

1. Proszę podać współczesną definicję kryształu i krystalografii.
2. Proszę wymienić układy krystalograficzne oraz podać elementy symetrii charakteryzujące poszczególne układy.
3. Proszę wykonać rzut cyklograficzny elementów symetrii oraz rzut stereograficzny ścian:
 - sześciangu
 - prostopadłościanu o podstawie kwadratowejProszę podać układ krystalograficzny i symbol klasy krystalograficznej kryształu o takiej symetrii.
4. Proszę przedstawić na kole projekcji działanie:
 - osi właściwych
 - osi inwersyjnych
5. Proszę podać zasady tworzenia międzynarodowych symboli grup punktowych (symboli Hermanna Mauguina) w poszczególnych układach krystalograficznych.
6. Kryształ posiada oś czterokrotną inwersyjną prostopadłą do koła projekcji oraz oś dwukrotną prostopadłą do tej osi.
Należy:
 1. zaznaczyć na kole projekcji te elementy symetrii
 2. zaznaczyć na kole projekcji punkty symetrycznie równoważne względem tych elementów symetrii
 3. zaznaczyć wtórne elementy symetrii
 4. podać układ krystalograficzny, do którego należy kryształ
 5. określić klasę krystalograficzną kryształu
 6. określić centrosymetryczność kryształu
7. Kryształ posiada oś czterokrotną oraz płaszczyznę symetrii prostopadłe do koła projekcji. Należy:
 1. zaznaczyć na kole projekcji te elementy symetrii
 2. zaznaczyć na kole projekcji punkty symetrycznie równoważne względem tych elementów symetrii
 3. zaznaczyć wtórne elementy symetrii
 4. podać układ krystalograficzny, do którego należy kryształ
 5. określić klasę krystalograficzną kryształu
 6. określić centrosymetryczność kryształu
8. Proszę podać zasady skracania pełnych symboli grup punktowych.
9. Jakie elementy symetrii wskazują, że kryształ jest centrosymetryczny?
10. Proszę podać relacje pomiędzy a , b , c oraz pomiędzy α, β, γ w poszczególnych układach krystalograficznych.
11. Proszę podać zasady konwencjonalnego wyboru komórki elementarnej.
12. Jakie konwencjonalne komórki elementarne Bravais nie istnieją w układzie: a) regularnym, b) tetragonalnym. Odpowiedź należałoby uzasadnić.
13. Proszę podać symbol prostej sieciowej przechodzącej przez węzły:
 1. $1,0,0$ oraz $\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$
 2. $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ oraz $0,1,0$
14. Proszę podać symbol Millera płaszczyzny sieciowej przechodzącej przez węzły:
 1. $1,0,0; 0,2,0$ oraz $0,0,4$
 2. $8,0,0; 0,4,0$ oraz $0,0,5$.
15. Proszę przedstawić za pomocą rysunku działanie osi śrubowych:
 1. 31 oraz 32
 2. 41, 42 oraz 43
16. Proszę wyjaśnić działanie płaszczyzny poślizgu:
 1. a
 2. b
 3. c
 4. n
17. Proszę na rysunku przekształcić punkt o współrzędnych x, y, z przez poniższe elementy symetrii:
 1. płaszczyznę a prostopadłą do osi Y i przechodzącą przez początek układu współrzędnych
 2. płaszczyznę a prostopadłą do osi Z i przechodzącą przez początek układu współrzędnych
 3. płaszczyznę n prostopadłą do osi X i przechodzącą przez początek układu współrzędnych
 4. płaszczyznę n prostopadłą do osi Z i przechodzącą przez początek układu współrzędnych
 5. płaszczyznę c prostopadłą do osi Y i przechodzącą przez początek układu współrzędnych.Proszę podać współrzędne obrazu.
18. Czy może istnieć płaszczyzna symetrii:
 1. typu a prostopadła do osi X
 2. typu b prostopadła do osi Y
 3. typu c prostopadła do osi Z
19. Proszę podać zasady tworzenia międzynarodowych symboli grup przestrzennych (symboli Hermanna Mauguina) w poszczególnych układach krystalograficznych.
20. Co to jest niezależna część komórki elementarnej?

21. Proszę podać i uzasadnić jak przejawia się w zewnętrznej budowie kryształu fakt, że w sieci krystalicznej występuje płaszczyzna:
1. poślizgu typu c prostopadła do osi krystalograficznej Y
 2. oś 2₁ równoległa do osi Y
22. Proszę wyjaśnić różnice pomiędzy: monokryształem, bliźniakiem i proszkiem.
23. Na czym polega mozaikowa budowa kryształu rzeczywistego?
24. Proszę podać zasadę konstrukcji sieci odwrotnej:
1. wektorową
 2. geometryczną
25. Jaka zależność występuje pomiędzy wartością periodu identyczności w sieci rzeczywistej a wartością periodu w sieci odwrotnej?
26. Proszę zaznaczyć na rysunku (lub opisać słownie) kierunek i zwrot osi sieci odwrotnej X, Y, Z* w przypadku gdy:
1. osie X, Y i Z są wzajemnie prostopadłe w sieci rzeczywistej kryształu
 2. oś Z jest prostopadła do osi X oraz Y w sieci rzeczywistej kryształu, a kąt pomiędzy osiami X oraz Y wynosi 120°.
27. Jak zorientowana jest prosta sieciowa o symbolu [321] znajdująca się w sieci odwrotnej w stosunku do płaszczyzny sieciowej (321) znajdującej się w sieci rzeczywistej?

Odpowiedzi

1) Proszę podać współczesną definicję kryształu i krystalografii.

