



Krystalografie

trojrozměrné počítačové modely

Seminární práce z fyziky

V Kladně květen 2006
Rudolf Rosa
07.A

Obsah

1. Úvod	strana 3
2. Metodika	strana 4
3. Vlastní práce	strana 5
A. Krystalografie	strana 5
B. Poruchy krystalové mřížky	strana 6
4. Závěr	strana 8
5. Diskuze	strana 9
Použitá literatura	strana 10
Copyright	strana 11
Přílohy	strana 12
1. CD-ROM „Krystalografie – trojrozměrné počítačové modely“ + seznam modelů podle čísel	strana 12
2. Pokyny pro instalaci a používání prohlížeče Cortona VRML Client	strana 13

1. Úvod

Tato seminární práce je koncipována zejména jako učební pomůcka pro základní seznámení s krystalografií (lehce nad úroveň příslušného učiva druhého ročníku vyššího gymnázia). Jejím těžištěm jsou trojrozměrné počítačové modely, znázorňující základní krystalografické pojmy a jevy – různé elementární buňky, krystalové mřížky a poruchy krystalových struktur, a k nim příslušející popisy.

Hlavním cílem práce je názorné popsání výše uvedených pojmů a jevů za účelem jejich snadnějšího a lepšího pochopení. Z vlastní zkušenosti totiž vím, že nákresy v učebnicích, byť velice dobře vypracované, z prostého důvodu dvojrozměrnosti papíru nedokážou dokonale postihnout trojrozměrné objekty, jakými jsou například právě krystalové struktury (o nákresech na tabuli nemluvě). K modelům je připojen i stručný výklad.

2. Metodika

Z fyzikálního hlediska jsem průběžně vycházel z [1] – [4], a to jak při vytváření modelů (u nich navíc i z [5]), tak při psaní vlastní práce. Pokud v textu nejsou uvedené citace (většinou), znamená to, že uvedené definice a části výkladu nejsou přesnými citacemi použité literatury, ale mými vlastními formulacemi, vytvořenými sloučením (a případně zjednodušením) informací z [1] - [4]. Tam, kde zdroje nebyly zcela jednoznačné, jsem se zpravidla držel [2], nebo, pokud to nebylo možné (například pokud v [2] informace chyběla nebo byla nejednoznačná), [3]. Zdroje byly také nejednoznačné v otázce dělení bodových poruch krystalové mřížky (konkrétně v zařazení příměsi v intersticiální poloze), proto zavádím vlastní dělení, které je v podstatě kombinací, upřesněním a rozšířením dělení podle zdrojů a které je především zcela jednoznačné.

Pro vytváření trojrozměrných modelů jsem si zvolil VRML (Virtual Reality Modeling Language, jazyk pro modelování virtuální reality), který je částečně příbuzný HTML (HyperText Markup Language, hypertextový značkovací jazyk – používá se pro tvorbu webových stránek). VRML má pro tento účel několik nesporných výhod, jako například jeho relativní jednoduchost, potřeba pouze minimálního vybavení (podobně jako pro práci v HTML zcela postačuje textový editor a příslušný zdarma dostupný prohlížeč), jednoduchá možnost kombinace VRML a HTML (z čehož vyplývá jednoduchá možnost zpřístupnění práce na internetu), a další.

Zdrojové kódy modelů jsem psal ručně v editoru *PSPad* podle normy VRML V2.0 (s využitím [6] a [7]), pro zobrazení modelů jsem používal VRML prohlížeč *Cortona VRML Client* verze 4.2 od společnosti *ParallelGraphics* (je přiložen na CD-ROMu). Tento program se implementuje ve formě pluginu do webového prohlížeče (já jsem používal prohlížeč *Mozilla Firefox* 1.5, ale zobrazení modelů by na webovém prohlížeči nemělo být závislé). Práci jsem psal v programu *Writer* z kancelářského balíku *OpenOffice.org* 2.0 a tímtož programem ji exportoval do formátu PDF (práce v PDF verzi je také umístěna na CD-ROMu).

