INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Moderní přístup k aplikaci matematických dovedností v přírodovědných a ekonomických oborech
reg. č.: CZ.1.07/2.2.00/28.0168

Software Mathematica pro biology a chemiky

Marie Volná, Vlasta Lungová, Hana Šebestová, František Látal, Jan Říha

Olomouc 2015

Oponenti: doc. RNDr. Taťjana Nevěčná, CSc.
RNDr. Stanislav Hledík, Ph.D.

Tato publikace neprošla redakční jazykovou úpravou.

Olomouc 2015
1. vydání

ISBN 978-80-244-4473-4

Obsah

1 Úvod

Publikace se věnuje využití programu *Mathematica* (verze 10.0.0) v biologii a chemii. V textu jsou vybrány některé zajímavé problémy, které jsou zpracovány a popsány s využitím programu *Mathematica*. Matematika je dnes nezbytný obor pro studium v přírodovědných disciplínách a odpovídajících učitelských oborech. V době výkonných počítačů, notebooků či moderních tabletů je nezbytné zahrnout tyto progresivní prostředky do výuky a vést studenty k jejich smysluplnému a efektivnímu využívání. Díky moderním technologiím vzniká prostor k řešení náročnějších problémů. Implementace profesionálního matematického softwaru *Mathematica* přispívá ke zkvalitnění vyučovacího procesu dnes velmi náročných oborů, jako je biologie, chemie i fyzika.
Publikace *Software Mathematica pro biology a chemiky* je rozdělena do šesti tématických kapitol. V první části je pozornost věnována mezipředmětovým vztahům mezi biologií a fyzikou a to konkrétně na příkladu elektrické činnosti srdce. Tato kapitola je věnována lidskému srdci a jeho elektrické aktivitě. Kapitola se zabývá biosignálem a jeho úlohou v lidské těle a elektrickými pochody v lidském srdci. Pomocí programu *Mathematica* jsou analyzovány elektrokardiogramy získané pomocí systému Vernier a z reálných dat elektrokardiogramu jsou vytvořeny animace představující pohyb elektrického vektoru polarizovaného srdce během jednoho srdečního cyklu. S využitím WolframAlpha jsou v textu uvedeny statistické informace týkající se bradykardie a tachykardie. Další kapitola je věnována antropometrii neboli měření tělesných proporcí a rozměrů na živém jedinci. Kapitola číslo čtyři je zaměřena na výpočet antropologických indexů, které se v antropologii využívají z důvodu, že absolutní rozměry nedávají dostatečnou představu o tvarových příčinách a jiných odlišnostech na lidských tělech. Pátá sekce této publikace popisuje metody odhadu tělesného složení. V teoretické části se seznámíme s pojmy jako je frakcionace lidského těla a s technikami měření kožních řas. Praktická část je zaměřena na dvě základní metody odhadu tělesného složení. Další kapitola se zabývá krystalovou stavbou kovů a konstrukcí krystalové mřížky. V poslední části je pozornost věnována krystalizaci kovů a slitin.

1.1 Základní pravidla práce v programu *Mathematica*

Veškerá práce v programu *Mathematica* se provádí v Notebooku. Pro správné zobrazení zadaných úloh, je nutné dodržovat několik základních pravidel:

- V první řadě je důležité stanovit formát v jakém bude buňka napsána, zda se bude jednat o text, příkaz, nadpis, kód, číslovaný matematický vzorec apod. Toto rozdělení najdeme v horním řádku Format → Style.
- Pro matematické výpočty, tvorbu grafů nebo simulací použijeme styl buňky Input. Příkaz bude označen In[n]:= a výsledek se zobrazí v buňce s označením Out[n]=.

```
In[1]:= Solve[x + 2 == 4, x]
Out[1]= {{x → 2}}
```

- Provedení příkazu v buňce se provede po stisknutí kombinace kláves SHIFT+ENTER nebo stisknutím klávesy ENTER na numerické klávesnici.
- Pokud se na konci příkazu napíše středník, tak se příkaz vykoná, ale výsledek se nezobrazí v Notebooku.

```
Solve[x+2 == 4,x];
```

- Základní syntaxí softwaru *Mathematica* je: názvy funkcí se píší vždy velkým písmenem na začátku a argumenty funkcí se uvádí v hranatých závorkách.

```
Plot[function, {var, min, max}]
Cos[expr]
Table[expr, {var, start, end}]
Limit[expr, var → value]
```

- Pokud si nenadefinujeme jinak, tak platí, že k zápisu desetinného čísla se používá tečka.

```
konstanta = 1.389
```

- Násobení symbolů může být reprezentováno mezerou.

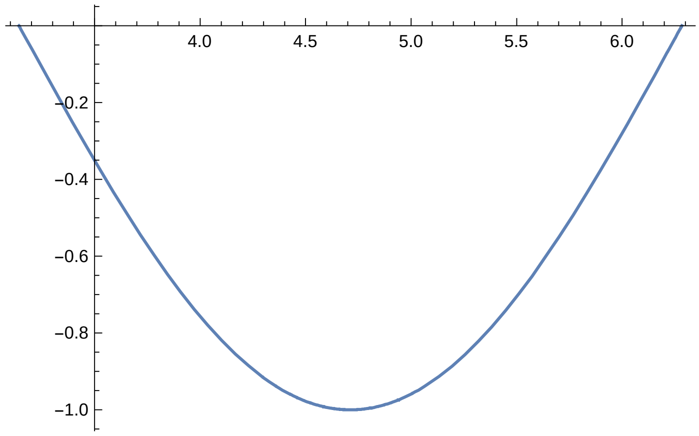
In[2]:=
```
Sin[2 × π];
```

In[3]:=
```
Sin[2 π];
```

- Důležitým pomocníkem při práci v Notebooku jsou Palety, které umožňují jednoduchým způsobem využívat funkce programu. Palety najdeme v horním řádku pod názvem Palettes.
- Pokud neznáme přesnou syntaxi, jak zapsat některý příkaz, lze využít tzv. free-form input. Zápisem znaku = na začátku buňky Input (např. = sin x from pi to 2pi), dojde s využitím serveru WolframAlpha k převedení příkazu do správné syntaxe (v tomto případě Plot[Sin[x], {x, Pi, 2Pi}]) a poté k provedení příkazu. Při zápisu znaku == na začátku buňky Input dostaneme plný výstup, který vytvoří server Wolfram Alpha.

In[4]:=
```
sin x from pi to 2pi
Plot[Sin[x], {x, Pi, 2 * Pi}]
```

Out[4]=

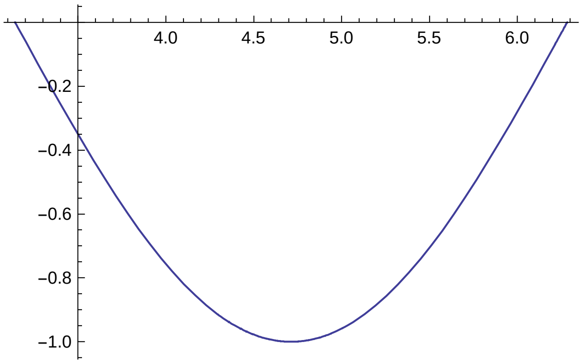


In[5]:= sin x from pi to 2 pi

Input interpretation:

plot	$\sin(x)$	$x = \pi$ to 2π

Plot:



min max

Arc length of curve: More digits

$$\int_{\pi}^{2\pi} \sqrt{1+\cos^2(x)}\, dx = 2\sqrt{2}\, E\left(\frac{1}{2}\right) \approx 3.8202$$

E(m) is the complete elliptic integral of the second kind with parameter m=k^2 »

WolframAlpha

- V rovnicích znamená symbol = přiřazení (definování) nové proměnné.

```
In[6]:= ypsilon = 2
Out[6]= 2
```

- Rovnost v rovnicích je potřeba napsat dvakrát symbol =, “==” .

```
In[7]:= Solve[x y + 3 x == 4, x]
```

Out[7]= $\left\{\left\{x \to \frac{4}{3+y}\right\}\right\}$

Ve zkratce uvádíme některé často používané příkazy na interpretaci zobrazovaných výsledků.

- Import dat se provádí přes příkaz Import[]. Importovat můžeme tabulkové data, grafiku, zvuky, výrazy i celé dokumenty. Pro import je vhodné zvolit vhodný formát, tím, že po názvu zadáme formát dat, např. “CVS”, “XLS” aj. Před příkazem Import je dobré použít příkaz SetDirectory[NotebookDirectory[]], který okazuje na místo, kde má *Mathematica* daný dokument hledat. NotebookDirectory[] přikazuje hledat daný soubor v adresáři, kde je uložen soubor, do kterého data importujeme.

```
In[8]:= SetDirectory[NotebookDirectory[]];
Import["svod2.txt", "Data"];
```

- Pro přehlednost interpretace dat jsou použity tabulky. Pro tvorbru tabulek je vhodné použít příkaz Insert [Grid[ ]] pro vložení položek v mřížce.
  Pro grafickou úpravu tabulky můžeme využít příkazů pro další úpravu.

zarovnání textu : Alignment→Automatic, Left, Righr, Top, Bottom, Baseline, Center
šířka sloupce: ItemSize→10
styp písma: ItemStyle→Directive[FontFamily→”Arial”,FontSize→12,Black]
styl tabulky: pozadí - Background→{None,{LightGreen,{White}}},
orámování - Frame→True
ohraniční - Dividers→ příkaz specifikuje jakým stylem a kam zakreslit ohraničení tabulky
předsazení textu v tabulce Spacings→3

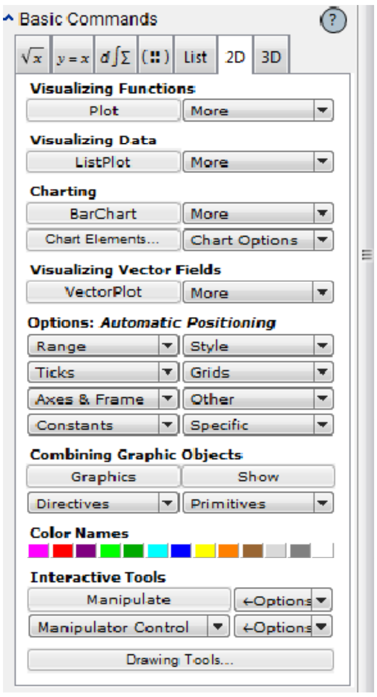
In[10]:=
```
Insert[Grid[{{"1.řádek/1. sloupec", "1.řádek/2. sloupec"},
   {"2.řádek/1. sloupec", "2.řádek/2. sloupec"},
   {"3.řádek/1. sloupec", "3.řádek/2. sloupec"}}, Alignment → Left,
  ItemSize → 10, ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black]
 ], {Background → {None, {LightGreen, {White}}}, Dividers → {Black},
  Frame → True, Spacings → {1, {1, 1, 1}} 2}, 2]
```

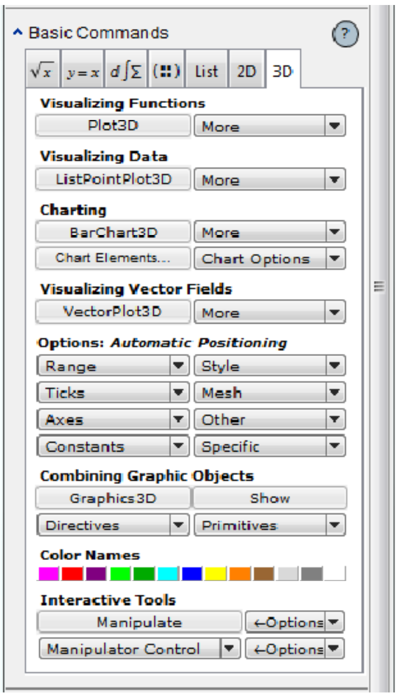
Out[10]=

1.řádek/1. sloupec	1.řádek/2. sloupec
2.řádek/1. sloupec	2.řádek/2. sloupec
3.řádek/1. sloupec	3.řádek/2. sloupec

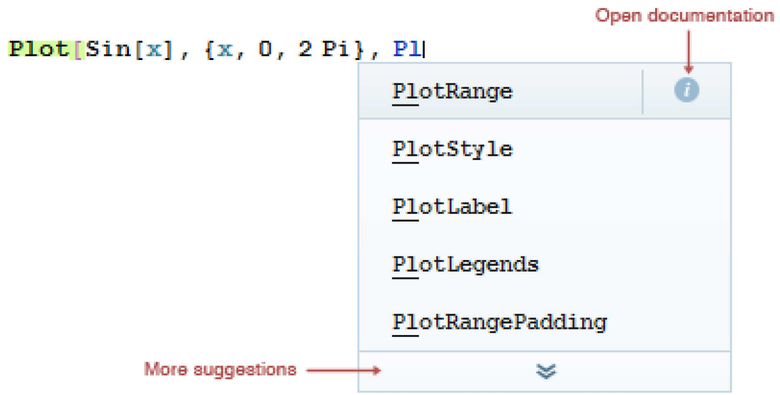
- Pro tvorbu grafů můžeme použít paletu Basic Math Assistant, kde v části Basic Commands 2D a Basic Commands 3D jsou všechny typy grafů. Pomocí části Options můžeme graf upravit podle našich představ (rozsah, tloušťku čar, styl osy, orámování, aj.)

  SetDirectory

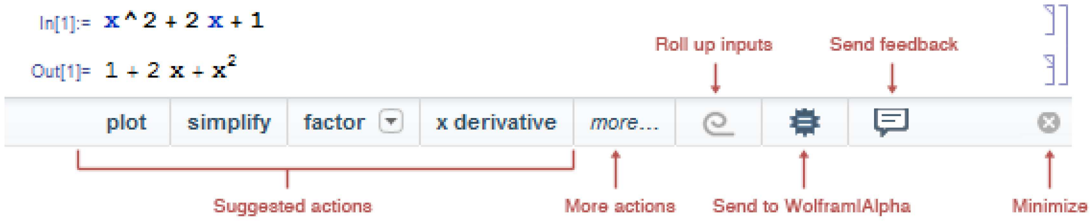




- Vytvořený program v softwaru *Mathematica* lze uložit ve formátu *.nb. Novou možností je ovšem uložení programu ve formátu Computable Document *.cdf. Programy v tomto formátu lze vkládat např. na webové stránky, kde si jej mohou spustit i uživatelé bez softwaru *Mathematica*, stačí, když si zdarma nainstalují *Wolfram CDF Player*.
- Od verze Mathematica 9 došlo k výraznému zjednodušení práce s programem. Input Assistant automaticky dokončuje příkazy, které chce uživatel do programu napsat.



- Od verze Mathematica 9 lze také využívat Suggestion Bar, který umožňuje jednoduše doplnit a vylepšit výsledek matematického příkazu.



- Verze Mathematica 10 přinesla možnost vrátit libovolný počet kroků zpět při práci v programu. Dřívější verze umožňovaly pouze jeden krok zpět.
- Software *Mathematica* obsahuje podrobnou nápovědu, kterou lze nalézt v hormín řádku softwaru Help → Documentation Center. Rozsáhlou podporu pro práci v programu *Mathematica* nabízí webová stránka www.wolfram.com.

2 Elektrická činnost srdce

Tato kapitola je věnována lidskému srdci a jeho elektrické aktivitě. Nejprve bude představen pojem biosignál a jeho úloha v lidské těle a poté se budeme věnovat elektrickým pochodům v našem srdci. Pomocí programu *Mathematica* budeme analyzovat elektrokardiogramy získané pomocí systému Vernier a z reálných dat elektrokardiogramu vytvoříme animaci představující pohyb elektrického vektoru polarizovaného srdce v čase během jednoho srdečního cyklu.

2.1 Biopotenciály

Informace o činnosti organismu získáváme skrze biosignály. **Biosignál** je libovolná pasivní reakce na fyzikální nebo chemický podnět z vnějšího prostředí. Jedním z typů biosignálů je **biopotenciál**, měřené napětí mezi dvěma body na těle. Tkáň živého organismu je složena z buněk a ty jsou obklopeny extracelulární tekutinou, která je tvořena především tkáňovým mokem, vyloučenými metabolity, proteiny, hormony, enzymy a ionty. V důsledku látkových přeměn v organismu vzniká nerovnoměrné rozložení iontů a právě ionty tvoří tento mezibuněčný prostor elektricky vodivým. Z fyzikálního hlediska dělíme vodiče na dva typy:

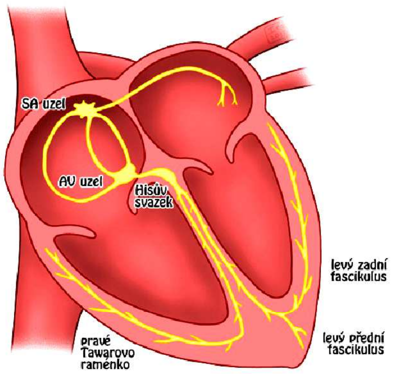
Vodič prvního typu - elektrický proud je veden elektrony.

Vodiče druhého typu - elektrický proud je zprostředkován ionty.

Naše tělo je tedy vodičem druhého typu, proud je zprostředkován ionty v mezibuněčném prostoru. Díky vodivosti mezibuněčného prostoru se tělem šíří elektrické proudy, které můžeme na povrchu těla snímat a měřit.

2.2 Šíření potenciálů v srdci

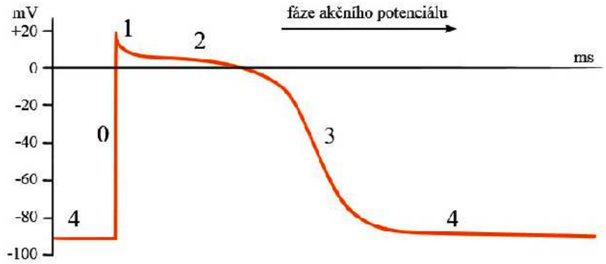
Pro funkci srdce je důležité šíření biopotenciálů. V srdci existují dva druhů buňek, buňky srdeční svaloviny (buňky pracovní) a buňky vedoucí vzruch. Buňky jsou spojeny v jednom funkčním orgánu a proto vrzuch vzniklý v jedné části srdce se šíří po celém srdci. Počátek srdečního cyklu je v sinoatriálním uzlu (SA uzlu). Od sinusového uzlu se elektrický impulz šíří přes srdeční svalovinu síní dále k atrioventrikulárnímu uzlu (AV uzlu). Dále od atriovertikulárního uzlu se šíří velmi rychle vlákny Hisového svazku, který se větví na pravé a levé Tawarovo raménko až k Purkyňovým vláknům a poté až na svalovinu komor. V SA uzlu dochází ke spontální depolarizaci, která určuje srdeční rytmus.



Obr. 1: Nervový systém srdce (www.wikiskripta.eu/index.php/Převodní_systém_srdeční)

Tkáň organismu je tvořena buňkami a mezibuňečným prostorem. Je-li buňka v klidovém stavu dochází k disociaci molekul. Kationty se zdžují na vnější straně buněčné membrány a anionty na vnitřní straně buněčné membrány. Podíl na vytváření klidového potenciálu mají sodíkové ionty, které se majoritně zdržují vně buňky a ionty K^+, které jsou převážně uvnitř buňky. Na buněčné membráně se vytváří elektrický potenciál a říkáme, že buňka je polarizována. U většiny buněk se klidový potenciál pohybuje v rozmezí od - 30 mV do - 90 mV. Buněčná membrána je za normálních podmínek propustná jen pro vodu a malé molekuly, prostup ostatních látek je zajišťován transportními bílkovinami. V okamžiku, kdy na buňku přichází vzruch z nervových vláken převodního systému, pronikají anionty na povrch buňky a naopak kationty dovnitř buňky. Tuto změnu polarity buněčné membrány srdeční svalové buňky označujeme jako **depolarizaci**. Depolarizace srdečních buněk se registruje na elektrokardiogramu jako pozitivní kmit. Po depolarizaci následuje **repolarizace** buňky, kdy sodíková pumpa (Na^+/K^+ ATPáza) přečerpává kationty z mezibuněčného prostoru do buňky a obnovuje se elektrická rovnováha. Podíváme-li se na obrázek 2, vidíme průběh změny membránového potenciálu během jednoho cyklu. Část 0-2 zobrazuje depolarizace buňky a část 3-4 představuje repolarizaci srdeční buňky.

Jedinečná funkce SA uzlu je způsobena nestálosti klidového potenciálu. Po dokonční repolarizace probíhá v SA uzlu pomalá samovolná depolaziazce. Tímto zajišťuje SA uzel automatickou elektrickou aktivitu v rozmezí 50-100 impulzů za minutu. Frekvence depolarizace SA uzlu je ovlivňována nervstvem a hormony. Snímáním a diagnostikou biopotenciálů vytvářených srdcem se zabývá elektrokardiografie.



Obr. 2: Průběh akčního potencálu srdeční buňky (www.wikiskripta.eu/index.php/Akční_potenciál_v_srdci)

2.3 Elektrokardiografie

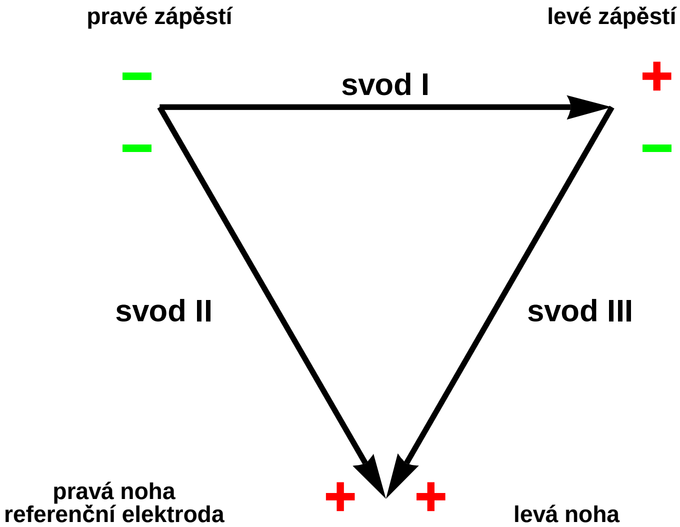
Kardiologie je část oboru vnitřního lékařství, která se zabývá diagnostikou a nechirurgickou terapií srdce, speciálně disgnostikou vrozených vad, ischemických chorob, srdečních selhání a jiných onemocnění srdce. Základní metodou diagnostiky srdce je elektrokardiografie. Principem elektrokardiografie je snímání elektrické aktivity srdce z povrchu těla nebo srdce.

Srdeční kontrakce jsou spojeny s elektrickými změnami na membránách buněk. Naše srdce je tvořeno miliardami (přibližně 10^{10}) svalových buněk a každá buňka má v rámci jednoho srdečního cyklu svůj elektrický cyklus. Elektrickou činnost srdeční buňky si můžeme představit jako **vektorovou sílu**. Každá srdeční buňka má svůj okamžitý vektor, který mění svou velikost a směr během srdečního cyklu. Součet všech vektorů srdečních buněk utváří obraz elektrické činnosti srdce. Elektrokardiograf zaznamenává srdeční aktivitu jako sled **srdečních vektorů**. Elektrické změny buněk vyvolávají elektrické proudy, které se šíří tělem, a můžeme je detekovat na povrchu těla pomocí elektrod jako změnu potenciálů. Při snímání elektrického potenciálu jsou elektrody umístěny na těle na určitých místech a zaznamenávají směr a velikost elektrický proudů v těchto místech. Přístroj zaznamenávající elektrickou aktivitu se nazývá elektrokardiograf. Záznam elektrických potenciálů snímaných na povrchu těla v čase se nazývá elektrokardiogram nebo také EKG křivka .

Pro získání elektrokardiogramu připojujeme elektrody na strategická místa na těle. Nejjednodušší připojení elektrod je bipolárním snímání na končetinách podle Willema Einthovena. Při snímání EKG na končetinových svodech jsou aktivní elektrody umístěny na pravé a levé horní končetině a levé dolní končetině a na pravou dolní končetinu umisťujeme elektrodu, která slouží jako uzemňovací elektroda. Elektrický potenciál měříme mezi dvěmi elektrodami. Pro snímání je nutný dobrý kontakt mezi elektrodou a kůží, což je zajištěno používáním EKG gelu. Snímáním elektrického napětí mezi dvěma elektrodami dostáváme obraz srdce z příslušné strany a ten nazýváme **svod**. Podrobný popis zapojení elektrod do svodů je vykreslen na obrázku 3. Při měření elektrokardiogramu podle Einthovena využíváme zakreslení svodů do rovnostranného trojúhelníku, kde přibližně v těžišti trojúhelníka leží srdce. Jeden svod tvoří dvě elektrody, jejichž polarita je předem dána. Svod I dává pohled na srdce zleva, svod II pohlíží na srdce z místa od levého třísla a svod III hledí na srdce z místa od pravého třísla. Všechny svody hledí na srdce ve frontální rovnině, tj. rovina dělící tělo na přední a zadní část. Pro přesnější analýzu srdce se při diagnostice srdce užívá unipolárních končetinových svodů a hrudních svodů.