Kryształ - materiał dający istotnie dyskretny obraz dyfrakcyjny

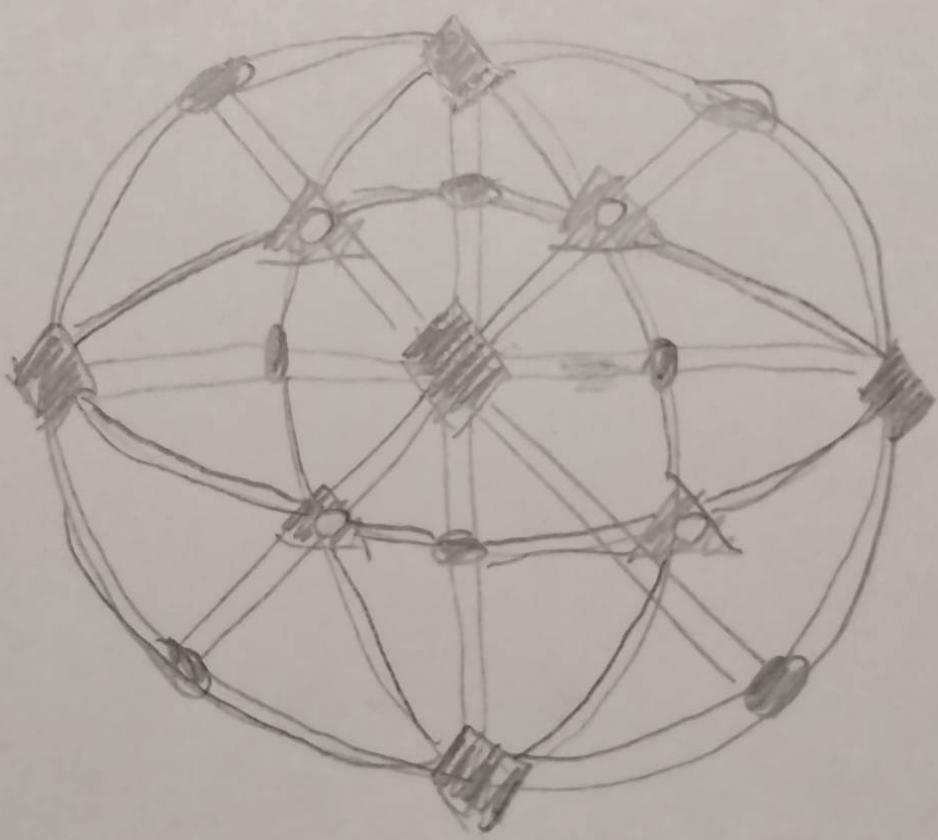
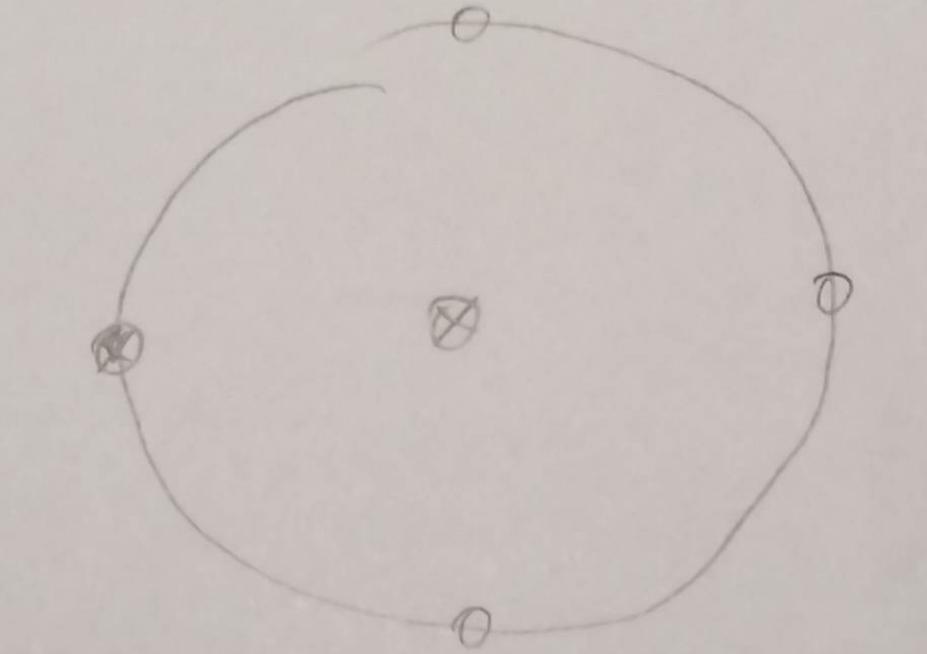
Krystalografia - nauka badająca materię skondensowaną, głównie o budowie translacyjnej na poziomie atomowym (określa położenie oraz drgania termiczne atomów lub jonów) za pomocą różnych metod (dyfrakcji promieni rentgenowskich, neutronów, elektronów; symulacji komputerowych).

2) Proszę wymienić układy krystalograficzne oraz podać elementy symetrii charakteryzujące poszczególne układy.

| Układ | grupy punktowe | charakterystyczny element symetrii |
|--------------|---|---|
| trójskoły | 1, $\bar{1}$ | brak elementów symetrii lub tylko środek symetrii |
| jednoskoły | 2, m | oś dwukrotna lub płaszczyzna symetrii |
| rombowy | 222, $22m$, $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (mmm) | $2 \perp 2 \perp 2$ lub $(m \perp m) \parallel 2$ (kryterium nadzędne względem pozostałych) |
| tetragonalny | $4, \bar{4}, \frac{4}{m}, 422, 4mm, \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ ($\frac{4}{m}mm$), $\bar{4}2m$ | dowolna oś czterokrotna zgodna z osią krystalograficzną Z i nie jest regularny |
| trygonalny | $3, \bar{3}, 32, 3m, \bar{3} \frac{2}{m}$ ($\bar{3}m$) | dowolna oś trójkrotna zgodna z osią krystalograficzną Z |
| heksagonalny | $6, \bar{6}, \frac{6}{m}, 622, 6mm, \frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ ($\frac{6}{m}mm$), $\bar{6}2m$ | dowolna oś sześciokrotna zgodna z osią krystalograficzną Z |
| regularny | $23, \frac{2}{m} \bar{3}(m\bar{3}), 432, 43m, \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$ ($m\bar{3}m$) | cztery osie trójkrotne w kierunkach przekątnych przestrzennych sześcianu |

3) Proszę wykonać rzut cyklograficzny elementów symetrii oraz rzut stereograficzny ścian:

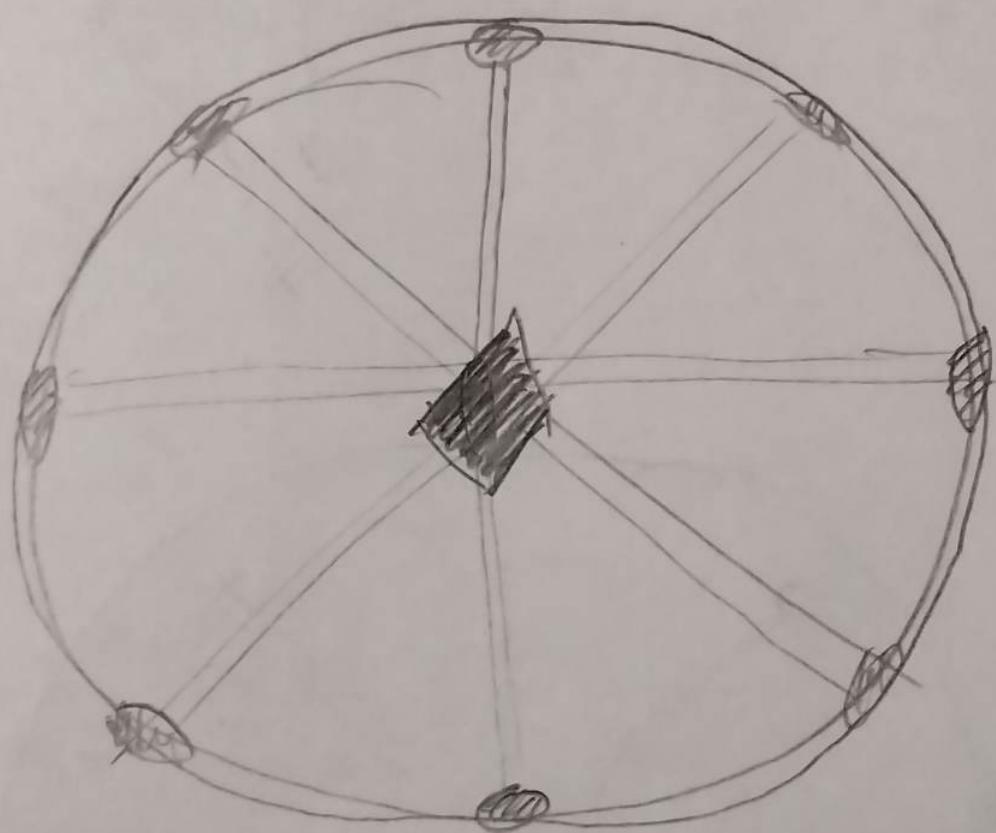
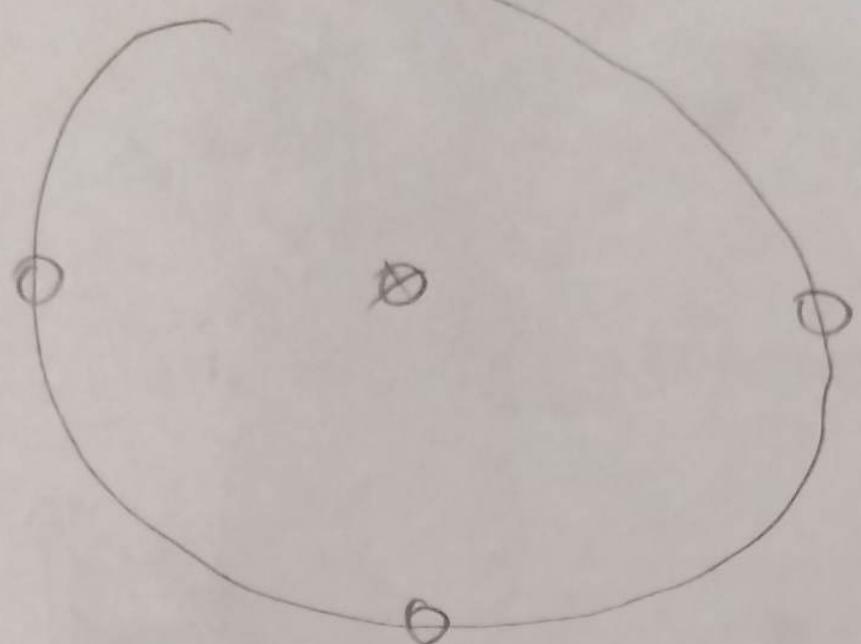
sześcianu



$m \bar{3} m$

układ
regularny

prostopadłościanu o podstawie kwadratowej



m m m

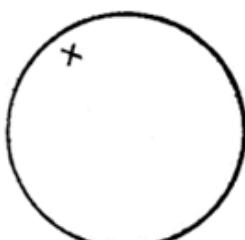
ichtad

vombowy

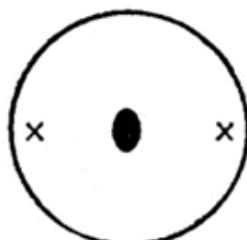
Proszę podać układ krystalograficzny i symbol klasy krystalograficznej kryształu o takiej symetrii.

4) Proszę przedstawić na kole projekcji działanie:

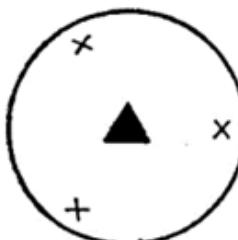
- osi właściwych



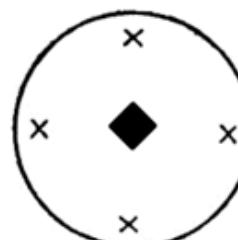
1



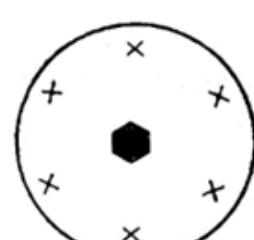
2



3

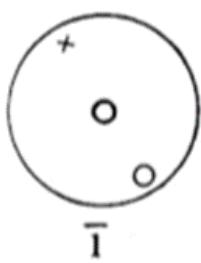


4

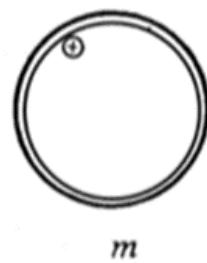


6

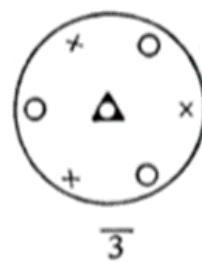
- osi inwersyjnych



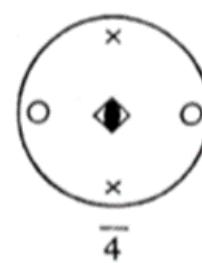
$\bar{1}$



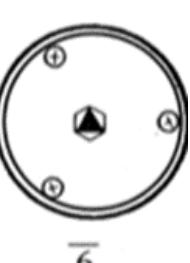
m



$\bar{3}$



$\bar{4}$



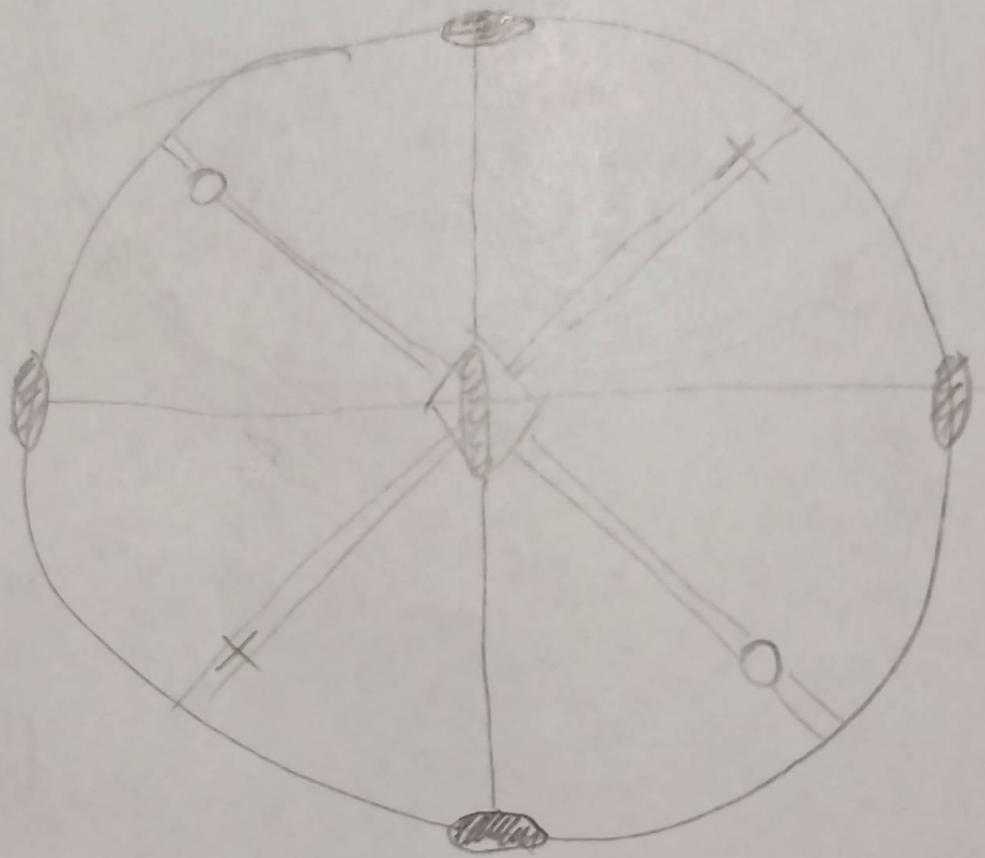
$\bar{6}$

5) Proszę podać zasady tworzenia międzynarodowych symboli grup punktowych (symboli Hermanna-Mauguina) w poszczególnych układach krystalograficznych.

| układ | zasady |
|--------------|--|
| trójskośny | trywialne |
| jednoskośny | $1:Z/Y$ |
| rombowy | $1:X\ 2:Y\ 3:Z$ |
| tetragonalny | $1:Z\ 2:X/Y\ 3:$ dwusieczna kąta między X i Y |
| regularny | $1:X/Y/Z\ 2:$ przekątne sześcianu $3:$ przekątne ścian sześcianu |
| trygonalny | $1:Z\ 2:X/Y/U\ 3:$ pusta |
| heksagonalny | $1:Z\ 2:X/Y/U\ 3:\frac{1}{2}\angle(X, -U)$ itd. |

6) Kryształ posiada oś czterokrotną inwersyjną prostopadłą do koła projekcji oraz oś dwukrotną prostopadłą do tej osi. Należy:

- zaznaczyć na kole projekcji te elementy symetrii
- zaznaczyć na kole projekcji punkty symetryczne równoważne względem tych elementów symetrii
- zaznaczyć wtórne elementy symetrii
- podać układ krystalograficzny, do którego należy kryształ
- określić klasę krystalograficzną kryształu
- określić centrosymetryczność kryształu



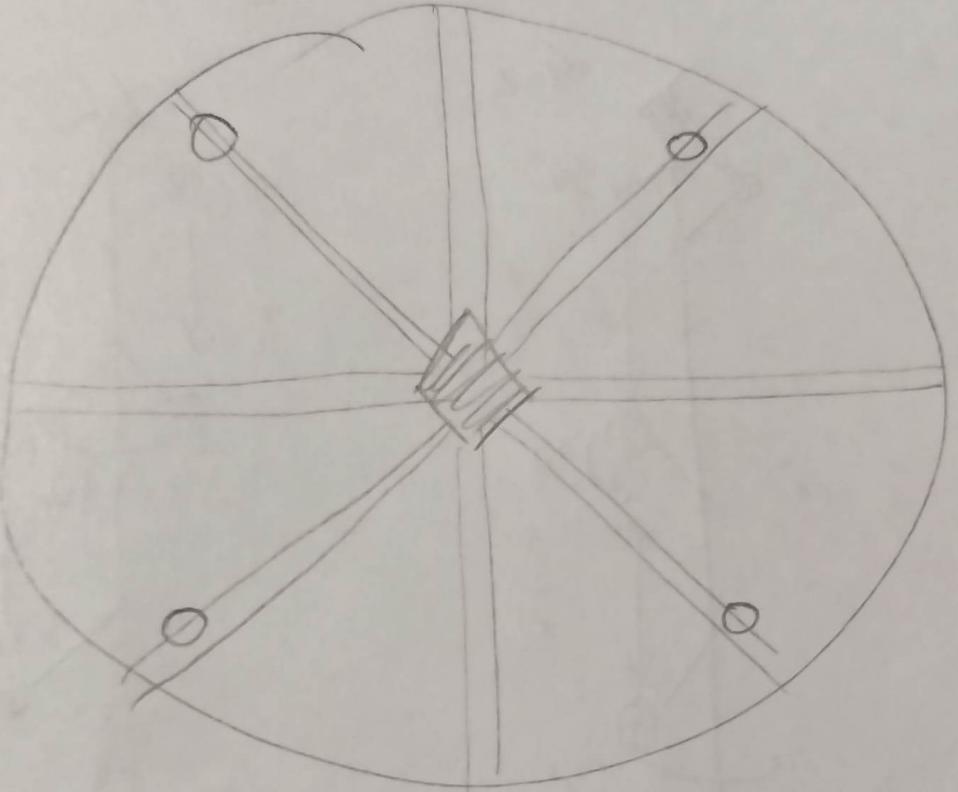
Tetragonaly

42m

nicentrosymetryczny

7) Kryształ posiada oś czterokrotną oraz płaszczyznę symetrii prostopadłe do koła projekcji. Należy:

1. zaznaczyć na kole projekcji te elementy symetrii
2. zaznaczyć na kole projekcji punkty symetryczne równoważne względem tych elementów symetrii
3. zaznaczyć wtórne elementy symetrii
4. podać układ krystalograficzny, do którego należy kryształ
5. określić klasę krystalograficzną kryształu
6. określić centrosymetryczność kryształu



Tetragonalny

4 mm

niecentrosymetryczny

8) Proszę podać zasady skracania pełnych symboli grup punktowych.

- $2/m \rightarrow m$ (za wyjątkiem układu jednoskośnego)
- w układzie regularnym $4/m \rightarrow m$

9) Jakie elementy symetrii wskazują, że kryształ jest centrosymetryczny?

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

10) Proszę podać relacje pomiędzy a , b , c oraz pomiędzy α, β, γ w poszczególnych układach krystalograficznych.

| układ | związki |
|----------------------------|--|
| trójskośny | $a \neq b \neq c \neq a, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha$ |
| jednoskośny | $a \neq b \neq c \neq a, \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ |
| rombowy | $a \neq b \neq c \neq a, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |
| tetralginalny | $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |
| trygonalny (romboedryczny) | $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ ($a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$) |
| heksagonalny | $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ |
| regularny | $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |

11) Proszę podać zasady konwencjonalnego wyboru komórki elementarnej.

