

# Bravaiho mřížka

1. Takové periodické uspořádání bodů v prostoru, kdy každý bod má identické okolí.

2. Uspořádání bodů v prostoru, popsané rovnicí

$$\mathbf{R}_n = n\mathbf{a} \quad (1\text{D})$$

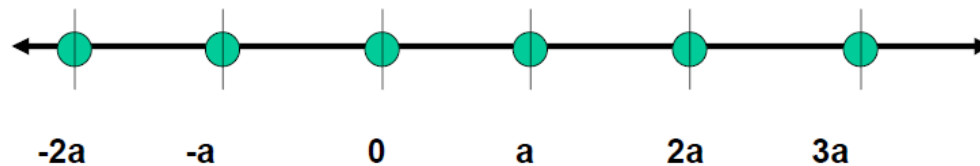
$$\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 \quad (2\text{D})$$

$$\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (3\text{D})$$

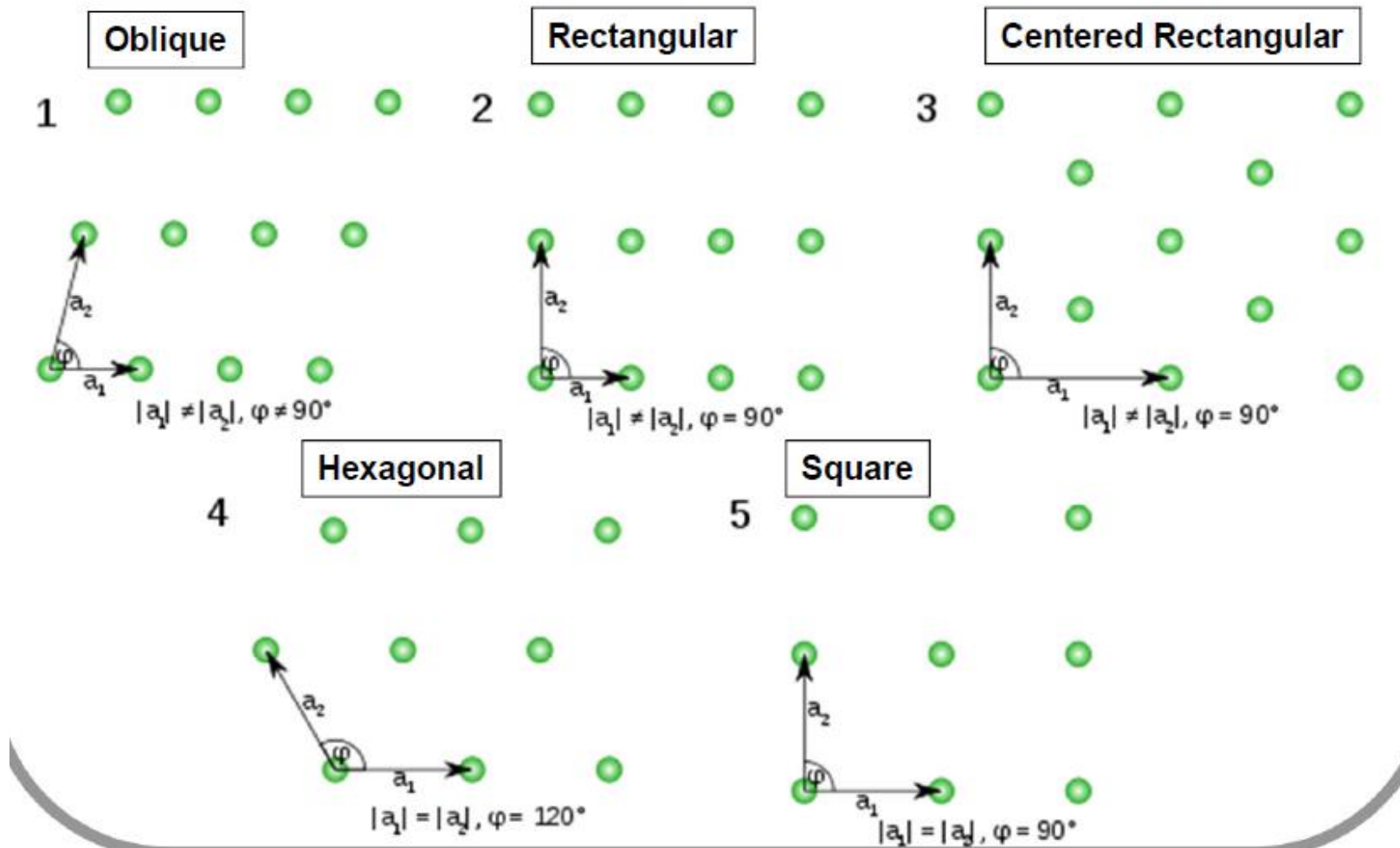


August Bravais (1811-1863)

**1D: Only one Bravais Lattice**



# Bravaiho mřížka – 2D



# Symetrie Bravaiho mřížky

Bodová grupa – soubor operací symetrie, které převádějí mřížku samu v sobě a zachovávají alespoň jeden pevný bod (střed symetrie, rovina zrcadlení, rotační osa)

Prostorová grupa (bodová grupa + translace přes všechny vektory mřížky)

## 3D

7 bodových grup – 7 krystalových systémů

14 grup symetrie – 14 Bravaiho mřížek

# 7 krystalových systémů

| System | Požadovaná symetrie |
|--------|---------------------|
|--------|---------------------|

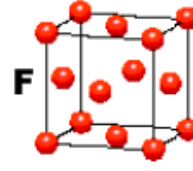
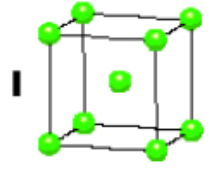
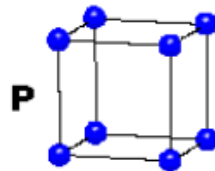
- |                  |                   |
|------------------|-------------------|
| • Kubický        | tři 4-četné osy   |
| • Tetragonální   | jedna 4-četná osa |
| • Orthorhombický | tři 2-četné osy   |
| • Hexagonální    | jedna 6-četná osa |
| • Rhomboedrický  | jedna 3-četná osa |
| • Monoklinický   | jedna 2-četná osa |
| • Triklinický    | žádná             |

# Bravaiho mřížka – 3D

## CUBIC

$$a = b = c$$

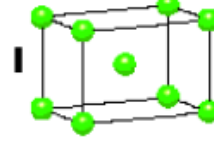
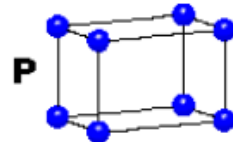
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



## TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

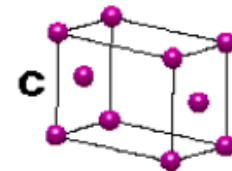
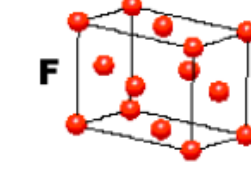
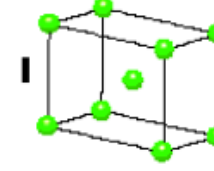
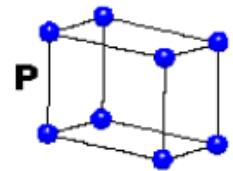
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



## ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

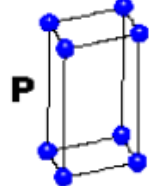


## HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

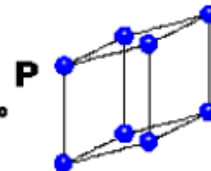
$$\gamma = 120^\circ$$



## TRIGONAL

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

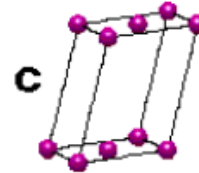
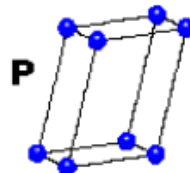


## MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

$$\beta \neq 120^\circ$$



## TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



### 4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

# Seven unique unit cell shapes that can be stacked together to fill three-dimensional space

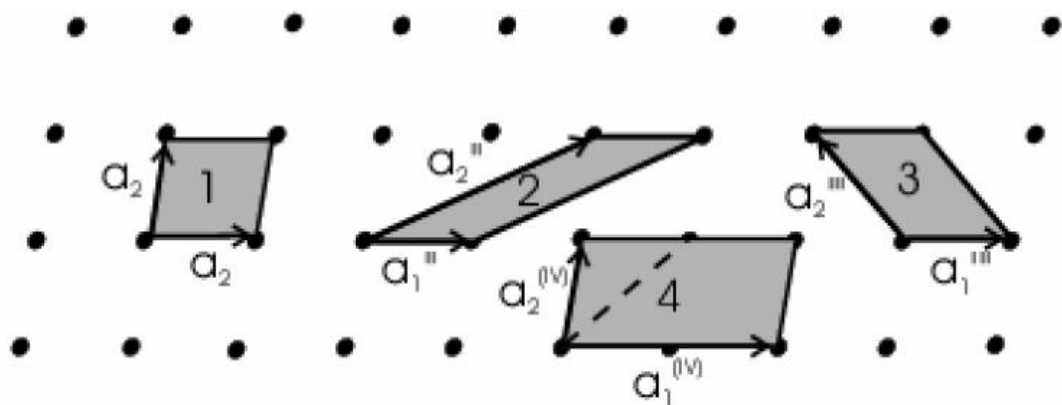
**TABLE 3-1** ■ *Characteristics of the seven crystal systems*

| Structure                   | Axes              | Angles between Axes                                                               |
|-----------------------------|-------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| Cubic                       | $a = b = c$       | All angles equal $90^\circ$                                                       |
| Tetragonal                  | $a = b \neq c$    | All angles equal $90^\circ$                                                       |
| Orthorhombic                | $a \neq b \neq c$ | All angles equal $90^\circ$                                                       |
| Hexagonal                   | $a = b \neq c$    | Two angles equal $90^\circ$ .<br>One angle equals $120^\circ$ .                   |
| Rhombohedral<br>or trigonal | $a = b = c$       | All angles are equal and<br>none equals $90^\circ$                                |
| Monoclinic                  | $a \neq b \neq c$ | Two angles equal $90^\circ$ .<br>One angle ( $\beta$ ) is not equal to $90^\circ$ |
| Triclinic                   | $a \neq b \neq c$ | All angles are different and<br>none equals $90^\circ$                            |

# Primitivní vektory, primitivní buňka

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 - \text{primitivní vektory}$$

Volba není jednoznačná



1D

$$\Omega_1 = |\bar{a}_1|$$

2D

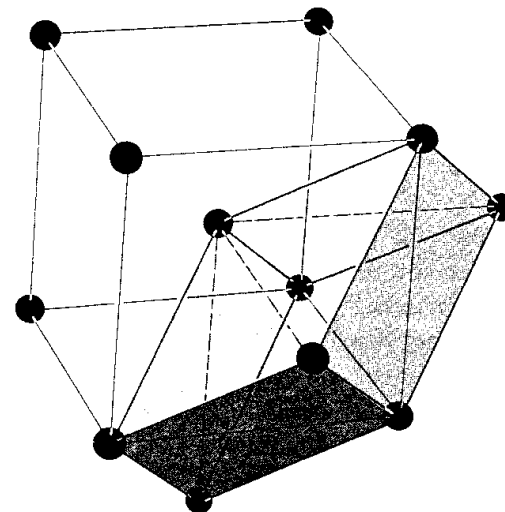
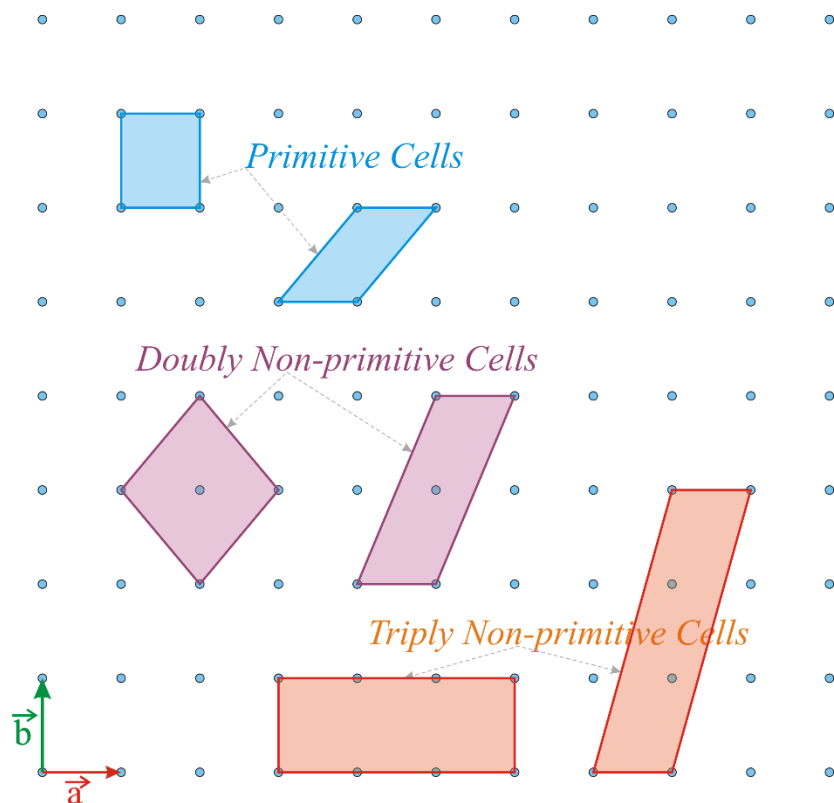
$$\Omega_2 = |\bar{a}_1 \times \bar{a}_2|$$

3D

$$\Omega_3 = |\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)|$$

Primitivní buňka – část prostoru, která při translaci přes **všechny** vektory Bravaisovy mřížky vyplní celý prostor bez překryvů a prázdných míst. Obecně nemá symetrii BM. Její objem obsahuje právě jeden mřížkový bod.

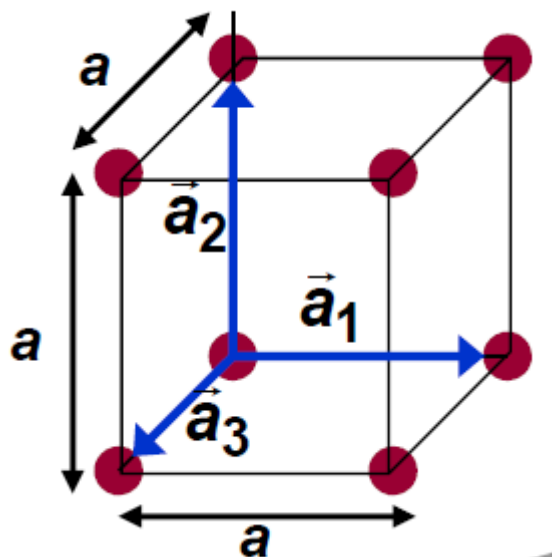
# Elementární buňka



Elementární buňka – část prostoru, která při translaci přes **některé** vektory Bravaiho mřížky vyplní celý prostor bez překryvů a prázdných míst. Zpravidla se volí tak aby měla symetrii Bravaiho mřížky. Její objem obsahuje více než jeden mřížkový bod.