In[11]:=
```
Graphics[{Text[Style["svod I", 16, Bold ], {0.5 , 0.05}],
Text[Style["pravé zápěstí", 12, Bold ], {-0.0 , 0.2}],
Text[Style["levé zápěstí", 12, Bold ], {1. , 0.2}],
Text[Style["levá noha", 12, Bold ], {0.9 , -0.9}],
Text[Style["pravá noha", 12, Bold ], {-0.1 , -0.85}],
Text[Style["referenční elektroda", 12, Bold ], {-0.1 , -0.9}],
Text[Style["svod III", 16 , Bold], {0.93 , -0.45}],
Text[Style["svod II", 16, Bold ], {0.01 , -0.45}],
Text[Style["-", Green, FontSize → 30, Bold ], {-0.05 , 0.08}],
Text[Style["+", FontSize → 30, Bold, Red ], {1.1 , 0.08}] ,
Text[Style["+", FontSize → 30, Bold, Red ], {0.6 , -0.85}] ,
Text[Style["+", FontSize → 30, Bold, Red ], {0.4 , -0.85}] ,
Text[Style["-", FontSize → 30, Bold, Green ], {-0.05 , -0.08}] ,
Text[Style["-", FontSize → 30, Bold, Green ], {1.1 , -0.08}] ,
{Arrowheads[0.08] , Thickness[0.01], Arrow[{{0, 0}, {1, 0}} ]},
{Arrowheads[0.08], Thickness[0.01], Arrow[{{1, 0}, {1/2, -√3/2}}]},
{Arrowheads[0.08], Thickness[0.01], Arrow[{{0, 0}, {1/2, -√3/2}}]}}, ImageSize → 350]
```

Out[11]=



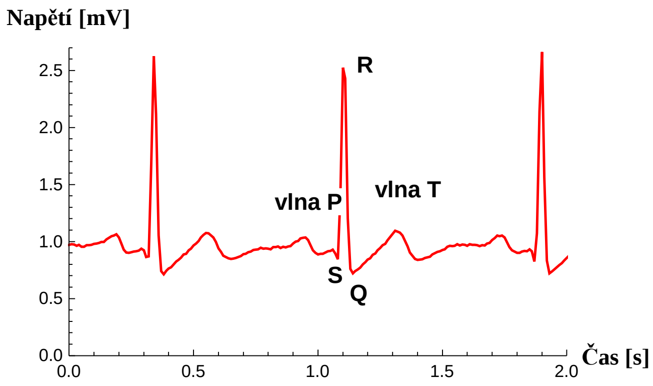
Obr. 3: Einthovenův rovnostranný trojúhelník pro zobrazení zapojení elektrod při snímání elektrické aktivity srdce

Elektrokardiogram je, v našem případě při zapojení standardních Einthovenových svodů, složen ze tří EKG křivek, které znázorňují obraz srdce ze tří směrů. EKG křivka je složena z kmitů a vln, které vystupují z izoelektrické linie. (Izoelekrická linie je linie při chodu na prázdno nebo v době mezi jednotlivými cykly.) V každé EKG křivce rozlišujeme dvě vlny P a T a kmity Q, R a S a tři kmity Q, R a S souhrně nazýváme komplex QRS (obrázek 4).

Každý kmit i vlna v EKG křivce odpovídá jedné části v elektrickém cyklu srdce. Srdce má 4 oddíly, ale z hlediska elektrického můžeme mluvit jen o dvou částech, protože síně kontrahují v témže čase a taktéž komory kontrahují společně. Projevem vedení vzruchu ze sinoátriálního uzlu přes svalovinu síní, atrioventrikulární uzel, Hisův svazek až po síť Purkyňových vláken je obrazem části od počátku vlny P až po začátek QRS komplexu. Vlna P je tedy projevem depolarizace síní, nejprve pravé síně a poté levé síně. Následný komplex QRS představuje depolarizaci komor a úsek od kmitu S po počátek vlny T představuje časový úsek mezi depolarizací komor a repolarizací komor. Poslední vlna T znázorňuje repolarizaci komor, tj. navrácení srdečního svalu k výchozímu elektrickému stavu.

Každý člověk je originál a proto i uložení srdce v hrudním koši je jiné, proto každý člověk má jiné EKG křivky. Pokud nějaká část srdce nefunguje jak má, objeví se na elektrokardiogramu anomálie, které jsou pro lékaře signálem, že je něco v nepořádku.

In[12]:=
```
SetDirectory[NotebookDirectory[]];
Svod2 = Import["svod2.txt", "Data"];
ListLinePlot[Svod2, AxesLabel →
   {Text[Style["Čas (s)", Bold, 12]], Text[Style["Napětí (mV)", Bold, 12]]},
  PlotRange → {{0.0, 2}, {0, 2.7}}, PlotStyle → {Red, Thickness → 0.005},
  ImageSize → 350];
```



Obr. 4: Popis hlavních části EKG křivky

2.4 Základní kroky při diagnostice srdce

Nyní si uvedeme tři jednoduché kroky hodnocení elektrokardiogramu.

Krok 1: Zjištění srdečního rytmu a frekvence

V prvním bodu zkoumáme, zda srdeční rytmus je sinusový, tj. jestli za vlnou P následuje QRS komplex a poté vlna T. Srdeční frekvenci stanovujeme pomocí vzdáleností kmitů R. Srdeční frekvence u zdravého dospělého jedince se pohybuje v rozmezí od 60 do 100 tepů za minutu. Je-li srdeční frekvence nižší než 60 tepů za minutu nazýváme ji bradykardií a je-li srdeční frekvence vyšší než 100 tepů za minutu nazýváme ji tachykardií. Srdeční frekvence u dětí je vyšší, než u dospěných lidí, naproti tomu srdeční frekvence výkonostních sportovců je mnohdy nižší než 60 tepů za minutu.
Pomocí WolframAlpha můžeme zjistit, kolik pacientů trpí tachykardií a bradykardií v USA a jaké jsou nejčastější příznaky onemocnění a charakteristika pacientů.

In[15]:=
```
WolframAlpha["tachycardia", IncludePods → "BasicProperties:SymptomData",
 AppearanceElements → {"Pods"}, TimeConstraint → {30, Automatic, Automatic, Automatic}]
```

Out[15]=

Patients with symptom in a given year: Show visit month

	male	female	all
fraction of US population	1 in 1200 ≈ 0.084%	1 in 1000 ≈ 0.1%	1 in 1070 ≈ 0.093%
number of US patients	149 400 per year	247 200 per year	396 600 per year
average patient age	43 years	55 years	50 years
symptom sample size	42 visits	87 visits	129 visits

(estimates based on 131 748 patient visits to healthcare providers from NAMCS and NHAMCS, weighted for USA healthcare demographics, 2006 to 2007)

In[16]:=
```
WolframAlpha["bradycardia", IncludePods → "BasicProperties:SymptomData",
 AppearanceElements → {"Pods"}, TimeConstraint → {30, Automatic, Automatic, Automatic},
 PodStates → {"BasicProperties:SymptomData__Show visit month",
   "BasicProperties:SymptomData__Hide visit month"}]
```

Out[16]=

Patients with symptom in a given year: Show visit month

	male	female	all
fraction of US population	1 in 1960 ≈ 0.051%	1 in 17 500 ≈ 0.0057%	1 in 4000 ≈ 0.025%
number of US patients	91 300 per year	14 100 per year	105 300 per year
average patient age	60 years	62 years	61 years
symptom sample size	9 visits	4 visits	13 visits

(estimates based on 131 748 patient visits to healthcare providers from NAMCS and NHAMCS, weighted for USA healthcare demographics, 2006 to 2007)

In[17]:=
```
WolframAlpha["tachycardia", IncludePods → "CoocurringSymptom:SymptomData",
 AppearanceElements → {"Pods"}, TimeConstraint → {30, Automatic, Automatic, Automatic},
 PodStates → {"MedicalCoverage:SymptomData__Show chart"}]
```

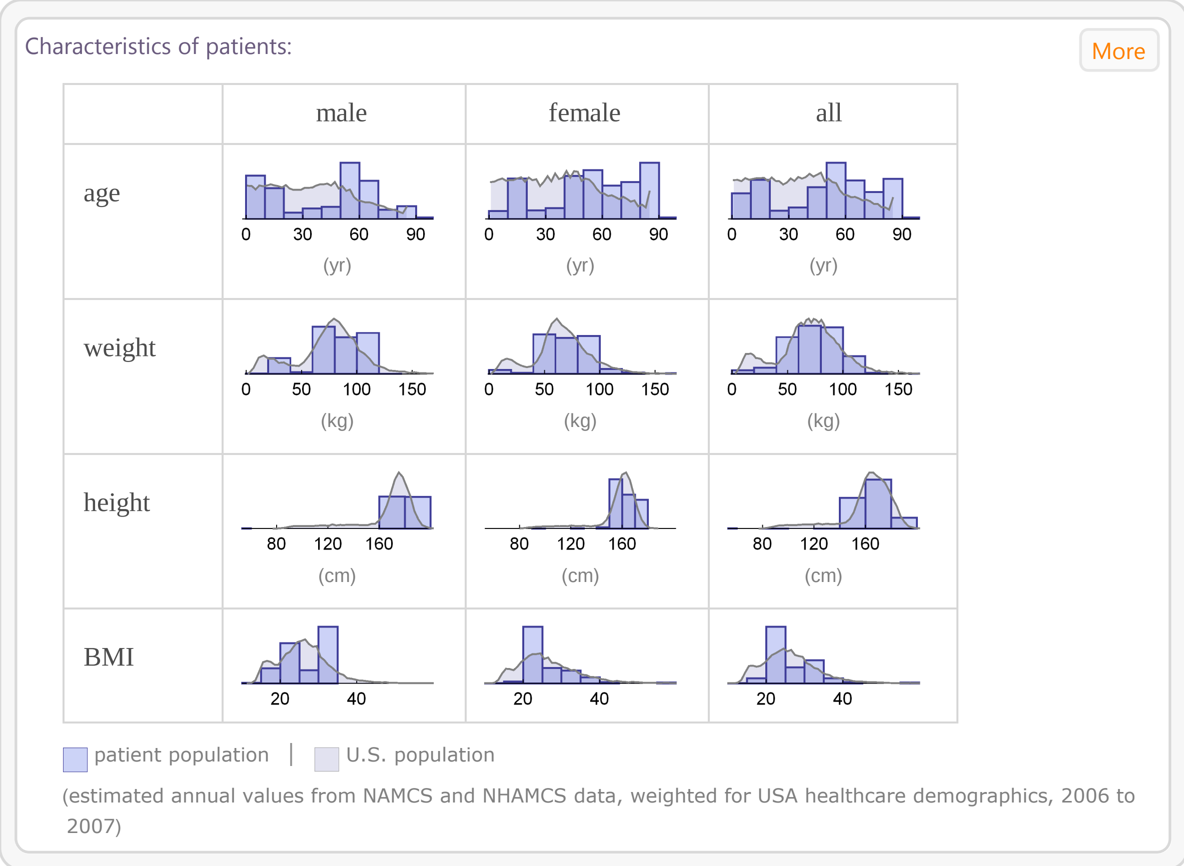
Out[17]=

Probabilities of co–occurring symptoms: Show specific symptoms More

	male	female	all
chest pain and related symptoms	4%	25%	17%
tiredness or exhaustion	0.2%	13%	8%
phlegm or sputum abnormalities	≈ 0%	12%	7%
wheezing	≈ 0%	12%	7%
congestion in the chest	18%	≈ 0%	7%

In[18]:=
```
WolframAlpha["tachycardia", IncludePods → "PatientCharacteristics:SymptomData",
 AppearanceElements → {"Pods"}, TimeConstraint → {30, Automatic, Automatic, Automatic},
 PodStates → {"MedicalCoverage:SymptomData__Show chart",
   "PatientCharacteristics:SymptomData__More",
   "PatientCharacteristics:SymptomData__Less"}]
```

Out[18]=



Krok 2: Měření délky intervalů

V tomto kroku je důležité stanovit délky jednotlivých intervalů a to interval PR, úsek QT, šířka QRS komplexu a délku vlny P a porovnat je s normálními hodnotami. Tyto hodnoty jsou uvedeny v tabulce 1.

In[19]:=
```
Insert[Grid[{{"Intervaly", "normální hodnoty"}, {"P-R", "0.12 - 0.2 s"},
   {"úsek QT", "0.25 - 0.45 s"}, {"komplex QRS", "0.05 - 0.1 s"},
   {"vlna P", "0.08 - 0.12 s"}}, Alignment → Left, ItemSize → 10,
  ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black],
  {Dividers → All, Spacings → {1.5`, 1.5`}}],
 {Background → {None, {LightGreen, {White}}}, Dividers → {Black, {2 → Black}},
  Frame → True, Spacings → {2, {2, {0.9}, 2}}}, 2]
```

Out[19]=

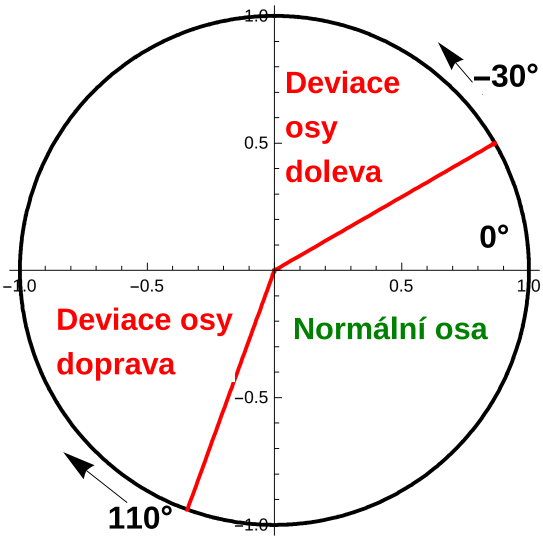
Intervaly	normální hodnoty
P–R	0.12 – 0.2 s
úsek QT	0.25 – 0.45 s
komplex QRS	0.05 – 0.1 s
vlna P	0.08 – 0.12 s

Tabulka 1. Normální délky úseků části EKG křivky (Sovová, 2006)

Krok 3: Stanovení elektrické osy srdeční

Určení elektrické osy srdeční pomáhá diagnostikovat choroby srdce. Součtem všech elektrických vektrorů vzniká jeden srdeční vektor. V čase kmitu R, moment depolarizace celého srdce, je elektrická osa srdeční totožná s vektorem kmitu R. Sklon elektrické osy srdeční se pak určuje pomocí Einthovenova rovnostranného trojúhelníku (v případě zapojení elektrod podle Einthovena). Sklon elektrické osy srdeční je určen uložením srdce v hrudníku, morfologií funkčního myokardu komor a postupem depolarizace. V případě zdravého srdce můžeme tedy vypočítat polohu našeho srdce v hrudním koši. Pro získání elektrokardiogramu z končetinových svodů, vynesením výchylek kmitu R do Einthovenova trojúhelníku zjistíme polohu vektoru v čase kmitu R a tedy i elektrickou osu srdeční (pozn. Eithovenův trojúhelník rovnostranný). Patologický směr elektrické osy srdeční je znázorněn na obrázku 5. Zdravý člověk má elektrickou srdeční osu v rozmezí od - 30° do + 110°, kdy 0° je totožná se směrem kladné osy *x*. Zdravé osoby mají nejčastěji elektrickou osu srdeční směr 60°, sklon osy od 0° do 30° mají lidé obézní, těhotné ženy (vysoká bránice), nebo jestliže má člověk přetíženou levou komoru. Naopak osu od 90° do 110° mají štíhlí lidé, úzký a delší hrudník.

In[20]:=
```
Graphics[Show[{
ParametricPlot[{Sin[x], Cos[x]}, {x, 0, 2 Pi}, PlotStyle → {Thick, Black}],
ParametricPlot[{x, Tan[30 °] x}, {x, 0, Cos[30 °]}, PlotStyle → {Thick, Red}],
ParametricPlot[{x, Tan[70 °] x}, {x, -Sin[20 °], 0}, PlotStyle → {Thick, Red}]}]];
```



Obr. 5: Sklon elektrické osy srdeční

2.5 Snímání srdečních biopotenciálů pomocí sondy Vernier

Pro získání elektrokardiogramu byla použita EKG sonda firmy Vernier a LabQuest Vernier. Pomocí programu Logger Pro 3 převedeme data do textového souboru, které následně můžeme importovat do programu *Mathematica*. Sonda EKG je citlivý voltmetr, který pomocí elektrod snímá elektrický signál ze těla. Každá EKG sonda Vernier má tři krokosvorky červenou, zelenou a černou. Černá krokosvorka se nazývá referenční elektroda, která je připojena vždy na pravou nohu. Červenou a zelenou svorku připojujeme na místa podle obrázku číslo 3. V této části se věnuje zpracování dat z EKG sondy.

Obr. 6: EKG senzor Vernier (www.vernier.com)

Exportování dat a zobrazení EKG křivek ze tří Einthovenových svodů

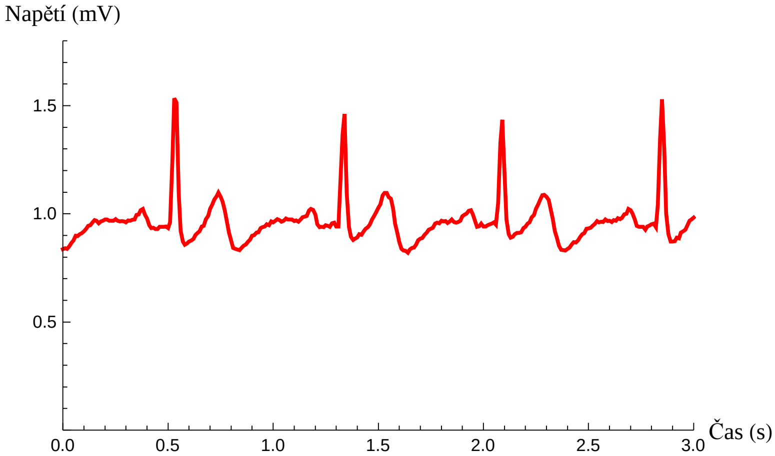
Každý Einthovenův svod zobrazuje jednu EKG křivku a ta ukazuje změnu elektrického napětí v čase. EKG křivky byly naměřeny a následně exportovány do textových souborů (*.txt). Nyní tedy pomocí příkazu **Import**, importujeme naměřená data pod názvem Leads a prověříme jejich dimenzi pomocí příkazu **Dimensions**.

```
In[21]:= SetDirectory[NotebookDirectory[]];
Svod1 = Import["svod1.txt", "Data"];
Svod2 = Import["svod2.txt", "Data"];
Svod3 = Import["svod3.txt", "Data"];
Dimensions[Svod1]
Dimensions[Svod2]
Dimensions[Svod3]

Out[25]= {301, 2}

Out[26]= {301, 2}

Out[27]= {301, 2}
```

V souboru Svod 1-3 máme dva sloupce a 301 řádků. Data byla měřena po dobu 3 sekund s frekvencí 100 vzorků/s. Příkazem **ListLinePlot** si EKG křivku prvního svodu zobrazíme v grafu. EKG křivku zobrazíme pomocí fukce **ListLinePlot** a upravíme vlastnosti grafu. Následně přidáme i grafy svodů 2 a 3.

```
In[28]:= ListLinePlot[Svod1, PlotRange → {{0, 3}, {0, 1.8}}, PlotStyle → {Red, Thick}, AxesLabel →
   {Text[Style["Čas (s)", 12]], Text[Style["Napětí (mV)", 12]]}, ImageSize → 400]
```

Out[28]=

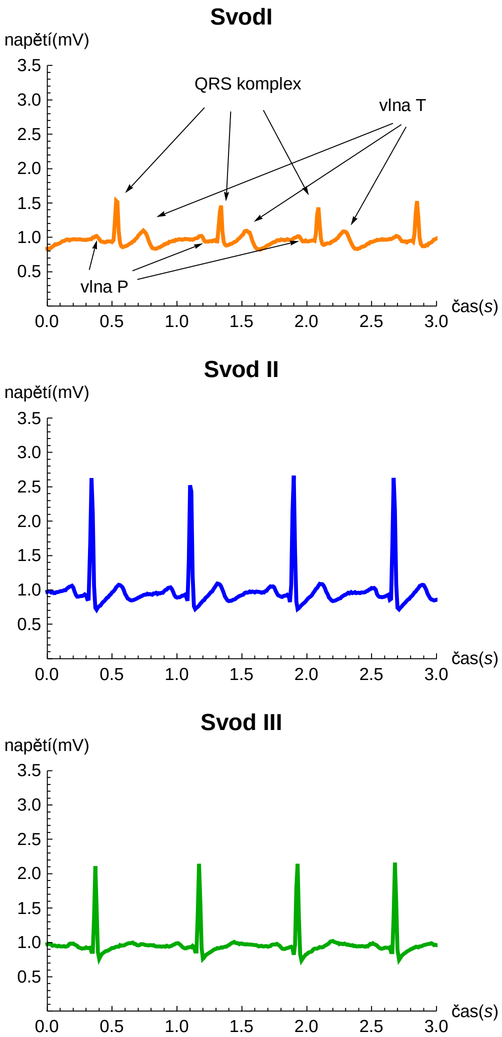


Obr. 7: EKG křivka svodu I

Úkol 1: Analýza srdečního rytmu a výpočet frekvence

Po vytvoření EKG křivek z dat vidíme, že srdeční rytmus je v pořádku. Po vlně P následuje QRS komplex a poté vlna T.

In[29]:=
```
GraphicsColumn[{
   Graphics[ListLinePlot[Svod1, AxesLabel → {"čas (s)", "napětí(mV)"},
     PlotLabel → Style["svod I", Black, Bold, 12],
     PlotRange → {{0, 3}, {0, 3.5}}, PlotStyle → {Orange, Thickness → 0.01} ]],
   Graphics[ListLinePlot[Svod2, AxesLabel → {"čas (s)", "napětí(mV)"} ,
     PlotLabel → Style["svod II", Black, Bold, 12],
     PlotRange → {{0, 3}, {0, 3.5}}, PlotStyle → {Blue, Thickness → 0.01}]],
   Graphics[ListLinePlot[Svod3, AxesLabel → {"čas (s)", "napětí(mV)"},
     PlotLabel → Style["svod III", Black, Bold, 12], PlotRange → {{0, 3}, {0, 3.5}},
     PlotStyle → {Darker[Green], Thickness → 0.01}]]}, ImageSize → {300, 600}];
```



Obr. 8: Svody I, II a III

Nyní z dat zjistíme frekvenci srdečního rytmu. Pro výpočet frekvence byl vybrán svod III, protože jeho maxima kmitu R jsou sobě nejblíže. Pro výpočet frekvence, seřadíme hodnoty svodu III a vybereme největší hodnotu napětní z prvních 100 dat a z posledních 100 dat. Odečteme od sebe, podělíme 3 (časový úsek 4 kmitů) a vynásobíme 60. Výsledkem bude srdeční frekvence v tepech za minutu.

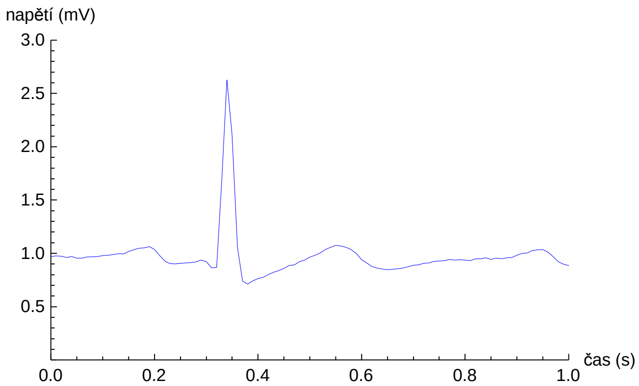
In[30]:=
```
S3Z = Take[Svod3, 100];
S3K = Take[Svod3, - 100];
R1 = Sort[S3Z, #1[[2]] > #2[[2]] &];
R4 = Sort[S3K, #1[[2]] > #2[[2]] &];
srdfrek3a = 60 / ((R4[[1, 1]] - R1[[1, 1]]) / 3)
```

Out[34]= 77.9221

Úkol 2: Měření délky intervalů

Pro měření délky intevalů vybereme svod ve kterém jsou vlny a kmity nejlépe vidět, tj. svod II a najdeme hodnoty počátku vlny P, konec vlny P, kmit Q, kmit S, kmit R a konec vlny T.

