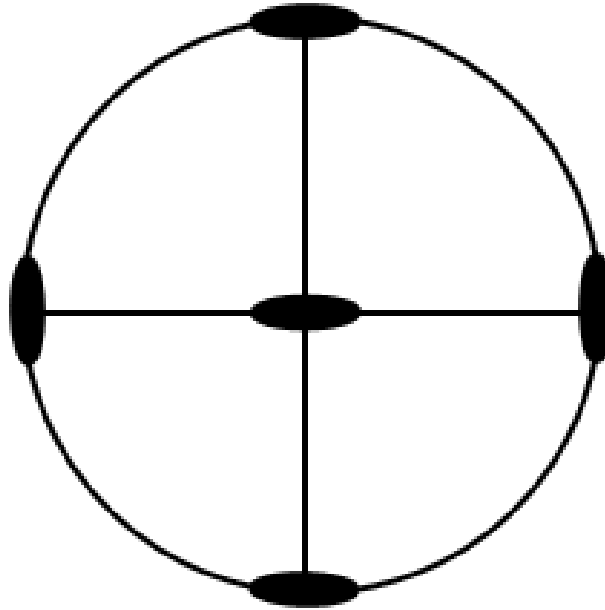
$2/m$

jednoskośny

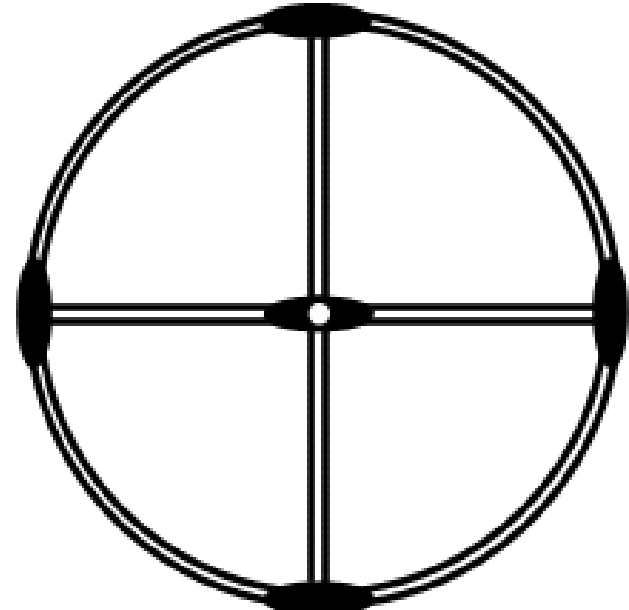
Układ rombowy



mm2

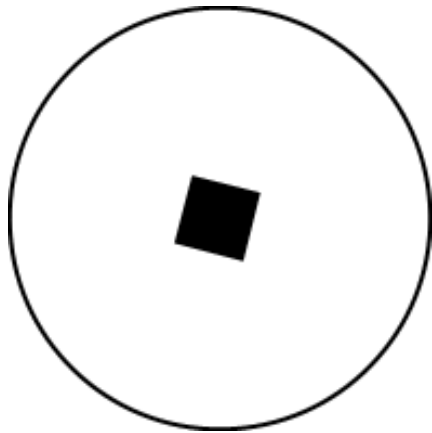


222

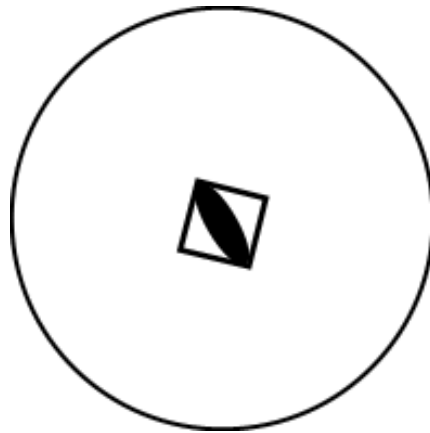


mmm

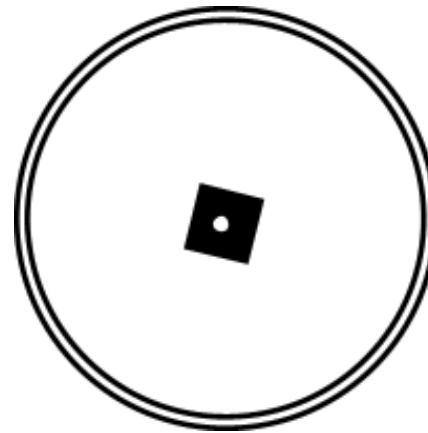
Układ tetragonalny



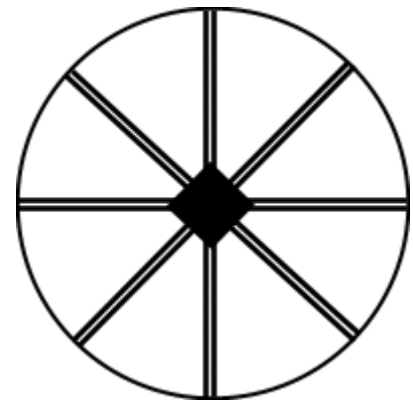
4



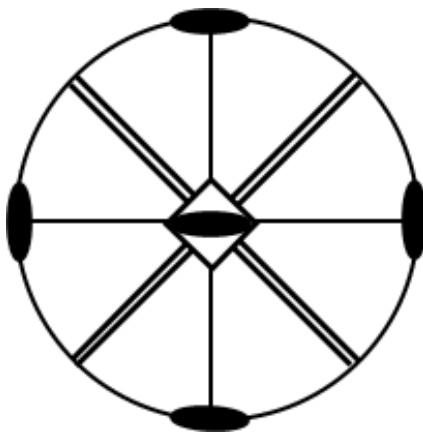
4⁻



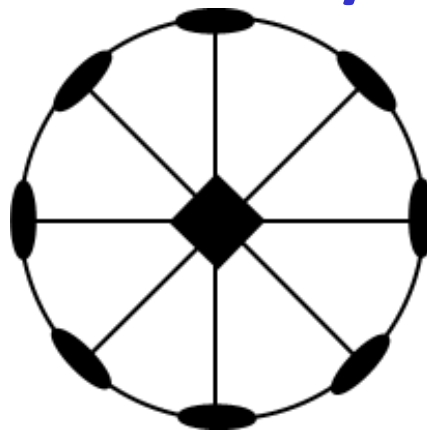
4/m



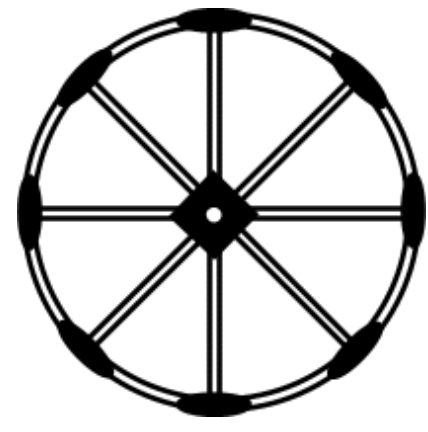
4mm



4mm

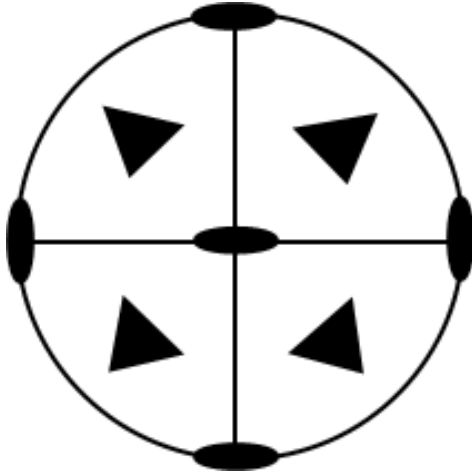


422

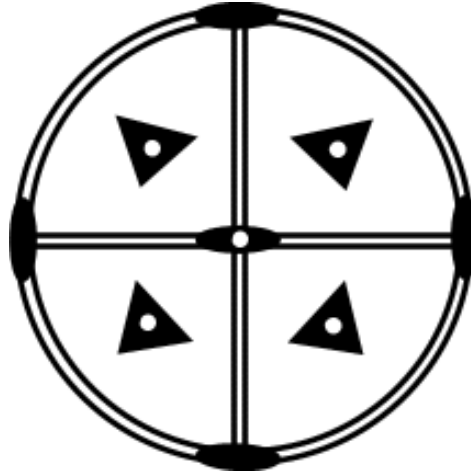


4/mm

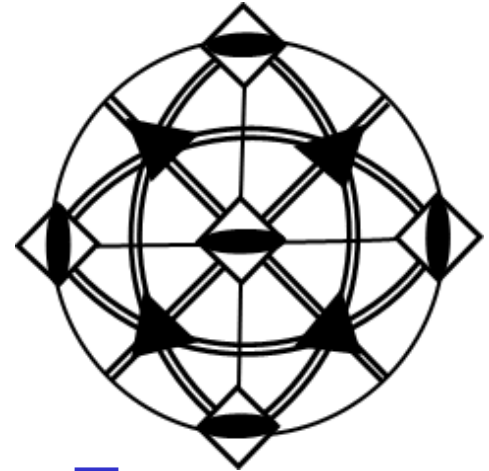
Układ regularny



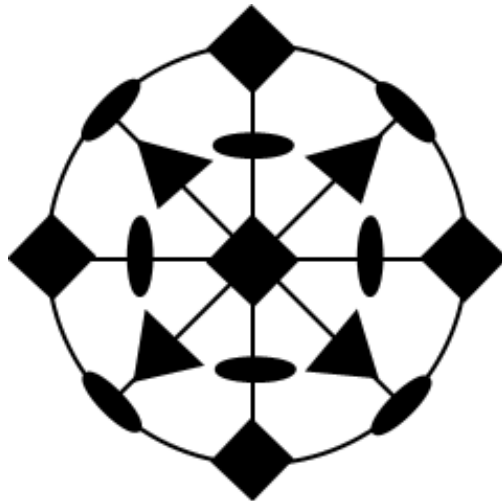
23



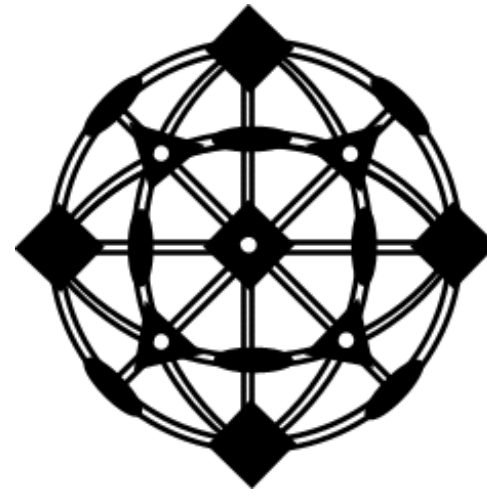
m3



$\bar{4}3m$

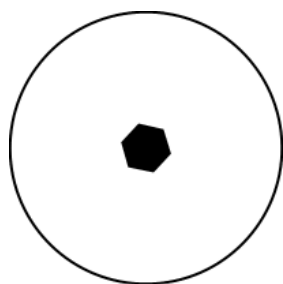


432

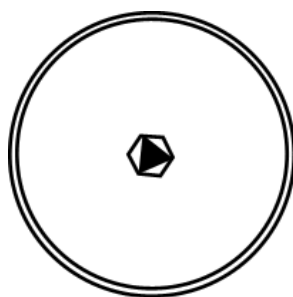


m3m

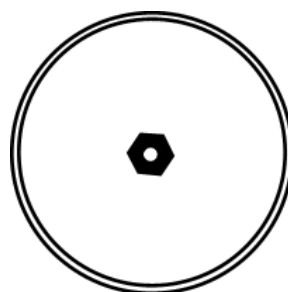
Układ heksagonalny



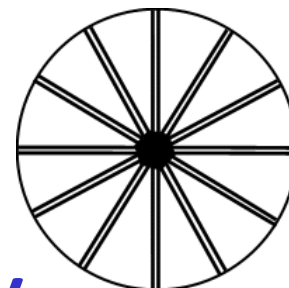
6



6



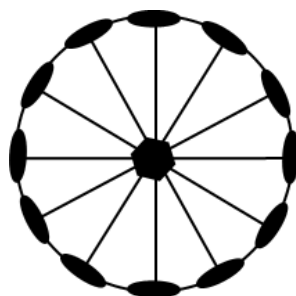
