

Zápis

z 95. schůzky Rozhovorů o aktuálních otázkách ve strukturní rentgenografii.

Schůzka se konala ve dnech 4. až 6. března 1969 ve Smolenicích na téma "Kryсталová mříž a kryсталografická souměrnost".

P r o g r a m

Přednáška A. Fingerlanda (ÚFPL ČSAV) "Kryсталografie" byla rozdělena do dvou částí. Prvá byla přednesena 4.3.1969. Jejím obsahem byly základní pojmy teorie grup, pojem mříže, a odvození možné symetrie mříží a Bravaisovy typy. Přednáška byla koncipována zároveň jako úvod k následujícím přednáškám Grubera a Línka. Každý účastník měl možnost sledovat logickou strukturu na blokovém schematu, které obdržel jako učební pomůcku. Pro jednoduchost byly konkrétní otázky řešeny ve dvou rozměrech, obecné definice a věty byly na počtu rozměrů nezávislé. Druhá část přednášky, zabývající se v podstatě bodovými a prostorovými grupami, byla přednesena 5.3.1969 odpoledne po přednáškách Gruberově, Línkově a Červeňově. Diskuse byla poměrně živá a neformální a velmi cenné byly diskusní příspěvky, zdůrazňující souvislosti mezi různými přístupy k těmže tématům, jak se objevily v přednáškách Fingerlanda, Grubera, Línka a Červeně. Přednáška byla doprovázena diapositivy. Večerní seminář (Fingerland) byl věnován odvození 80 černobílých grup. Seminář byl zcela neformální za účasti poměrně malé skupiny vážných zájemců, kteří v debatě u tabule se aktivně podíleli na odvození a přispěli k dobrému pocitu přednášejícího.

Literatura

C. Kittel: Introd. to Solid State Physics II. ed. New York 1956.

Barrett C.S.: Structure of Metals, New York 1943, český překlad: Struktura kovů, Praha 1956.

Guinier A.: Radiocristallographie II. ed. Paris 1956.

Pinsker: Difrakcija elektronov, Moskva 1948.

Ljubarskij: Teorija grupp i jejo priměnenije v fizike. Moskva 1958.

Burckhardt J.J.: Die Bewegungsgruppen d. Kristallographie, Basel 1947.

Bělov N.V.: Trudy Inst. Kristallografiji 6 (1951), 25.

Wood E.A.: J. Appl. Phys. 35 (1964), 1306.

Nye J.F.: Phys. Properties of Crystals, Oxford 1957.

Frei V.: Teorie pevných látek, Praha 1965, I. kap.

International Tables for X-Ray Crystallography, Birmingham 1952.

Autor příspěvku: Prof. D. Ilkovič, přednesl Ivan Červeň, prom. fys. (Katedra fyziky elektrotechnické fakulty SVŠT, Bratislava).

Na základe vektorovej rovnice roviny bol v príspevku provedený dokaz, že rovina určená tromi nesúdelnými číslami, tj. Millerovými indexami je rovinou mriežkovou a to z danej osnovy rovín k začiatku súradnicovej sústavy najbližšou. Dokaz prof. Ilkoviča sa opiera o vetu z teórie čísiel, ktorú má na uvedených stránkach svojej knihy dokázanú. Závažnú pripomienku k príspevku mal doc. Gruber, ktorý zdoraznil, že uvedený dokaz sa netýka rovín popísaných Millerovými indexami, z ktorých je aspoň jeden nulový. Naznačil však postup, ako sa týmto ťažkostiam vyhnúť.

Literatura:

Ilkovič: Fyzika I. Naklad. ALFA, Bratislava - 1969, str. 230-235.
Vinogradov I. M.: Základy theorie čísel, Praha, Nakl. ČSAV, 1953.

Dr. Boris Gruber, CSc. (MFF Karlova universita, Praha) "Stanovení symetrických vlastností roviny (hkl) v obecné Bravaisově mřížce a některé příbuzné problémy".

Referát se týkal v podstatě dvou hlavních problémů.

V prvním šlo o stanovení tří lineárně nezávislých mřížkových vektorů trojrozměrné Bravaisovy mřížky, jejichž součet délek je minimální. Takové tři vektory uspořádané podle velikosti nazval přednášející fundamentální posloupností dané mřížky. Platí pro ně tato věta: Vektory \underline{a} , \underline{b} , \underline{c} tvoří fundamentální posloupnost právě tehdy, jsou-li bázi dané mřížky a platí-li nerovnosti

$$|\underline{a}| \leq |\underline{b}| \leq |\underline{c}|,$$

$$2|\underline{a} \cdot \underline{b}| \leq a^2, \quad 2|\underline{a} \cdot \underline{c}| \leq a^2, \quad 2|\underline{b} \cdot \underline{c}| \leq b^2,$$

$$2|(\underline{a} + \underline{b}) \cdot \underline{c}| \leq (\underline{a} + \underline{b})^2, \quad 2|(\underline{a} - \underline{b}) \cdot \underline{c}| \leq (\underline{a} - \underline{b})^2$$

($\underline{a} \cdot \underline{b}$ značí skalární součin dvou vektorů). Bezprostředním důsledkem této věty je tvrzení, že dvě nejhustěji obsazené roviny libovolné Bravaisovy mřížky nemohou svírat úhel menší než

60° a větší než 120° . Byly naznačeny hlavní myšlenky důkazu věty a ukázán algoritmus umožňující efektivní stanovení fundamentální posloupnosti.