Všechny použité programy jsou kompletně freeware, tedy volně a zdarma dostupné.

3. Vlastní práce

A. Krystalografie

Krystalografie je nauka, která se zabývá především studiem struktury krystalů a poruchami jejich ideální struktury.

Krystal je pevné těleso s trojrozměrně periodickým rozmístěním základních stavebních částic (atomů, iontů, molekul).¹ Periodické rozmístění částic se projevuje pravidelným opakováním základního motivu (hmotné báze) tvořeného jednou nebo více částicemi ve třech rozměrech.

Strukturou krystalu rozumíme konkrétní způsob rozmístění základních stavebních částic v krystalu.

Ideální krystal je nekonečný a jeho struktura je zcela pravidelná, bez poruch.

Dokonalý krystal je konečný ideální krystal.

Reálný krystal je konečný a vykazuje více či méně četné geometrické i chemické odchylky od ideálního krystalu (tzv. poruchy, viz B.).

K reálným krystalům náleží všechny skutečně existující krystaly, ideální a dokonalý krystal slouží pouze jako teoretické fyzikální modely.

Modely v této práci zpravidla zobrazují vnitřní část dokonalého, případně částečně dokonalého a částečně reálného krystalu. Částice, které se v modelu jeví jako vnější, okrajové, je třeba považovat za částice vnitřní, za kterými krystal dále pokračuje.²

Pro popis struktury krystalu se většinou zavádí **krystalová mřížka** (krystalová mříž). Je to množina určitých význačných bodů, od nichž se odvozuje poloha konkrétních částic v krystalu.³ Je třeba dodat, že krystalová mřížka je pouhou abstrakcí, která nám pomáhá popsat strukturu krystalů. Ve skutečnosti žádnou takovou mřížku v krystalu nenajdeme.⁴

Podobně jako u krystalu i zde zavádíme pojem **ideální krystalová mřížka**, což je

1 Částice v krystalech za normálních podmínek ve skutečnosti vykonávají neustálý neuspořádaný kmitavý pohyb kolem svých rovnovážných poloh (ekvivalentních bodů), z čehož vyplývají následující závěry:
- přesná poloha každé částice krystalu je časově proměnná a nelze ji určit
- částice ve skutečnosti nejsou umístěny pravidelně ani periodicky, pravidelné periodické umístění vykazují pouze jejich rovnovážné polohy

Popis struktury krystalu se většinou provádí tak, že popíšeme rovnovážné polohy částic, ze kterých je krystal složen, a tohoto postupu se držím i já v této práci. Je tedy třeba mít na paměti, že následující modely a popisy ve skutečnosti popisují pouze teoretický stav, ve kterém jsou všechny částice ve svých rovnovážných polohách (přičemž je sice krajně nepravděpodobné, aby takový stav za normálních podmínek nastal, ale jde o určitý průměrný stav, kterým lze krystal v mnoha ohledech poměrně věrně popsat).

2 Technicky by nebyl problém pracovat s celými konečnými ani nekonečnými krystaly, ale zjistil jsem, že už při práci s krystaly čítajícími řádově stovky částic jsou modely značně nepřehledné.

3 Někdy se krystalová mřížka zjednodušeně definuje přímo jako množina bodů, ve kterých leží částice krystalu, a většinou se tak i používá. Obecně ale může jít o jakoukoli množinu bodů, od kterých se poloha částic odvozuje.

4 Avšak v některých případech mohou spojnice mezi částicemi krystalu tvořené krystalovou mřížkou znázorňovat vazby mezi těmito částicemi.

taková krystalová mřížka, jejíž struktura je zcela pravidelná, bez poruch.