6/m



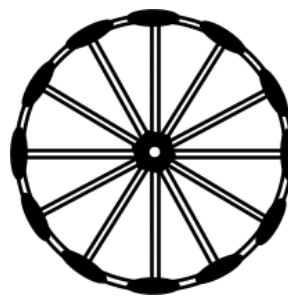
6/mm



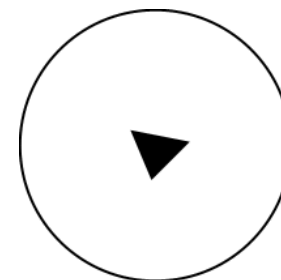
6m2



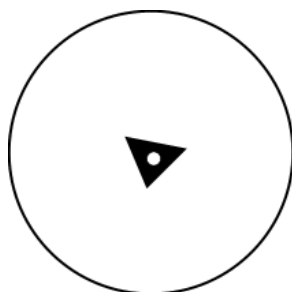
622



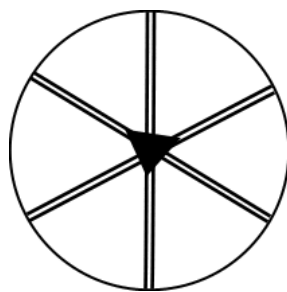
6/mmm



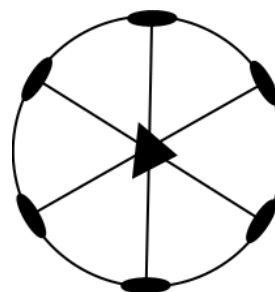
3



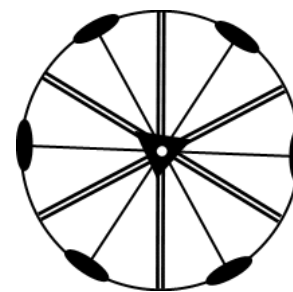
$\overline{3}$



3m



322



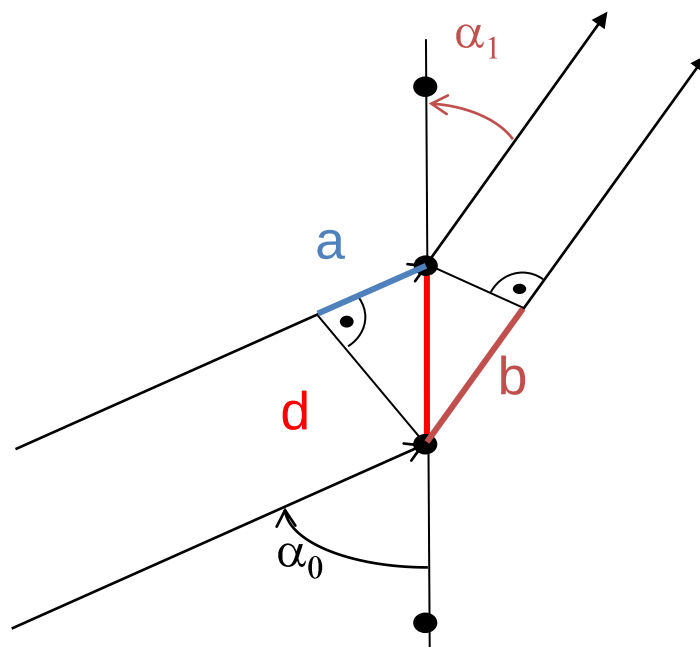
$3m\overline{2}$

32 klasy symetrii oraz bryły je charakteryzujące

Układ	Symbol	Nazwa klasy symetrii
Trójskośny	$\frac{1}{1}$	jednościanu (pedionalna) dwuścianu (pinakoidalna)
Jednoskośny	$\frac{2}{m}$ $\frac{2}{m}$	sfenoidalna daszka jednoskośnego (domatyczna) słupa (pryzmatyczna)
Rombowy	$\frac{2}{mm}$ $\frac{2}{22}$ $\frac{2}{mmm}$	piramidy rombowej czworościanu rombowego (bisfenoidu) podwójnej piramidy (bipiramidy) rombowej
Tetragonalny	$\frac{4}{4}$ $\frac{4}{m}$ $\frac{4}{2m}$ $\frac{4}{mm}$ $\frac{4}{22}$ $\frac{4}{m\ mm}$	piramidy tetragonalnej czworościanu tetragonalnego podwójnej piramidy tetragonalnej skalenoedru tetragonalnego piramidy tetragonalnej trapezoedru tetragonalnego podwójnej piramidy dytetragonalnej