In[35]:=
```
ListLinePlot[Svod2, AxesLabel → {"čas (s)", "napětí (mV)"},
 PlotRange → {{0, 1}, {0, 3.}}, PlotStyle → {Blue, Thickness → 0.001}]
```

Out[35]=


Obr. 9: Svod II

In[36]:=
```
P0 = {0.1353, 0.9862};
P1 = {0.2309, 0.9066};
Q = {0.3184, 0.8403};
R = {0.3397, 2.636};
S = {0.3758, 0.6943};
T = {0.6409, 0.8535};
```

In[42]:=
```
Insert[Grid[{{"Intervaly", "normální hodnoty",
    "počáteční hodnota intervalu", "konečná hodnota intervalu", "výpočet"},
   {"P-R", "0.12 - 0.2 s", P0[[1]], R[[1]], N[R[[1]] - P0[[1]]]},
   {"úsek QT", "0.25 - 0.45 s", Q[[1]], T[[1]], N[T[[1]] - Q[[1]]]},
   {"komplex QRS", "0.05 - 0.1 s", Q[[1]], S[[1]], N[S[[1]] - Q[[1]]]},
   {"vlna P", "0.08 - 0.12 s", P0[[1]], P1[[1]], N[P1[[1]] - P0[[1]]]}},
  Alignment → Center, ItemSize → 9,
  ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 10, Black],
  {Dividers → All, Spacings → {1, 1}}], {Background → {None, {LightGreen, {White}}},
  Dividers → {Black, {2 → Black}}, Frame → True, Spacings → {0.2, {1.5, {1}, 1.5}}}, 2]
```

Out[42]=

Intervaly	normální hodnoty	počáteční hodnota intervalu	konečná hodnota intervalu	výpočet
P–R	0.12 – 0.2 s	0.1353	0.3397	0.2044
úsek QT	0.25 – 0.45 s	0.3184	0.6409	0.3225
komplex QRS	0.05 – 0.1 s	0.3184	0.3758	0.0574
vlna P	0.08 – 0.12 s	0.1353	0.2309	0.0956

Tabulka 2. Výpočet délek intervalů

Úkol 3: Stanovení elektrické osy srdeční

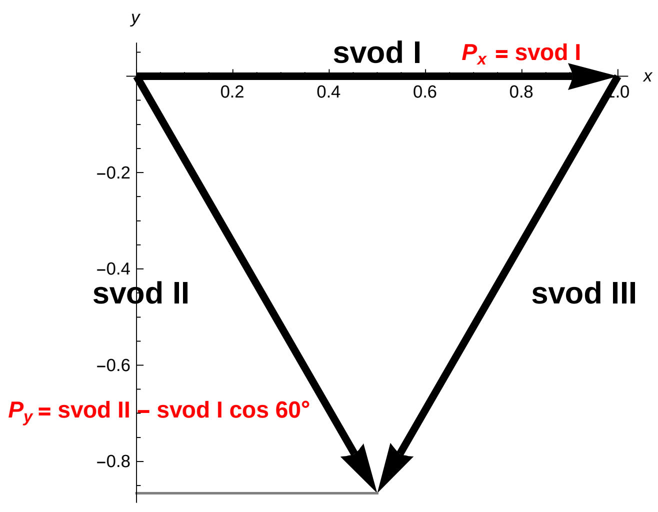
Při stanovení elektrické osy srdeční je úkolem vypočítat elektrický vektor v okamžiku kmitu R. Nejprve najdeme hodnoty kmitu R v prvním a druhém svodu a vytvoříme z nich vektror o hodnotách z rovnic níže. Poté spočítáme velikost úhlu mezi vektorem a kladnou části osy *x* pomocí funkce **VectorAngle**.

P_x = Svod I

P_y = Svod II − Cos (60 °) · Svod I

```
Graphics[{
Text[Style["Py = svod II - svod I cos 60°", 12, Bold, Red], {0.048, -0.7}],
Text[Style["Px = svod I", 12, Bold, Red], {0.8, 0.05}],
Text[Style["svod I", 16, Bold], {0.5, 0.05}],
Text[Style["svod III", 16, Bold], {0.93, -0.45}],
Text[Style["svod II", 16, Bold], {0.01, -0.45}],
{Arrowheads[0.1], Thickness[0.015], Arrow[{{0, 0}, {1, 0}}]},
{Arrowheads[0.1], Thickness[0.015], Arrow[{{1, 0}, {1/2, -Sqrt[3]/2}}]},
{Arrowheads[0.1], Thickness[0.015],
Arrow[{{0, 0}, {1/2, -Sqrt[3]/2}}]},
 {Thickness[0.005], Gray, Line[{{0, -Sqrt[3]/2}, {0.5, -Sqrt[3]/2}}]},
 Axes → True, AxesLabel → {x, y}]
```

Out[43]=



Obr. 10: Výpočet souřadnic srdečního vektoru

In[44]:=
```
S1V = Take[Svod1, 100];
S2V = Take[Svod2, 100];
R1V = Sort[S1V, #1[[2]] > #2[[2]] &];
R2V = Sort[S2V, #1[[2]] > #2[[2]] &];
```

In[48]:=
```
R1V[[1, 2]]
R2V[[1, 2]]
```

Out[48]= 1.53397

Out[49]= 2.62703

```
In[50]:= Px = R1[[1, 2]]
         Py = R4[[1, 2]] - Cos[60 °] R1[[1, 2]]
         Px1 = Px * {1, 0}
         Py1 = Py * {0, -1}
Out[50]= 2.11273
Out[51]= 1.10741
Out[52]= {2.11273, 0.}
Out[53]= {0., -1.10741}
```

```
In[54]:= QRS1 = Px1 + Py1
Out[54]= {2.11273, -1.10741}
```

```
In[55]:= angle = N[VectorAngle[{1, 0}, QRS1]];
         FullSimplify[angle / Degree]
Out[56]= 27.6617
```

2.6 Tvorba animace elektrické aktivity srdce

Při měření elektrokardiografem na Lékařské fakultě Univerzity Palackého v Olomouci, byla získána přesnější data než EKG sondou Vernier. Tato data byla z elektrokardiografu exportována do souboru (*.txt) a poté importována do sw *Mathematica*.
Animace elektrické aktivity srdce se bude skládát ze čtyř části. Tři části budou EKG křivky tří končetinových svodů (I-III) zapojených podle Einthovena a poslední část bude zkonstruovaný srdeční vektor. Srdeční vektor se bude pohybovat a zároveň na EKG křivkách se bude zobrazovat aktuální hodnota elektrického napětí. Data obsahují jen údaje o změnách naměřeného elektrického napětí v průběhu jedné srdeční periody. Data (EKG.txt) byla importována do sw *Mathematica* a rozdělena na tři části: Lead I, Lead II a Lead III.

```
In[57]:= SetDirectory[NotebookDirectory[]];
         Leads = Import["EKG.txt", "Data"];
         Dimensions[Leads]
Out[59]= {498, 3}
```

```
In[60]:= LeadI  = Table[Leads[[i, 1]], {i, 498}];
         LeadII  = Table[Leads[[i, 2]], {i, 498}];
         LeadIII = Table[Leads[[i, 3]], {i, 498}];
```

Jak bylo řečeno v předchozí části, k výpočtu souřadnic elektrického srdečního vektoru použijeme svod I a II. Označíme-li si srdeční vektor jako vektor $\vec{P}$ se souřadnicemi p_x a p_y, pak hodnoty p_x a p_y dopočítáme pomocí naměřených hodnot ze svodu I a II pomocí rovnic:

p_x = Svod I

p_y = Svod II − cos (60 °) · Svod I

Při zjisťování souřadnic srdečního vektoru vycházíme z Einthovenova trojúhelníku a jeho vlastností (rovnostranný trojúhelník). Souřadnice vektoru p_x je velikost elektrického napětí na svodu I. Souřadnice vektoru p_y dopočítáme pomocí hodnot svodu I a II, viz obrázek 10.

Soubor Leads obsahuje hodnoty elektrického napětí během jednoho cyklu ze tří Einthovenových svodů. Z dat Leads budeme používat jen Lead I a Lead II, proto vybereme tato dato do dvou samostatných souborů dat Dimenze {498}.

In[63]:=
```
Dimensions[LeadI]
Dimensions[LeadII]
```

Out[63]= {498}

Out[64]= {498}

Nyní máme připraveny soubory LeadI a LeadII na tvorbu vektoru $\vec{P}$, kde využijeme rovnice. Přířazovacím pravidlem z hodnot p_x a p_y vytvoříme vektory se směry svodu I a II a vektrory sečteme.

In[65]:=
```
Px = LeadI;
Py = LeadII - Cos[60 °] LeadI;
VectorPx = k * {1, 0} /. Table[{k → i}, {i, Px}];
VectorPy = k * {0, -1} /. Table[{k → i}, {i, Py}];
HeartVector = VectorPx + VectorPy;
```

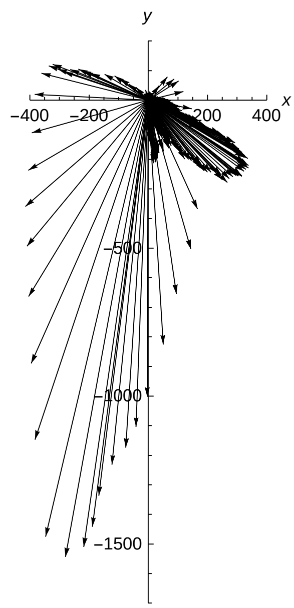
In[70]:=
```
Part[HeartVector, 1 ;; 20]
```

Out[70]= $\left\{\left\{7, -\frac{77}{2}\right\}, \{6, -47\}, \left\{7, -\frac{83}{2}\right\}, \left\{7, -\frac{95}{2}\right\}, \{10, -46\}, \left\{7, -\frac{97}{2}\right\}, \left\{7, -\frac{95}{2}\right\}, \{12, -46\}, \left\{9, -\frac{95}{2}\right\}, \left\{9, -\frac{93}{2}\right\}, \{12, -51\}, \left\{19, -\frac{99}{2}\right\}, \{12, -56\}, \{10, -46\}, \left\{13, -\frac{69}{2}\right\}, \{14, -39\}, \{14, -36\}, \{14, -36\}, \{12, -44\}, \left\{15, -\frac{79}{2}\right\}\right\}$

Vytvořené vektory znázorníme pomocí příkazů **Graphics** a **Arrows**. Na výstupu vidíme, že výsledný obraz je tvořen třemi smyčkami, které odpovídají jednotlivým částím srdečního cyklu a taktéž jednotlivým částím EKG křivky. Největší smyčka odpovídá komplexu QRS, kdy srdce je nejvíce elektricky aktivní, střední smyčka vlně T repolarizaci komor a nejmenší smyčka (málo viditelná) vlně P depolarizaci síní. Vytvořený elektrokardiogram můžeme porovnat s reálným obrazem z elektrokardiografu na Lékařské fakultě Univerzity Palackého v Olomouci (obr. 4) Vidíme, že směr srdečního vektoru v maximu QRS komplexu je přibližně stejný jako směr vektoru z přístroje na lékařské fakultě, ale smyčky zobrazující vlnu P a T již přesně neodpovídají, metoda výpočtu srdečního vektoru se liší.

In[71]:=
```
HeartVectorsAll = Graphics[
  Arrow[{{0, 0}, vector} /. Table[{vector -> l}, {l, HeartVector}]], ImageSize → 160,
  PlotRange → {{-400, 400}, {200, -1700}} , Axes → True, AxesLabel → {x, y}]
```

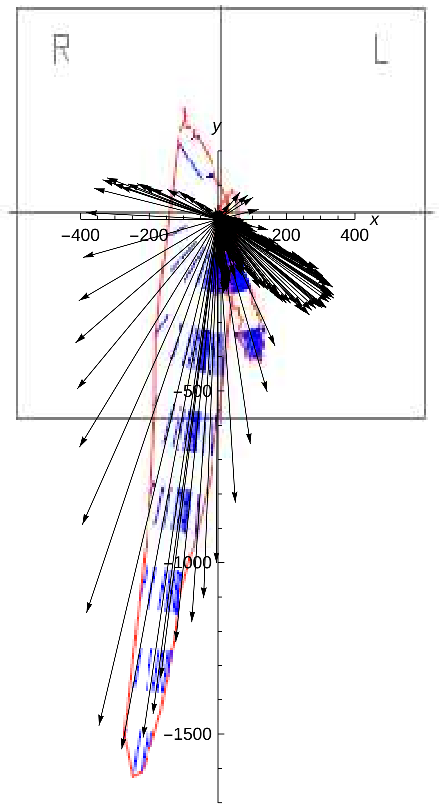
Out[71]=



Obr. 11: Vektorkardiogram srdce

In[72]:=
```
Cardiac = Import["vektor17.bmp"];
```

In[73]:=
```
GraphicsRow[{Cardiac, HeartVectorsAll}, ImageSize → {600, 400}];
```



Obr. 12: Porovnání vektorkardiogramů

Pro animaci srdečního vektroru máme připravena data a nyní vytvoříme graf EKG křivky pro animaci.

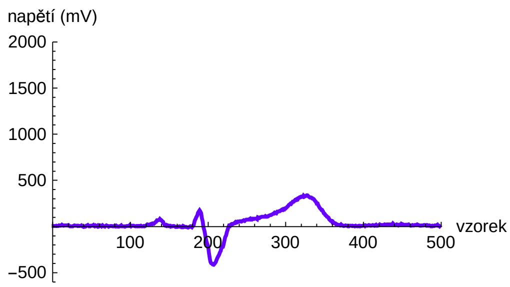
Vytvoříme grafy EKG křivek z datového souboru Leads a upravíme graf do požadovaného vzhledu.

In[74]:=
```
SetDirectory[NotebookDirectory[]];
```

In[75]:=
```
Leads = Import["EKG.txt", "Data"];
```

In[76]:=
```
ListPlot[Leads[[1 ;; 498, 1]], ImageSize → 260,
 AxesLabel → {"vzorek", "napětí (mV)"}, PlotStyle → {RGBColor[0.4, 0, 1], Thick},
 Joined → True, PlotRange → {{0, 500}, {-600, 2000}}]
```

Out[76]=

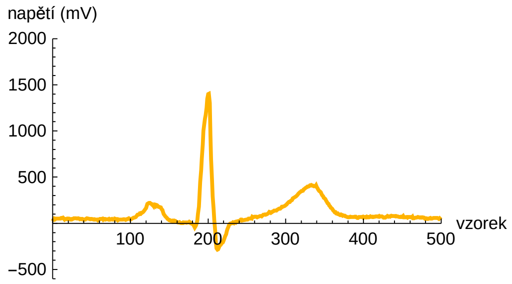


Obr. 13: Svod I

Stejný proces provedeme se všemi svody II a III a vektorkardiogram, kdy bude zobrazovat pohyb srdečního vektoru.

In[77]:=
```
ListPlot[Leads[[1 ;; 498, 2]], ImageSize → 260,
 AxesLabel → {"vzorek", "napětí (mV)"}, PlotStyle → {RGBColor[1, 0.7, 0], Thick} ,
 Joined → True, PlotRange → {{0, 500}, {-600, 2000}}]
```

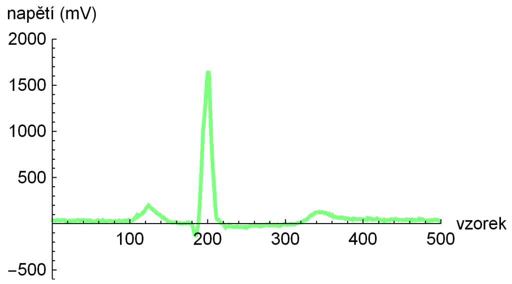
Out[77]=



Obr. 14: Svod II

In[78]:=
```
ListPlot[Leads[[1 ;; 498, 3]], ImageSize → 260,
 AxesLabel → {"vzorek", "napětí (mV)"}, PlotStyle → {RGBColor[0, 1, 0, 0.5], Thick} ,
 Joined → True, PlotRange → {{0, 500}, {-600, 2000}}]
```

Out[78]=

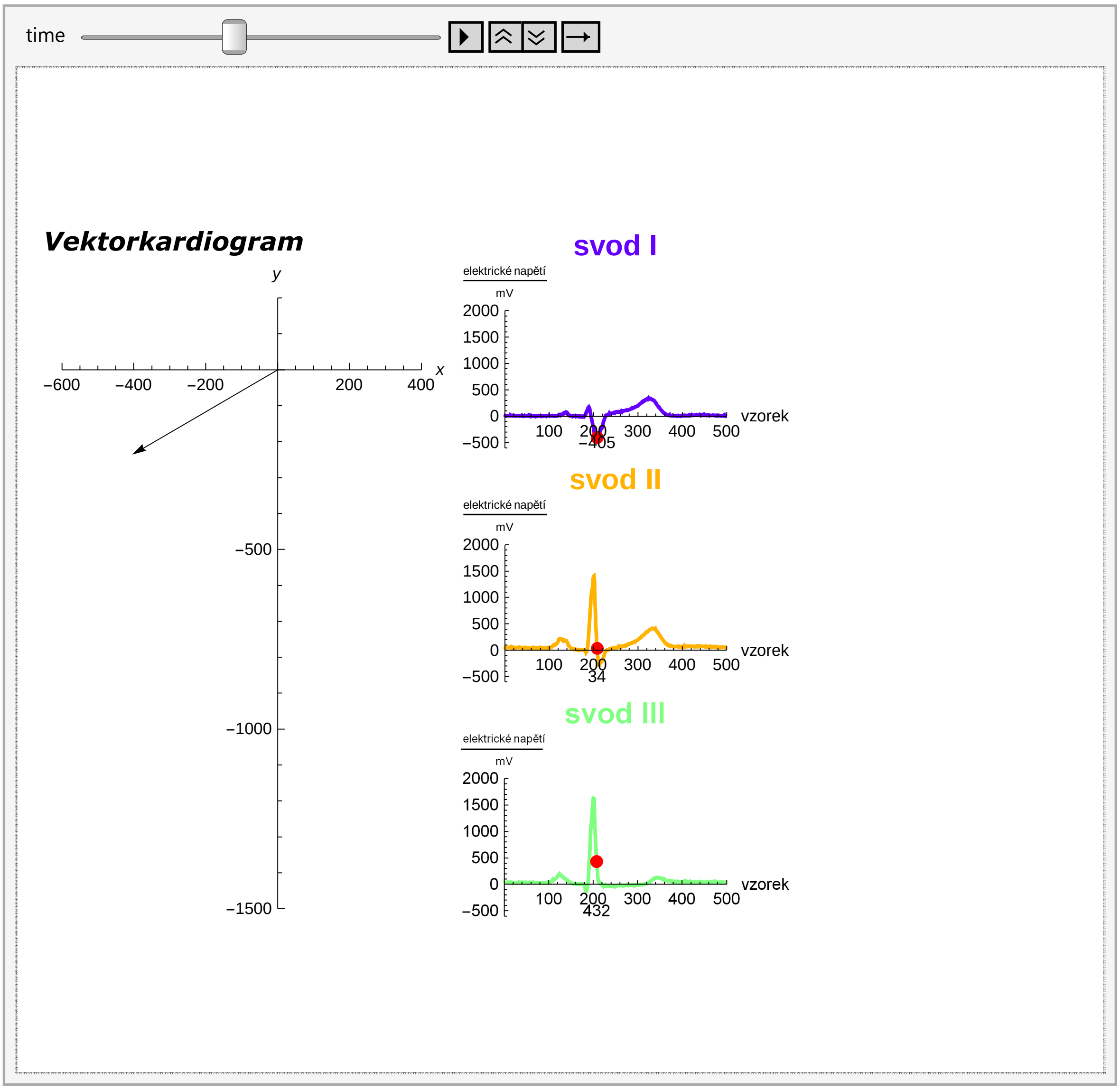


Obr. 15: Svod III

Použijeme funkci **Animate,** která zajišťuje vybírání jednotlivých dat z příslušných souborů dat. Naši proměnnou nazveme time. Okno animace bude rozděleno na dva sloupce a druhý sloupec bude mít dva řádky. K vytvoření použijeme příkazy **Grid** a **Column**. Pro vytvoření jednotlivých buněk použijeme: pro první sloupec využijeme příkaz **Graphics**, pro druhý sloupec příkaz **Show**. Pomocí funkcí **Epilog**, **Graphics** a **Point** je definováno zobrazování hodnot na EKG křivkách.

In[79]:=
```
Animate[Grid[{{Column[
{Style["Vektorkardiogram", "Label", Bold, Italic, 14],
Graphics[Arrow[{{0, 0}, HeartVector [[time]]}],
        Axes → True, AxesLabel → {x, y}, AxesOrigin → {0, 0},
        PlotRange → {{-600, 400}, {-1500, 200}}, ImageSize → 220 ]}],
    Column[{Show[ListPlot[Leads[[1 ;; 498, 1]], PlotLabel →
          Style["svod I", RGBColor[0.4, 0, 1], Bold, 16 ], AxesLabel →
          {vzorek, elektrické napětí / mV}, PlotStyle → {RGBColor[0.4, 0, 1], Thick} ,
         Joined → True, PlotRange → {{0, 500}, {-600, 2000}},
         Epilog → Text[ Leads[[time, 1]], {time, -500}]], Graphics[
         {PointSize[Large], Red, Point[{time, Leads[[time, 1]]}]}]], ImageSize → 180],
Show[ListPlot[Leads[[1 ;; 498, 2]], PlotLabel → Style["svod II", RGBColor[1, 0.7, 0],
          Bold, 16 ], AxesLabel → {vzorek, elektrické napětí / mV}, Joined → True,
         PlotStyle → {RGBColor[1, 0.7, 0], Thick}, PlotRange → {{0, 500}, {-600, 2000}},
         Epilog → Text[Leads[[time, 2]], {time, -500}]], Graphics[
         {PointSize[Large], Red, Point[{time, Leads[[time, 2]]}]}]], ImageSize → 180],
       Show[ListPlot[Leads[[1 ;; 498, 3]], PlotLabel → Style["svod III", RGBColor[
            0, 1, 0, 0.5], Bold, 16 ], AxesLabel → {vzorek, elektrické napětí / mV},
         Joined → True, PlotStyle → {RGBColor[0, 1, 0, 0.5], Thick}, PlotRange →
          {{0, 500}, {-600, 2000}}, Epilog → Text[Leads[[time, 3]], {time, -500}]],
        Graphics[{PointSize[Large], Red, Point[{time, Leads[[time, 3]]}]}]],
        ImageSize → 180]}]}}],
 {time, 1, 498, 1}, AnimationRunning → False, DisplayAllSteps → True]
```

Out[79]=



Obr. 16: Vektorkardiogram

3 Antropometrie

Tato kapitola je věnována antropometrii neboli měření tělesných proporcí a rozměrů na živém jedinci. V teoretické části kapitoly si představíme pojem antropometrie a seznámíme se s pomůckami a základními antropologickymi mírami, které se v antropometrii využívaji. V praktické části si nejprve zmeříte své tělesné rozměry a pomoci softwaru *Mathematica* spočítáte základní tělesné indexy. V závěru praktické části si vytvoříte vlastní databázi z dat získaných od svých spolužáků a naučíte se pomocí softwaru *Mathematica* vypočítat základní statistické hodnoty jako je aritmetický průměr, medián, standardní odchylka apod. Výsledky zpracujte graficky ve formě diagramu.

3.1 Antropometrie

Antropometrie je základní výzkumná metoda fyzické antropologie. Jedná se o měření tělesných proporcí a rozměrů na živém jedinci. Pravidla, rozdělení, hranice a klasifikace, které se v antropometrii používají, jsou vytvořeny uměle a jsou věcí dohody a úmluvy. Každý výzkumník musí mít možnost zvolit si a použít pozorování a míry, které jsou pro jeho práci nejvhodnější a které sledovanému účelu nejlépe vyhovují.

3.2 Základní pomůcky antropometrie

Většina antropologických měřidel pracuje na principu pusuvného měřidla. Takovými nástroji jsou např. antropometr, koordinátni měřidlo, dotykové měřidlo (kefalometr), torakometr či kaliper. Tato zmínená měřidla se užívají pro zjištování délkových rozměrů.

<u>Přehled základních antropologických měřidel</u>:
a) antropometr: využívá se pro měření výšky těla
b) koordinátní měřidlo
c) dotyková měřidla: kefalometr: používá se pro měření rozměrů hlavy a jiných menších rozměrů na těle
pelvimetr, torakometr: používají se na měření šířkových a hloubkových rozměrů
d) kaliper: používá se na měření kožních řas
e) posuvné měřidlo
f) pásová míra: používá se při měření obvodových a obloukových rozměrů
g) váha: užívá se pro zjišťování tělesné hmotnosti
h) dynamometr: užívá se k zjištění svalové síly, zejména stisku ruky

3.3 Základní rozměry antropometrie

Tělesná výška a hmotnost jsou dva základni rozměry v klinické antropometrii.
Tělesnou výšku definujeme jako vertikální vzdálenost nejvyššího bodu na temeni hlavy (vertex) od podložky. Nutný je předepsaný vzpřímený postoj u stěny, přičemž hlava probanda musí být v takové úrovni jako by se jedinec díval do dálky. Měřený jedinec musí být bez bot. Měří se s přesností na 0.5 cm.
Pomůcky: antropometr, posuvné měřidlo připevněné ke stěně nebo pásový metr připevněný na stěnu.

Tělesná hmotnost: pro zjištění hmotnosti by měl být proband ve spodním prádle. Měří se s přesností měření 0,1 kg.
Pomůcky: páková váha.

Další tělesné rozměry:
a) Obvodové rozměry – měří se pásovým měřidlem.
- Obvod hrudníku – měříme tak, že pásová míra probíhá vzadu těsně pod dolními úhly lopatek, vpředu těsně nad prsními bradavkami. Přesnost měření - 0,1 cm. Pro doplnění se měří také obvody hrudníku v exspiriu a v inspiriu.
- Obvod břicha – měří se tak, že pásová míra probíhá vodorovně ve výši pupku.

- Obvod gluteální – měří se ve výši nejmohutněji vyvinutého hýžďového svalstva.
- Obvod paže – měří se uprostřed paže mezi loktem a nadpažkem, paže volně visí.
- Obvod paže kontrahované – paže je pokrčená (přibližně 90 stupňů), flexory i extenzory paže jsou v maximálním napětí, měří se v místě největšího vyklenutí svalstva.
- Obvod předloktí – měříme v místě nejvíce vyvinutých svalů předloktí (asi 1/4 délky pod loketním kloubem).
- Obvod stehna gluteální – měříme při mírném rozkročení probanda těsně pod rýhou gluteálního svalstva.
- Obvod stehna střední – měříme uprostřed délky stehenní kosti.
- Obvod lýtka – měříme v místě největšího vyklenutí lýtkového svalu.