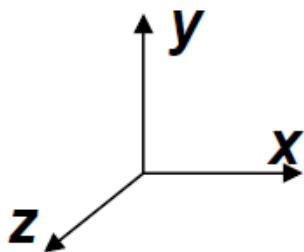
# Bravaiho mřížka – 3D

Kubická prostá

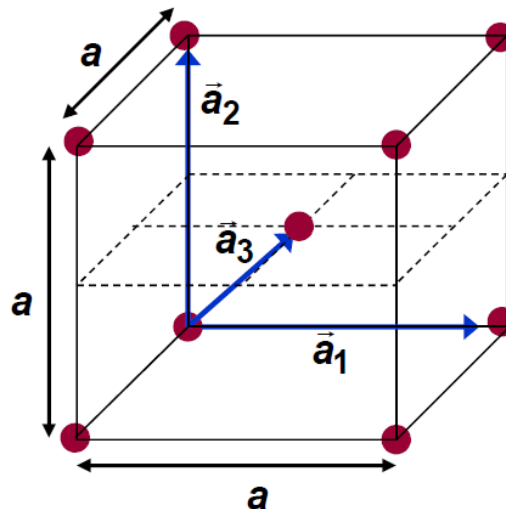


$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

$n_i$  jsou celá čísla



Kubická prostorově centrovaná - BCC



$$\mathbf{a}_1 = a \cdot \mathbf{x}$$

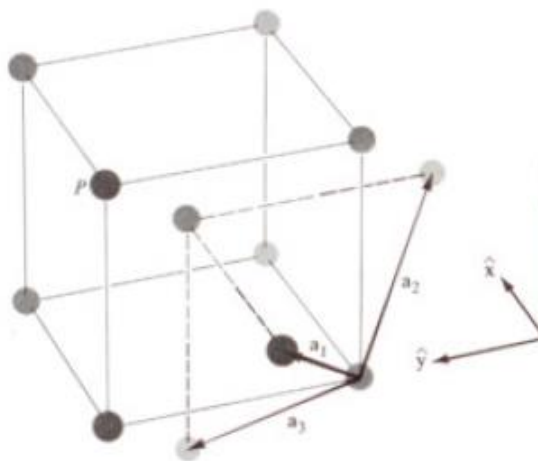
$$\mathbf{a}_2 = a \cdot \mathbf{y}$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{y} + \mathbf{z})$$

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\mathbf{x} + \mathbf{y} + \mathbf{z})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{z})$$

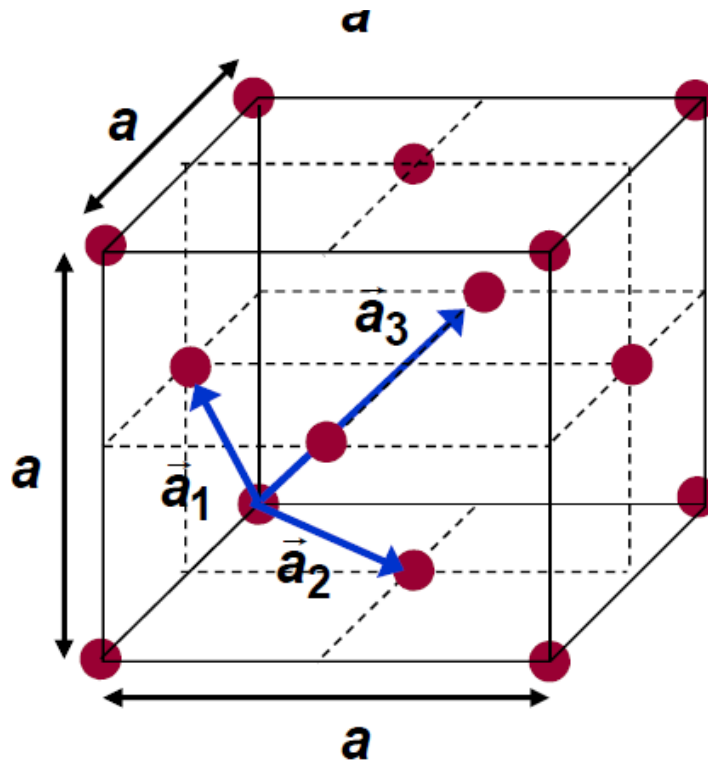
$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{y} - \mathbf{z})$$



S touto mřížkou krystalizují  
např. Fe, W, K

# Bravaiho mřížka - FCC

Kubická plošně centrovaná - FCC



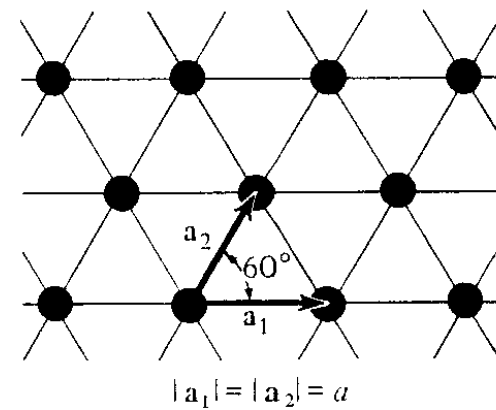
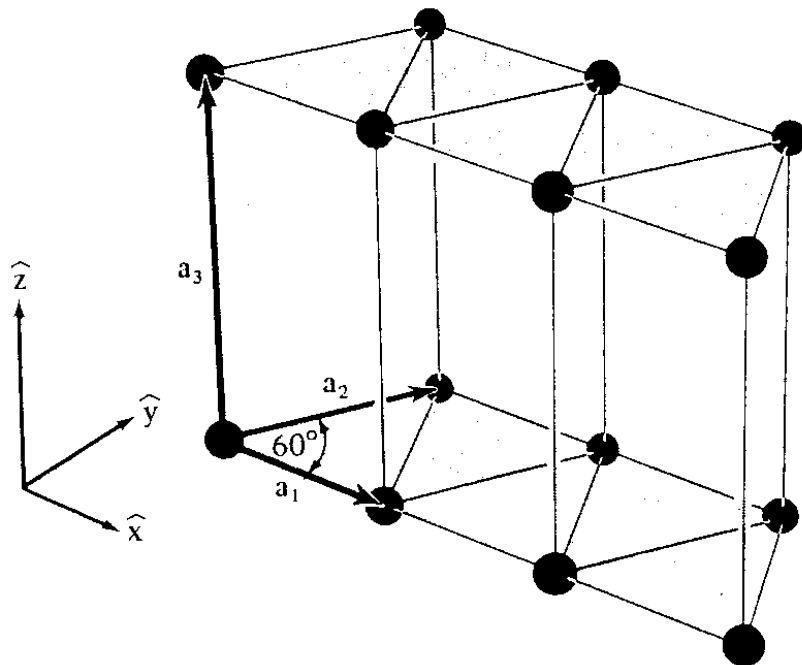
$$a_1 = \frac{a}{2}(y + z)$$

$$a_2 = \frac{a}{2}(x + z)$$

$$a_3 = \frac{a}{2}(x + y)$$

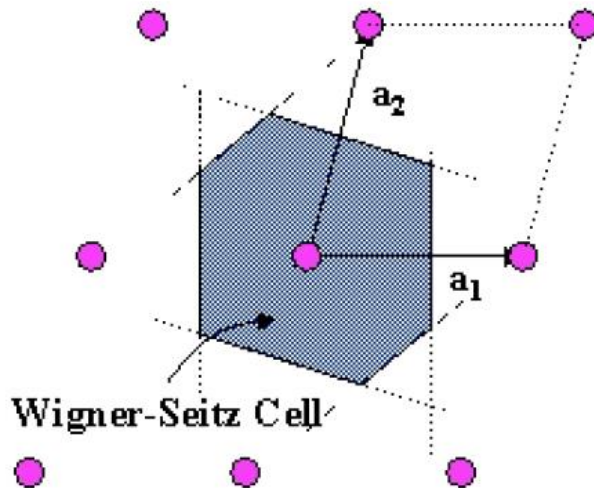
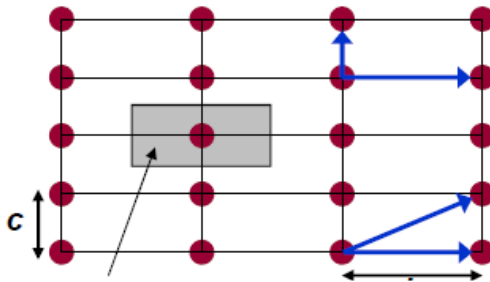
S touto mřížkou krystalizují např. Au, Ag, Pt, Al