Regularny	$\frac{2}{3}$ $\frac{2}{m3}$ $\frac{2}{43m}$ $\frac{2}{432}$ $\frac{2}{m3m}$	12-ścianu tetraedryczno-pentagonalnego (tritetraedru) 12-ścianu pentagonalnego podwójnego (didodekaedru) czworościanu poszóstnego (heksatetraedru) 24-ścianu pentagonalnego (trioktaedru) 48-ścianu (heksaoktaedru)
Heksagonalny	$\frac{3}{3}$ $\frac{3}{m}$ $\frac{3}{22}$ $\frac{3}{m}$ $\frac{6}{6}$ $\frac{6}{m}$ $\frac{6}{2m}$ $\frac{6}{m}$ $\frac{6}{mm}$ $\frac{6}{22}$ $\frac{6}{m\ mm}$	piramidy trygonalnej romboedru piramidy dytrygonalnej trapezoedru trygonalnego skalenoedru trygonalnego piramidy heksagonalnej podwójnej piramidy trygonalnej podwójnej piramidy dytrygonalnej podwójnej piramidy heksagonalnej piramidy dyheksagonalnej trapezoedru heksagonalnego podwójnej piramidy dyheksagonalnej

Dyfrakcja w sieci krystalicznej

wiązka pada pod kątem α_0 – ugina się pod kątem α_1



$$b - a = n \lambda$$

$$d(\cos \alpha_1 - \cos \alpha_0) = n \lambda$$

Równania Lauego

W trzech wymiarach :

$$h = \mathbf{a}(\cos \alpha_0 - \cos \alpha_1) / \lambda$$

$$k = \mathbf{b}(\cos \beta_0 - \cos \beta_1) / \lambda$$

$$l = \mathbf{c}(\cos \gamma_0 - \cos \gamma_1) / \lambda$$

Max von Laue (1879-1960)
równania -1912, Nobel 1914

Wektorowe równania Lauego

$$\Delta \vec{k} = \vec{k}_{hkl} - \vec{k}_0 \quad \text{zmiana wektora falowego}$$

$$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \quad \text{wektory komórki podstawowej}$$

$$\vec{a} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi h$$

$$\vec{b} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi k$$

$$\vec{c} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi l$$

łącznie

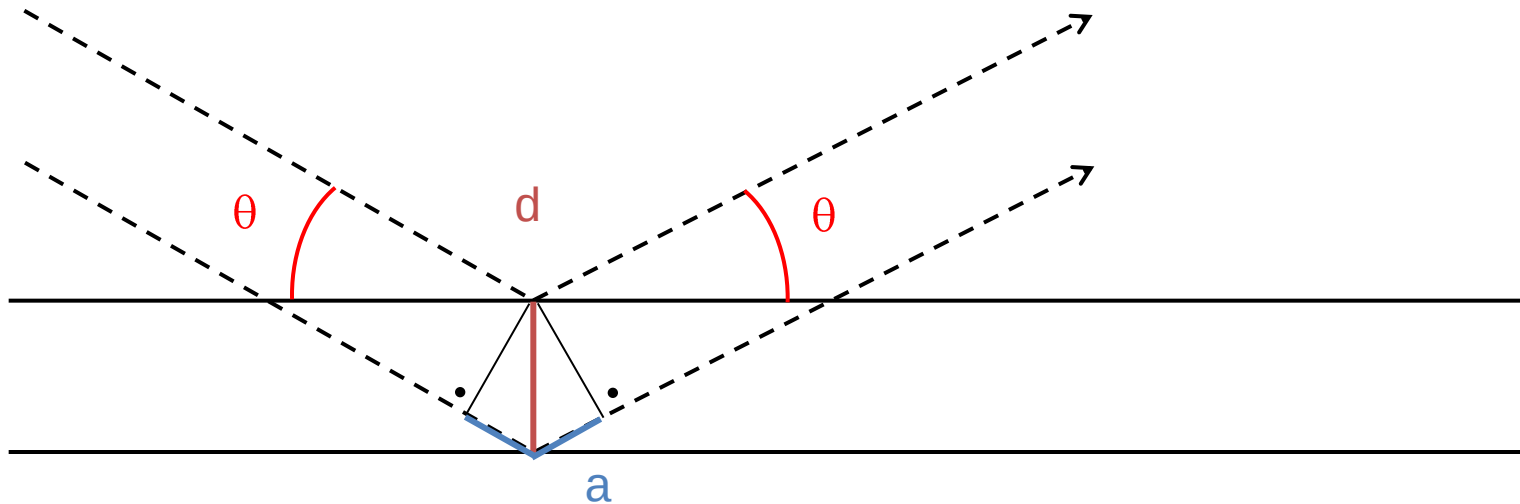
$$\Delta \vec{k} \cdot (\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}) = 2\pi (h + k + l)$$

Równanie Bragga (1913 r.)