(starszeństwo reguł - 1>2>3>4)

1. Symetria komórki elementarnej musi być zgodna z symetrią sieci kryształu. (Jak w sieci jest jakaś oś to było by dobrze jakby była w komórce)
2. Krawędzie komórki elementarnej powinny być w miarę możliwości równoległe do osi symetrii i prostopadłe do płaszczyzn symetrii.
3. Krawędzie komórki elementarnej powinny być symetrycznie równoważne.
4. Najmniejsza objętość

Mnemotechnika:

Symetria, kierunki, równoważne, objętość

SKROb

12) Jakie konwencjonalne komórki elementarne Bravais nie istnieją w układzie: a) regularnym, b) tetragonalnym. Odpowiedź należy uzasadnić.

| | P | A | B | C | I | F |
|----|---|---|---|---|---|---|
| 3c | x | | | | | |
| 1c | x | | | x | | |
| or | x | x | x | x | x | x |
| 4g | x | | | | x | |
| 3g | x | | | | | |
| 6g | x | | | | | |
| r | x | | | x | x | |

a) A, B i C. Ze względu na występowanie w układzie regularnym czterech osi trójkrotnych, kierunki X, Y i Z są symetrycznie równoważne. Jeżeli miałby istnieć dodatkowy węzeł na ścianie prostopadłej do jednego z kierunków musiałby też występować na pozostałych.

b) A, B, C i F. Oś czterokrotna w kierunku Z wyklucza istnienie węzłów tylko na ścianach prostopadłych do jednego z kierunków X i Y co wyklucza istnienie komórek A i B. Komórki C i F są natomiast niekonwencjonalne - mniejszą objętość w sieci tetragonalnej, przy jednoczesnym spełnieniu pozostałych reguł mają odpowiednio komórka P i I.

13) Proszę podać symbol prostej sieciowej przechodzącej przez węzły:

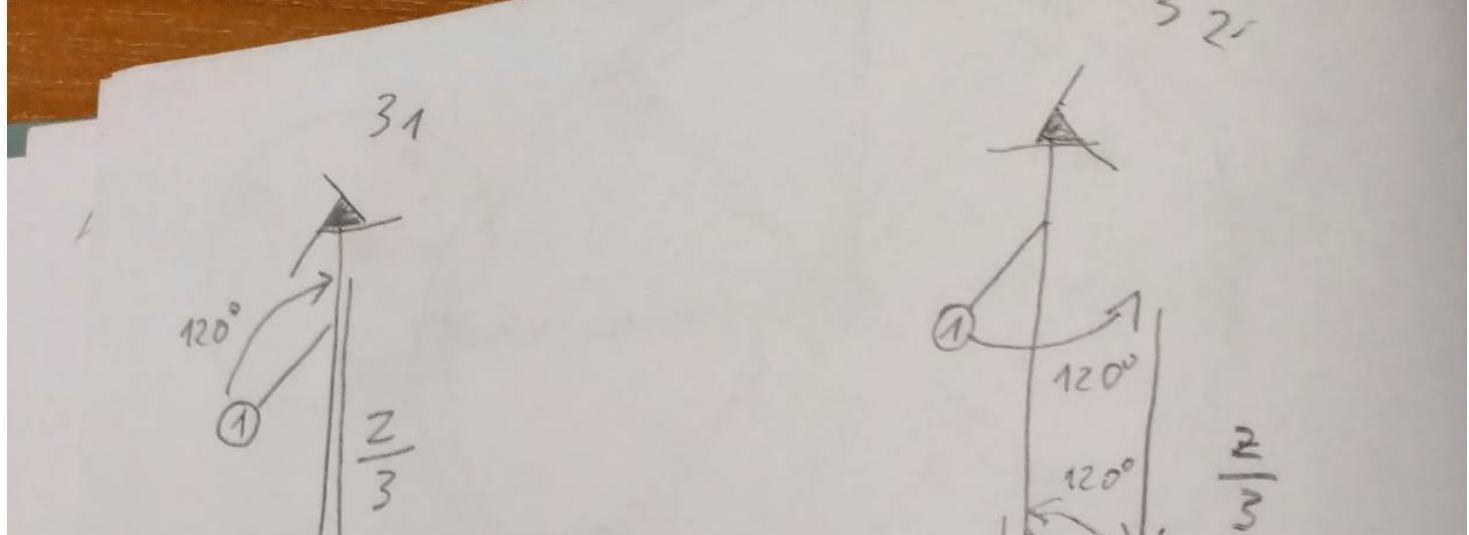
1. $1,0,0$ oraz $\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$ - $[\bar{1}10]$
2. $\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ oraz $0,1,0$ - $[1\bar{1}\bar{1}]$