# Hexagonální BM



# Wigner-Seitzova primitivní buňka

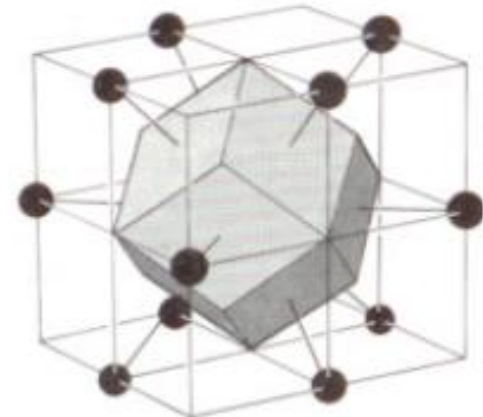
Oblast prostoru, která jen bližší vybranému bodu BM než k jakémukoliv jinému bodu mřížky. Má plnou symetrii mřížky.



BCC



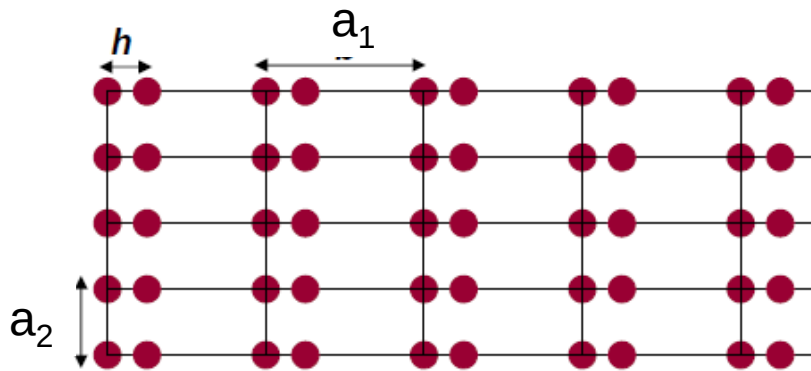
FCC



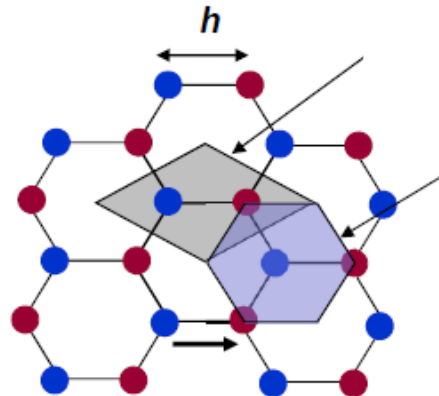
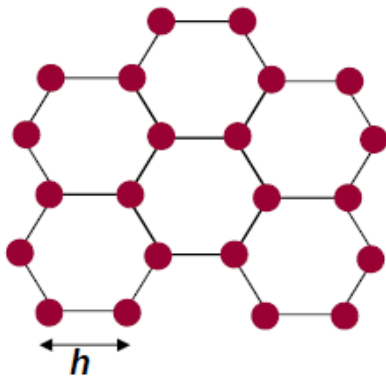
# Krystalová struktura

Krystalová struktura = mřížka + báze

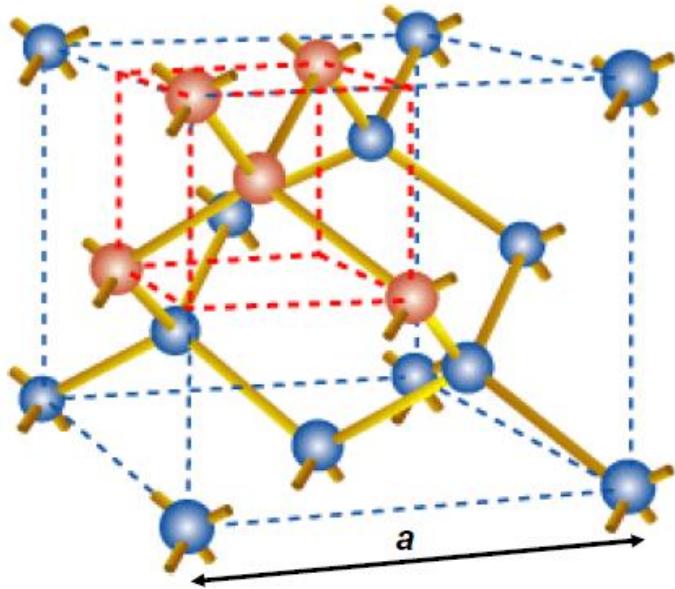
Báze = atom, skupina atomů, molekula



To není Bravaiho mřížka. Každý bod nemá stejné okolí. Dá se popsat jako rektangulární 2D BM s dvouatomovou bází.



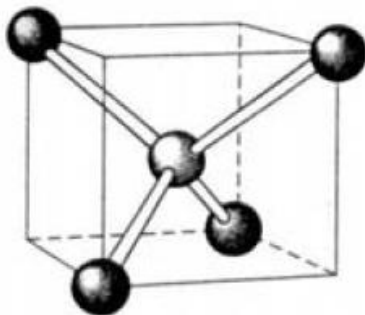
# Krystalová struktura diamant, sfalerit



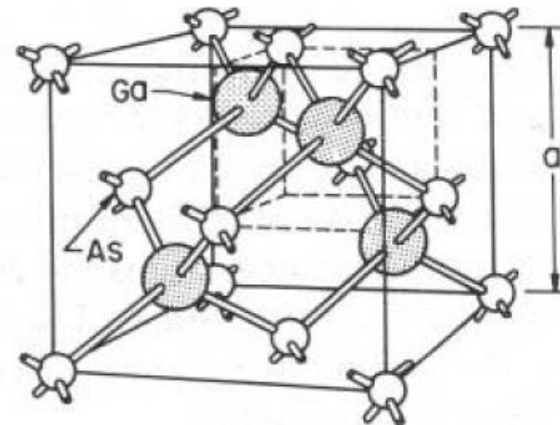
Diamantová – 2 FCC posunutě  
 $\frac{1}{4}$  tělesové úhlopříčky

BM- FCC + báze dvou atomů  
Pokud jsou oba atomy báze stejné,  
jedná se o strukturu diamantu – krystalizují  
v ní např. C, Si, Ge.

Pokud jsou oba atomy různé, jedná  
se strukturu sfaleritu – ZnS. V této  
struktúře krystalizuje např. GaAs, CdTe,  
InP, AlAs.