Odbicie od płaszczyzn sieciowych

$$2 a = n \lambda, \quad a = d_{hkl} \sin \theta$$

$$n \lambda = 2 d_{hkl} \sin \theta$$



Sieć odwrotna

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ - wektory bazowe sieci rzeczywistej

$\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ - wektory bazowe sieci odwrotnej

$$\vec{P}_{hkl} = h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}$$

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$$

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{b} \cdot (\vec{c} \times \vec{a})}$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})}$$

$$\vec{A} \cdot \vec{a} = \vec{B} \cdot \vec{b} = \vec{C} \cdot \vec{c} = 2\pi$$

$$\vec{A} \cdot \vec{b} = \vec{A} \cdot \vec{c} = 0$$

$$\vec{B} \cdot \vec{a} = \vec{B} \cdot \vec{c} = 0$$

$$\vec{C} \cdot \vec{b} = \vec{C} \cdot \vec{a} = 0$$

Równanie Lauego a równania Bragga

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \Rightarrow \vec{G}_{hkl} \cdot (\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}) = 2\pi(h + k + l)$$

równanie Lauego $\boxed{\Delta\vec{k} \cdot (\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}) = 2\pi(h + k + l)}$

$$\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{G}_{hkl} \Rightarrow \vec{k}_{hkl} = \vec{k}_0 + \vec{G}_{hkl}}$$

$$2\vec{k}_0 \cdot \vec{G}_{hkl} = G_{hkl}^2$$

$$2 \frac{2\pi}{\lambda} \cdot G_{hkl} \cdot \sin \vartheta = G_{hkl}^2 \Rightarrow 2 \sin \vartheta = \frac{G_{hkl}}{2\pi} \lambda$$

$$G_{hkl} d_{hkl} = 2\pi$$

$$\boxed{2d_{hkl} \sin \vartheta = \lambda}$$

Płaszczyzny międzysieciowe a typ układu krystalograficznego

$$d_{hkl} = d_{hkl}(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}; h, k, l)$$