Druhý problém se týkal stanovení symetrických vlastností roviny (hkl) v obecné Bravaisově mřížce. Přednášející naznačil jeho význam pro krystalografii, a to jednak pro studium vrstevných chyb, jednak pro stanovení všech krystalograficky možných dvojčat v dané mřížce, jejichž rovina dvojčatění je (hkl). Uvedl pak dva teoremy a algoritmus pro řešení této úlohy. Stručně se zmínil i o jejich modifikaci pro samočinný počítač. Na několika případech ukázal dosah této metody v případech, že tvar mřížky závisí na jednom nebo dvou parametrech.

V diskusi poukázal Dr.Komrska, že na jejich pracovišti se zabývali podobnou úlohou pro některé speciální mřížky. Srovnání ukázalo naprostou shodu výsledků.

Literatura:

Boris Gruber: "O nejkratších vektorech v prostorové translační mřížce". V recensním řízení Časopisu pro pěstování matematiky.

Boris Gruber: "Stanovení symetrických vlastností roviny (hkl) v obecné translační mřížce". Habilitační práce MFF KU 1968.

V další přednášce referoval Dr.A.Línek (ÚFPL ČSAV, Praha) o starší práci B.Delauneye, která je v Internacionálních tabulkách zahrnuta v kapitole 5.1 na str. 530 a dalších. Referující nejprve definoval Voronoi-ův obor, popsal geometrické vlastnosti Voronoi-ova tělesa, přiřadil k němu čtyři "redukované" vektory. V dalším se zabýval numerickým vyjádřením popsaných geometrických vztahů, ukázal základní vlastnost šestice čísel, které charakterisují mříž. V závěru odvodil algoritmus, který převádí libovolnou nalezenou primitivní trojici mřížových vektorů na redukovanou čtveřici, která dovoluje nalezení soustavy a typu Bravaisovy mříže.

V diskusní poznámce C.Novák podrobněji ukázal na praktický význam, který má Delauneyova práce.

Literatura:

B.Delauney: Zeit.f.Krist. 84,132,1933. International Tables for X-ray Crystallography, sv.I., str.530, the Kynoch Press, Birmingham.

K otázke OD-súmernosti, S. Ďurovič, CSc. (ÚACH SAV, Bratislava).

Prednášajúci sa v krátkom prehľade zaoberal štruktúrami, ktoré obsahujú parciálne krycie operácie (parciálne krycie operácie prevádzajú do seba iba časti štruktúry a nie celú štruktúru do seba samej, takže nie je na mieste hovoriť o operáciach súmernosti), ale ktoré súčasne splňajú tzv. podmienky susedstva (Nachbarchaftsbedingungen). V takýchto štruktúrach poloha stavebnej častice (napr. vrstvy) nie je jednoznačne určená polohou susedných stavebných častíc, takže kryštál danej látky nemusí byť trojrozmerné periodický. Súbor krycích operácií potom netvorí grupu, ale Brandtov resp. Ehresmannov grupoid.

Základné pojmy a symbolika symetrie boli potom ilustrované na príklade auripigmentu As_2S_3 .

Literatúra:

K.Dornberger-Schiff: Abh.dtsch.Akad.Wiss. 3 (1964),
(monografia o teorii OD-štruktúr z vrstiev).

K.Dornberger-Schiff: Lehrgang über OD-Strukturen, Berlin, Akademie Verlag, 1966 (dvojdielne skriptá z letnej školy o OD-štruktúrach, usporiadanej r.1965 v Berlíne - vhodné pre začiatočníkov)

Na záver prednáškového cyklu Doc.Dr.F.Hanic, DrSc. (UACH SAV) ukázal, ve ktorých částech Internacionálných tabulek lze nalézt kapitoly odpovídající přednáškám jednotlivých předřečníků. Pro některá témata se zabýval i praktickými ukázkami.

Literatura: International Tables for X-ray Crystallography, The Kynoch Press, Birmingham.

V závěrečném hodnocení posluchači v převážné většině vyslovili přání, aby kolokvia s uzavřenou tematikou podobného charakteru pokračovala.

Vyslovili poděkování pořadatelům za uspořádání kolokvia ve velmi milém prostředí Smolenického zámku.

Pro podzim 1969, případně pro jaro 1970 (závisí na ubytovacích možnostech), je připravováno kolokvium o otázkách difrakce.

Zapsali přednášející.