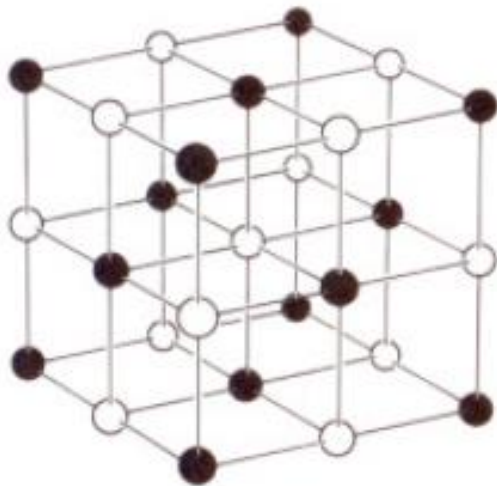


Bond angle =  $109.5^\circ$



# Structure NaCl a CsCl

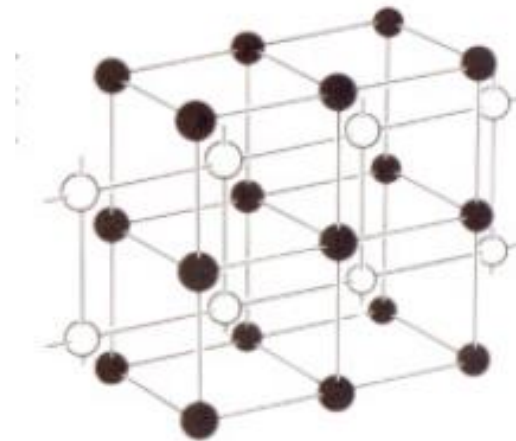
NaCl



BM kubická prostá, periodicky se střídají dva různé atomy

Krystalizuje v ní např. NaCl, NaBr, AgCl, MgO, LiF

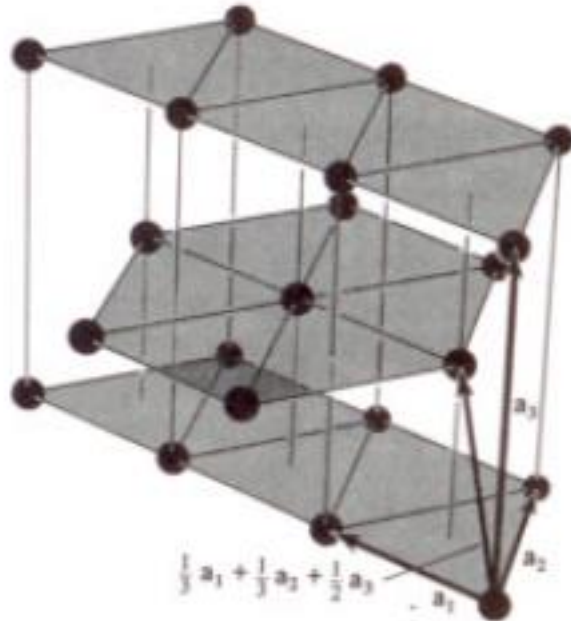
CsCl



BM kubická prostorově centrovaná se dvěma alternujícími atomy

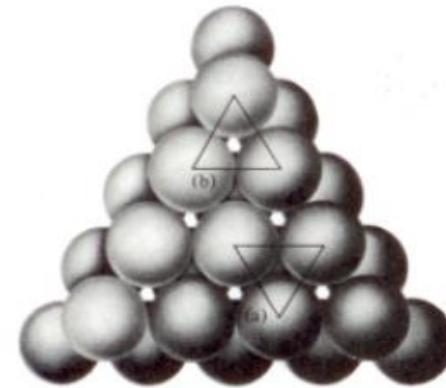
Krystalizuje v ní např. CdCl, CsBr, TlBr

# Hexagonální struktura s nejtěsnějším uspořádáním (hcp)



Dvě hexagonální prosté mřížky  
navzájem posunuté o

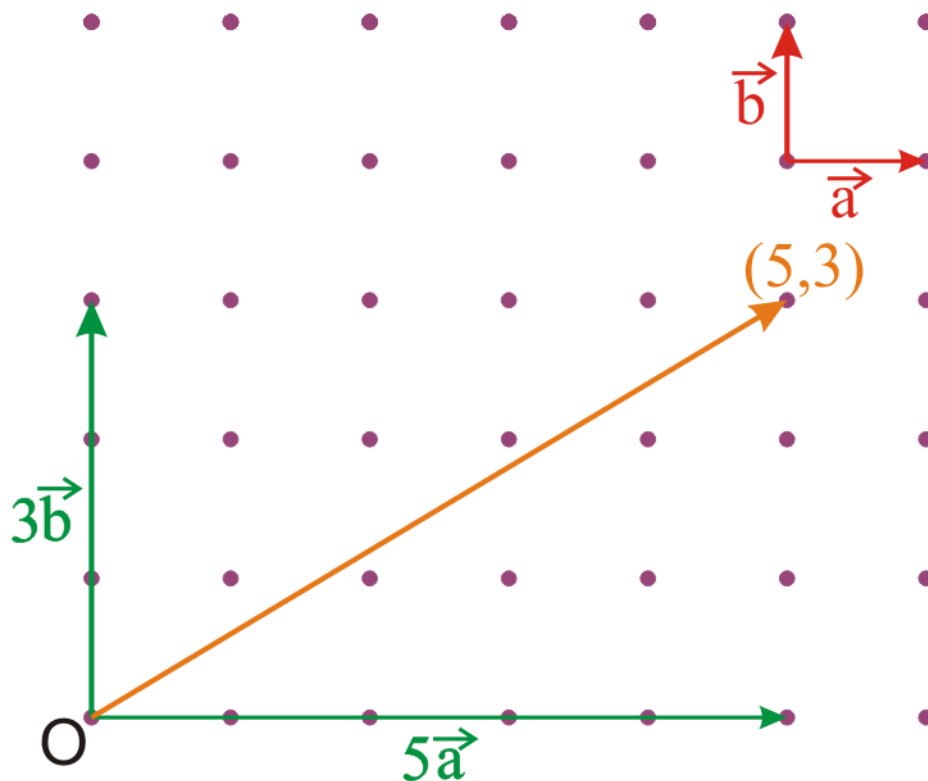
$$\frac{a_1}{3} + \frac{a_2}{3} + \frac{a_3}{3}$$



Krystalizuje v ní např. Cd, Zn, Mg,  
Be. Ce

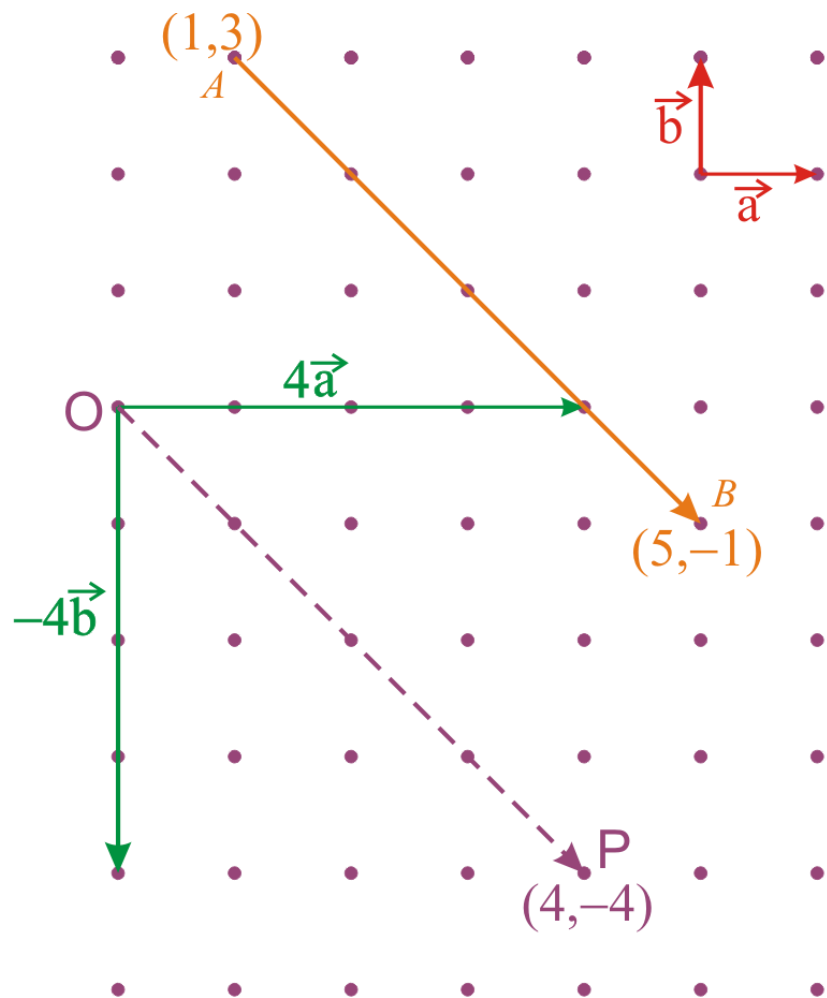
# Millerovy indexy

Používají se k specifikaci krystalografických směrů nebo rovin



## Jak najít Millerovy indexy pro libovolný směr?

- ❑ Odečtou se souřadnice konečného a počátečního bodu vektoru vyznačujícího daný směr.  
→ např. pokud je počáteční bod  $A(1,3)$  a konečný bod  $B(5,-1)$  → rozdíl je  $(4, -4)$