regularny

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

tetragonalny

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

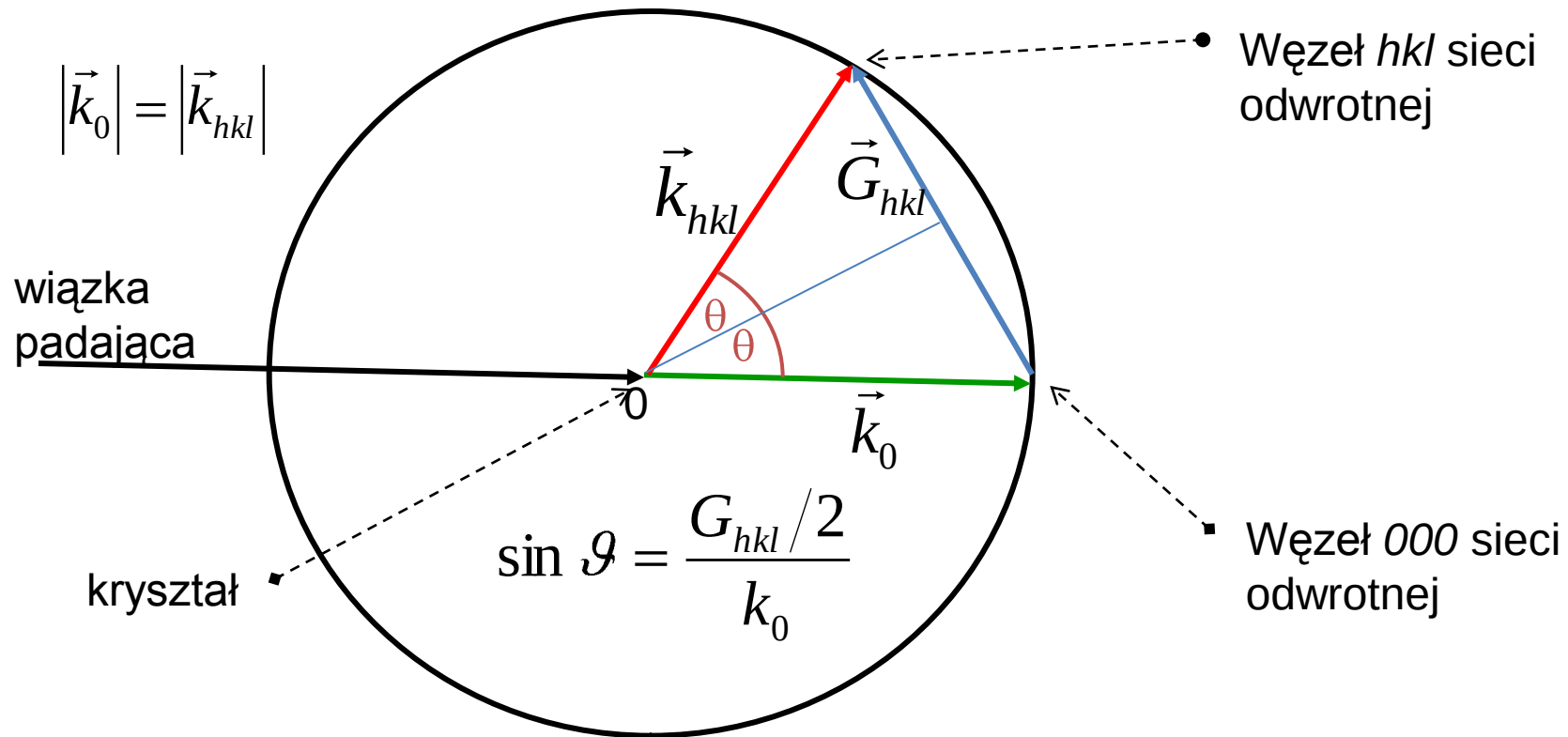
heksagonalny

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Kula Ewalda

związek sieci odwrotnej z równaniem Bragga

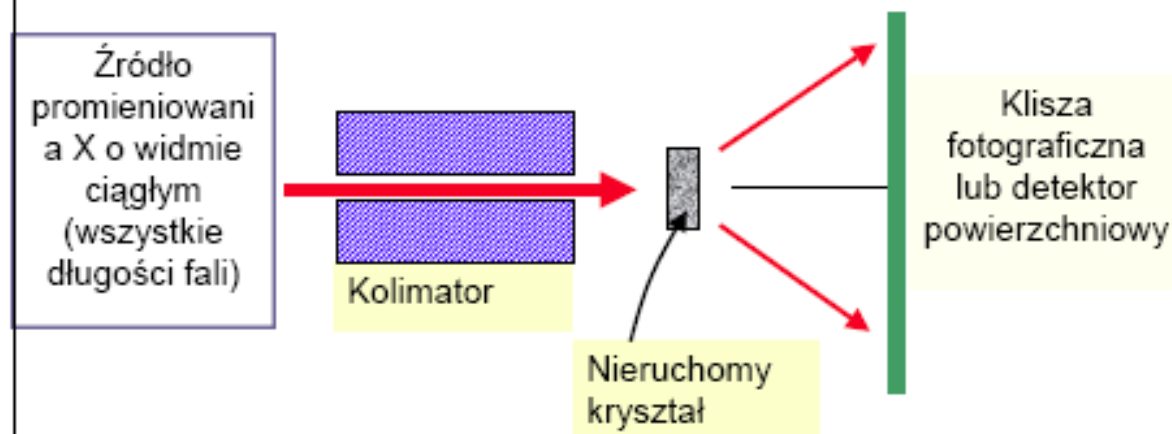
- konstrukcja Ewalda



Dyfrakcyjne metody badania kryształów

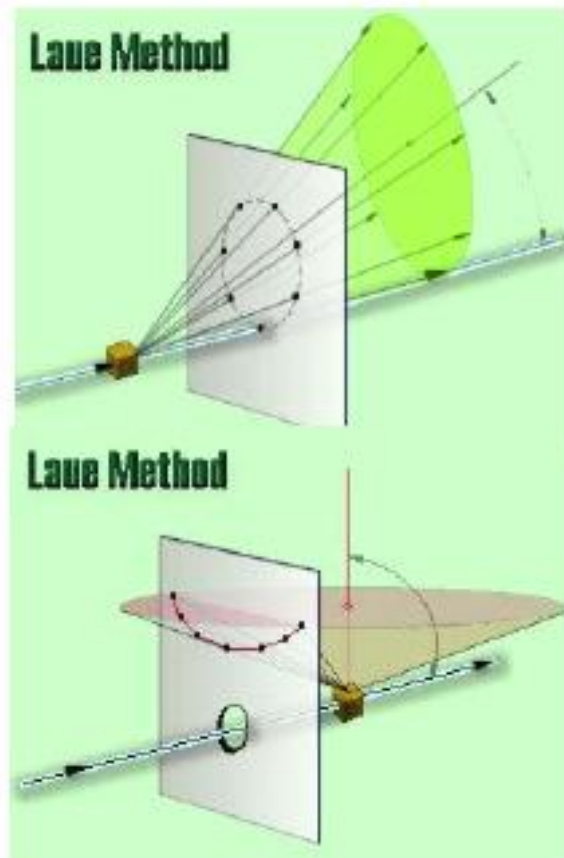
- Metody Lauego
 - metoda promieni przechodzących
 - metoda promieni zwrotnych
- Metoda Braggów
- Metoda obracanego kryształu
- Metoda proszkowa Debye'a, Scherrerera i Hulla