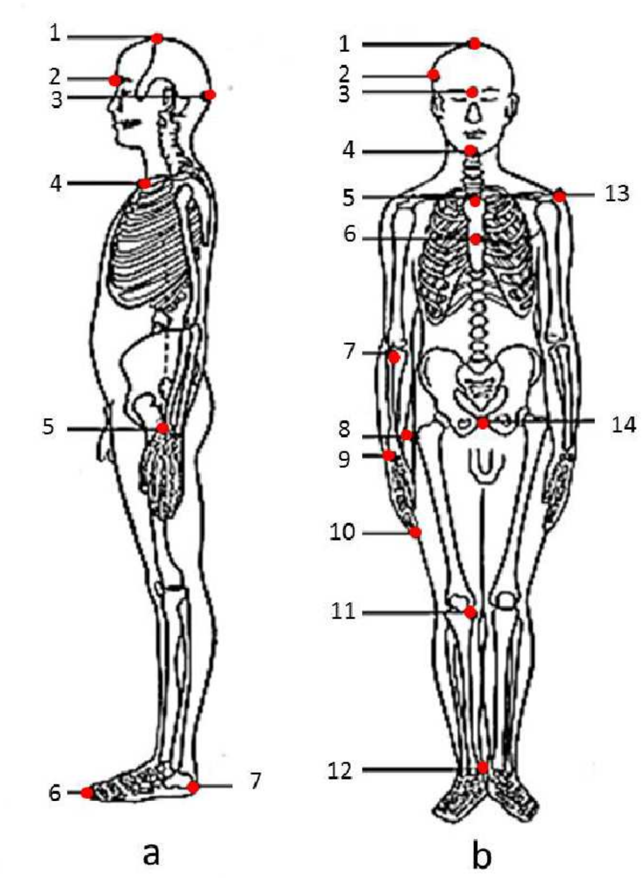
b) Šířkové a délkové rozměry
- Šířka biakromiální (šířka ramen) je vzdálenost mezi nadpažky (acromion). Jako měřidlo používáme torakometr nebo pelvimetr. Přesnost měření - 0,5 cm.
- Šířka bikristální (šířka pánve) je vzdálenost mezi pravým a levým nejvzdálenějším bodem horní hrany kosti kyčelní. Měříme stejnými měřidly, se stejnou přesností.
- Rozpětí paží je vzdálenost koncových bodů prostředních prstů na pravé a levé ruce při upažení. Probandi stojí zády u stěny, upaží s dotykem hřbetů rukou na stěně, prostřední prst jedné ruky se opírá o pevnou hranu (nulový bod), druhá ruka je položena na papírové míře na stěně. Odečítáme s přesností 0,1 cm.
- Výška v sedě je to vzdálenost nejvyššího bodu na temeni hlavy od rovné podložky, na které proband vzpřímeně sedí.
- Délka dolních končetin je rozdíl mezi tělesnou výškou probanda a jeho výškou v sedě.

3.4 Základní antropometrické body

Antropometrické body měřené na trupu a končetinách:

Suprasternale - (sst) - jugulare je bod ležící na horním okraji prsní kosti v mediánní rovině.
Mesosternale - (mst) - bod na přední straně hrudníku ve střední čáře v místě úponu 4. žebra, uprostřed prsní kosti.
Symphysion - (sy) - bod ležící na horním okraji stydké spony ve střední čáře.
Akromiale - (a) - nadpažek, bod nejvíce laterálně položený na akromiálním výběžku lopatky (akromiu) při vzpřímeném postoji s připaženou končetinou.
Radiale - (r) - bod na horním okraji hlavičky kosti vřetenní, který na připažené končetině leží nejvýše. Prstem vyhmátneme na zevní straně paže štěrbinu mezi kosti pažní a kosti vřetenní.
Stylion - (sty) - bod, který je na processus styloideus radii připažené končetiny položen nejvíce dole. Nahmátneme jej na palcové straně předloktí.
Daktylion - (da) - bod na konci prstu, který na připažené končetině leží nejníže. Používá se hlavně daktylion 3. prstu.
Trochanterion - (tro) - velký chocholík, nejvýše položený bod na velkém chocholíku. Hmatáme jej za bočním obrysem v nejširším místě boků.
Tibiale - (ti) - bod na proximálním konci kosti holenní (tibia), který při vzpřímeném postoji leží nejvíce nahoře a nejvíce laterálně, popř.mediálně.
Sphyrion - (sph) - bod na hrotu vnitřního kotníku (malleolus medialis), který při vzpřímeném postoji leží nejvíce dole.
Pternion - (pte) - bod ležící nejvíce vzadu na patě zatížené nohy.
Akropodion - (ap) - bod ležící na špičce zatížené nohy nejvíce vpředu (na konci 1. a 2. prstu).

Antropometrické body na hlavě:
Glabella - (g) - bod ležící nad nosním kořenem na dolní části čela, nejvíce vpředu, v mediánní rovině mezi obočím.
Vertex - (v) - bod na temeni lebky, který při poloze hlavy v orientační rovině leží nejvíce nahoře.
Opisthokranion - (op) - bod ležící na okcipitální části hlavy v mediánní rovině, nejvíce vzdálený od bodu glabella.
Euryon - (eu) - bod ležící na straně hlavy nejvíce laterálně. Stanoví se při měření největší šířky hlavy.
Gnathion - (gn) - bod ležící v mediální rovině na spodním okraji dolní čelisti.



Obr. 17: Antrpometrické body na hlavě, trupu a končetinách: a - pohled lateralni (1 - Vertex, 2 - Glabela; 3 - Opisthocranion; 4 - Suprasternale; 5 - Stylion, 6 - Akropodion; 7 - Pternion), b - pohled frontalni (1- Vertex; 2 - Eurion; 3 - Glabella; 4 - Gnathion; 5 - Suprasternale; 6 - Mesostrenale; 7 - Radiale; 8 - Trochanterion; 9 - Stylion; 10 - Daktylion; 11 - Tibiale ; 12 - Sphyrion; 13 - Acromiale (nadpazek); 14 - Symphysion)

4 Měření tělesných segmentů a výpočet indexů

V následující kapitole se budeme věnovat měřeni tělesných segmentů a výpočtu indexů. Antropologické ukazatele neboli indexy se v antropologii využívají z důvodu, že absolutní rozměry nedávají dostatečnou představu o tvarových příčinách a jiných odlišnostech na lidských tělech. Antropologický index se nejčastěji vypočítává poměrem (dělením) dvou rozměrů většinou vynásobeným 100. Některé antroposkopické ukazatele, jako je např. barva oční duhovky, se nepočítaji, ale porovnávají se standardními tabulkami.

Krok 1: Zjištěni indexů tělesných segmentů

Nejprve si změřte jednotlivé tělesné segmenty a poté pomoci softwaru *Mathematica* spočítejte indexy.

A) Délka trupu

Poměr rozdílu výšky v sedě a výšky židle s celkovou tělesnou výškou vynásobenou 100.
Pomůcky: antropometr.
Údaje udávejte v metrech (m).

Příklad:

```
In[80]:= Vyskavsede = 1.40;
Vyskazidle = 0.45;
Vyska1 = 1.82;

In[83]:= Delkatrupu = (Vyskavsede - Vyskazidle) / Vyska1 * 100

Out[83]= 52.1978

In[84]:= Insert[
 Grid[{{"Kategorie", "Muži", "Ženy"},
   {"Krátký trup", "≤ 51.0", "≤ 52.5"},
   {"Středni trup", "51.1 - 52.0", "52.6 - 53.0"},
   {"Dlouhý trup", "≥ 52.1", "≥ 53.1"}}, Alignment → Center, ItemSize → 9.5,
  ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black],
  {Dividers → All, Spacings → {1.5`, 1.5`}}],
 {Background → {None, {LightBlue, {White}}}, Dividers → {Black, {2 → Black}},
  Frame → True, Spacings → {2, {2, {0.9}, 2}}}, 2]
```

Out[84]=

Kategorie	Muži	Ženy
Krátký trup	≤ 51.0	≤ 52.5
Středni trup	51.1 – 52.0	52.6 – 53.0
Dlouhý trup	≥ 52.1	≥ 53.1

Tabulka 3. Délka trupu

B) Relativní délka horních končetin

Poměr mezi výškou nadpažku - Acromiale - od podložky zmenšenou o výšku konce prostředníčku (znovu od podložky) a celkovou tělesnou výškou vynásobenou 100.
Jedná se o poměr absolutní délky horní končetiny a celkové výšky probanda vyjádřený v procentech.

Pomůcky: antropometr, pásova míra.
Údaje udávejte v metrech (m).

Příklad:

```
In[85]:= Vyskanadpazku = 0.73;
         Vyska2 = 1.66;

In[87]:= Delkahornichkoncetin = Vyskanadpazku / Vyska2 * 100

Out[87]= 43.9759

In[88]:= Insert[
          Grid[{{"Kategorie", "Muži", "Ženy"},
             {"Kratké horní končetiny", "≤ 44.0", "≤ 43.5"},
             {"Středni horní končetiny", "44.1 – 44.5", "43.6 – 44.0"},
             {"Dlouhé horní končetiny ", "≥ 44.6", "≥ 44.1"}},
            Alignment → Center, ItemSize → 10.5,
            ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black],
            {Dividers → All, Spacings → {1.5`, 1.5`}}],
          {Background → {None, {LightBlue, {White}}}, Dividers → {Black, {2 → Black}},
            Frame → True, Spacings → {2, {2, {0.9}, 2}}}, 2]
```

Out[88]=

Kategorie	Muži	Ženy
Kratké horní končetiny	≤ 44.0	≤ 43.5
Středni horní končetiny	44.1 – 44.5	43.6 – 44.0
Dlouhé horní končetiny	≥ 44.6	≥ 44.1

Tabulka 4. Relativní délka horních končetin

C) Relativní délka dolních končetin

Poměr mezi výškou velkého chocholíku - Trochanterion od podložky a celkovou tělesnou výškou vynásobenou 100, abychom získali procentní podíl.
Pomůcky: antropometr.
Údaje udávejte v metrech (m).

Příklad:

```
In[89]:= Vyskavelkehochocholiku = 0.95;
         Vyska3 = 1.7;

In[91]:= Delkadolnichkoncetin = Vyskavelkehochocholiku / Vyska3 * 100

Out[91]= 55.8824
```

In[92]:=
```
Insert[
 Grid[{{"Kategorie", "Muži", "Ženy"},
   {"Kratké dolní končetiny", "≤ 53.5", "≤ 53.9"},
   {"Středni dolní končetiny", "53.6 – 54.0", "54.0 – 54.5"},
   {"Dlouhé dolní končetiny ", "≥ 54.1", "≥ 54.6"}}, Alignment → Center,
  ItemSize → 10.5,
  ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black],
  {Dividers → All, Spacings → {1.5`, 1.5`}}],
 {Background → {None, {LightBlue, {White}}}, Dividers → {Black, {2 → Black}},
  Frame → True, Spacings → {2, {2, {0.9}, 2}}}, 2]
```

Out[92]=

Kategorie	Muži	Ženy
Kratké dolní končetiny	≤ 53.5	≤ 53.9
Středni dolní končetiny	53.6 – 54.0	54.0 – 54.5
Dlouhé dolní končetiny	≥ 54.1	≥ 54.6

Tabulka 5. Relativní délka dolních končetin

D) Relativní šířka ramen

Poměr mezi šířkou ramen (biakromální šířka - Acromiale - Acromiale) a celkovou tělesnou výškou vynásobenou 100.
Pomůcky: antropometr, dotykové měřidlo - pelvimetr.
Údaje udávejte v metrech (m).

Příklad:

In[93]:=
```
Biacromalnisirka = 0.38;
Vyska4 = 1.66;
```

In[95]:=
```
Sirkaramen = Biacromalnisirka / Vyska4 * 100
```

Out[95]= 22.8916

In[96]:=
```
Insert[
 Grid[{{"Kategorie", "Muži ", "Ženy"},
   {"Úzká ramena", "≤ 22.0", "≤ 21.5"},
   {"Středni ramena", "22.1 – 23.0", "21.6 – 22.5"},
   {"Široká ramena", "≥ 23.1", "≥ 22.6"}}, Alignment → Center,
  ItemSize → 10.5,
  ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black],
  {Dividers → All, Spacings → {1.5`, 1.5`}}],
 {Background → {None, {LightBlue, {White}}},
  Dividers → {Black, {2 → Black}}, Frame → True, Spacings → {2, {2, {0.9}, 2}}}, 2]
```

Out[96]=

Kategorie	Muži	Ženy
Úzká ramena	≤ 22.0	≤ 21.5
Středni ramena	22.1 – 23.0	21.6 – 22.5
Široká ramena	≥ 23.1	≥ 22.6

Tabulka 6. Relativní šířka ramen

E) Relativní šířka pánve

Poměr absolutní šířky pánve (bikristální šířka) k celkové tělesné výšce vynásobené 100.
Pomůcky - antropometr, dotykové měřidlo - pelvimetr.
Údaje uvádějte v metrech (m).

Příklad:

In[97]:=
```
Bikristalnisirka = 0.31;
Vyska5 = 1.7;
```

In[99]:=
```
Absolutnisirkapanve = Bikristalnisirka / Vyska5 * 100
```

Out[99]=
```
18.2353
```

In[100]:=
```
Insert[
 Grid[{{"Kategorie", "Muži ", "Ženy"},
   {"Úzká pánev", "≤ 16.5", "≤ 17.5"},
   {"Středni pánev", "16.6 – 17.5", "17.6 – 18.5"},
   {"Široká pánev", "≥ 17.6", "≥ 18.6"}}, Alignment → Center,
  ItemSize → 10.5,
  ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black],
  {Dividers → All, Spacings → {1.5`, 1.5`}}],
 {Background → {None, {LightBlue, {White}}},
  Dividers → {Black, {2 → Black}}, Frame → True, Spacings → {2, {2, {0.9}, 2}}}, 2]
```

Out[100]=

Kategorie	Muži	Ženy
Úzká pánev	≤ 16.5	≤ 17.5
Středni pánev	16.6 – 17.5	17.6 – 18.5
Široká pánev	≥ 17.6	≥ 18.6

Tabulka 7. Relativní šířka pánve

Krok 2: Zjištěni výškováhových indexů

A) Body-Mass Index (BMI)

BMI je poměr mezi tělesnou hmotností v kg a druhou mocninou výšky v m.
Pomůcky: antropometr, váha.

Příklad:

In[101]:=
```
Hmotnost = 56;
Vyska6 = 1.7;
```

In[103]:=
```
BodyMassIndex = Hmotnost / Vyska6^2
```

Out[103]=
```
19.3772
```

In[104]:=
```
Insert[
 Grid[{{"Doporučené kategorie", "Muži", "Ženy"},
   {"Velká podváha", "≤ 18.4", "≤ 17.4"},
   {"Podváha", "18.5 – 19.9", "17.5 – 18.4"},
   {"Normální váha", "20.0 – 24.9", "18.5 – 23.9"},
   {"Nadváha", "25.0 – 29.9", "24.0 – 28.9"},
   {"Obezita 1. stupně", "30.0 – 34.9", "29.0 – 33.9"},
   {"Obezita 2. stupně", "35.0 – 39.9", "34.0 – 38.9"},
   {"Obezita 3. stupně", "≥ 40.0", "≥ 39.0"}}, Alignment → Center,
  ItemSize → 10.5,
  ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black],
  {Dividers → All, Spacings → {1.5`, 1.5`}}],
 {Background → {None, {LightBlue, {White}}},
  Dividers → {Black, {2 → Black}}, Frame → True, Spacings → {2, {2, {0.9}, 2}}}, 2]
```

Out[104]=

Doporučené kategorie	Muži	Ženy
Velká podváha	≤ 18.4	≤ 17.4
Podváha	18.5 – 19.9	17.5 – 18.4
Normální váha	20.0 – 24.9	18.5 – 23.9
Nadváha	25.0 – 29.9	24.0 – 28.9
Obezita 1. stupně	30.0 – 34.9	29.0 – 33.9
Obezita 2. stupně	35.0 – 39.9	34.0 – 38.9
Obezita 3. stupně	≥ 40.0	≥ 39.0

Tabulka 8. BMI

Pomocí BMI můžeme stanovit doporučené rozmezí váhy na základě výšky, pohlaví a doporučeného rozmezí BMI. U žen je doporučení rozmezí v intervalu 17,5 - 23,9, u mužů je v intervalu 18,5 - 24,9.

Příklad (ženy):

In[105]:=
```
BMI1 = 17.5;
BMI2 = 23.9;
Vyska7 = 1.72;
```

In[108]:=
```
RozmeziVahy1 = BMI1 * Vyska7^2
```

Out[108]= 51.772

In[109]:=
```
RomeziVahy2 = BMI2 * Vyska7^2
```

Out[109]= 70.7058

Pro tento vzorový příklad je doporučený váhový interval u ženy od 51.8 kg do 70.7 kg.

B) Modifikovaný Brocův index

Modifikovaný Brocův index zjišťuje, kolik kg hmotnosti přebývá nad krajní hranicí doporučené váhy (kladná čísla), resp. kolik kg do této hranice chybí (záporná čísla).
Modifikovaný Brocův index = hmotnost (kg) – (výška (cm) – 100).
Pomůcky: antropometr, váha.

Příklad:

In[110]:=
```
Hmotnost8 = 56;
Vyska8 = 172;
```

In[112]:=
```
BrockuvIndex = Hmotnost8 - (Vyska8 - 100)
```
Out[112]=
```
-16
```

Do krajní hranice doporučené váhy zbývá 16 kg.

C) Waist-Hip Ratio (WHR)

Waist-Hip Ratio (WHR) je nejužívanějším ukazatelem distribuce tuku. Jedná se o poměr obvodu pasu v cm a obvodu gluteálního, rovněž v cm.Tento index je vhodné doplňovat s BMI.
Výpočet: WHR = obvod pasu (cm) děleno obvod boků (cm).
Pomůcky: pásová míra.

Příklad:

In[113]:=
```
ObvodPasu = 69.00;
ObvodGlutealni = 97.00;
```

In[115]:=
```
WaistHipRatio = ObvodPasu / ObvodGlutealni
```
Out[115]=
```
0.71134
```

In[116]:=
```
Insert[
 Grid[{{"Kategorie", "Muži WHR", "Ženy WHR"},
   {"Spíše periferní", "≤ 0.84", "≤ 0.74"},
   {"Vyrovnaná", "0.85 - 0.89", "0.75 - 0.79"},
   {"Spíše centrální", "0.90 - 0.94", "0.80 - 0.84"},
   {"Centrální (riziková)", "≥ 0.95", "≥ 0.85"}}, Alignment → Center,
  ItemSize → 10.5,
  ItemStyle → Directive[FontFamily → "Arial", FontSize → 12, Black],
  {Dividers → All, Spacings → {1.5`, 1.5`}}],
 {Background → {None, {LightBlue, {White}}},
  Dividers → {Black, {2 → Black}}, Frame → True, Spacings → {2, {2, {0.9}, 2}}}, 2]
```

Out[116]=

Kategorie	Muži WHR	Ženy WHR
Spíše periferní	≤ 0.84	≤ 0.74
Vyrovnaná	0.85 – 0.89	0.75 – 0.79
Spíše centrální	0.90 – 0.94	0.80 – 0.84
Centrální (riziková)	≥ 0.95	≥ 0.85

Tabulka 9. WHR

Krok 3: Sestavení databáze pro výpočet BMI, grafické a základní statistické zpracování dat

Tento krok je zaměřen na sestavení databáze BMI z dat získaných od ostatních studentů semináře či studijní skupiny. Jejich hmotnosti (M) a výšku (V) zadejte jako list hodnot. Výsledné hodnoty BMI potom zpracujte pomocí softwaru *Mathematica* ve formě grafu či diagramu a statisticky zhodnoťte.

Příklad:
Data BMI skupina1:

In[117]:=
```
M3 = {60, 68, 73, 56, 79, 82, 57, 60, 74, 64, 56, 78}
```
Out[117]=
```
{60, 68, 73, 56, 79, 82, 57, 60, 74, 64, 56, 78}
```

```
In[118]:= V3 = {1.66, 1.72, 1.83, 1.6, 1.78, 1.79, 1.55, 1.67, 1.68, 1.73, 1.7, 1.73}
Out[118]= {1.66, 1.72, 1.83, 1.6, 1.78, 1.79, 1.55, 1.67, 1.68, 1.73, 1.7, 1.73}
```

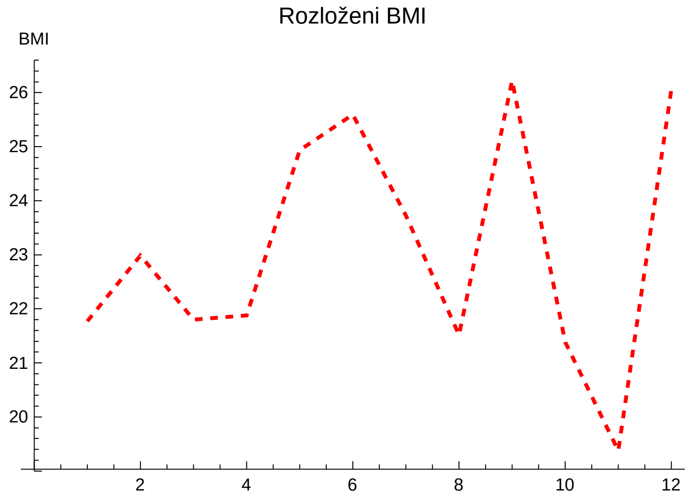
A) Grafické zpracovaní dat

In[119]:= $BMI3 = \frac{M3}{V3\text{^}2}$

```
Out[119]= {21.7738, 22.9854, 21.7982, 21.875, 24.9337,
 25.5922, 23.7253, 21.5139, 26.2188, 21.3839, 19.3772, 26.0617}
```

```
ListLinePlot[BMI3, PlotStyle → {Red, Dashed, Thick},
 PlotLabel → "Rozloženi BMI", AxesLabel → {"", "BMI"}]
```

Out[120]=

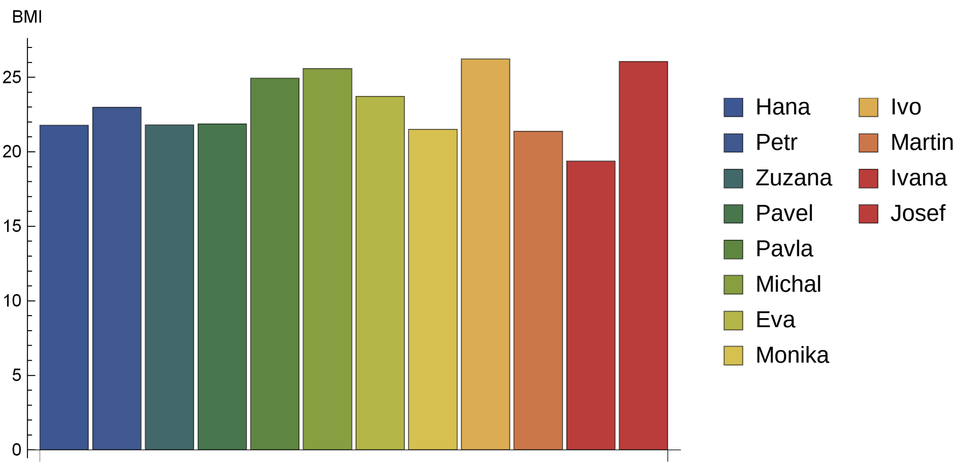


Obr. 18: Rozložení BMI

B) Grafické zpracování dat, BMI skupina1, ve formě sloupcového diagramu:

```
In[121]:= BarChart[{BMI3}, ChartLegends → {"Hana", "Petr", "Zuzana", "Pavel",
   "Pavla", "Michal", "Eva", "Monika", "Ivo", "Martin", "Ivana", "Josef"},
 ChartStyle → "DarkRainbow", AxesLabel → {"", "BMI"}]
```

Out[121]=



Obr. 19: Rozložení BMI, skupina1

C) Statistické zhodnocení dat

Výpočet aritmetického průměru **Mean**, mediánu **Median**, maximální a minimální hodnoty **Max**, **Min** a standardní odchylky **StandardDeviation**. Získaná data lze dále porovnat mezi různými skupinami a opět graficky vyhodnotit.

```
In[122]:= Mean[BMI3]
Out[122]= 23.1033

In[123]:= Median[BMI3]
Out[123]= 22.4302

In[124]:= Max[BMI3]
Out[124]= 26.2188

In[125]:= Min[BMI3]
Out[125]= 19.3772

In[126]:= StandardDeviation[BMI3]
Out[126]= 2.18986
```

5 Metody odhadu tělesného složení

Tato kapitola je věnována metodám odhadu tělesného složení. V teoretické části se seznámíme s pojmy jako je frakcionace lidského těla a s technikami měřeni kožních řas. Praktická část je zaměřena na dvě základní metody odhadu tělesného složení a to na metodu odhadu procentního podílu tuku dle Pařízkové a původní Matiegkovu metodu odhadu anatomického složení těla. Po změření jednotlivých parametrů spočítejte pomocí softwaru *Mathematica* jednotlivé frakce a své výsledky zpracujte ve formě diagramu.