- ❑ Výsledek se vloží do hranatých závorek, minus se nahradí čárkou nad číslem →  $[4\bar{4}]$

- ❑ Společný faktor se vytkne před závorku →  $4[1\bar{1}]$

- ❑ Velikost a směr →  $4[1\bar{1}]$

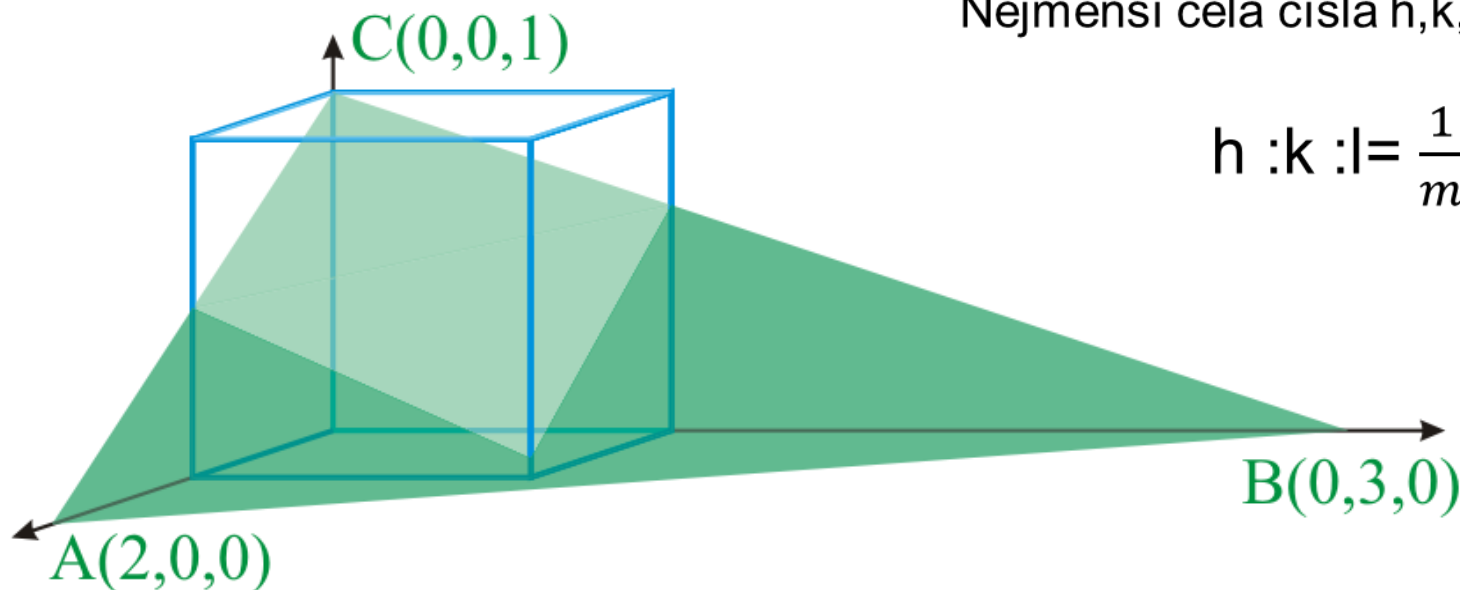
- ❑ Jen směr →  $[1\bar{1}]$

# Millerovy indexy pro roviny

$(m,n,p)$  – Schoenfliesovy indexy roviny

Millerovy indexy –  
Nejmenší celá čísla  $h,k,l$ , pro něž platí

$$h : k : l = \frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p}$$



- ❑ Najdou se průsečíky s osami  $\rightarrow 2 \ 3 \ 1$
- ❑ Spočtou se  $\rightarrow 1/2 \ 1/3 \ 1$
- ❑ Převeďte se na nejmenší společný jmenovatel  $\rightarrow 3 \ 2 \ 6$
- ❑ Výsledek se zapíše v kulatých závorkách  $\rightarrow (326)$

# Brillouinova zona

BCC



(a)

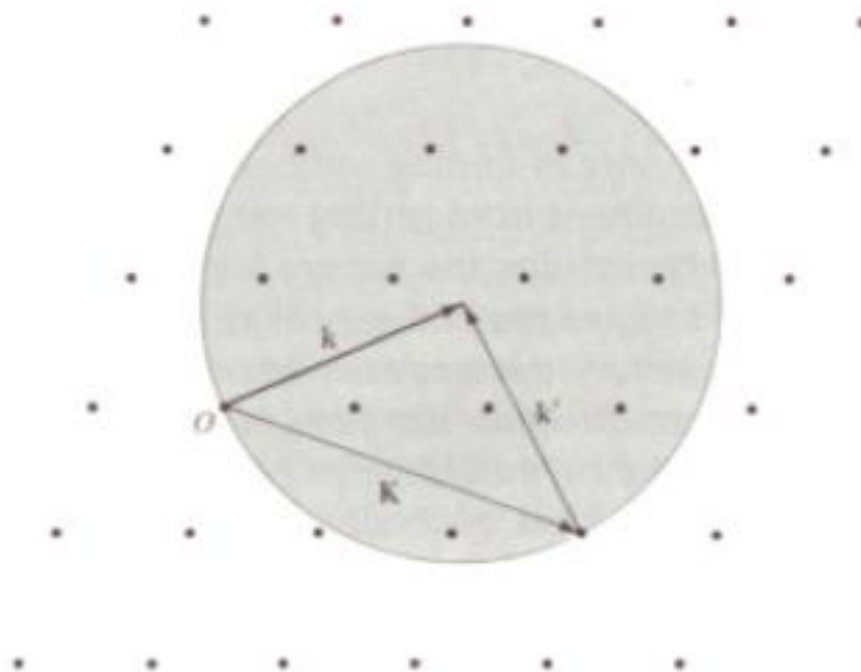
FCC



(b)

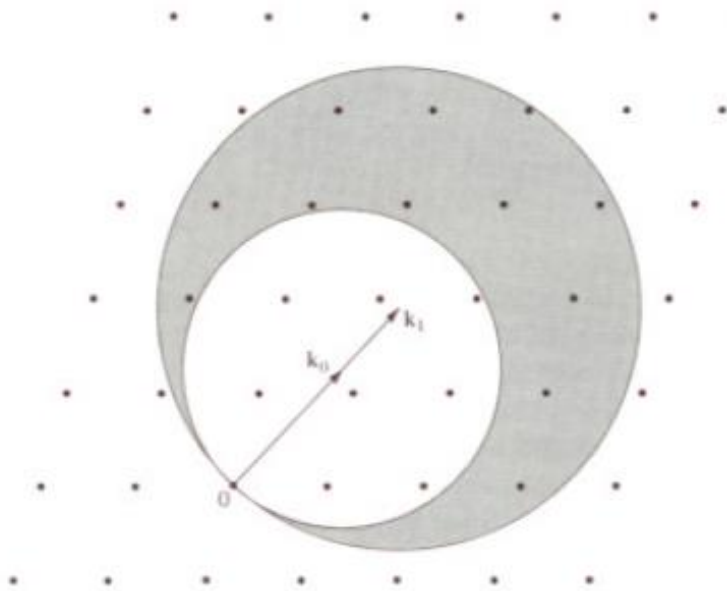
Brillouinova zóna je Wignerova - Seitzova Seitz buňka v recipoké mřížce