Krystalová mřížka se odvozuje od další abstrakce, která se většinou označuje jako **elementární buňka** (základní buňka) krystalu. Elementární buňka je pro krystalovou mřížku něco jako mer pro polymer. Je to základní stavební jednotka, jejímž opakováním (zpravidla opakovanou translací ve směrech všech tří souřadných os⁵) získáme krystalovou mřížku.⁶

Krystalových mřížek (a zároveň elementárních buněk) existuje právě čtrnáct typů (tzv. Bravaisovy mříže⁷). Na základě tohoto poznatku rozdělujeme krystaly do krystalografických soustav, avšak tato problematika není součástí této práce.

Obecně (nezávisle na typu Bravaisovy mříže) se zpravidla uvádějí čtyři (resp. šest⁸) **typy elementárních buněk**, z nichž každá má svou značku (dělení podle [4]). Totéž rozdělení platí pro krystalové mřížky:

- **P - prostá** (primitivní) – částice jsou umístěny ve vrcholech elementární buňky
- **A, B, C - bazálně centrované** – částice jsou umístěny ve vrcholech elementární buňky a ve středech dvou protilehlých stěn elementární buňky
 - ➔ **A** - částice jsou umístěny ve středech přední a zadní stěny
 - ➔ **B** - částice jsou umístěny ve středech bočních stěn
 - ➔ **C** - částice jsou umístěny ve středech horní a dolní stěny
- **F - plošně centrovaná** – částice jsou umístěny ve vrcholech elementární buňky a ve středech stěn elementární buňky
- **I - prostorově centrovaná** – částice jsou umístěny ve vrcholech elementární buňky a ve středu elementární buňky

5 Protože popisujeme trojrozměrné objekty, používáme zpravidla pro popis soustavu souřadnou 0xyz. Tato soustava může, ale nemusí, být ortogonální.

6 Kromě termínů *krystalová mřížka* a *elementární buňka krystalu* existují také pojmy *geometrická mřížka* a *elementární rovnoběžnostěn*. Jejich význam je velmi blízký. Rozdíl mezi nimi lze vyjádřit takto: Pokud bodům elementárního rovnoběžnostěnu přiřadíme polohy částic, získáme elementární buňku (pro mřížky obdobně). Elementární rovnoběžnostěn tedy sám o sobě nepopisuje strukturu krystalu – k tomu je zapotřebí elementární buňka.

7 Auguste Bravais (1811-1863), francouzský fyzik, roku 1848 ukázal, že existuje 14 krystalových mřížek. Věnoval se též například magnetismu, meteorologii a astronomii - [3]

8 Zda počítáme čtyři nebo šest typů záleží na tom, zda bazálně centrované elementární buňky bereme jako jeden typ, či zda rozlišujeme, ve středech kterých stěn jsou částice umístěny. Model bazálně centrované elementární buňky je vytvořen jeden, ale mezi variantami A, B, a C lze přecházet pomocí nabídky „view“ - viz 2. přílohu.

B. Poruchy krystalové mřížky

Různými způsoby může dojít k rozmanitým poruchám krystalové mřížky, neboli odchylkám od ideální krystalové mřížky. Základními typy poruchy jsou poruchy **bodové** (nepravidelnost v jednom bodě) a **čárové** neboli dislokace mřížky (porušená oblast má čárový charakter).⁹ V okolí poruchy (až na výjimky¹⁰) dochází k nerovnováze vazebných sil a k deformaci krystalové mřížky.

Bodové poruchy mřížky lze dělit několika podobnými (ne zcela totožnými) způsoby. Já upřednostňuji toto dělení na čtyři druhy poruch:

- **Vakance**, neobsazený uzel mřížky. Může docházet k tzv. **difúzi** vakance neboli k jejímu přemístování v mřížce.¹¹
- **Vlastní částice v intersticiální (mezimřížkové) poloze**. Částice je jakoby „navíc“ v takovém místě krystalové mřížky, ve kterém by za normálních podmínek žádná částice být neměla. Zpravidla jde o částici, která se uvolnila ze své normální polohy v mřížce (tato porucha tedy úzce souvisí s poruchou předchozí).
Částice v intersticiální poloze může také difundovat. Pokud na sebe narazí vakance a částice v intersticiální poloze, zpravidla dojde k **rekombinaci** – obě poruchy se navzájem vyloučí.
- **Příměs** (cizí částice, nečistota) **v mřížkové poloze**. Vlastní částice krystalu je nahrazena částicí cizorodé látky.
- **Příměs v intersticiální poloze**. Jde o kombinaci předchozích dvou poruch (do krystalu se dostává cizorodá částice, která se navíc nachází v intersticiální poloze). Tato porucha také vykazuje schopnost difundovat, takže při kombinaci s vakancí může přecházet v předchozí poruchu - nečistotu v mřížkové poloze.

Dislokacemi mřížky se v této práci budu zabývat pouze stručně, neboť tato problematika je složitější než bodové poruchy a přesahuje běžný rámec učiva střední školy. Proto jsem ani netvořil trojrozměrné modely dislokací.

Rozlišujeme dislokace mřížky dvěma typy:

- **Hranová dislokace** je jakousi obdobou vakance, ale ve větším rozsahu – v případě hranové dislokace chybějí v krystalu celé souvislé skupiny částic.
- **Šroubová dislokace** znamená deformaci části mřížky, která se projeví hromadným posunem větší či menší skupiny částic oproti jejich poloze v dokonalém krystalu.

⁹ Dále známe ještě poruchy plošné a prostorové (objemové) - [3]

¹⁰ Výjimkou může být například bodová porucha třetího typu (příměs v mřížkové poloze) - pro některé vhodné kombinace původní a cizí částice zde vůbec nemusí docházet k deformaci mřížky.

¹¹ Správněji difúzi vakance popisujeme jako přemístění některé z okolních částic na její místo.

4. Závěr

Domnívám se, že vytvořením této práce vznikl materiál, který je použitelný pro základní seznámení s krystalografií pro jednotlivce i pro výuku na školách.

Díky použitým technologiím by pro potenciální zájemce o krystalografii neměl být problém s touto prací pracovat – zcela k tomu postačuje běžný počítač vybavený webovým prohlížečem (a případně připojením na internet, pokud zájemce nevlastní kopii přiloženého CD-ROMu). Pro prohlížení modelů je nezbytné do počítače doinstalovat VRML prohlížeč (ten bohužel k základní výbavě počítače nepatří), avšak pokud má uživatel na počítači právo instalovat software, neshledávám v tom žádnou překážku. Prohlížeč *Cortona* lze instalovat buď z CD-ROMu, nebo z internetových stránek společnosti ParallelGraphics. (Pokyny pro instalaci a používání prohlížeče Cortona viz 2. příloha)

U využití modelu ve školách vidím dvě možnosti. Pokud je škola vybavena dostatečným množstvím počítačů, domnívám se, že by bylo nejvhodnější na všechny počítače nainstalovat VRML prohlížeč a jednu hodinu fyziky absolvovat s žáky v počítačové učebně, aby si mohli modely „osahat“. Někomu na pochopení krystalových struktur stačí jen rychlý pohled, jiný si potřebuje modelem chvíli otáčet, než mu bude vše jasné.

Pokud škola takovou možnost nemá, bylo by vhodné využití dataprojektoru. Pedagog by modely promítal ze svého počítače na projekční plátno a otáčel by jimi tak dlouho, až by jim všichni žáci porozuměli. Pokud škola nedisponuje ani dataprojektorem, nezbyvá než se uchýlit k poněkud nouzovému řešení – předvádět modely celé třídě na jednom počítači.

Také se domnívám, že by bylo možné využít modely k prověřování znalostí žáků (ke zkoušení). Za tímto účelem jsem se v práci rozhodl zcela oddělit modely od výkladu, ačkoli původně jsem hodlal oboje spojit dohromady. Na CD-ROMu tedy najdete dva různé seznamy modelů:

První, označený jako „seznam s názvy“, je určen pro výklad. Modely jsou v něm rozdělené do kategorií a každý model je pojmenován.