Metoda Lauego

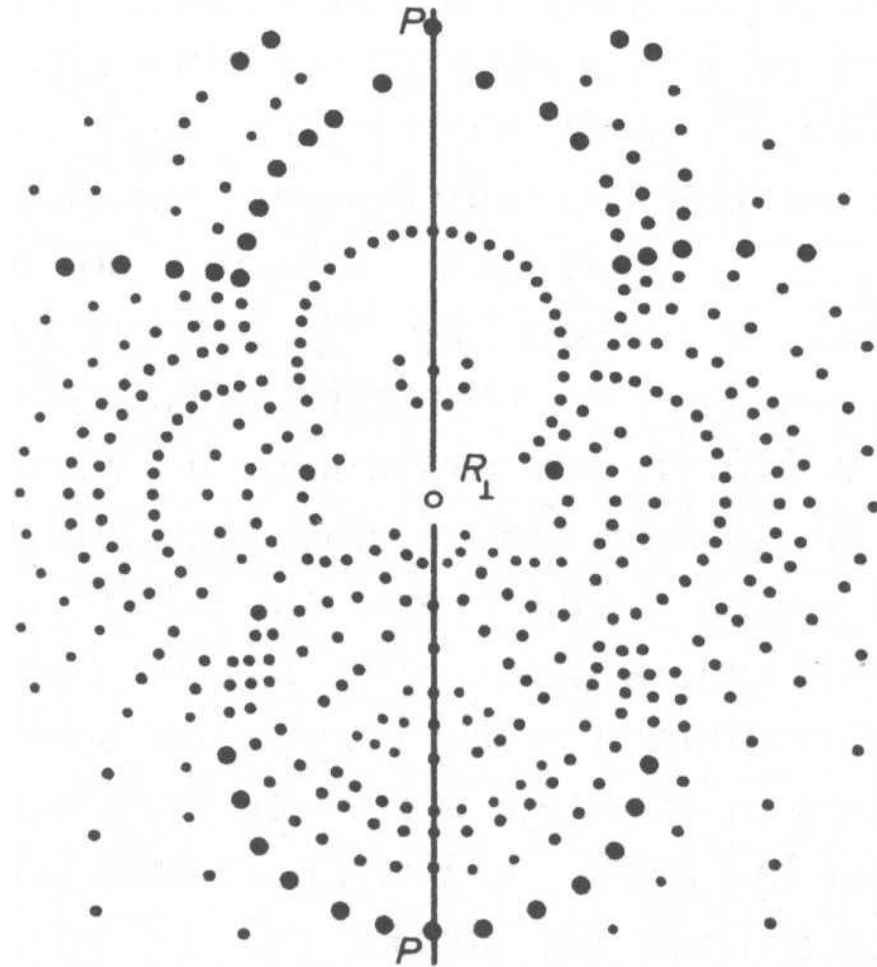


Metoda Lauego

Rejestruje się promienie albo
po przejściu przez kryształ,
albo odbite od kryształu



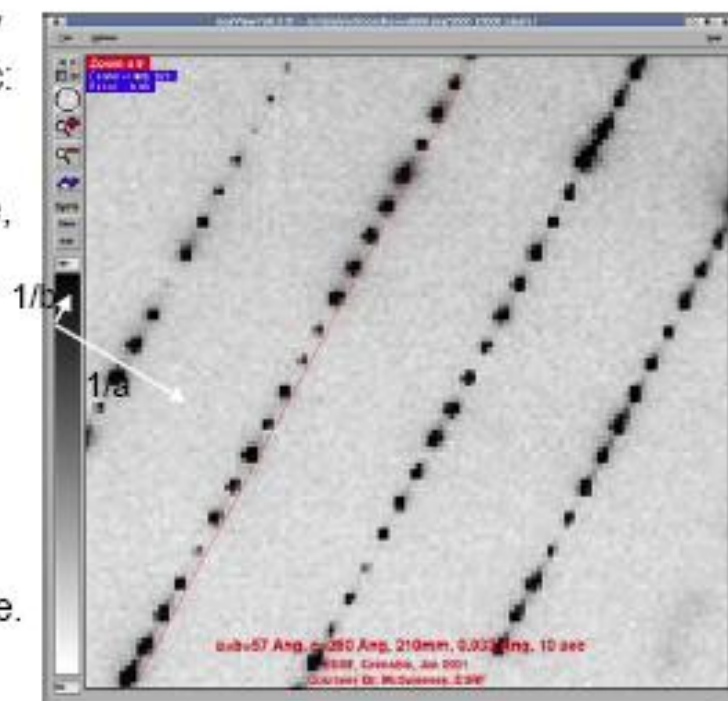
Dyfraktoqram Lauego



Metoda Lauego

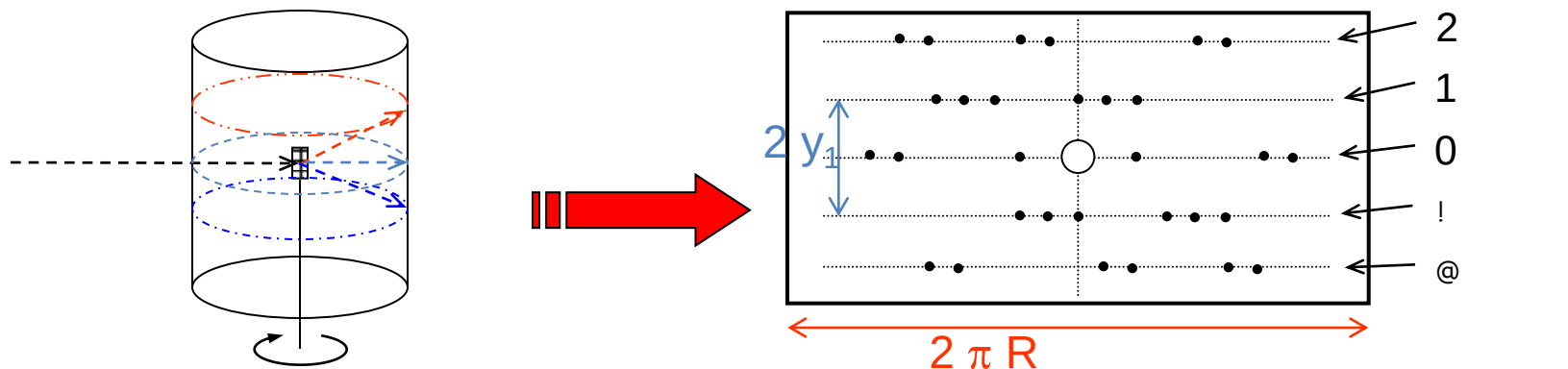
Na podstawie odległości między punktami można wyznaczyć:

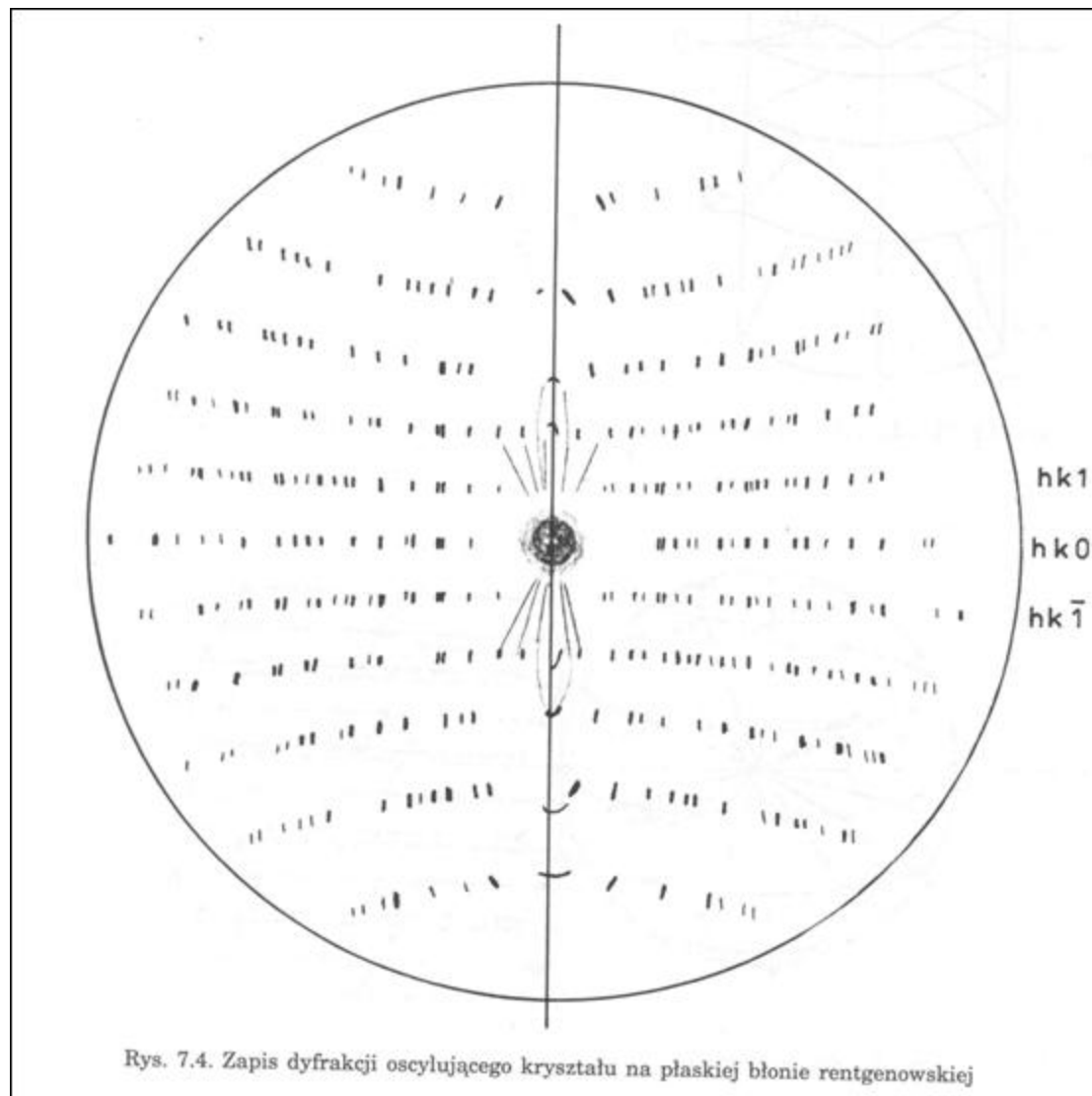
- a) odległości międzypłaszczyznowe, a co za tym idzie, rozmiar komórki elementarnej
- b) Orientację kryształu
- c) Symetrię komórki elementarnej
- d) Niektóre defekty strukturalne.



Metoda obracanego kryształu

- Kasetta cylindryczna z błoną rentgenowską
- Kryształ jest obracany lub oscyluje w zakresie kątów $\pm 2 \div \pm 20^\circ$ wokół osi Z
- Kryształ jest zorientowany osią krystalograficzną w kierunku Z





Interpretacja rentgenogramu

- Powstawanie warstwic jest analogią do powstawania stożków przy dyfrakcji od prostej sieciowej
- warstwica zerowa zawiera refleksy $hk0$, warstwica pierwsza $hk1$ itd.
- obracanie kryształu umożliwia ustawienie płaszczyzn w położenie dyfrakcyjne
- odległość warstwic wyznacza okres identyczności w kierunku osi obrotu Z

Cechy metody obracanego kryształu

- W zasadzie można by wyznaczyć wszystkie stałe sieciowe ***a***, ***b***, ***c*** odpowiednio mocując kryształ w trzech położeniach
- Informacja o dwuwymiarowej warstwiczy sieci odwrotnej jest jednowymiarowa