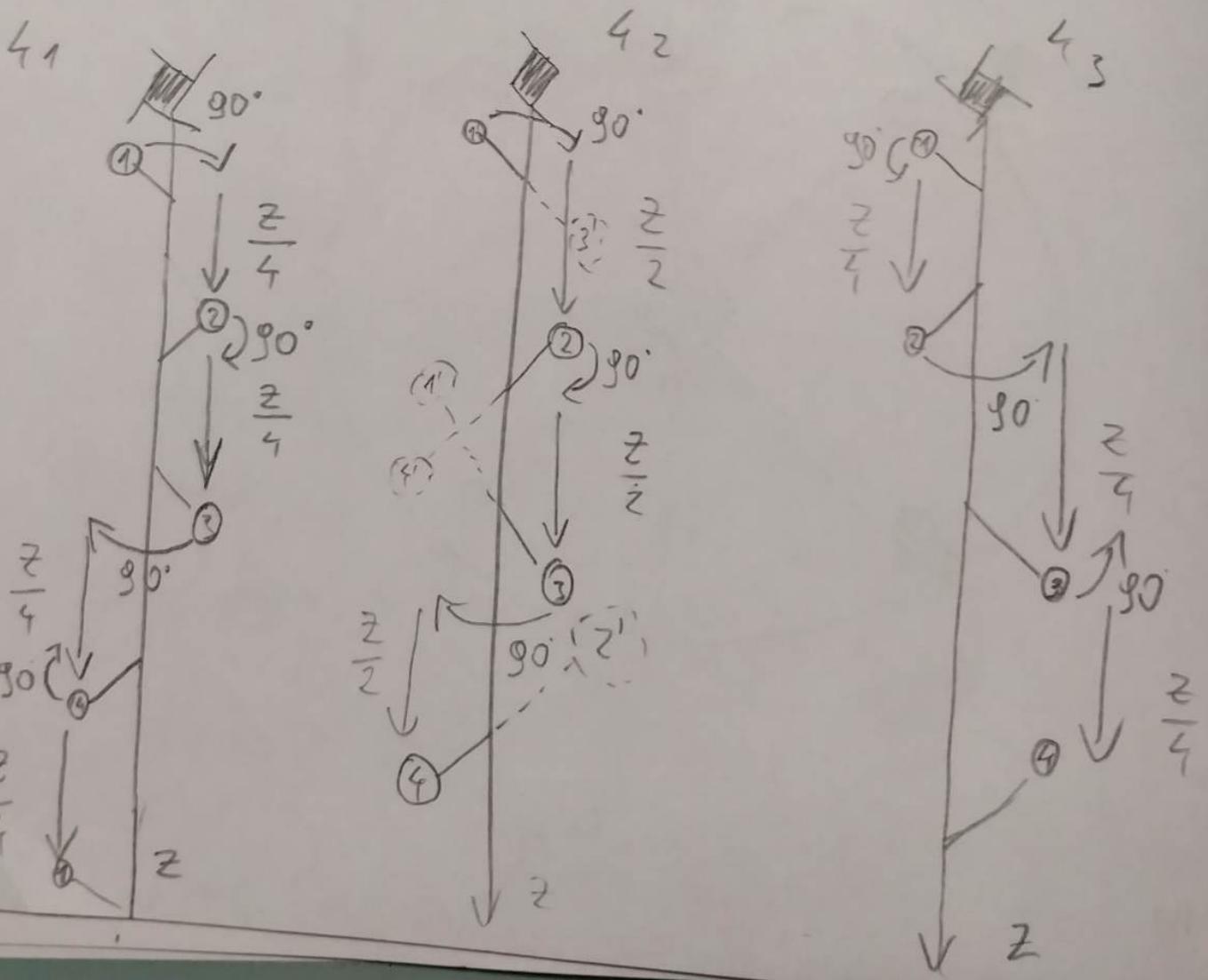
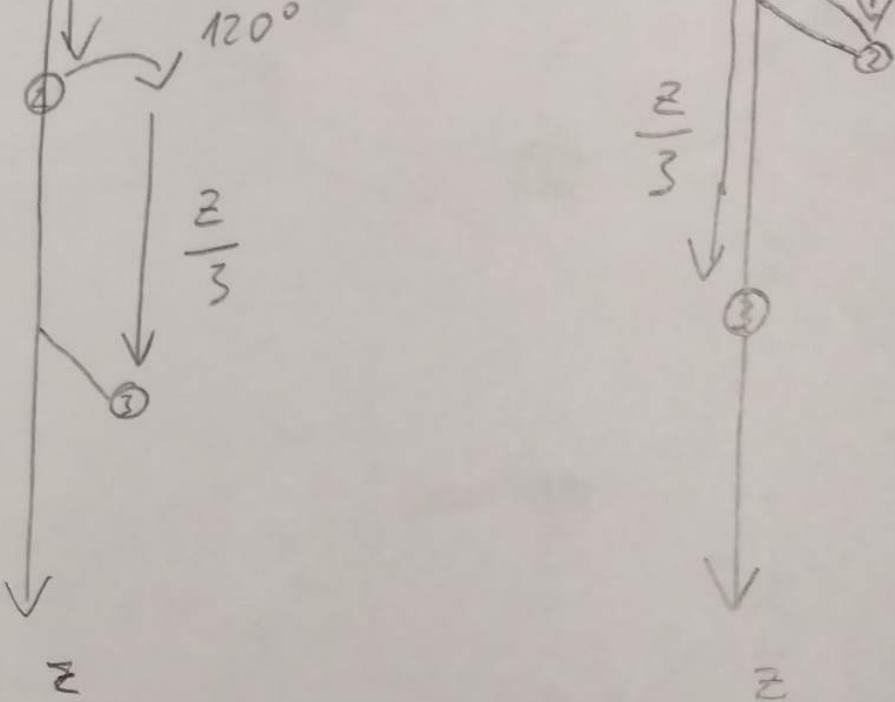
14) Proszę podać symbol Millera płaszczyzny sieciowej przechodzącej przez węzły:

1. $1,0,0; 0,2,0$ oraz $0,0,4$ - (421)
2. $8,0,0; 0,4,0$ oraz $0,0,5$. - (5,10,8)

15) Proszę przedstawić za pomocą rysunku działanie osi śrubowych:

1. 3_1 oraz 3_2
2. $4_1, 4_2$ oraz 4_3





16) Proszę wyjaśnić działanie płaszczyzny poślizgu:

Każda operacja odbicia w płaszczyźnie poślizgu składa się z dwóch operacji:

- odbicia w płaszczyźnie zwierciadlanej oraz
 - translacji (przesunięcia) o pewien wektor równoległy do płaszczyzny zależny od rodzaju płaszczyzny.
1. a - translacja równoległa do osi X o wektor 1/2a
 2. b - translacja równoległa do osi Y o wektor 1/2b
 3. c - translacja równoległa do osi Z o wektor 1/2c

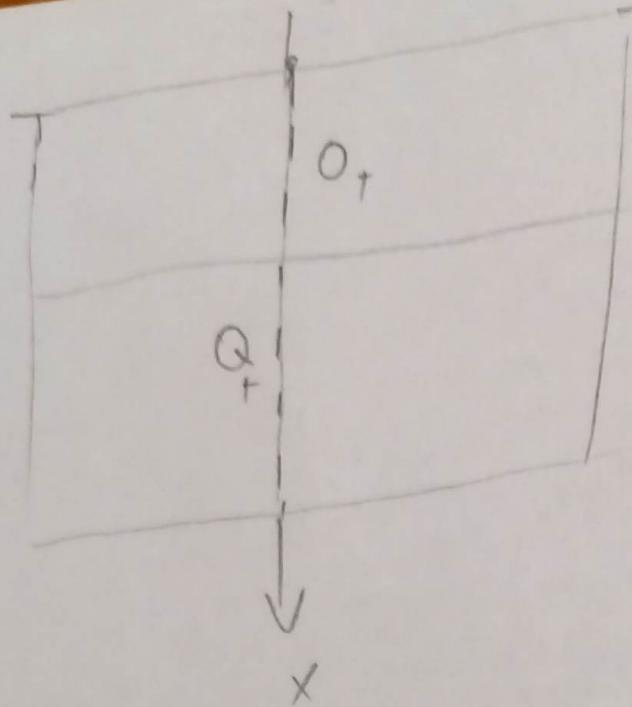
4. n - translacja:
1. dla n równoległej do XY: o wektor $1/2a + 1/2b$
 2. dla n równoległej do XZ: o wektor $1/2a + 1/2c$
 3. dla n równoległej do YZ: o wektor $1/2b + 1/2c$
 4. dla n prostopadłej do przekątnej podstawy komórki o wektor $1/2a + 1/2b + 1/2c$

17) Proszę na rysunku przekształcić punkt o współrzędnych x,y,z przez poniższe elementy symetrii:

1. płaszczyznę a prostopadłą do osi Y i przechodzącą przez początek układu współrzędnych
2. płaszczyznę a prostopadłą do osi Z i przechodzącą przez początek układu współrzędnych
3. płaszczyznę n prostopadłą do osi X i przechodzącą przez początek układu współrzędnych
4. płaszczyznę n prostopadłą do osi Z i przechodzącą przez początek układu współrzędnych
5. płaszczyznę c prostopadłą do osi Y i przechodzącą przez początek układu współrzędnych.

Proszę podać współrzędne obrazu.