5.1 Frakcionace lidského těla

Metody odhadu tělesného složení se používaji pro zjištění frakcionace lidského těla, tj. jakou hmotnost v našem těle zabírají komponenty jako kosti, svalovina, tuk nebo voda. Složení těla je ovlivněno dědičně, pohlavím, zdravotním stavem a stářím organismu, stravováním a z velké části také mírou pohybové aktivity. Působení tělesné zátěže na lidský organizmus je ze somatometrického hlediska posuzováno hlavně změnami frakcionace tělesné hmotnosti – především úbytkem tukové a nárůstem svalové frakce, případně kosterní složky. Metody, které se užívají k poznání tělesného složení, se dělí na přímé a nepřímé (odhady). Podle Pařízkové (1962) se přímou metodou dají analyzovat jen mrtvá těla. Poznatky získané touto metodou však se využily k aplikaci na metody nepřímé, dnes hojně užívané ve sportovní antropologii. U nás je nejužívanější metodou pro odhad tělesného složení metoda dle Pařízkové, stanovována ze součtu deseti kožních řas a původní Matiegkova metoda. Obě metody jsou založené na kaliperaci (měření kožních řas) a antropometrii.

5.2 Měření kožních řas

U obou metod se jednotlivé frakce vypočítávají na základě měření šiřkových rozměrů, obvodových měr a měření kožních řas. Širkové rozměry měříme posuvným měřidlem, obvodové rozměry pásovou mírou a kožní řasy kaliperem (viz kapitola Antropometrie). V rámci této kapitoly se podrobněji seznámíme s měřením šiřkových rozměrů a kožních řas.

A) Měřeni šiřkových rozměrů
Mezi šířkové rozměry, které se při odhadu tělesného složení vyživají patří měření epikondylů kosti pažní a stehenní, měření šířky zápěstí a kotníku.
Epikondyly humeru se měří se posuvným měřídlem na dolním konci kosti pažní (u loketního kloubu), proband má paži v úhlu 90°, přesnost 0,5 mm.
Epikondyly femuru se měří se stejným měřidlem, proband sedí na židli, stehno a bérec svírají úhel 90°a měří se na dolním konci stehenní kosti (u kolenního kloubu), přesnost měření je 0,5 mm.

B) Měření kožních řas
Měření kožních řas se provádí kaliperem (Obr. 20). Palcem a ukazovákem pevně uchopíme kožní řasu v místě, kde má být její tlouštka změřena. Tahem se řasa oddělí od svalové vrstvy, která leží pod ní. Dotykové plošky kaliperu umístíme za vrchol ohybu kůže. Uvolníme prsty, kterými držíme měřidlo, jak začne působit tlak na kožní řasu. Vzdálenost měřících ploch kaliperu od prstů je prakticky asi 1 cm. Odečítáme na stupnici měřidla nejdéle 2 s od okamžiku, kdy tlak začne působit. Pro zvýšení přesnosti měření doporučujeme každou hodnotu zjišťovat 3x. Jako výsledek zapisujeme tzv. medián, tj. střední hodnotu naměřených dat.

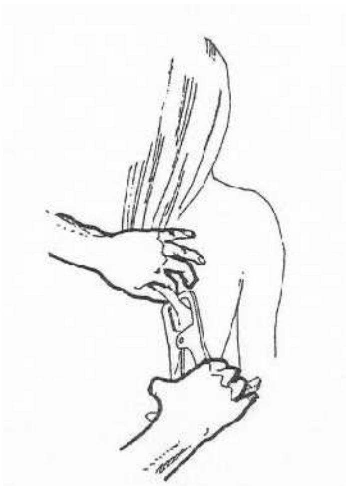
Obr. 20: Kaliper, pršstroj na měřeni kožních řas (http://www.kaliper.cz/provedeni.html)

Popis vybraných standardních míst měření:
V následující části si představíme způsob měření v praxi nejčastěji určovaných kožních řas. Jednoznačný popis standardizovaných míst měření uvádí odborná literatura (Fetter a kol. 1967, Pařízková 1973).

1. Kožní řasa nad tricepsem - řasa probíhá svisle, měříme nad trojhlavým svalem pažním (paže visí volně podle těla). Řasu vytahujeme v polovině vzdálenosti mezi ramenem a loktem. Kaliper přikládáme 1 cm dolů od prstů ruky (Obr. 21).

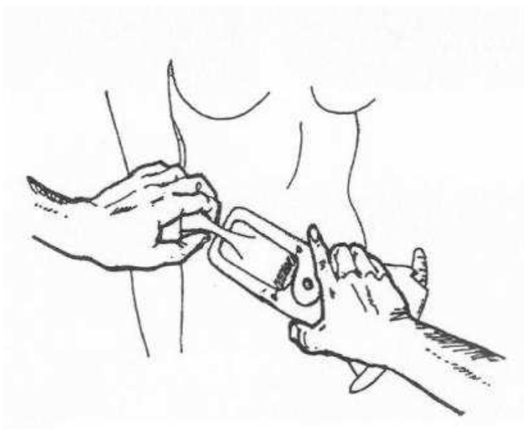
Obr. 21: Postup při měřeni kožní řasy nad tricepcem (http://www.kaliper.cz/provedeni.html)

2. Kožní řasa pod lopatkou - řasa probíhá mírně šikmo podél průběhu žeber, měříme přímo pod dolním úhlem lopatky. Měřená osoba stojí, ramena uvolněná. Kaliper přikládáme vpravo (laterálně) 1 cm od prstů v úhlu asi 45° s horizontálou (Obr. 22).



Obr. 22: Postup při měření kožni řasy pod lopatkou (http://www.kaliper.cz/provedeni.html)

3. Kožní řasa nad spinou - kožní řasu lokalizujeme podél průběhu hřebene kosti kyčelní, v pomyslné čáře pod podpažní jamkou. Její směr je asi 45° k horizontále, směrem ke středu těla (Obr. 23).

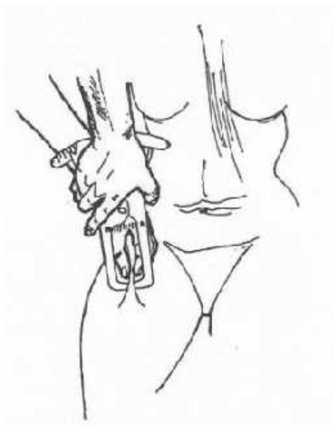


Obr. 23: Postup při měření kožni řasy nad spinou (http://www.kaliper.cz/provedeni.html)

4. Kožní řasa na břiše - kožní řasa probíhá vertikálně na levé straně pupeční oblasti. Kaliper přikládáme kolmo na řasu asi 1 cm od prstů (Obr. 24).

Obr. 24: Postup při měření kožní řasy na břiše (http://www.kaliper.cz/provedeni.html)

5. Kožní řasa na stehně - kožní řasu lokalizujeme na stehně nad čtyřhlavým svalem v poloviční vzdálenosti od třísel ke kolenu. Měřená osoba sedí, chodidlo měřené končetiny se celé opírá o podložku. Kaliper přikládáme v podélné ose s kostí stehenní (Obr. 25). Podle Pařízkove se měření na stehně provádí nad patellou.

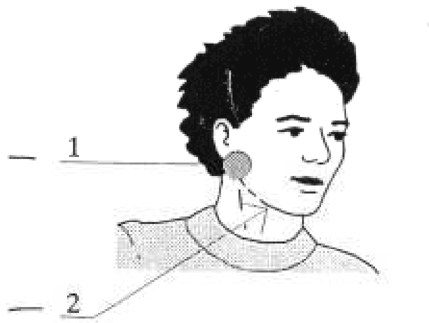


Obr. 25: Postup při měření kožni řasy na stehně (http://www.kaliper.cz/provedeni.html)

6. Kožní řasa na lýtku - kožní řasu měříme v místě největšího obvodu lýtka. Měřená končetina je opřená o podložku tak, aby koleno bylo v pravém úhlu. Řasu vytahujeme vertikálně na vnitřní straně lýtka (Obr. 26). Měření kožní řasy na lýtku podle Pařízkové se provádí na zadní straně lýtka těsně pod fossa poplitea (podkolenní jáma).

Obr. 26: Postup při měření kožní řasy na lýtku (http://www.kaliper.cz/provedeni.html)

7. Kožní řasy na obličeji - měření kožni řasy na obličeji se provádí na tváři - pod spánkem na spojnici tragion-alare (1) a na bradě - nad jazylkou (2) (Obr. 27).



Obr. 27: Kaliperační body na obličeji (http://bruxy.regnet.cz/web/fitness/CZ/kaliperace)

8. Kožní řasy na hrudníku - na hrudníku jsou kaliperační body umistěny jednak na předním ohraničení axilární jámy (podpaží) nad okrajem m. pectoralis major = velký prsní sval (hrudník I) a jednak v přední axilární čáře ve výši 10. žebra (hrudník II).

V praktické části se seznámíme se dvěma základními metodami odhadu tělesného složeni, a to odhad % podílu tuku podle Pařízkové a Matiegkovou metodou odhadu anatomického složení.

5.3 Odhad podílu procent tuku podle Pařízkové

Podíl tuku podle Pařízkové (1962) je vypočítáván z regresních rovnic na základě měření deseti kožních řas, údaje se zapisují v centimetrech:

x1 - na tváři - pod spánkem na spojnici tragion-alare
x2 - na brade - nad jazylkou
x3 - hrudník I - na předním ohraničení axilární jámy nad okrajem m.pectoralis major
x4 - hrudník II - v přední axilární čáře ve výši 10. žebra
x5 - paže (triceps) - nad m.triceps brachii v polovině vzdálenosti mezi akromiale a radiale
x6 - záda (subscap.) - pod dolním úhlem lopatky
x7 - břicho - v 1/4 vzdálenosti mezi omphalion a iliospinale ant., blíže bodu omphalion
x8 - bok - nad hřebenem kosti kyčelní v průsečíku s přední axilární čárou
x9 - stehno - nad patellou
x10 - lýtko - pod fossa poplitea (pod podkolenní jámou).

```
In[127]:= x1 = 1.0;
x2 = 1.2;
x3 = 1.5;
x4 = 1.4;
x5 = 1.4;
x6 = 0.8;
x7 = 2.4;
x8 =  2.9;
x9 = 2.4;
x10 = 1.5;
```

```
In[137]:= Procentotukumuzi = 28.96 × Log[x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x7 + x8 + x9 + x10] - 41.27

Out[137]= 39.9153
```

In[138]:=
```
Procentotukuzeny = 35.572 × Log[x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x7 + x8 + x9 + x10] - 61.25
```
Out[138]=
```
38.4711
```

5.4 Matiegkova metoda odhadu anatomického složení

Matiegkův model vychází z dělení tělesného složení na kostní a svalovou frakci, frakci kůže a reziduál, tedy zbytek.
Výpočet: $m = O + D + M + R$
m………………….celková tělesná hmotnost
O………………….hmotnost kostry
D ……………….....hmotnost kůže a podkoží
M…………………hmotnost svalstva
R………………….hmotnost zbytku (např.orgánů, vnitřní tuk, voda)

Úpravou této rovnice získáme hmotnost orgánů a dalších segmentů, protože ty nejde nijak změřit či zpočítat: $R = m - (O + D + M)$.

Krok1: Výpočet hmotnosti kostry

Hmotnost kostry: $O = o^2 * v * \mathrm{k1}$, kde $o = \frac{\mathrm{o1 + o2 + o3 + o4}}{4}$

Pro výpočet hmotnosti kostry změříme tyto parametry:

O - hmotnost kostry (g)
o1 - šířka epikondylu humeru (cm)
o2 - šířka dolní epifýzy femuru (epikondyly femuru) (cm)
o3 - šířka zápěstí (cm)
o4 - šířka kotníku (cm)
v - tělesná výška (cm)
k1 - koeficient (k = 1,2)

In[139]:=
```
o1 = 7.1;
o2 = 9.8;
o3 = 6.5;
o4 = 8.2;
k1 = 1.2;
v = 165;
```

In[145]:=
$$\text{HmotnostKostry} = \left(\frac{\mathrm{o1 + o2 + o3 + o4}}{4}\right)^2 \mathrm{v\ k1}$$
Out[145]=
```
12357.2
```

Krok 2: Výpočet hmotnosti kůže

Hmotnost kůže $D = \frac{d*S*k2}{2}$, kde $d = \frac{\mathrm{d1 + d2 + d3 + d4 + d5 + d6}}{6}$

Pro výpočet hmotnosti kůže změříme tyto parametry:

D - hmotnost kůže a podkoží (g)
d1 - kožní řasa na bicepsu paže (cm)
d2 - kožní řasa na předloktí (cm)
d3 - kožní řasa na stehně (cm)

$d4$ - kožní řasa na lýtku II (cm)
$d5$ - kožní řasa na hrudníku II (cm)
$d6$ - kožní řasa na břiše (cm)
$k2$ - koeficient ($k2$ = 0,13)

Povrch těla $S = 71, 84 * m^{0,425} * v^{0,725}$.
m - tělesná hmotnost (kg)
v - tělesná výška (cm)

In[146]:=
```
d1 = 1.8;
d2 = 0.8;
d3 = 2.4;
d4 = 1.5;
d5 = 1.8;
d6 = 2.4;
k2 = 0.13;
m = 58.00;
v = 165.00;
```

In[155]:=
```
Povrchtela = 71.84 × (m^0.425) × v^0.725
```

Out[155]= 16 349.3

In[156]:=
$$\text{HmotnostKuze} = \left(\frac{d1 + d2 + d3 + d4 + d5 + d6}{6}\right) \times \text{Povrchtela} \times k2$$

Out[156]= 3790.31

Krok 3: Výpočet hmotnosti svalstva

Hmotnost svalstva $M = r^2 * v * \text{k3}$, kde $r = \frac{\text{r1} + \text{r2} + \text{r3} + \text{r4}}{4}$

Pro výpočet hmotnosti svalstva změříme tyto parametry:

M - hmotnost svalstva (g)
$r1$, $r2$, $r3$, $r4$ - korigované poloměry

$o5$ - obvod paže kontrahované (cm)
$o6$ - obvod předloktí v maximální šířce (cm)
$o7$ - střední obvod stehna (cm)
$o8$ - maximální obvod lýtka (cm)
$d1$ - kožní řasa bicepsu (cm)
$d2$ - kožní řasa předloktí (cm)
$d3$ - kožní řasa na stehně (cm)
$d4$ - kožní řasa na lýtku (cm)
$d7$- kožní řasa na tricepsu (cm)
v - tělesná výška (cm)
$k3$ - koeficient ($k3$ = 6,5)

In[157]:=
```
o5 = 32.00;
o6 = 23.50;
o7 = 52.50;
o8 = 35.40;
d1 = 1.8;
d2 = 0.8;
d3 = 2.4;
d4 = 1.5;
d7 = 1.9;
v = 165;
k3 = 6.5;
```

In[168]:= $r1 = \frac{1}{2} \times \left(\frac{o5 - d1 - d7}{\pi}\right)$

Out[168]= 4.50408

In[169]:= $r2 = \frac{1}{2} \times \left(\frac{o6 - d2}{\pi}\right)$

Out[169]= 3.61282

In[170]:= $r3 = \frac{1}{2} \times \left(\frac{o7 - d3}{2\,\pi}\right)$

Out[170]= 3.98683

In[171]:= $r4 = \frac{1}{2} \times \left(\frac{o8 - d4}{\pi}\right)$

Out[171]= 5.39535

In[172]:= $HmotnostSvalstva = \left(\frac{r1 + r2 + r3 + r4}{4}\right)\text{^}2 \times v \times k3$

Out[172]= 20 526.2

Upravené rovnice pro výpočet svalové frakce (novější údaje):

In[173]:=
```
o5 = 32.00;
o6 = 23.50;
o7 = 52.50;
o8 = 24.00;
d1 = 1.8;
d2 = 0.8;
d3 = 2.4;
d4 = 1.5;
d7 = 1.9;
v = 165;
k3 = 6.5;
```

In[184]:=
```
HmotnostSvalstvaII = v × (0.0553 × (o7 - d3) ^2 + 0.0987 × (o6^2) + 0.0331 × (o8 - d4) ^2) - 2445
```

Out[184]= 32 216.1

Krok 4: Výpočet reziduálních orgánu

Po výpočtu předchozích složek zjistíme úpravou rovnice hmotnost vnitřních orgánů, včetně vnitřního tuku a vody (R). Nakonec určíme procentuální podíl hmotností jednotlivých komponent k celkové hmotnosti probanda.
Celková hmotnost (M) = Hmotnost kostry (O) + Hmotnost kůže (D) + Hmotnost svalstva (M) + Hmotnost vnitřních orgánů (R)

.... původní Matiegkova metoda.
V případě využití upravených rovnic pro výpočet svalové frakce: Celková hmotnost (M) = Hmotnost kostry (O) + Hmotnost kůže (D) + Hmotnost svalstvaII (M) + Hmotnost reziduálních orgánů (R). Hmotnosti se zadávají v gramech (g).

In[185]:=
```
CelkovaHmotnost = 58 000.00;
HmotnostKostry = 12 352.2;
HmotnostKuze = 3790.31;
HmotnostSvalstva = 20 526.2;
HmotnostSvalstvaII = 32 216.1;
```

In[190]:=
```
HmotnostRezidualnichOrganu =
  (CelkovaHmotnost - HmotnostKostry - HmotnostKuze - HmotnostSvalstva)
```

Out[190]= 21 331.3

In[191]:=
```
HmotnostRezidualnichOrganuII =
  (CelkovaHmotnost - HmotnostKostry - HmotnostKuze - HmotnostSvalstvaII)
```

Out[191]= 9641.39

Krok 5: Výpočet procentuálního zastoupení jednotlivých složek

V této části se seznámíme s výpočty procentuálního zastoupení jednotlivých složek a s jejich grafickým vyjádřením ve formě diagramu.

In[192]:= $\text{Kostra} = \text{HmotnostKostryProcenta} = \frac{\text{HmotnostKostry}}{\text{CelkovaHmotnost}} \times 100$

Out[192]= 21.2969

In[193]:= $\text{Kuze} = \text{HmotnostKuzeProcenta} = \frac{\text{HmotnostKuze}}{\text{CelkovaHmotnost}} \times 100$

Out[193]= 6.53502

In[194]:= $\text{Svalstvo} = \text{HmotnostSvalstvaProcenta} = \frac{\text{HmotnostSvalstva}}{\text{CelkovaHmotnost}} \times 100$

Out[194]= 35.39

In[195]:= $\text{HmotnostSvalstvaIIProcenta} = \frac{\text{HmotnostSvalstvaII}}{\text{CelkovaHmotnost}} \times 100$

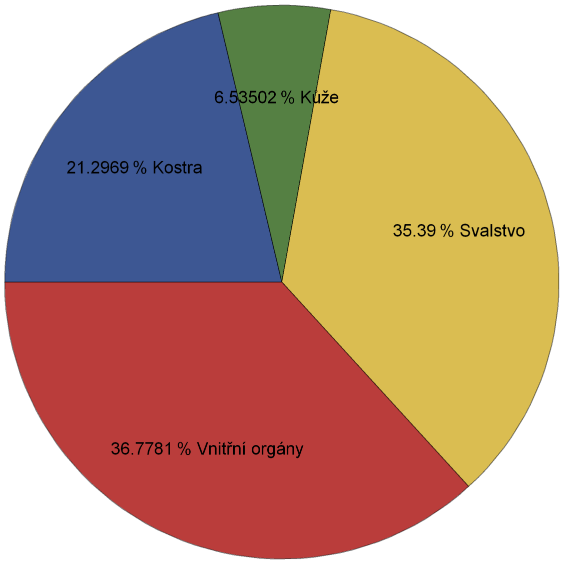
Out[195]= 55.545

In[196]:= $\text{VnitrniOrgany} = \text{HmotnostVnitrnichOrganuProcenta} = \frac{\text{HmotnostRezidualnichOrganu}}{\text{CelkovaHmotnost}} \times 100$

Out[196]= 36.7781

In[197]:=
```
PieChart[{Kostra, Kuze, Svalstvo, VnitrniOrgany},
 ChartStyle → "DarkRainbow", ChartLabels → { Kostra "% Kostra ",
   Kuze "% Kůže", Svalstvo "% Svalstvo", VnitrniOrgany "% Vnitřní orgány"}]
```

Out[197]=



Obr. 28: Procentuální zastoupení jednotlivých složek

6 Krystalová stavba kovů

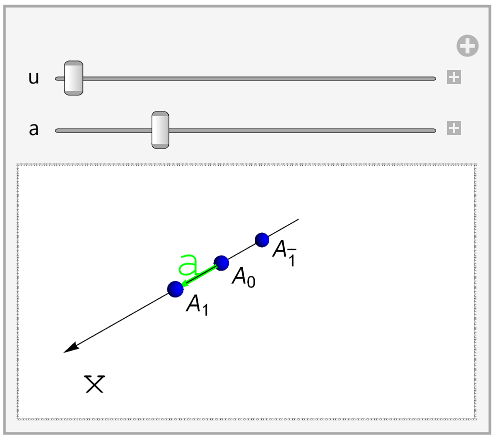
Pevné skupenství, ve kterém se za normálních podmínek nachází většina kovů, je charakterizováno těsným uspořádáním atomů a molekul. Malé volné prostory mezi stavebními částicemi jsou příčinou vysokého stupně jejich vzájemného silového působení a uspořádanosti částic. Soustava částic uspořádaných na velkou vzdálenost, u které je zachována prostorová symetrie i v makroskopickém měřítku, je reprezentována krystalem. Krystaly existují díky prostorově orientovaným silám navzájem přitahujících jednotlivé částice, které se nachází v periodicky rozmístěných uzlových bodech. Systém uzlových bodů se nazývá krystalová mřížka. Částice se v prostoru uspořádávají tak, aby co nejhospodárněji vyplnily prostor a dosáhly maximální pravidelnosti uspořádání. Pro krystalové uspořádání je typické pravidelné opakování základní strukturní jednotky - elementární buňky. Elementární buňka nemusí být nutně nejmenší strukturní jednotkou, jejíž translací lze vybudovat celý krystal. Nejmenší strukturní jednotku označujeme jako primitivní buňka. Pro názorné zobrazení je však častěji vhodnější použití elementární buňky.

6.1 Konstrukce krystalové mřížky

Konstrukce ideální krystalové mřížky vychází ze základní operace symetrie, a to translace neboli posunutí. Translace je jednoznačně určena bodem translace a translačním vektorem, tedy jeho velikostí, směrem a orientací. Libovolnému bodu (uzlu) A_0 je translací přiřazen bod A_1 translačně symetrický. Přitom platí, že vzdálenost těchto bodů je rovna velikosti translačního vektoru $\boldsymbol{a}$. Postupnou aplikací této translace a translace s opačně orientovaným translačním vektorem na posunuté body, resp. aplikací translací s vektory k$\boldsymbol{a}$, kde $k \in \langle -u, u \rangle$, $u \in \mathbb{Z}$, na výchozí bod, získáme skupinu translačně symetrických bodů $A_{\overline{u}}$, ..., $A_{\overline{2}}$, $A_{\overline{1}}$, A_0, A_1, A_2,..., A_u, kde pruh nad číslicí značí záporné číslo. Tyto body leží na jedné přímce, kterou označujeme jako mřížková (uzlová) přímka. Sestrojili jsme lineární mřížku. Označme její směr jako směr osy x.

In[198]:=
```
point = Sphere[{0, 0, 0}, .5];
Manipulate[Graphics3D[{
   {Blue, point, Table[Translate[{point}, {{k * a, 0, 0}, {-k * a, 0, 0}}], {k, u}]},
   {Table[Text[Style[Ai, Medium], {i * a, .5 * a, 0}], {i, 0, u}],
    Table[Text[Style[A-i, Medium], {i * a, .5 * a, 0}], {i, -u, -1}]},
   {Black, Arrow[{{(-u - 1) * a, 0, 0}, {(u + 2) * a, 0, 0}}]},
   Text[Style["x", Large, Black], {(u + 2) * a, .7 * a, 0}],
   {Green, Thick, Arrow[{{0, 0, 0}, {a, 0, 0}}]},
   Text[Style["a", 25 - u, Green], {.7 * a, 0, .4 * a}]},
  Boxed → False, ImageSize → Medium, ViewPoint → {1, 1, 1}],
 {u, 1, 4, 1}, {{a, 4}, 2, 10}, ControlPlacement → Center]
```

Out[199]=

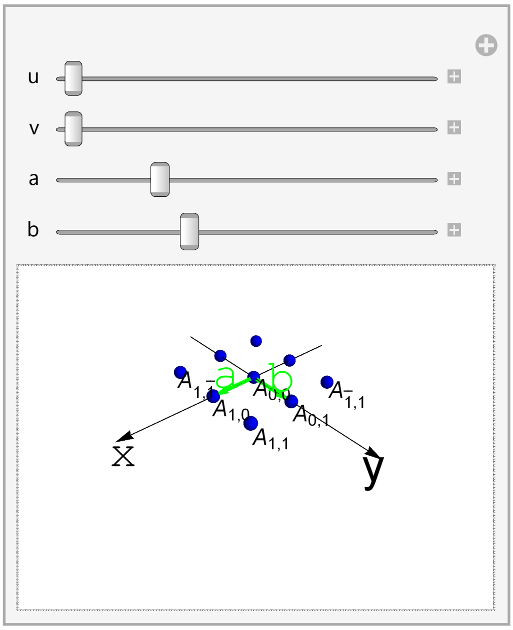


Obr. 29: Lineární krystalová mřížka

Rovinnou mřížku získáme násobnou translací lineární mřížky ve směru translačního vektoru $\boldsymbol{b}$, který má jiný směr a obecně i jinou velikost než vektor $\boldsymbol{a}$. Uzlové body $A_{u,v}$ rovinné mřížky jsou tedy translačně symetrické s body A_u lineární mřížky a jejich vzdálenost je rovna velikosti vektoru ***b***. Jeho směr určuje směr osy *y*. Translační vektory ***a*** a ***b*** a úhel, který svírají definují základní (elementární) buňku rovinné mřížky.