# Ewaldova konstrukce (I)

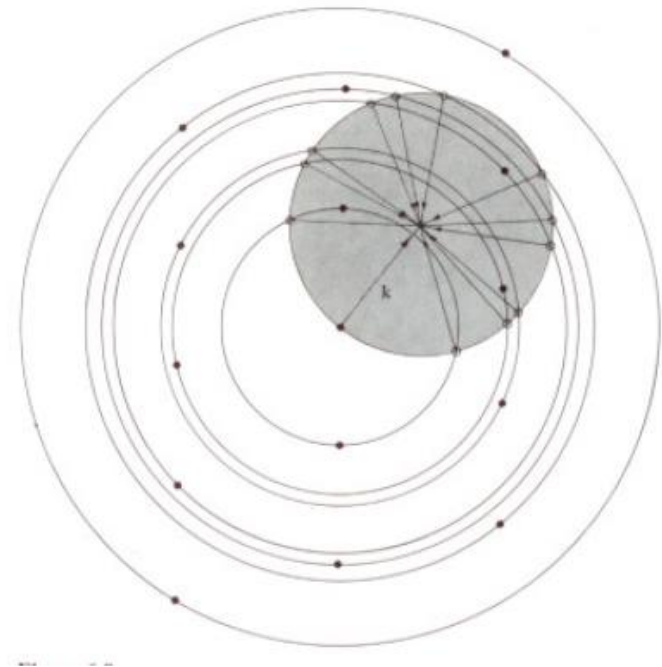


If  $\mathbf{G}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'$ , radiation is diffracted

# Ewaldova konstrukce(II)

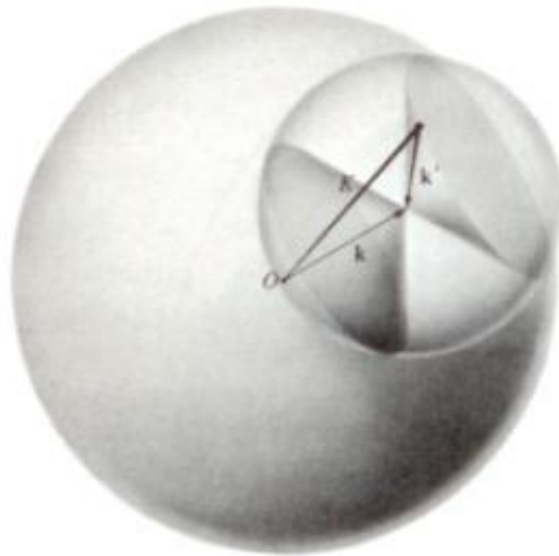


Laueho metoda

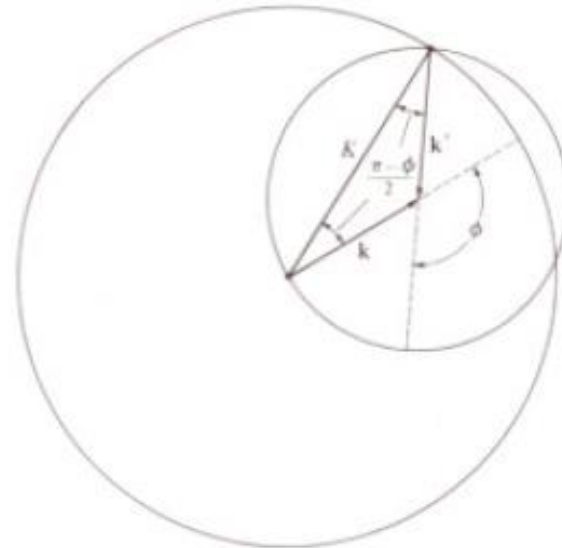


Metoda rotujícího krystalu

# Ewaldova konstrukce (III)



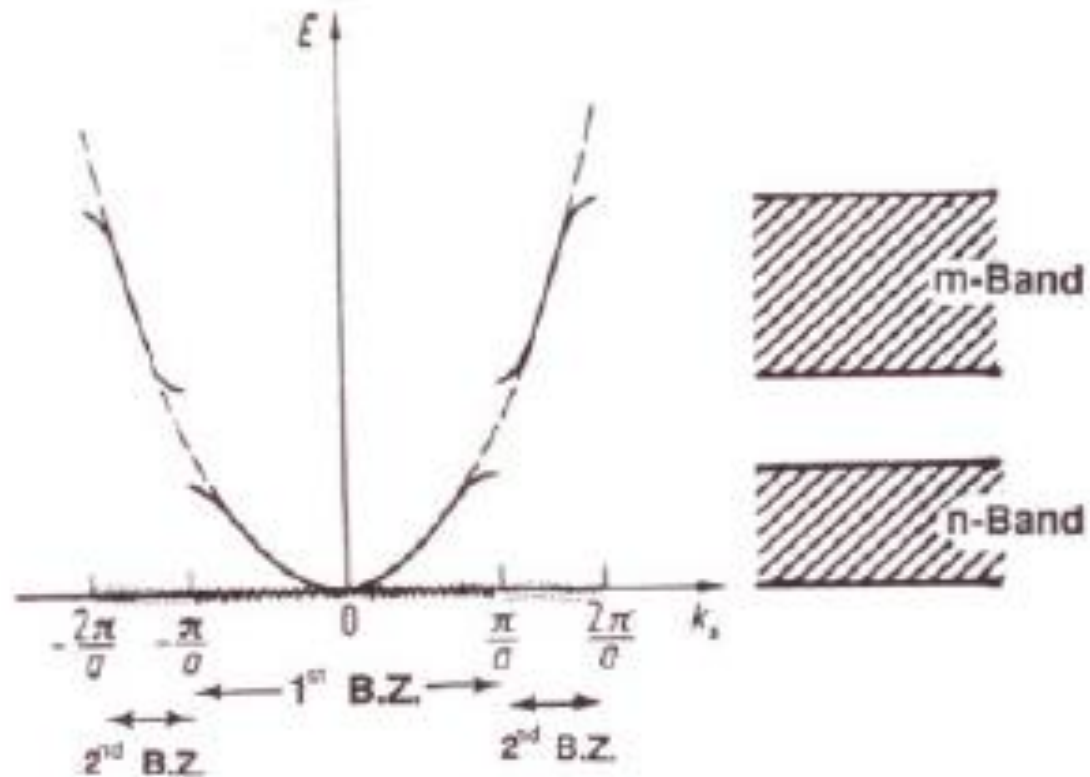
(a)



(b)