Druhý, označený „pouze očíslované“, obsahuje prostý seznam modelů označených pouze čísly. Takto má pedagog k dispozici samostatnou sadu modelů, které neobsahují žádné další informace, které by žákům zkoušení zbytečně usnadňovaly. Pro pedagoga je pak určena písemná část 1. přílohy – Seznam modelů podle čísel.

5. Diskuze

Tato práce se drží lehce nad úrovní běžného středoškolského učiva, čímž (snad) splňuje vytyčený cíl, ovšem její rozšíření ještě dále za tuto úroveň by jistě nebylo marné. Vznikl by tak materiál, který by zájemcům o krystalografii zprostředkoval podrobné seznámení s jejími základy a objasnil by jim i některé pokročilejší krystalografické poznatky. Také by se mohly přidružit kapitoly z využití těchto poznatků v praxi, modely konkrétních krystalů, a podobně.

Práce se také nezabývá vazbami v krystalech. Je to proto, že vazby jako takové se těžko dají věrně vymodelovat, a středoškolské učebnice se omezují pouze na stručný popis jednotlivých typů vazeb a jejich výskytu. Nicméně i tato problematika by se mohla stát zajímavým rozšířením této práce.

A konečně, všechny vytvořené modely jsou modely statickými. Dá se jimi sice otáčet, přibližovat je, či jimi procházet, avšak model jako takový zůstává stále stejný. Naproti tomu ve skutečném krystalu, ač se jako takový jeví být v klidu, je neustále spousta pohybu. Jednak je to pohyb částic okolo jejich rovnovážných poloh (viz pozn. 1), jehož zavedením v modelech by se tyto mnohem více přiblížily realitě. Velmi zajímavá by jistě také byla pohyblivá modelace poruch krystalové mřížky – např. difúze vakance a její rekombinace s částicí v intersticiální poloze. Zavedením pohybu by se však modely staly několikanásobně komplikovanějšími, a taková práce by se již, dle mého názoru, spíše blížila středoškolské odborné činnosti než pouhé seminární práci.

Použitá literatura

Fyzika:

- [1] BARTUŠKA, K. - SVOBODA, E. **Fyzika pro gymnázia – Molekulová fyzika a termika**. 3. vyd. Praha: Prometheus 1996. Kapitola 5, Struktura a vlastnosti pevných látek, s. 122-135. ISBN 80-7196-052-7.
- [2] KŘÍŽ, David. **Úvod do krystalografie a strukturní analýzy**. Diplomová práce [online]. Praha: Czech and Slovak Crystallographic Association – CSCA, 2000. [Cit. 4.5.2006]. Dostupné z URL: <http://www.xray.cz/krystalografie>
- [3] CHVÁTAL, Marek a kol. **Úvod do mineralogie**. Internetová učebnice [online]. Praha: Univerzita Karlova a Olomouc: Univerzita Palackého, 2002. [Cit. 4.5.2006]. Dostupné z URL: <http://skripta.dictor.net>
- [4] KRÁLOVÁ, R. - NOVOTNÁ, Z. - BUDINSKÝ, R. **Rentgenová difrakce - okno do materiálu**. In Fyzika na WWW pro budoucí studenty ČVUT [online]. Praha: FJFI ČVUT, 1998. [Cit. 4.5.2006]. Dostupné z URL: http://www-troja.fjfi.cvut.cz/cgi-bin/toCP1250/~drska/edu/webfyz/rtg_difrakce Kapitola 2, Krystalické látky.
- [5] Kolektiv autorů: **Crystal Lattice Structures**. In Center for Computational Materials Science [online]. Washington, D.C.: The US Navy, 2004. [Cit. 4.5.2006]. Dostupné z URL: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice>

VRML:

- [6] GERGELITSOVÁ, Šárka. **VRML v příkladech**. 1. vyd. Praha: BEN – technická literatura, 2004. ISBN 80-7300-138-1
- [7] ZRZAVÝ, Jakub. **VRML, tvorba dokonalých WWW stránek, Podrobný průvodce**. 1. vyd. Praha: Grada Publishing, 1999. ISBN 80-7169-643-9

Copyright

Rozhodl jsem se tuto seminární práci, za účelem jejího potenciálního výše naznačeného využití, dát volně k dispozici na internet, a to na nově zřízené adrese <http://vrml.ic.cz/seminarka>. Dávám tímto souhlas s jejím volným šířením v libovolné formě, kopírováním i veřejným předváděním. Zdrojové kódy modelů jsou v textové a tedy volně zobrazitelné a editovatelné formě bez nutnosti dekompilace. Pro studium jsou k dispozici zcela volně, avšak jejich změna či využití pro tvorbu jiných modelů je povolena pouze po předchozím uvědomění.

Příloha č. 1: Seznam modelů na CD-ROMu „Krystalografie - trojrozměrné počítačové modely“ podle čísel

Elementární buňka

1. Prostá (P)
2. Bazálně centrovaná (A, B, C)
3. Plošně centrovaná (F)
4. Prostorově centrovaná (I)

Prostá krystalová mřížka

5. Bez částic (pouze geometrická mřížka)
6. Normální zobrazení
7. Pouze částice, bez spojnic mřížky

Bazálně centrovaná krystalová mřížka

8. Normální zobrazení
9. Pouze částice, bez spojnic mřížky

Plošně centrovaná krystalová mřížka

10. Normální zobrazení
11. Pouze částice, bez spojnic mřížky

Prostorově centrovaná krystalová mřížka

12. Normální zobrazení
13. Pouze částice, bez spojnic mřížky

Bodové poruchy krystalové mřížky

14. Vakance
15. Vlastní částice v intersticiální poloze
16. Příměs v mřížkové poloze 1
17. Příměs v mřížkové poloze 2
18. Příměs v intersticiální poloze

Příloha č. 2: Pokyny pro instalaci a používání prohlížeče Cortona VRML Client

Instalace programu

Po vložení CD-ROMu do mechaniky počítače by mělo dojít k automatickému spuštění a měla by Vám být nabídnuta možnost instalovat prohlížeč Cortona. Před prvním prohlížením modelů na daném počítači je nutné na něj tento prohlížeč nainstalovat.

Pokud nemáte CD-ROM, lze prohlížeč získat na webu této seminární práce (<http://vrml.ic.cz/seminarka>), případně přímo na webu společnosti ParallelGraphics (<http://www.parallelgraphics.com/bin/cortvrml.exe>).

Instalace se Vás v jednom bodě zeptá, pro které webové prohlížeče se má nainstalovat. Vyberte ty, které používáte. Pokud nevíte, pravděpodobně bude správná volba „Internet Explorer“.

Jako „Installation type“ (typ instalace) Vám pravděpodobně bude stačit „Typical“ (typická).

Dále pravděpodobně budete mít na výběr z několika různých tzv. „rendererů“. Výběr rendereru ovlivní kvalitu zobrazení modelů, zejména rychlost zobrazení a plynulost otáčení. Pokud nevíte, který renderer vybrat, ponechte nastavení tak, jak je. Později můžete toto nastavení změnit v nastavení programu (Preferences – Renderer) a vyzkoušet, která možnost Vám poskytne nejlepší výsledky.

Nakonec Vám instalace nabídne prohlédnutí souboru Readme.txt a ukázkové VRML scény (View a sample VRML scene...). U obou možností můžete zrušit zaškrtnutí.

Pozn.: prohlížeč může z důvodu ochrany bezpečnosti zakázat zobrazení VRML modelů. Pokud se tak stane, zablokovaný obsah povolte. Není třeba se ničeho obávat, mnou vytvořené modely jsou zcela bezpečné.