In[200]:=
```
Manipulate[Graphics3D[{
   {Blue, point, Table[Translate[{point}, {{k * a, 0, 0}, {-k * a, 0, 0}}], {k, u}],
    Table[
     Translate[{point, Table[Translate[{point}, {{k * a, 0, 0}, {-k * a, 0, 0}}], {k, u}]},
      {{0, k * b, 0}, {0, -k * b, 0}}], {k, v}]},
   Text[Style[A0,0, Medium], {0, .5 * b, 0}],
   {Table[Text[Style[Ai,j, Medium], {i * a, (j + .5) * b, 0}], {i, 0, u}, {j, v, v}],
    Table[Text[Style[A-i,j, Medium], {i * a, (j + .5) * b, 0}], {i, -u, -1}, {j, v, v}],
    Table[Text[Style[Ai,j, Medium], {i * a, (j + .5) * b, 0}], {i, u, u}, {j, 0, v}],
    Table[Text[Style[Ai,-j, Medium], {i * a, (j + .5) * b, 0}], {i, u, u}, {j, -v, -1}]},
   {Black, Arrow[{{(-u - 1) * a, 0, 0}, {(u + 2) * a, 0, 0}}],
    Arrow[{{0, (-v - 1) * b, 0}, {0, (v + 2) * b, 0}}]},
   Text[Style["x", Large, Black], {(u + 2) * a, 1, 0}],
   Text[Style["y", Large, Black], {1, (v + 2) * b, 0}],
   {Green, Thick, Arrow[{{0, 0, 0}, {a, 0, 0}}], Arrow[{{0, 0, 0}, {0, b, 0}}]},
   Text[Style["a", 25 - u * v, Green], {.7 * a, 0, .4 * a}],
   Text[Style["b", 25 - u * v, Green], {0, .7 * b, .4 * a}]},
  Boxed → False, ImageSize → Medium, ViewPoint → {1, 1, 1}],
 {u, 1, 4, 1}, {v, 1, 4, 1}, {{a, 4}, 2, 10}, {{b, 4}, 1, 10}, ControlPlacement → Center]
```

Out[200]=



Obr. 30: Rovinná krystalová mřížka

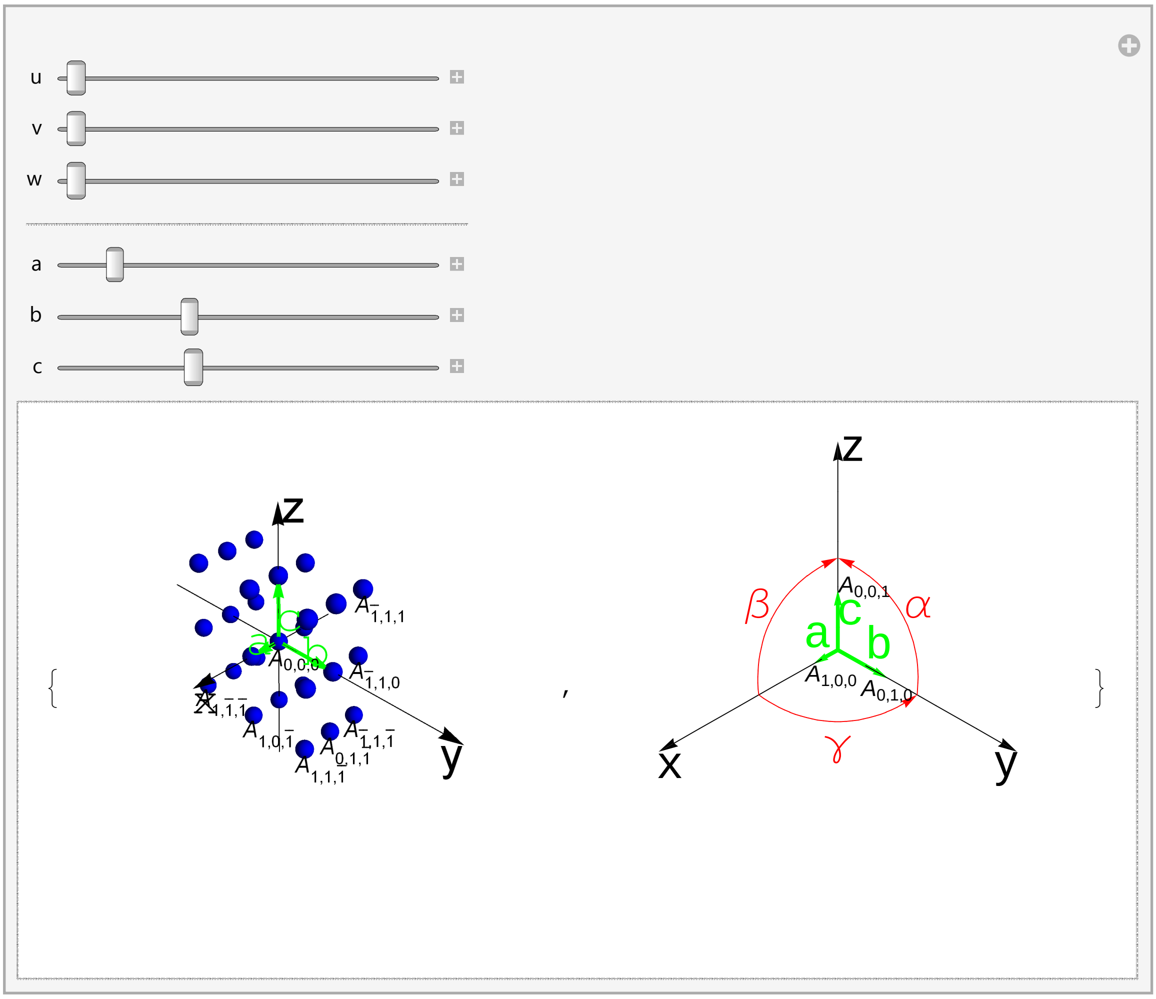
Prostorová mřížka vznikne násobnou translací rovinné mřížky ve směru translačního vektoru ***c***, který má směr odlišný od směrů vektorů ***a*** a ***b*** a má obecně i jinou velikost. Směr vektoru ***c*** je směrem osy *z*. Takto vzniklé uzlové body mají obecné označení $A_{u,v,w}$ a jsou translačně symetrické s body A_{uv}. Translační vektory ***a***, ***b*** a ***c*** spolu s úhly α, β a γ který svírají definují základní buňku prostorové mřížky. Elementární buňkou je tedy rovnoběžnostěn s délkami hran *a*, *b* a *c* ($a = |\boldsymbol{a}|$, $b = |\boldsymbol{b}|$, $c = |\boldsymbol{c}|$), které svírají úhly α, β a γ. Délky hran tohto rovnoběžnostěnu *a*, *b* a *c* označujeme jako mřížkové konstanty (parametry) ve směrech os *x*, *y* a *z*. Vyjadřují vzdálenosti středů sousedních atomů.

Poloha libovolného uzlového bodu prostorové mřížky $A_{u,v,w}$ je určena lineární kombinaci mřížkových vektorů $A_{u,v,w} = \mathrm{u}\boldsymbol{a} + \mathrm{v}\boldsymbol{b} + \mathrm{w}\boldsymbol{c}$, kde u, v, w jsou souřadnice uzlového bodu.

```
Manipulate[{Graphics3D[{
    {Blue, point, Table[Translate[{point}, {{k * a, 0, 0}, {-k * a, 0, 0}}], {k, u}],
     Table[Translate[{point, Table[Translate[{point}, {{k * a, 0, 0}, {-k * a, 0, 0}}],
         {k, u}]}, {{0, k * b, 0}, {0, -k * b, 0}}], {k, v}],
     Table[Translate[{point, Table[Translate[{point}, {{k * a, 0, 0}, {-k * a, 0, 0}}],
         {k, u}], Table[Translate[{point, Table[Translate[{point},
             {{k * a, 0, 0}, {-k * a, 0, 0}}], {k, u}]}, {{0, k * b, 0}, {0, -k * b, 0}}],
         {k, v}]}, {{0, 0, k * c}, {0, 0, -k * c}}], {k, w}]},
    Text[Style[A_{0,0,0}, Medium], {0, .3 * b, -.15 * c}],
    {Table[Text[Style[A_{i,j,\overline{-k}}, Medium], {i * a, (j + .3) * b, (k - .15) * c}],
      {i, 0, u}, {j, v, v}, {k, -w, -w}],
     Table[Text[Style[A_{\overline{-i},j,\overline{-k}}, Medium], {i * a, (j + .3) * b, (k - .15) * c}],
      {i, -u, -1}, {j, v, v}, {k, -w, -w}], Table[Text[Style[A_{i,j,\overline{-k}}, Medium],
       {i * a, (j + .3) * b, (k - .15) * c}], {i, u, u}, {j, 0, v}, {k, -w, -w}],
     Table[Text[Style[A_{i,\overline{-j},\overline{-k}}, Medium], {i * a, (j + .3) * b, (k - .15) * c}],
      {i, u, u}, {j, -v, -1}, {k, -w, -w}],
     Table[Text[Style[A_{\overline{-i},j,\overline{-k}}, Medium], {i * a, (j + .3) * b, (k - .15) * c}],
      {i, -u, -u}, {j, v, v}, {k, -w, -1}], Table[Text[Style[A_{\overline{-i},j,k}, Medium],
       {i * a, (j + .3) * b, (k - .15) * c}], {i, -u, -u}, {j, v, v}, {k, 0, w}]},
    {Black, Arrow[{{(-u - 1) * a, 0, 0}, {(u + 2) * a, 0, 0}}],
     Arrow[{{0, (-v - 1) * b - 1, 0}, {0, (v + 2) * b, 0}}],
     Arrow[{{0, 0, (-w - 1) * c}, {0, 0, (w + 1) * c}}]},
    Text[Style["x", Large, Black], {(u + 2) * a, 1, 0}],
    Text[Style["y", Large, Black], {1, (v + 2) * b, 0}],
    Text[Style["z", Large, Black], {0, 1, (w + 1) * c}],
    {Green, Thick, Arrow[{{0, 0, 0}, {a, 0, 0}}],
     Arrow[{{0, 0, 0}, {0, b, 0}}], Arrow[{{0, 0, 0}, {0, 0, c}}]},
    Text[Style["a", 25 - u * v * w, Green], {.7 * a, 0, .2 * c}],
    Text[Style["b", 25 - u * v * w, Green], {0, .7 * b, .2 * c}],
    Text[Style["c", 25 - u * v * w, Green], {0, .2 * b, .5 * c}]},
   Boxed -> False, ImageSize -> Medium, ViewPoint -> {1, 1, 1}],
  Graphics3D[{
    Text[Style[A_{1,0,0}, Medium], {a, 1.5, 0}],
    Text[Style[A_{0,1,0}, Medium], {0, b, -.8}],
    Text[Style[A_{0,0,1}, Medium], {0, 2, c + 1}],
    {Black, Arrow[{{0, 0, 0}, {12, 0, 0}}],
     Arrow[{{0, 0, 0}, {0, 12, 0}}],
     Arrow[{{0, 0, 0}, {0, 0, 12}}]},
    Text[Style["x", Large, Black], {12, 1, 0}],
    Text[Style["y", Large, Black], {1, 12, 0}],
    Text[Style["z", Large, Black], {0, 1, 12}],
    {Red, Arrow[BSplineCurve[{{6, 0, 0}, {6, 6, 0}, {0, 6, 0}}]],
     Arrow[BSplineCurve[{{6, 0, 0}, {6, 0, 6}, {0, 0, 6}}]],
     Arrow[BSplineCurve[{{0, 6, 0}, {0, 6, 6}, {0, 0, 6}}]]},
    Text[Style["α", Large, Red], {0, 5.5, 5.5}],
    Text[Style["β", Large, Red], {5.5, 0, 5.5}],
    Text[Style["γ", Large, Red], {5.5, 5.5, 0}],
    {Green, Thick, Arrow[{{0, 0, 0}, {a, 0, 0}}],
     Arrow[{{0, 0, 0}, {0, b, 0}}], Arrow[{{0, 0, 0}, {0, 0, c}}]},
```

```
    Text[Style["a", Large, Green], {.8 * a, 0, 2}],
    Text[Style["b", Large, Green], {0, .8 * b, 2}],
    Text[Style["c", Large, Green], {0, 1, .8 * c}]},
   Boxed → False, ImageSize → 250 , ViewPoint → {1, 1, 1}]},
 {u, 1, 4, 1}, {v, 1, 4, 1}, {w, 1, 4, 1},
 Delimiter, {{a, 2}, 1, 10}, {{b, 4}, 1, 10}, {{c, 3}, 1, 10}]
```

Out[201]=

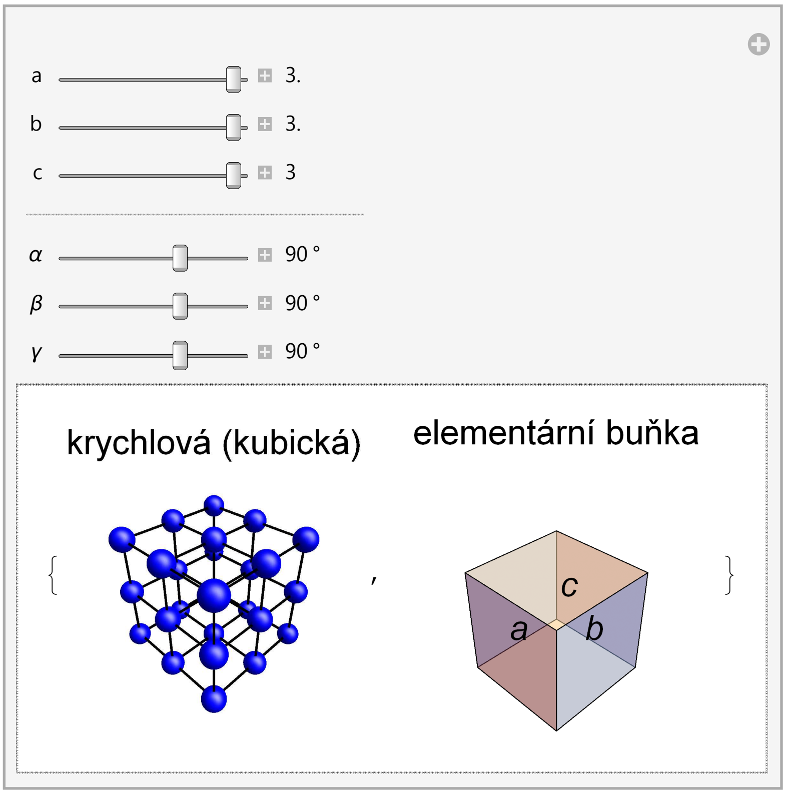


Obr. 31: Prostorová krystalová mřížka

V závislosti na vzájemném vztahu mřížkových parametrů ve směrech jednotlivých krystalografických os a úhlech, které tyto osy svírají rozlišujeme sedm typů krystalografických soustav.

```
In[202]:= Manipulate[
  x0 = y0 = z0 = 0;
  p[0] = {x0, y0, z0};
  p[1] = {x0 + c Cos[β], y0 + c (Cos[α] Csc[γ] - Cos[β] Cot[γ]),
    z0 + c √(Sin[β]^2 + (Cos[α] Csc[γ] - Cos[β] Cot[γ])^2) };
  p[2] = {x0 + b Cos[α], y0 + b Sin[γ], z0};
  p[3] = {x0 + a, y0, z0};
  p[4] = p[1] + p[2]; p[5] = p[1] + p[3];
  p[6] = p[2] + p[3];
  p[7] = p[1] + p[2] + p[3];
  {Graphics3D[{Blue, Specularity[White, 20], Lighting → "Neutral",
     Table[Translate[{Table[Sphere[p[n], .6], {n, 0, 7}], Thickness[.01], Black,
        Line[{p[0], p[1], p[5], p[3], p[0]}],
        Line[{p[0], p[1], p[4], p[2]}],
        Line[{p[0], p[2], p[6], p[3]}],
        Line[{p[1], p[4], p[7], p[5]}],
        Line[{p[3], p[5], p[7], p[6]}],
        Line[{p[2], p[4], p[7], p[6]}]}, p[n]], {n, 0, 7}]},
    Boxed → False, PlotRange → {-1, 1.5 * 2 Max[a, b, c] - 1},
    ImageSize → {400, 400}, PlotLabel → Style[Which[
       a == b == c && α == β == γ == 90 °, "krychlová (kubická)",
       (a == b && α == β == 90 ° && γ == 120 °) || (a == c && α == γ == 90 ° && β == 120 °) ||
        ( b == c && β == γ == 90 ° && α == 120 °), "šesterečná (hexagonální)",
       (a == b || a == c || b == c) && α == β == γ == 90 °, "čtverečná (tetragonální)",
       a ≠ b ≠ c && α == β == γ == 90 °, "kosočtverečná (ortorombická)",
       a == b == c && α == β == γ ≠ 90 °, "klencová (trigonální, romboedrická)",
       α == γ == 90 ° ≠ β || α == β == 90 ° ≠ γ || β == γ == 90 ° ≠ α, "jednoklonná (monoklinická)",
       True, "trojklonná (triklinická)"], 18], ViewPoint → {1, 1, 1}],
   Graphics3D[{Text[Style["a", 18, Italic], (p[0] + p[3])/2 + {0, 0, .5}],
     Text[Style["b", 18, Italic], (p[0] + p[2])/2 + {0, 0, .5}],
     Text[Style["c", 18, Italic], (p[0] + p[1])/2 + {0, .5, 0}],
     Opacity[.5],
     Polygon[{p[0], p[1], p[5], p[3]}],
     Polygon[{p[0], p[1], p[4], p[2]}],
     Polygon[{p[0], p[2], p[6], p[3]}],
     Polygon[{p[1], p[4], p[7], p[5]}],
     Polygon[{p[3], p[5], p[7], p[6]}],
     Polygon[{p[2], p[4], p[7], p[6]}]},
    Boxed → False, PlotRange → {-1, 1.5 Max[a, b, c] + 1},
    ImageSize → {300, 300}, PlotLabel → Style["elementární buňka", 18],
    SphericalRegion → True, ViewPoint → {1, 1, 1}]},
  {{a, 3}, 1, 3, .5, ImageSize → Small, Appearance → "Labeled"},
  {{b, 3}, 1, 3, .5, ImageSize → Small, Appearance → "Labeled"},
  {{c, 3}, 1, 3, .5, ImageSize → Small, Appearance → "Labeled"}, Delimiter,
  {{α, 90 °}, 30 °, 120 °, 30 °, ImageSize → Small, Appearance → "Labeled"},
  {{β, 90 °}, 30 °, 120 °, 30 °, ImageSize → Small, Appearance → "Labeled"},
  {{γ, 90 °}, 30 °, 120 °, 30 °, ImageSize → Small, Appearance → "Labeled"},
  ControlPlacement → Center, TrackedSymbols → {a, b, c, α, β, γ}]
```

Out[202]=

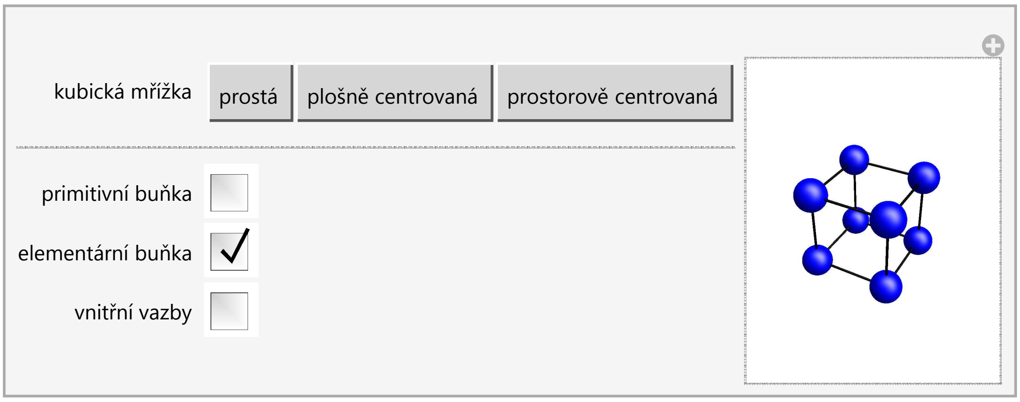


Obr. 32: Typy krystalografických soustav a příslušné elementární buňky

Kromě prostých lze v některých krystalografických soustavách nalézt i bazálně, plošně či prostorově centrované mřížky. Celkem je známo čtrnáct typů elementárních buněk, které určil v roce 1850 francouzský přírodovědec Auguste Bravais. Příklad prosté, plošně a prostorově centrované kubické mřížky je uveden níže.

In[203]:=
```
Manipulate[
 Graphics3D[{Specularity[White, 20], Blue, FlipView[{Sphere[#, .4]}] & /@ atompos,
   Green,
   CellLines[If[unit, If[atompos == atomssc, unitsc, If[atompos == atomsfcc, unitfcc,
       If[atompos == atomsbcc, unitbcc]]], 0 * IdentityMatrix[3]], .03],
   Black, CellLines[If[cubic, 2 * IdentityMatrix[3], 0 * IdentityMatrix[3]], .03],
   Black, If[internal, If[atompos == atomsbcc,
     internalbcc[.03], If[atompos == atomsfcc, internalfcc[.03]]], {}],
   Black, {}}, Lighting → "Neutral", SphericalRegion → True,
  Boxed → False, ImageSize → {150, 200}],
 {{atompos, atomsfcc, "kubická mřížka"}, {atomssc → "prostá",
   atomsfcc → "plošně centrovaná", atomsbcc → "prostorově centrovaná"}}, Delimiter,
 {{unit, True, "primitivní buňka"}, {True, False}},
 {{cubic, True, "elementární buňka"}, {True, False}},
 {{internal, True, "vnitřní vazby"}, {True, False}},
 ControlPlacement → Left, SynchronousInitialization → False,
 Initialization :→ (
   CellLines[lattvec_, wid_] := Module[{Lines1, Lines2, MidLines, UnitCellLines}, Lines1 =
      {{0, 0, 0}, lattvec[[1]], lattvec[[1]] + lattvec[[2]], lattvec[[2]], {0, 0, 0}};
     Lines2 = (# + lattvec[[3]]) & /@ Lines1;
     MidLines = Table[{Lines1[[ii]], Lines2[[ii]]}, {ii, Length@Lines1}];
     UnitCellLines =
      # & /@ {Tube[Lines1, wid], Tube[Lines2, wid], Tube[#, wid] & /@ MidLines}];
   atomssc = Tuples[{0, 2}, 3];
   atomsfcc = Pick[Tuples[{0, 1, 2}, 3], Mod[
      Total[Tuples[{0, 1, 2}, 3][[#]]] & /@ Range[Length[Tuples[{0, 1, 2}, 3]]], 2], 0];
   atomsbcc = Join[Tuples[{0, 2}, 3], {{1, 1, 1}}];
   unitsc = 2 * IdentityMatrix[3];
   unitfcc = Permutations[{1, 1, 0}, {3}];
   unitbcc = Permutations[{1, 1, -1}, {3}];
   internalbcc[wid_] := Tube[{#, {1, 1, 1}}, wid] & /@ Tuples[{0, 2}, 3];
   internalfcc[wid_] :=
    {Tube[{{1, 0, 1}, {2, 1, 1}, {1, 2, 1}, {0, 1, 1}, {1, 0, 1}}, wid],
     Tube[{{1, 1, 0}, #}, wid] & /@ {{0, 1, 1}, {1, 0, 1}, {1, 2, 1}, {2, 1, 1}},
     Tube[{{1, 1, 2}, #}, wid] & /@ {{0, 1, 1}, {1, 0, 1}, {1, 2, 1}, {2, 1, 1}}};
   internaldiam[wid_] := {Tube[{{.5, .5, .5}, #}, wid] & /@
      Join[{{0, 0, 0}}, Permutations[{1, 1, 0}, {3}]],
     Line[{{1.5, 1.5, .5}, #}, wid] & /@ {{2, 2, 0}, {1, 1, 0}, {2, 1, 1}, {1, 2, 1}},
     Line[{{.5, 1.5, 1.5}, #}, wid] & /@ {{0, 1, 1}, {1, 2, 1}, {1, 1, 2}, {0, 2, 2}},
     Line[{{1.5, .5, 1.5}, #}, wid] & /@ {{1, 0, 1}, {2, 0, 2}, {1, 1, 2}, {2, 1, 1}}};)]
```

Out[203]=



Obr. 33: Kubická mřížka

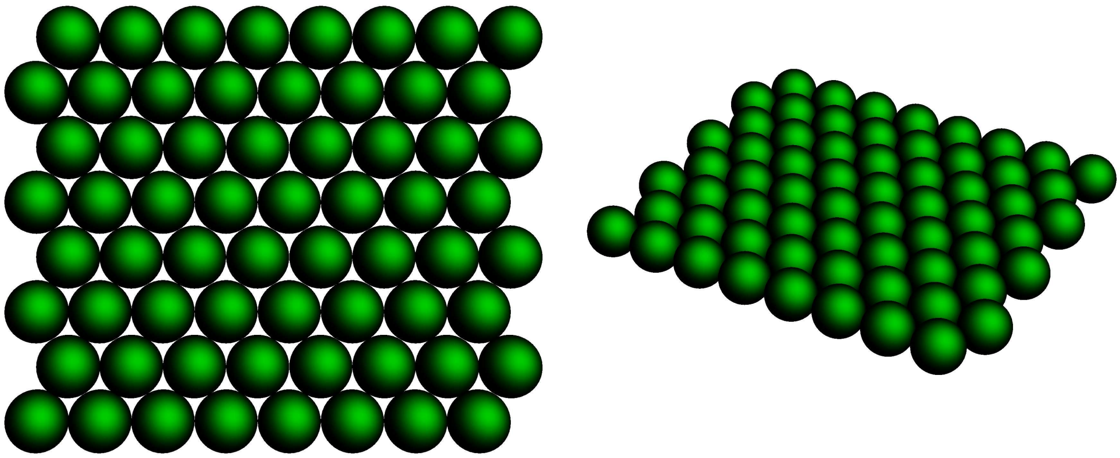
6.2 Konstrukce základních typů krystalových mřížek kovů vycházející z vrstvení hustě obsazených rovin atomů

Většina kovů krystalizuje v kubické nebo hexagonální soustavě. V případě kubické soustavy je elementární buňka plošně nebo prostorově centrovaná. Prostá kubická soustava se v přírodě nevyskytuje. Kovy krystalizující v hexagonální soustavě mají obvykle nejtěsnější uspořádání.