Prášková metoda

# Rozšířené pásové schéma



# Periodické pásové schéma

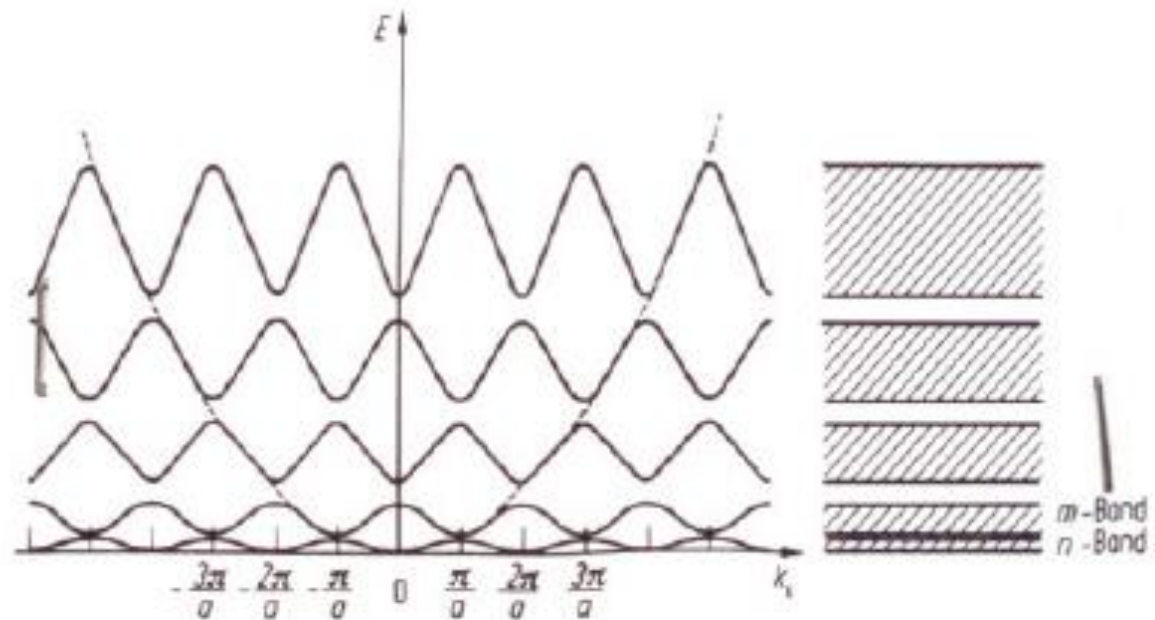
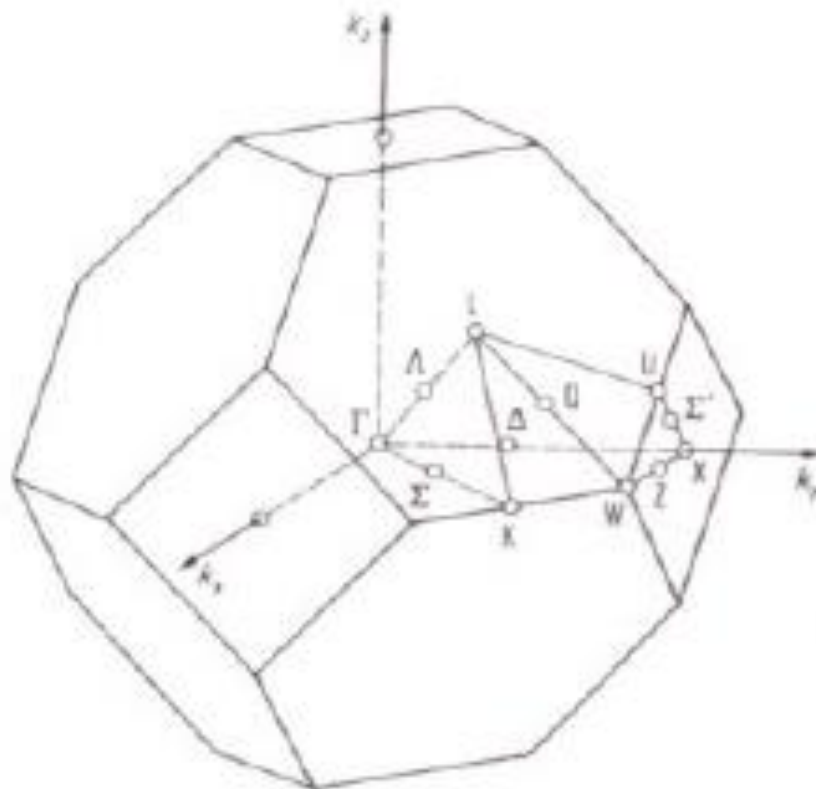
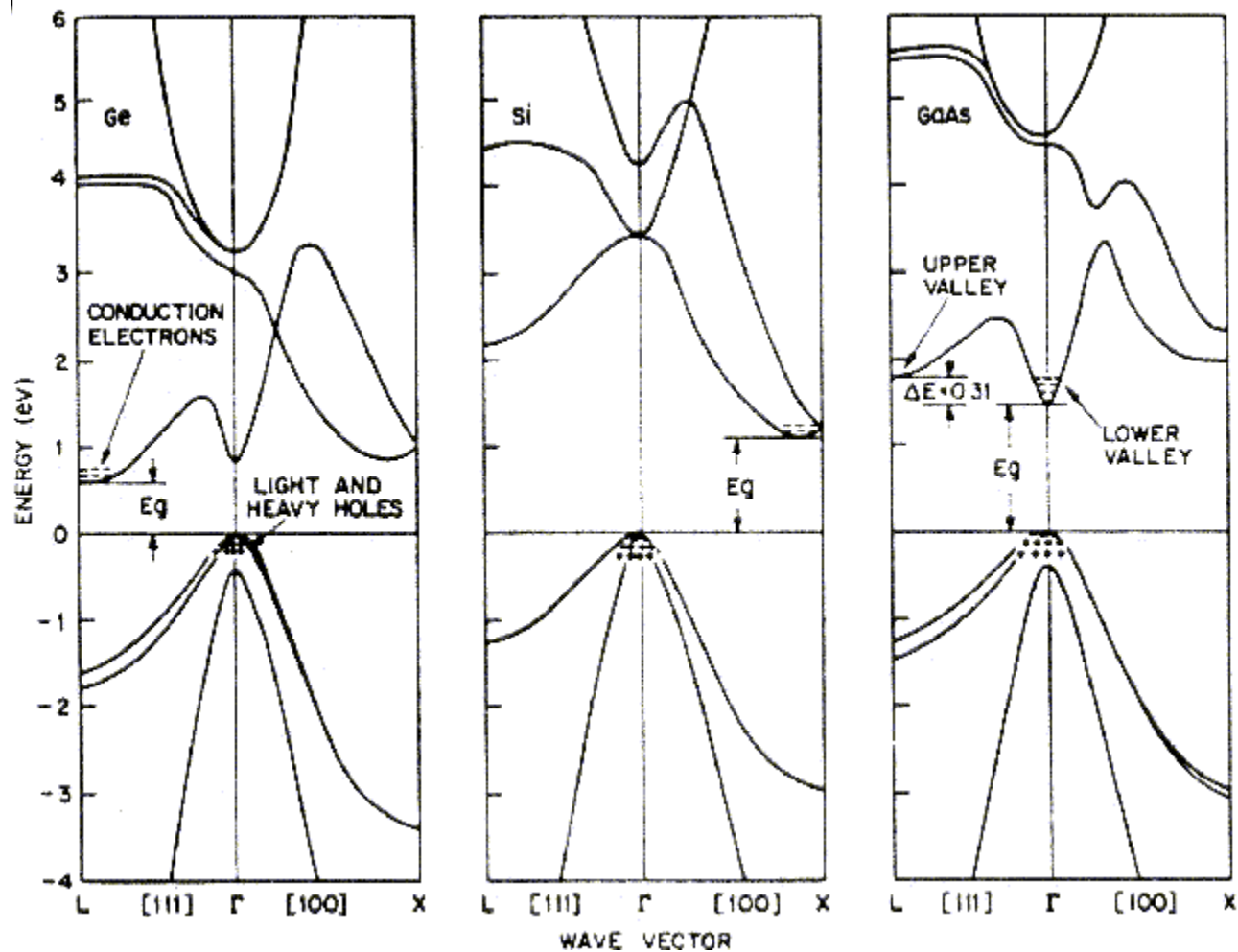


Figure 5.3. Periodic zone scheme.

# Brillouinova zóna (FCC)



# Pásové schéma reálných polovodičů



## Bandstructure of GaAs