Používání programu

Použití programu je víceméně intuitivní. Uvádím zde základní seznámení, potřebné pro použití modelů této seminární práce. Podrobný návod (v angličtině) najdete v nápovědě k programu (pravé tlačítko myši – Help – User's Guide).

Při otevření modelu uvidíte především model jako takový. Po stranách najdete ovládací lištu (použití viz níže). Při kliknutí kamkoliv do okna pravým tlačítkem myši uvidíte další nabídku, z níž je asi nejzajímavější podnabídka Fullscreen, kde můžete zapnout zobrazení přes celou obrazovku. To provedete tak, že vyberete rozlišení Vašeho monitoru (často 1024×768) a požadovanou barevnou hloubku (pro tyto modely bohatě stačí 16 bpp). Zpět do zobrazení v okně potom se vrátíte klávesou Escape (Esc). Také zde najdete položku „Preferences...“, pod níž se skrývají různá nastavení programu. Doporučuji v ní, v záložce „Navigation“, nastavit „Animate viewpoints“ na hodnotu „Always“ - přechod mezi přednastavenými pohledy pak bude plynulý místo přechodu skokem.

Dobrá rada na začátek: pro návrat k původnímu zobrazení modelu se vždy můžete vrátit tlačítkem „**restore**“ (tlačítko najdete dole, druhé zprava). Bude se Vám hodit, pokud se Vám model třeba najednou ztratí.

Modelem pohybujete vždy **pohybem myši** za **stisknutého levého tlačítka myši**. Podle výběru režimu pohybu se bude model otáčet, přibližovat, oddalovat, a podobně. Pokud budete při pohybu myši navíc držet klávesu Control (Ctrl) na klávesnici, model se bude pohybovat rychleji.

Režim pohybu ve scéně vybíráte tlačítka v levé horní části ovládací lišty.

- Výchozím (předem vybraným) režimem bude většinou „**study**“ (studovat). V tomto režimu můžete modelem otáčet a prohlédnout si ho tak ze všech možných úhlů pohledu.

- Dále je k dispozici režim „**fly**“ (létat). Když si ho zapnete, můžete se doslova proletět scénou. Tento režim použijte, pokud budete chtít model přiblížit nebo oddálit (nebo také můžete použít tlačítko „**goto**“ - viz níže).

- Režim „**walk**“ (chodit) bude většinou vypnutý. Používá se pro chůzi po vodorovné rovině, což je pro modely krystalů značně irelevantní.

Další tlačítka v levé části lišty (plan, pan, turn, roll) slouží k výběru pohybů, které bude model vykonávat na základě pohybů myši. Můžete si je všechny vyzkoušet, ale nejsou důležitá.

Po kliknutí na tlačítko „**goto**“ se kurzor (ukazatel myši) změní na zaměřovací kříž. Pak si můžete vybrat libovolnou částici v modelu, kliknout na ni zaměřovacím křížem, a tato částice bude přesunuta do středu obrazovky a přiblížena (přirozeně včetně svého nejbližšího okolí).

Tlačítko „**align**“ slouží k zarovnání modelu podle vodorovné roviny, ale často nadělá více škody než užitku (nedoporučuji používat pro modely této práce).

Šipky doleva a doprava u nápisu „**view**“ slouží k výběru různých pohledů – tzv. „Viewpoints“ (v případě, že je k dispozici několik přednastavených pohledů). Po kliknutí přímo na nápis „**view**“ se zobrazí seznam všech pojmenovaných pohledů, ze kterých si můžete kliknutím zvolit požadovaný pohled.

Tlačítko „**fit**“ posune model tak, aby se při aktuálním natočení přesně vešel do okna (velmi užitečné tlačítko).

Pro návrat od zobrazeného modelu na seznam modelů použijte tlačítko Zpět webového prohlížeče (úplně přesně tak, jako když si prohlížíte stránky na internetu a dáváte Zpět).