V rovině lze atomy reprezentované stejně velkými koulemi nejtěsněji uspořádat pouze jediným způsobem. Vytvoříme řadu dotýkajících se koulí. Vedle ní umístíme další řadu dotýkajících se koulí tak, že koule v sousedních řadách budou vzájemně posunuty o polovinu průměru koule a každá koule druhé řady bude se dvěma nejbližšími koulemi z řady první tvořit vrcholy rovnostranného trojúhelníka s hranou, jejíž délka je rovna průměru koule.Vzdálenost os sousedních řad je rovna výšce uvedeného trojúhelníka. Analogicky vytvoříme další řady.

In[204]:=
```
a1 = Table[{n, 0, 0}, {n, 8}];
a2 = Translate[Translate[Sphere[{a1}, .5], {{0, 0, 0}, {.5, √3 / 2, 0},
      {0, √3, 0}, {.5, 3 √3 / 2, 0}}], {{0, 0, 0}, {0, 2 √3, 0}}];
a = Row[{
   Graphics3D[{Black, Specularity[Green, 4], a2},
    Boxed → False, ImageSize → 300, ViewPoint → Above],
   Graphics3D[{Black, Specularity[Green, 4], a2}, Boxed → False, ImageSize → 300]}]
```

Out[206]=



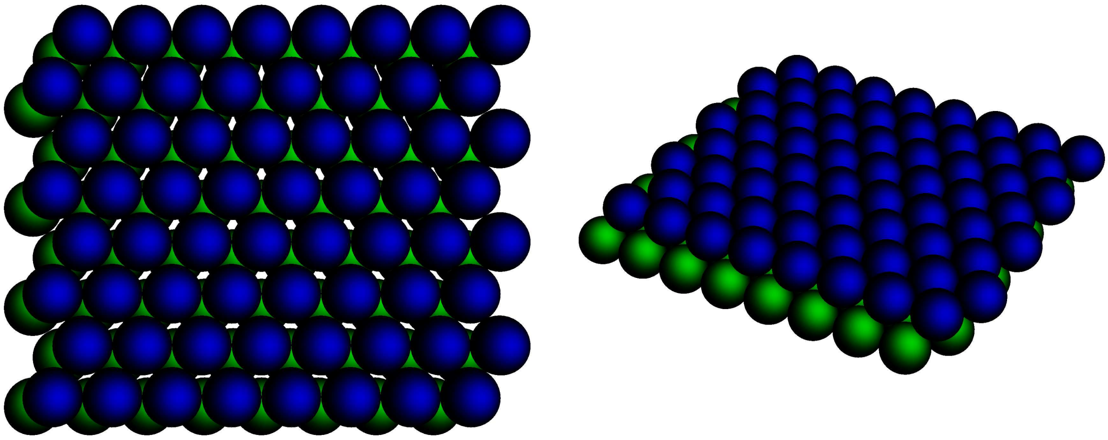
Obr. 34: Nejtěsnější uspořádání atomů v rovině

Mezi každými dvěma řadami koulí vznikly mezery (prohlubně), které leží na dvou osách rovnoběžných s osami řad koulí. Pokud obsadíme mezery v jedné ose, vytvoříme řadu těsně uspořádaných koulí druhé vrstvy. Další řady budujeme analogicky jako v případě vrstvy první. Tímto způsobem vznikne druhá těsně uspořádaná vrstva tvořená koulemi, které zapadly do prohlubní v první vrstvě a obsadily polovinu z nich, tedy obsadily mezery v každé druhé ose. Výběr osy pro zaplnění první řady koulí druhé vrstvy je náhodný a obě možné struktury jsou rovnocenné.

In[207]:=
```
b2 = Translate[a2, {.5, √3 / 6, √6 / 3}];
```

In[208]:=
```
ab = Row[{
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2}},
    Boxed → False, ImageSize → 300, ViewPoint → Above],
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2}},
    Boxed → False, ImageSize → 300]}]
```

Out[208]=

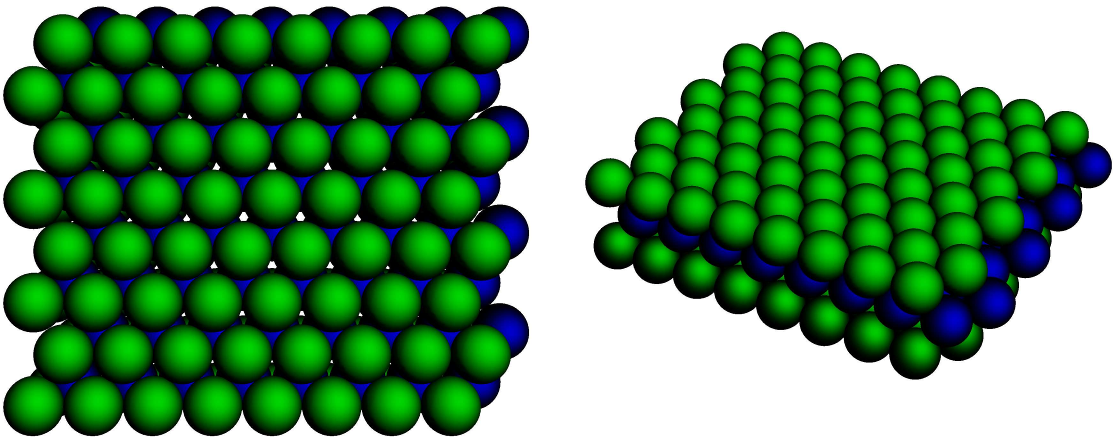


Obr. 35: První dvě vrstvy atomů hexagonální těsně uspořádané mřížky

Je-li třetí vrstva koulí rozložená symetricky s první (řazení vrstev je ABA), vytvořili jsme hexagonální (šesterečnou) těsně uspořádanou (HTU) mřížku (označovanou také HCP z anglického hexagonal close packed). Každá koule má šest sousedů ve vrstvě a dvanáct v prostoru, koeficient zaplnění je 74 %. V HTU mřížce krystalizují berylium, hořčík, zinek, kadmium, α titan, α zirkonium, α kobalt a většina kovů vzácných zemin.

In[209]:=
```
c2 = Translate[a2, {0, 0, 2 √6 / 3}];
abcHTU = Row[{
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2},
     {Black, Specularity[Blue, 4], b2}, {Black, Specularity[Green, 2], c2}},
    Boxed → False, ImageSize → 300, ViewPoint → Above],
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2},
     {Black, Specularity[Green, 2], c2}}, Boxed → False, ImageSize → 300]}]
```

Out[210]=

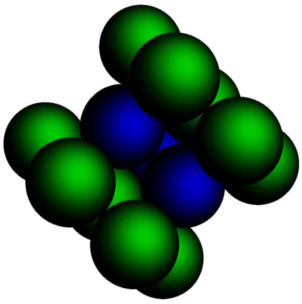


Obr. 36: Základní vrstvení rovin atomů hexagonální těsně uspořádané mřížky

Níže je uvedena elementární buňka HTU mřížky. Jde o případ hexagonální mřížky s nejtěsnějším prostorovým uspořádáním.

In[211]:=
```
podst1 = Translate[Sphere[{0, 0, 0}, .5], {{0, 0, 0}, {1, 0, 0}, {-1, 0, 0},
    {.5, √3 / 2, 0}, {-.5, √3 / 2, 0}, {.5, -√3 / 2, 0}, {-.5, -√3 / 2, 0}}];
podst2 = Translate[podst1, {{0, 0, 0}, {0, 0, 2 √6 / 3}}];
sHTU = Translate[Sphere[{0, 0, 0}, .5],
   {{.5, √3 / 6, √6 / 3}, {-.5, √3 / 6, √6 / 3}, {0, -√3 / 3, √6 / 3}}];
Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], podst1, podst2},
  {Black, Specularity[Blue, 4], sHTU}}, Boxed → False]
```

Out[214]=

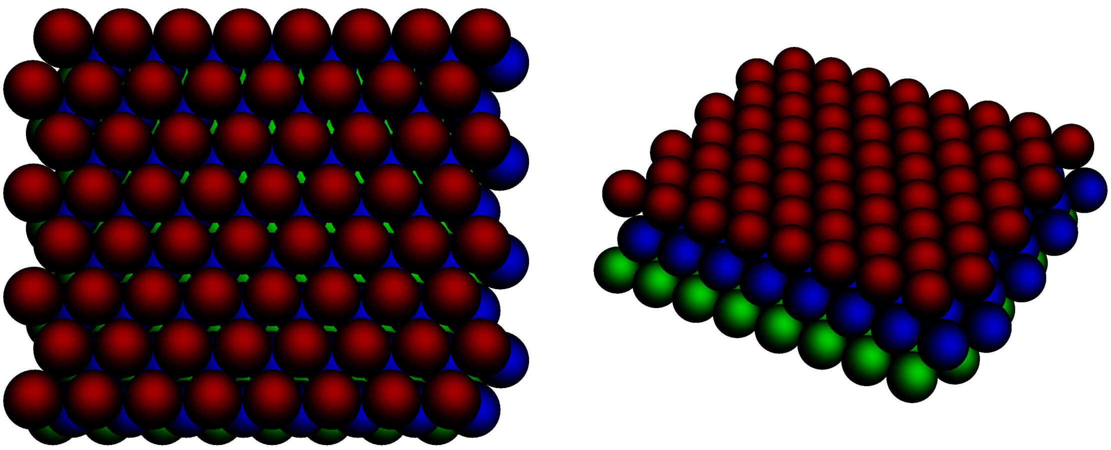


Obr. 37: Elementární buňka hexagonální těsně uspořádané mřížky

Jestliže budou první dvě vrstvy uspořádány stejným způsobem jako v případě konstrukce HTU mřížky, ale třetí vrstva bude vůči první posunuta tak, že budou zaplněny mezery na druhé paralelní ose, které nebyly v případě HTU struktury využity, bude teprve až čtvrtá vrstva shodná s první (řazení vrstev ABCA). V tomto rozložení je vytvořena kubická (krychlová) plošně centrovaná (středěná), neboli kubická planicentrická (KPC) mřížka (označovaná také FCC z anglického face centered cubic). Objem KPC mřížky je zaplněn ze 74 % a její koordinační číslo je dvanáct stejně jako u HTU. Stejný koeficient zaplnění mřížky a koordinační číslo souvisí se společným nejtěsnějším uspořádáním atomů. V KPC mřížce krystalizují γ železo, cín, cer, hliník, β kobalt, rhodium, iridium, nikl, palladium, platina, měď, stříbro, zlato, olovo, α vápník. Tyto kovy se navenek jeví jako velmi tvárné

In[215]:=
```
c2FCC = Translate[a2, {0, √3 / 3, 2 √6 / 3}];
abcFCC = Row[{
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2},
     {Black, Specularity[Blue, 4], b2}, {Black, Specularity[Red, 4], c2FCC}},
    Boxed → False, ImageSize → 300, ViewPoint → Above],
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2},
     {Black, Specularity[Red, 4], c2FCC}}, Boxed → False, ImageSize → 300]}]
```

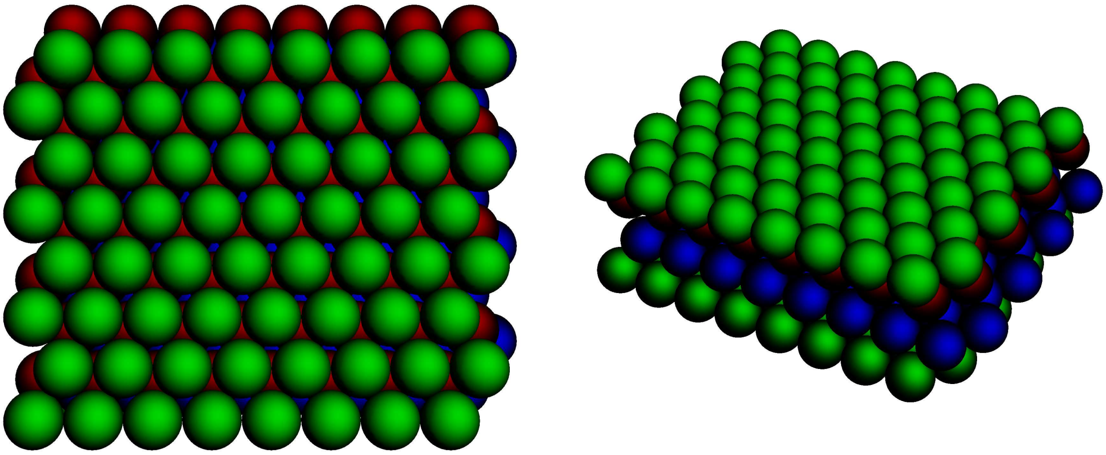
Out[216]=



Obr. 38: První tři vrstvy atomů kubické plošně centrované mřížky

```
In[217]:= d = Translate[a2, {0, 0, √6}];
abcdFCC = Row[{
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2},
     {Black, Specularity[Red, 4], c2FCC}, {Black, Specularity[Green, 2], d}},
    Boxed → False, ImageSize → 300, ViewPoint → Above],
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2},
     {Black, Specularity[Blue, 4], b2}, {Black, Specularity[Red, 4], c2FCC},
     {Black, Specularity[Green, 2], d}}, Boxed → False, ImageSize → 300]}]
```

Out[218]=



Obr. 39: Základní vrstvení rovin atomů kubické plošně centrované mřížky

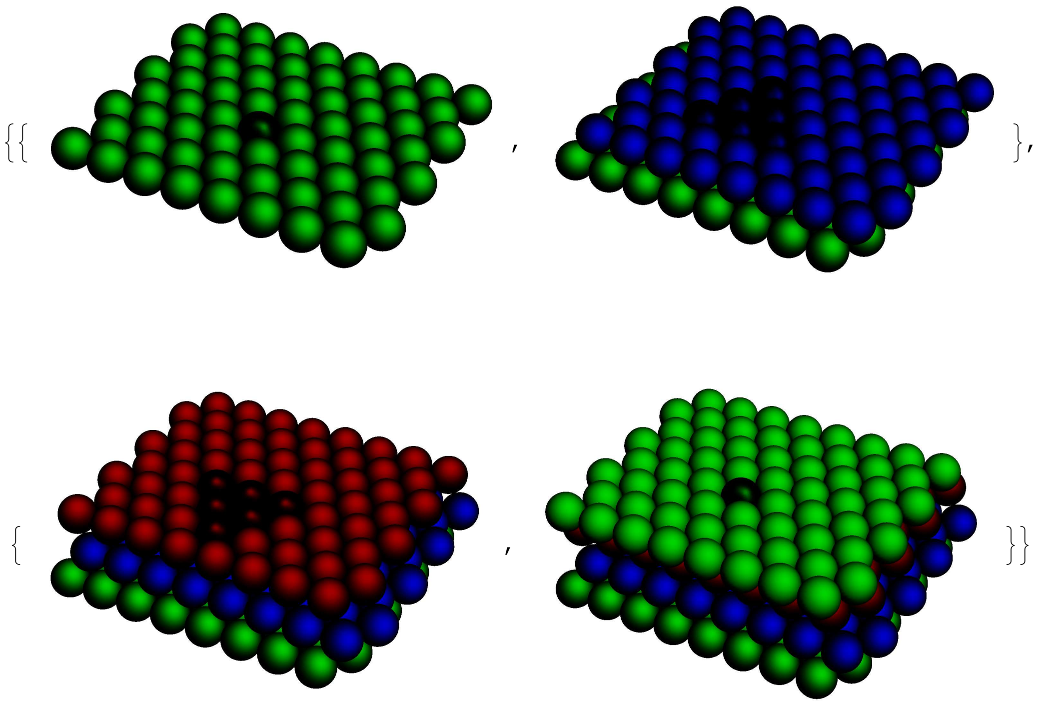
Krychlová neprimitivní elementární buňka KPC mřížky je orientována tak, že její diagonála je normálou uvedeného vrstvení rovin. Pro názornost jsou v každé rovině zvýrazněny koule, které tvoří tuto elementární buňku.

```
In[219]:= ax = Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2}, {Black, Specularity[Green, 50],
     Sphere[{4.5, 3 √3 / 2, 0}, .51]}}, Boxed → False, ImageSize → 250];

In[220]:= abx = Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2},
    {Black, Specularity[Green, 50], Sphere[{4.5, 3 √3 / 2, 0}, .51]},
    {Black, Specularity[Blue, 4], b2}, {Black, Specularity[Blue, 50],
     Sphere[{{5, 5 √3 / 3, √6 / 3}, {4, 5 √3 / 3, √6 / 3}, {4.5, 13 √3 / 6, √6 / 3},
       {4.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}, {3.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}, {5.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}},
      .51]}}, Boxed → False, ImageSize → 250];

In[221]:= abcFCCx =
  Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2},
    {Black, Specularity[Blue, 50], Sphere[{{5, 5 √3 / 3, √6 / 3},
       {4, 5 √3 / 3, √6 / 3}, {4.5, 13 √3 / 6, √6 / 3}, {4.5, 7 √3 / 6, √6 / 3},
       {3.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}, {5.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}}, .51]},
    {Black, Specularity[Red, 4], c2FCC}, {Black, Specularity[Red, 50],
     Sphere[{{4.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {5.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3},
       {3.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {4, 8 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {5, 8 √3 / 6, 2 √6 / 3},
       {4.5, 5 √3 / 6, 2 √6 / 3}}, .51]}}, Boxed → False, ImageSize → 250];
```

In[222]:=
```
abcdFCCx =
  Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2},
    {Black, Specularity[Blue, 50], Sphere[{{5, 5 √3 / 3, √6 / 3},
       {4, 5 √3 / 3, √6 / 3}, {4.5, 13 √3 / 6, √6 / 3}, {4.5, 7 √3 / 6, √6 / 3},
       {3.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}, {5.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}}, .51]},
    {Black, Specularity[Red, 4], c2FCC}, {Black, Specularity[Red, 50],
     Sphere[{{4.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {5.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3},
       {3.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {4, 8 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {5, 8 √3 / 6, 2 √6 / 3},
       {4.5, 5 √3 / 6, 2 √6 / 3}}, .51]}, {Black, Specularity[Green, 2], d},
    {Black, Specularity[Green, 50], Sphere[{4.5, 3 √3 / 2, √6}, .51]}},
   Boxed → False, ImageSize → 250];
```

In[223]:=
```
  ax       abx
abcFCCx  abcdFCCx
```

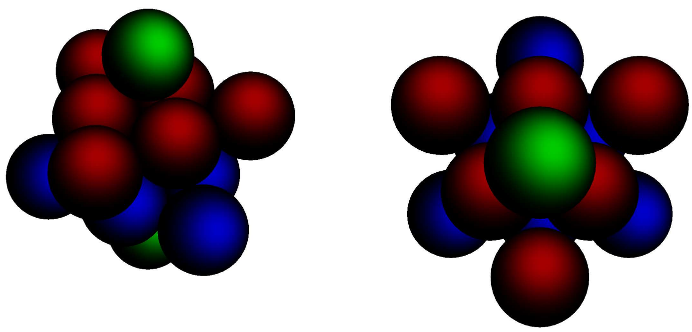
Out[223]=



Obr. 40: K vysvětlení orientace elementární buňky kubické plošně centrované mřížky vůči vrstvení těsně uspořádaných rovin atomů - zvýrazněné atomy tvoří neprimitivní elementární buňku

```
In[224]:= Row[{Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], Sphere[{4.5, 3 √3 / 2, 0}, .5]},
      {Black, Specularity[Blue, 4], Sphere[{{5, 5 √3 / 3, √6 / 3},
         {4, 5 √3 / 3, √6 / 3}, {4.5, 13 √3 / 6, √6 / 3}, {4.5, 7 √3 / 6, √6 / 3},
         {3.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}, {5.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}}, .5]},
      {Black, Specularity[Red, 4], Sphere[{{4.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3},
         {5.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {3.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {4, 8 √3 / 6, 2 √6 / 3},
         {5, 8 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {4.5, 5 √3 / 6, 2 √6 / 3}}, .5]},
      {Black, Specularity[Green, 4], Sphere[{4.5, 3 √3 / 2, √6}, .5]}},
     Boxed → False, ImageSize → 250],
    Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], Sphere[{4.5, 3 √3 / 2, 0}, .5]},
      {Black, Specularity[Blue, 4], Sphere[{{5, 5 √3 / 3, √6 / 3},
         {4, 5 √3 / 3, √6 / 3}, {4.5, 13 √3 / 6, √6 / 3}, {4.5, 7 √3 / 6, √6 / 3},
         {3.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}, {5.5, 7 √3 / 6, √6 / 3}}, .5]},
      {Black, Specularity[Red, 4], Sphere[{{4.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3},
         {5.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {3.5, 11 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {4, 8 √3 / 6, 2 √6 / 3},
         {5, 8 √3 / 6, 2 √6 / 3}, {4.5, 5 √3 / 6, 2 √6 / 3}}, .5]},
      {Black, Specularity[Green, 4], Sphere[{4.5, 3 √3 / 2, √6}, .5]}},
     Boxed → False, ViewPoint → Above, ImageSize → 250]}]
```

Out[224]=



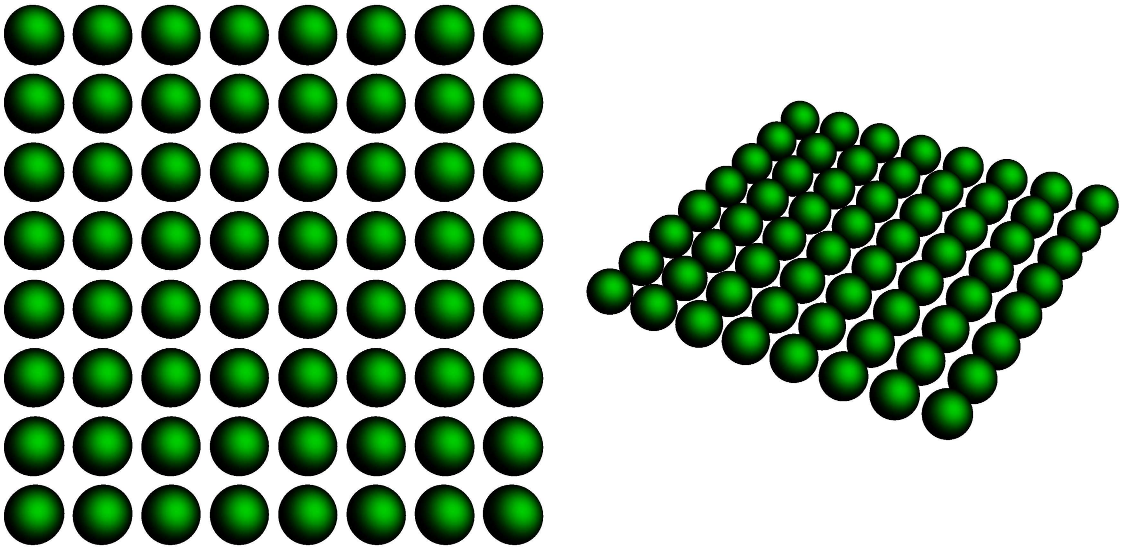
Obr. 41: Elementární buňka kubické plošně centrované mřížky

Dále je uvedeno čtverečné upořádání koulí v rovině, které je základem další varianty krychlové mřížky.

```
In[225]:= a2s = Translate[Translate[Sphere[{a1}, √3 / 4],
      {{0, 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 2, 0}, {0, 3, 0}}], {{0, 0, 0}, {0, 4, 0}}];
```

In[226]:=
```
as = Row[{
    Graphics3D[{Black, Specularity[Green, 4], a2s},
     Boxed → False, ImageSize → 300, ViewPoint → Above],
    Graphics3D[{Black, Specularity[Green, 4], a2s}, Boxed → False, ImageSize → 300]}]
```

Out[226]=



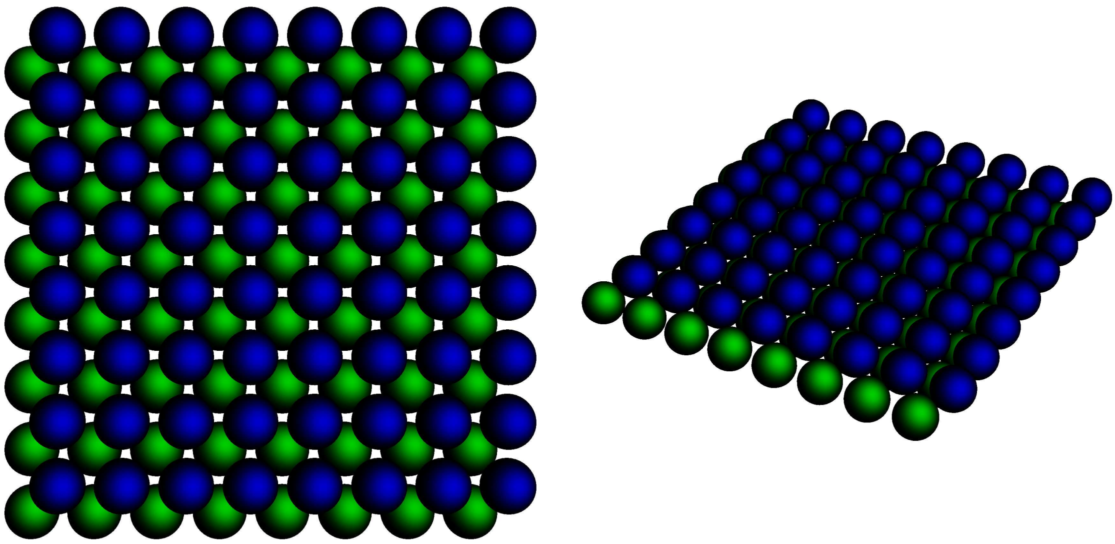
Obr. 42: Čtverečné uspořádání atomů v rovině

Druhá vrstva zapadne do přirozených mezer v první vrstvě a má opět čtverečné uspořádání.