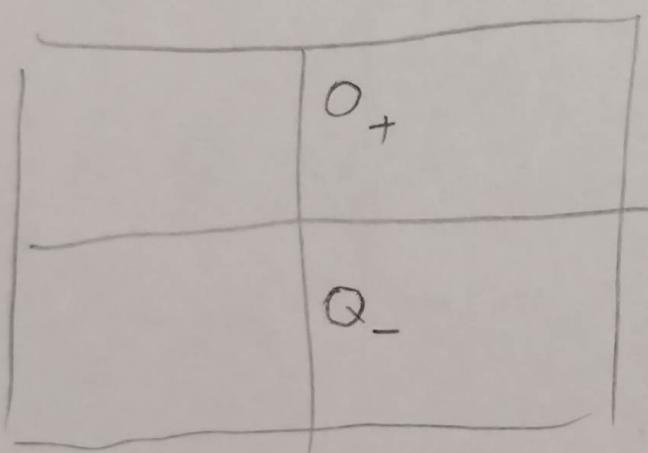
a)

 γ

$$\frac{1}{2} + x$$

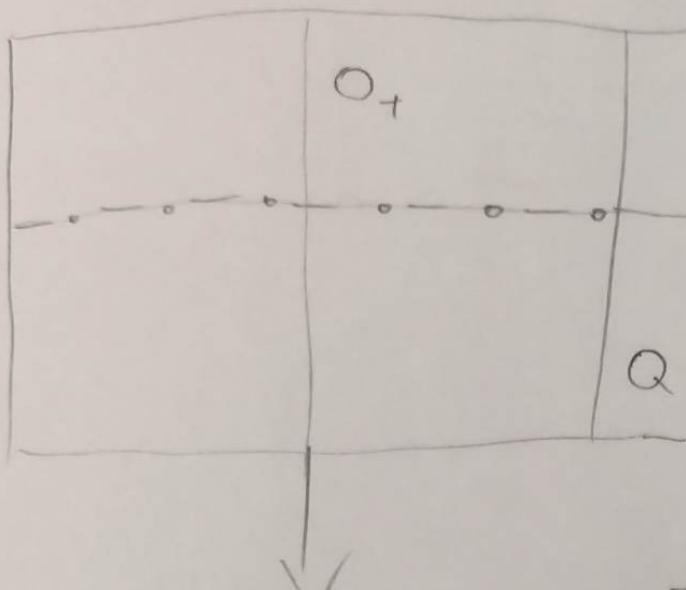
 $\bar{\gamma}$ \bar{z}

b)

 \bar{x}

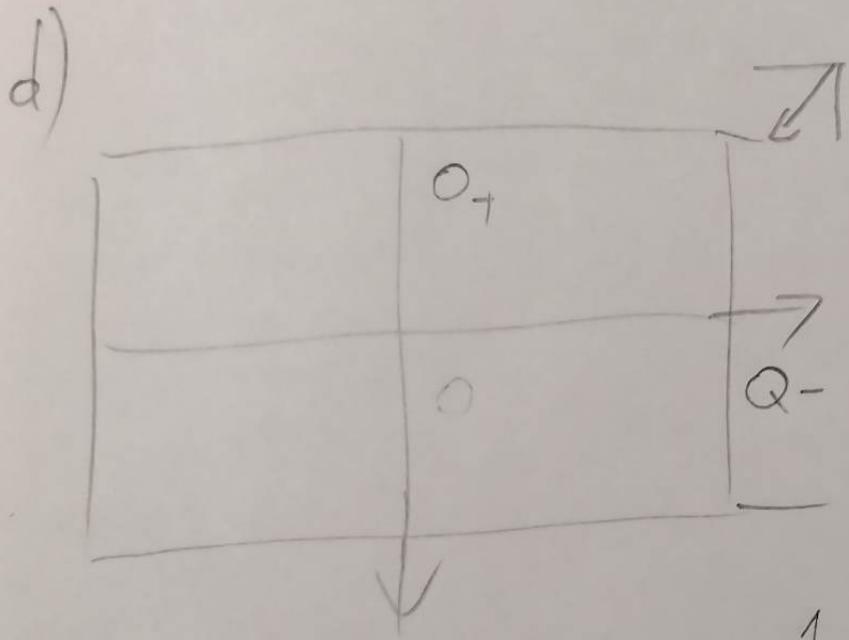
$$\frac{1}{2} + x, \gamma, \bar{z}$$

c)

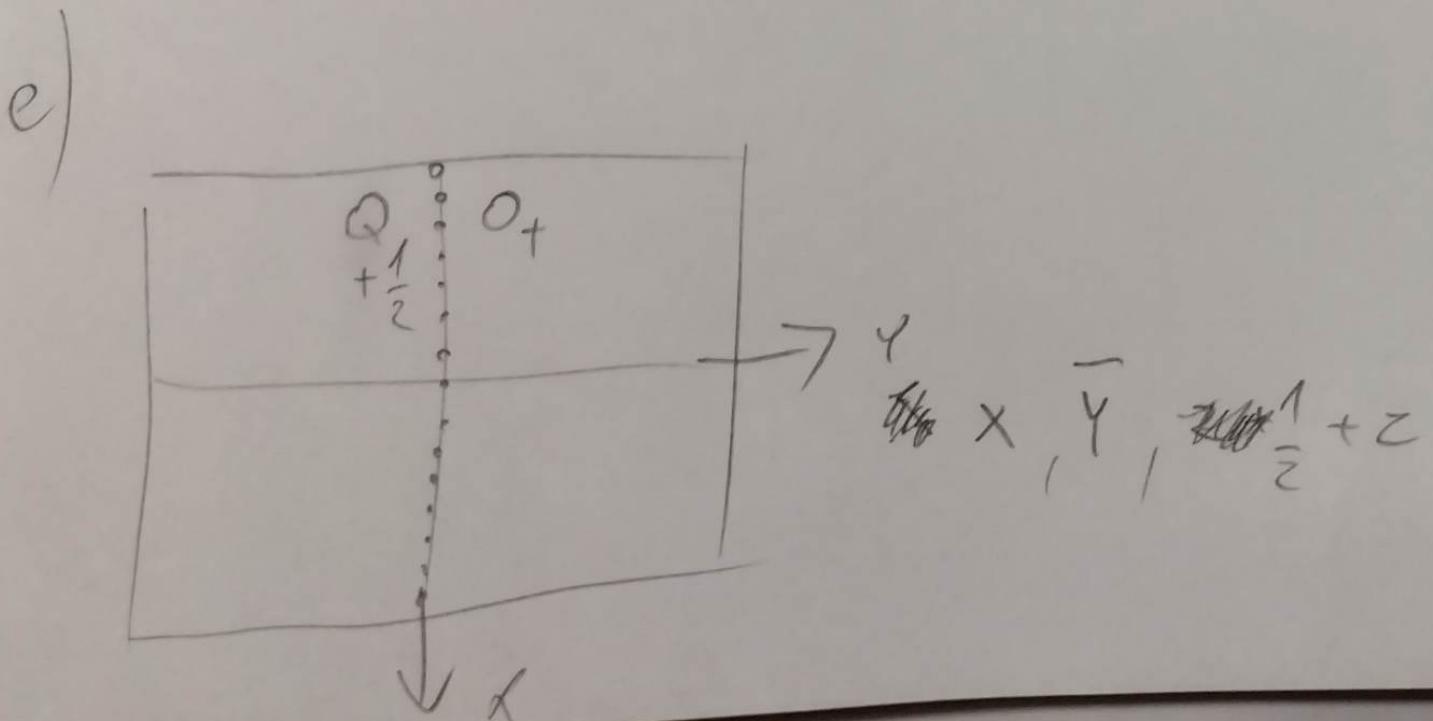
 γ

$$Q \cdot \frac{1}{2} +$$

$$\bar{x} \cdot \frac{1}{2} + \gamma \quad \frac{1}{2} + z$$



$$\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z$$



$$y, \cancel{x}, \bar{y}, \cancel{\frac{1}{2} + z}$$

18) Czy może istnieć płaszczyzna symetrii:

1. typu a prostopadła do osi X - nie, ponieważ nie jest możliwe wykonanie translacji o wektor równoległy równocześnie do takiej płaszczyzny poślizgu oraz do osi X.
2. typu b prostopadła do osi Y - nie, z analogicznych powodów
3. typu c prostopadła do osi Z - nie, z analogicznych powodów

19) Proszę podać zasady tworzenia międzynarodowych symboli grup przestrzennych (symboli Hermanna Mauguina) w poszczególnych układach krystalograficznych.

Na pierwszym miejscu symbolu grupy przestrzennej podaje się typ sieci Bravais. Na kolejnych miejscach, w kolejności jak dla grup punktowych, podaje się twórcze elementy symetrii.

Reguły dodatkowe:

1. Jeżeli równolegle do siebie występują płaszczyzna zwierciadlana i płaszczyzna poślizgu, to w symbolu umieszcza się płaszczyznę zwierciadlaną.
2. Jeżeli równolegle do siebie istnieją dwie płaszczyzny poślizgu, to to w symbolu umieszcza się płaszczyznę o mniejszej liczbie składowych translacyjnych (np. płaszczyznę c, a nie płaszczyznę n).

- Jeżeli równolegle do siebie występują osie właściwe i śrubowe, to w symbolu podaje się oś o wyższej krotności (np. 4_2 , a nie 2).
- Jeżeli kierunek, którego symetria powinna być opisana jest asymetryczny, to w symbolu umieszcza się 1 (np. P3m1).

20) Co to jest niezależna część komórki elementarnej?

Niezależna część komórki elementarnej (ang. asymmetric unit) jest to taki jej fragment, który przekształcony przez twórcze elementy symetrii i powielony zgodnie z typem sieci Bravais odtworzy całą komórkę elementarną.

Zatem jeśli znana jest zawartość niezależnej części komórki elementarnej oraz symbol grupy przestrzennej, to znana jest również zawartość całej komórki elementarnej.

21) Proszę podać i uzasadnić jak przejawia się w zewnętrznej budowie kryształu fakt, że w sieci krystalicznej występuje płaszczyzna:

- poślizgu typu c prostopadła do osi krystalograficznej Y
- oś 2_1 równoległa do osi Y

Odp.

- występuje płaszczyzna zwierciadlana prostopadła do osi krystalograficznej Y
- występuje oś dwukrotne właściwa równoległa do osi Y

Przesunięcia w przypadku płaszczyzn poślizgu i osi śrubowych są bardzo małe, rzędu $10\text{-}100 \text{ \AA}$ i nie uwzględniamy ich w opisie budowy zewnętrznej kryształu. Wszystkie osie śrubowe traktujemy jako właściwe a wszystkie płaszczyzny poślizgu jako płaszczyzny zwierciadlane.

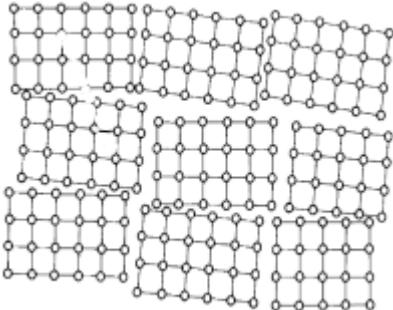
22) Proszę wyjaśnić różnice pomiędzy: monokryształem, bliźniakiem i proszkiem.

- Monokryztał charakteryzuje się **jednakową orientacją sieci przestrzennej** w każdym swoim punkcie.
- Bliźniak są to dwa lub więcej kryształów zrosniętych ze sobą pod pewnym kątem. Zatem orientacja sieci przestrzennej w każdym punkcie **nie jest jednakowa**.
- Proszek jest to zbiór monokryształów mikro- lub nanokrystalicznych. Orientacja ziaren w preparacie jest dowolna, zatem orientacja sieci przestrzennych jest również **dowolna**.

W definicjach nie jest brana pod uwagę mozaikowa budowa kryształu.

23) Na czym polega mozaikowa budowa kryształu rzeczywistego?

Kryztał rzeczywisty nie posiada w całej swej objętości jednej idealnej sieci. Kryztał rzeczywisty jest zbudowany z bloków. Wewnątrz jednego bloku sieć jest idealna. Wymiary bloków są rzędu 1000 \AA . Bloki są nieznacznie skręcone względem siebie: od kilku dziesiątych stopnia do kilku stopni.



24) Proszę podać zasadę konstrukcji sieci odwrotnej:

- wektorową

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V}$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V}$$

- geometryczną

Do każdej rodziny płaszczyzn sieciowych w sieci rzeczywistej należy wystawić prostą prostopadłą, na której zaznaczane są węzły w odległości n/d od początku układu współrzędnych w sieci odwrotnej

25) Jaka zależność występuje pomiędzy wartością periodu identyczności w sieci rzeczywistej a wartością periodu w sieci odwrotnej?

$$|\vec{a}^*| = \frac{1}{|\vec{a}| \cdot \cos(\vec{a}, \vec{a}^*)}$$

Innymi słowy ich iloczyn skalarny jest równy 1

26) Proszę zaznaczyć na rysunku (lub opisać słownie) kierunek i zwrot osi sieci odwrotnej X, Y, Z* w przypadku gdy:

1. osie X, Y i Z są wzajemnie prostopadłe w sieci rzeczywistej kryształu
2. oś Z jest prostopadła do osi X oraz Y w sieci rzeczywistej kryształu, a kąt pomiędzy osiami X oraz Y wynosi 120° .

Odp.

1. osie X, Y, Z* pokrywają się z osiami odpowiednio X,Y,Z (też są wzajemnie prostopadłe)
2. oś Z jest prostopadła do osi X oraz Y, a kąt pomiędzy osiami X i Y* wynosi 60°

27) Jak zorientowana jest prosta sieciowa o symbolu [321] znajdująca się w sieci odwrotnej w stosunku do płaszczyzny sieciowej (321) znajdującej się w sieci rzeczywistej?

Nie wiem, kurwa, prostopadle