In[227]:=
```
b2s = Translate[a2s, {.5, .5, .5}];
```

In[228]:=
```
abs = Row[{
    Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2s}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2s}},
     Boxed → False, ImageSize → 300, ViewPoint → Above],
    Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2s},
      {Black, Specularity[Blue, 4], b2s}}, Boxed → False, ImageSize → 300]}]
```

Out[228]=



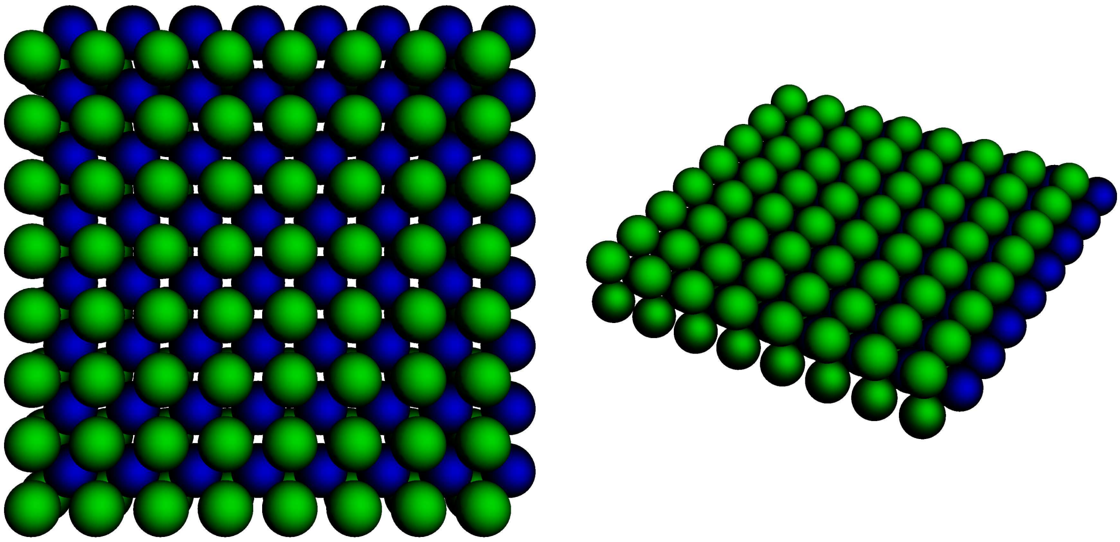
Obr. 43: První dvě vrstvy atomů kubické prostorově centrované mřížky

Třetí vrstva zapadne do mezer druhé vrstvy a je rozložena stejně jako vrstva první. Hovoříme o kubické (krychlové) prostorově centrované (středěné), neboli kubické stereocentrické (KSC) mřížce (označované také BCC z anglického body centered cubic) s řazením rovin ABA.

In[229]:=
```
c2BCC = Translate[a2s, {0, 0, 1}];
```

In[230]:=
```
abcBCC = Row[{
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2s},
     {Blue, Specularity[Blue, 4], b2s}, {Black, Specularity[Green, 2], c2BCC}},
    Boxed → False, ImageSize → 300, ViewPoint → Above],
   Graphics3D[{{Black, Specularity[Green, 4], a2s}, {Black, Specularity[Blue, 4], b2s},
     {Black, Specularity[Green, 2], c2BCC}}, Boxed → False, ImageSize → 300]}]
```

Out[230]=

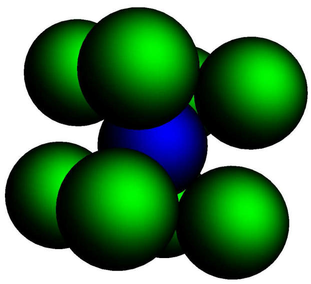


Obr. 44: Základní vrstvení rovin atomů kubické prostorově centrované mřížky

Elementární neprimitivní buňka této mřížky je uvedena níže. V KSC mřížce se každá koule v prostoru dotýká osmi sousedních koulí a její objem je vyplněn ze 68 %. Krystalizuje v ní železo v modifikacích α a všechny alkalické kovy (lithium, sodík, draslík, rubidium, cesium), některé přechodové kovy (vanad, niob, tantal, chrom, molybden, wolfram a Zr). Tyto kovy se navenek jeví jako pevné, málo plastické.

In[231]:=
```
rohy = Union[List[{0, 0, 0}, {1, 1, 1}], Permutations[{1, 0, 0}], Permutations[{1, 1, 0}]];
stred = {.5, .5, .5};
Graphics3D[{Black, Specularity[Green, 4], Sphere[{rohy}, √3 / 4],
  Specularity[Blue, 4], Sphere[{stred}, √3 / 4]}, Lighting → "Neutral", Boxed → False]
```

Out[233]=



Obr. 45: Elementární buňka kubické prostorově centrované mřížky

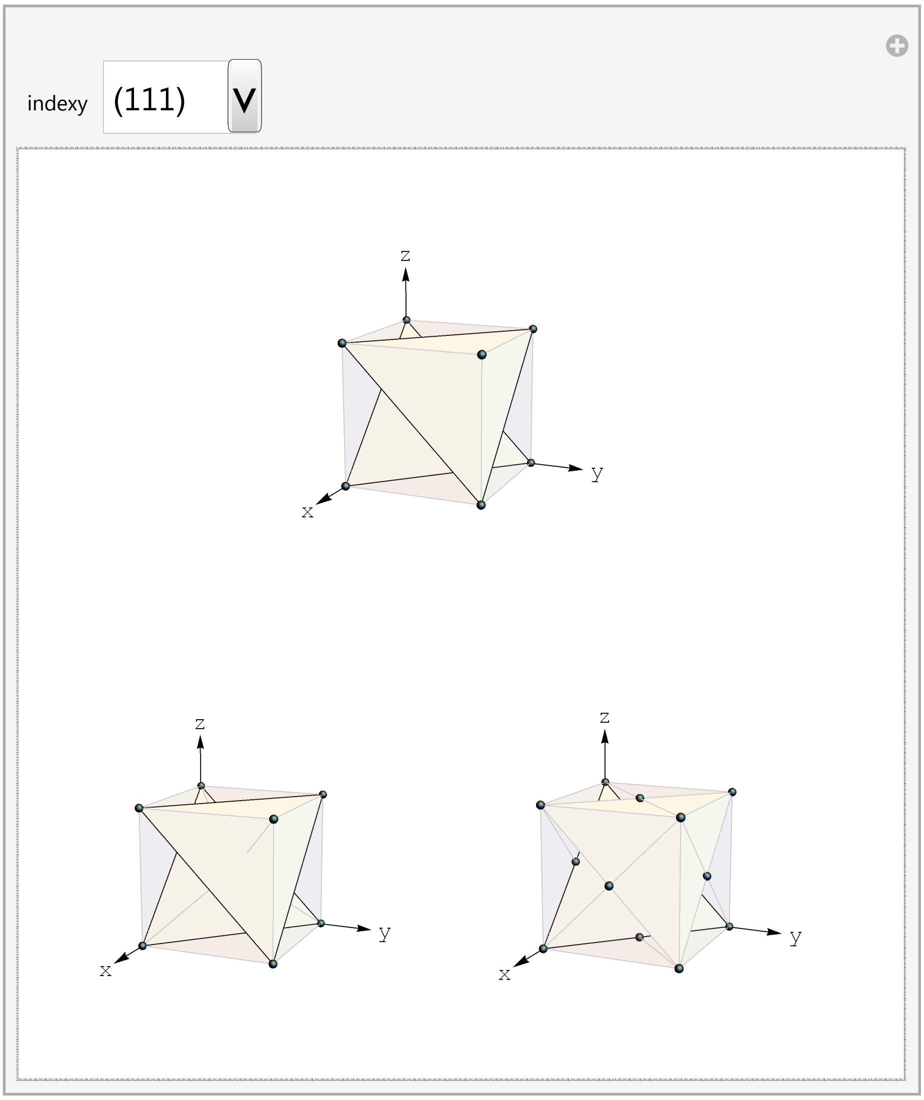
6.3 Značení krystalografických rovin a směrů

Pro orientaci v prostorovém uspořádání krystalů se v praxi používají Millerovy indexy. Potřeba označování krystalografických rovin a směrů vyplývá z anizotropie (směrové závislosti) řady vlastností kovových monokrystalů. Tato anizotropie souvisí s druhy vazeb mezi atomy a těsností jejich uspořádání v prostoru. Některé krystalografické směry a roviny jsou hustěji obsazeny než jiné, a proto zde budou i vlastnosti kovu odlišné.

Obecně vychází Millerovy indexy rovin a směrů z elementární buňky. Ke značení krystalografických rovin se obvykle používají Millerovy indexy ve tvaru (h k l), které jednoznačně popisují orientaci krystalografické roviny vůči krystalografickým osám x, y, z. Indexy h, k, l jsou celá nesoudělná čísla, jejichž převrácené hodnoty odpovídají poměrným úsekům, které vytíná příslušná rovina na krystalografických osách. Záporné Millerovy indexy se neoznačují znaménkem „minus“, ale pruhem nad číslicí. Rovnoběžné roviny v téže mřížce mají stejné Millerovy indexy. Níže jsou uvedeny kubické mřížky se značením krystalografických rovin. Všimněte si různé obsazenosti týchž rovin v různých typech kubických mřížek.

In[234]:=
```
Manipulate[
 Row[{Show[LatticeData["SimpleCubic", "Image"],
    i = Graphics3D[
      {Polygon[Which[indexy == "(001)", {{{-1, -1, 1}, {-1, 1, 1}, {1, 1, 1}, {1, -1, 1}},
           {{-1, -1, -1}, {-1, 1, -1}, {1, 1, -1}, {1, -1, -1}}},
          indexy == "(010)", {{{-1, 1, -1}, {1, 1, -1}, {1, 1, 1}, {-1, 1, 1}},
           {{-1, -1, -1}, {1, -1, -1}, {1, -1, 1}, {-1, -1, 1}}},
          indexy == "(100)", {{{-1, -1, -1}, {-1, 1, -1}, {-1, 1, 1}, {-1, -1, 1}},
           {{1, -1, -1}, {1, 1, -1}, {1, 1, 1}, {1, -1, 1}}},
          indexy == "(101)", {{1, -1, -1}, {1, 1, -1}, {-1, 1, 1}, {-1, -1, 1}},
          indexy == "(110)", {{1, -1, -1}, {-1, 1, -1}, {-1, 1, 1}, {1, -1, 1}},
          indexy == "(011)", {{1, -1, 1}, {1, 1, -1}, {-1, 1, -1}, {-1, -1, 1}},
          indexy == "(111)",
          {{{1, -1, -1}, {-1, 1, -1}, {-1, -1, 1}}, {{1, -1, 1}, {1, 1, -1}, {-1, 1, 1}}},
          indexy == "(11̅1)", {{{1, -1, -1}, {1, 1, 1}, {-1, -1, 1}},
           {{1, 1, -1}, {-1, 1, 1}, {-1, -1, -1}}},
          indexy == "(111̅)", {{{1, -1, -1}, {-1, 1, -1}, {1, 1, 1}},
           {{-1, -1, -1}, {1, -1, 1}, {-1, 1, 1}}}]],
       {Black, Arrow[{{-1.01, -1.01, -1.01}, {1.8, -1.01, -1.01}}],
        Arrow[{{-1.01, -1.01, -1.01}, {-1.01, 1.8, -1.01}}],
        Arrow[{{-1.01, -1.01, -1.01}, {-1.01, -1.01, 1.8}}],
        Text[Style["x", Medium], {2, -1.01, -1.01}],
        Text[Style["y", Medium], {-1.01, 2, -1.01}],
        Text[Style["z", Medium], {-1.01, -1.01, 2}]}}],
    SphericalRegion -> True, ImageSize -> {250, 250}],
   Show[LatticeData["BodyCenteredCubic", "Image"],
    i, SphericalRegion -> True, ImageSize -> {250, 250}],
   Show[LatticeData["FaceCenteredCubic", "Image"],
    i, SphericalRegion -> True, ImageSize -> {250, 250}]}], {{indexy, "(111)"},
  {"(001)", "(100)", "(010)", "(101)", "(110)", "(011)", "(111)", "(11̅1)", "(111̅)"}}]
```

Out[234]=



Obr. 46: Značení krystalografických rovin kubických mřížek (prostá, plošně a prostorově centrovaná)

Krystalografické směry se popisují symbolem [u v w], kde u, v, w jsou celá nesoudělná čísla, která odpovídají složkám vektoru vedeného z počátku systému krystalografických os do nejbližšího mřížkového bodu, který leží ve směru, který popisujeme. Směr je definován vektorem vycházejícím z počátečního bodu a končícím v bodě Auvw. U ortogonálních mřížek odpovídají Millerovy indexy roviny souřadnicím jejího normálového vektoru, tedy například směr [0 1 0] je kolmý k rovině (0 1 0).

7 Krystalizace kovů a slitin

Pro pochopení krystalizace se předpokládá znalost základů termodynamiky, a to zejména termodynamických funkcí entropie a Gibbsovy energie, k jejichž změnám v průběhu fázových transformací dochází.
Gibbsova energie představuje maximální užitečnou (neobjemovou) práci, kterou může termodynamická soustava vykonat během izobaricko-izotermického děje (p, T = konst.). Pro izochoricko-izotermické děje (V, T = konst.) je maximální užitečná práce rovna Helmholtzově energii. Pro kondenzované látky, které jsou téměř nestlačitelné, lze rozdíly mezi Helmholtzovou a Gibbsovou energií zanedbat a pro popis fázových transformací, které v nich probíhají, se často používá pouze Gibbsova energie.

7.1 Gibbsova energie kapalné a tuhé fáze

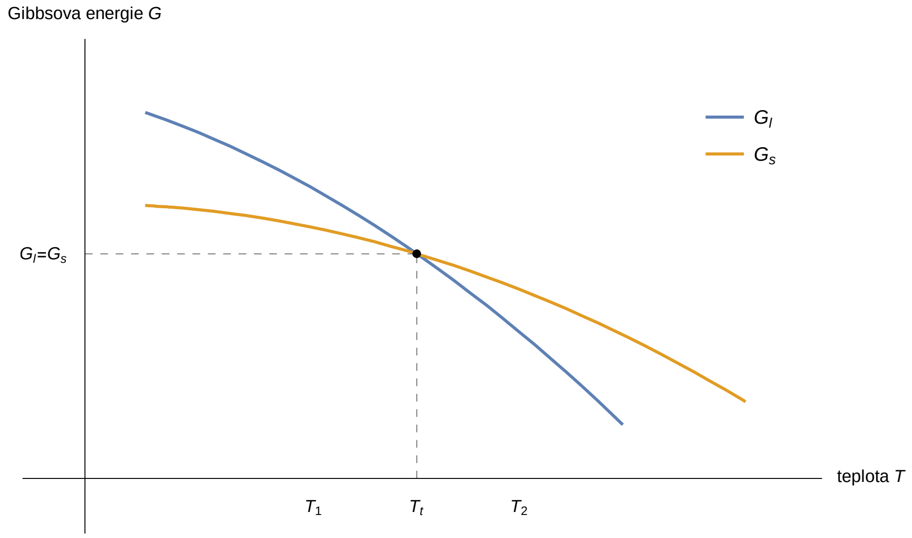
Při teplotě tuhnutí (tání, tavení) jsou tuhá i kapalná fáze v rovnováze. Jejich rovnováha může být narušena pouze odebráním či dodáním energie, skupenského tepla Q_{sk}. Při dodání skupenského tepla tání přechází soustava do kapalné fáze, naopak uvolnění skupenského tepla doprovází tuhnutí. Skupenské teplo je úměrné změně entropie při fázové přeměně. Kapalná a tuhá fáze jsou tedy charakterizovány různou entropií. Rozdíl mezi entropií tuhé (S_s) a kapalné (S_l) fáze, tedy změnu entropie při tuhnutí $\Delta \mathrm{S} = S_s - S_l$ je možné podle II. věty termodynamiky vyjádřit $\Delta \mathrm{S} = \frac{Q_{\mathrm{sk}}}{T}$, kde T je termodynamická teplota. S využitím I. věty termodynamiky lze rovněž psát $Q_{\mathrm{sk}} = (U_s - U_l) + p(V_s - V_l)$, kde U_s a U_s jsou vnitřní energie tuhé a kapalné fáze, V_s a V_l objem tuhé a kapalné fáze a p tlak, který považujeme během tuhnutí za konstantní.
Z porovnání uvedených vztahů vyplývá, že jsou-li tuhá a kapalná fáze v rovnováze, pak jsou jejich Gibbsovy energie shodné.

$$(U_s - U_l) + p\,(V_s - V_l) = T\,(S_s - S_l)$$
$$U_s + pV_s - TS_s = U_l + pV_l - TS_l$$
$$H_s - TS_s = H_l + TS_l$$
$$G_s = G_l$$

Závislost Gibbsových energií kapalné (G_l) a tuhé (G_s) fáze na teplotě jsou uvedeny níže. Každá fázová transformace je doprovázena narušením rovnováhy Gibbsových energií a proběhne pouze ta, která je spojena s poklesem Gibbsovy energie. Při poklesu teploty na teplotu T_1 nižší než je teplota tavení T_t tedy dojde k tuhnutí, neboť $G_s < G_l$, a tedy $\Delta G_{l \to s} = G_s - G_l < 0$. Naopak při ohřevu na teplotu T_2 vyšší než je teplota tavení má nižší Gibbsovu energii fáze kapalná a dojde k tavení, $\Delta G_{s \to l} = G_l - G_s < 0$.

In[235]:=
```
Show[sol = FindRoot[-(x + 1)^2 + 15 == -.7 x^2 + 10 , {x, 4}];
 tt = x /. {sol};
 gtt = -.7 tt^2 + 10;
 Plot[{-(x + 1)^2 + 15, -.7 x^2 + 10} , {x, -.3, 3.5},
  RegionFunction → Function[{x, y}, .3 < x < 3.2 ⋀ 2 < y < 15],
  Epilog → {PointSize[Medium], Point[{tt[[1]], gtt[[1]]}]},
  AxesLabel → {"teplota T", "Gibbsova energie G"}, Ticks → None, PlotRange → {-2, 16},
  PlotLegends → Placed[{"G_l", "G_s"}, {.9, .8}], ImageSize → Large],
 Graphics[{Dashed, Thin, {Line[{{tt[[1]], 0}, {tt[[1]], gtt[[1]]}}],
    Line[{{0, gtt[[1]]}, {tt[[1]], gtt[[1]]}}]}}],
 Graphics[{Text["T_t", {tt[[1]], -1}], Text["G_l=G_s", {-.2, gtt[[1]]}]}],
 Graphics[{Text["T_1", {tt[[1]] - .5, -1}]}],
 Graphics[{Text["T_2", {tt[[1]] + .5, -1}]}]]
```

Out[235]=



Obr. 47: Závislost Gibbsovy energie pevné a kapalné fáze na teplotě

7.2 Kritická velikost zárodku tuhé fáze

Tuhnutí taveniny je podmíněno přítomností krystalizačních zárodků (jader, center), které musí mít nadkritickou velikost, aby byly schopny při ochlazování dalšího růstu. Krystalizační zárodky jsou shluky atomů či iontů v tavenině, které nahodile získaly strukturu podobnou struktuře tuhé fáze. Vznikají vlivem fluktuací energie a teploty v tavenině. Pro vytvoření zárodku tuhé fáze, který bude schopen dalšího růstu, je nutné, aby jeho Gibbsova energie byla nižší než Gibbsova energie taveniny. Vznik zárodku je tedy spojen s poklesem Gibbsovy energie ΔG. Ta je dána součtem změny Gibbsovy energie $\Delta G_V'$ související se vznikem krystalizačního zárodku o objemu V (uvolnění energie) a změny Gibbsovy energie $\Delta G_P'$ související se vznikem mezifázového rozhraní s povrchem P (nárůst povrchové energie o práci vynaloženou na vznik nového mezifázového rozhraní)

$$\Delta G = \Delta G_V' + \Delta G_P' = -V \mid \Delta G_V \mid + P\sigma,$$

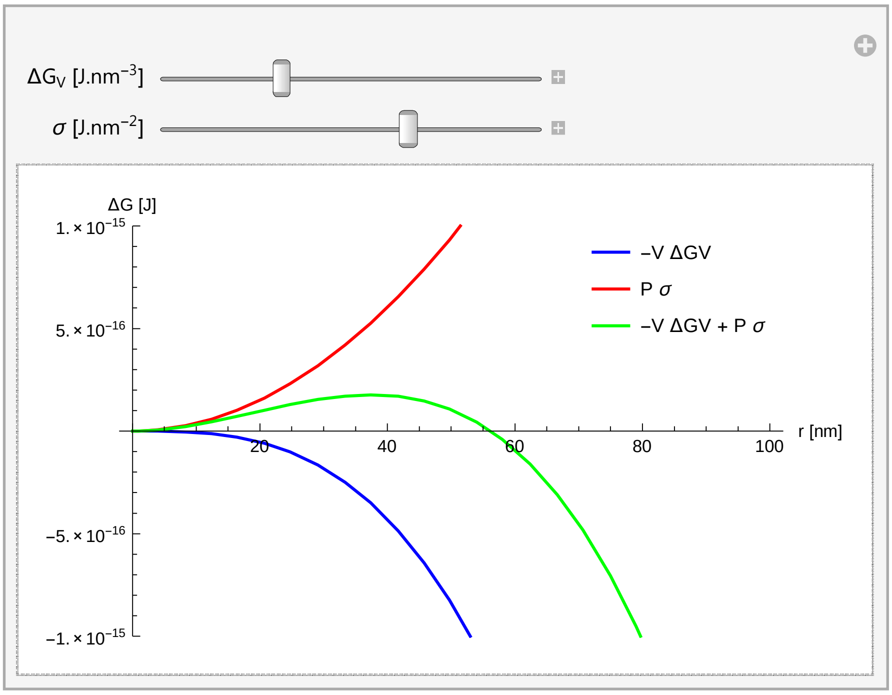
kde ΔG_V je měrná (jednotková) změna objemové Gibbsovy energie ($\Delta G_V < 0$) a σ je měrná změna povrchové energie fázového rozhraní, která je číselně rovna povrchovému napětí.

Pro kulový zárodek o poloměru r je možno změnu Gibbsovy energie vyjádřit $\Delta G(r) = -\frac{4}{3}\pi r^3 |\Delta G_V| + 4\pi r^2 \sigma$.

In[236]:=
```
V = 4/3 π r^3; P = 4 π r^2;
```

```
In[237]:= Manipulate[Plot[{-V ΔGV, P σ, -V ΔGV + P σ}, {r, 0, 100},
    PlotRange → {-10^-15, 10^-15}, AxesLabel → {"r [nm]", "ΔG [J]"},
    PlotLegends → Placed[{"-V ΔGV", "P σ", "-V ΔGV + P σ"}, {Right, Top}],
    PlotStyle → {Blue, Red, Green}, ImageSize → 450],
  {{ΔGV, 1.6 × 10^-21 , "ΔGV [J.nm^-3]"}, 1 × 10^-21, 3 × 10^-21},
  {{σ, 3 × 10^-20, "σ [J.nm^-2]"}, 1 × 10^-20, 4 × 10^-20}, ControlPlacement → Top]
```

Out[237]=



Obr. 48: Závislost změny Gibbsovy energie na poloměru zárodku tuhé fáze

Nalezením extrému funkce ΔG(r) zjistíme kritický poloměr zárodku r_k a tomu odpovídající maximální Gibbsovu energii ΔG_k, která je aktivační energiií nukleace zárodku. Pouze zárodky s poloměrem větším než r_k jsou shopny dál růst a vytvořit pevnou fázi. Zárodky menších rozměrů se rozpustí.

In[238]:= $\text{solu} = \text{Solve}\left[D\left[-\frac{4}{3}\pi r^3 \Delta GV + 4\pi r^2 \sigma, r\right] == 0, r\right]; \text{krpol} = r \,/.\, \{\text{solu}\};$

$r_k = \text{krpol}[[1, 2]]$

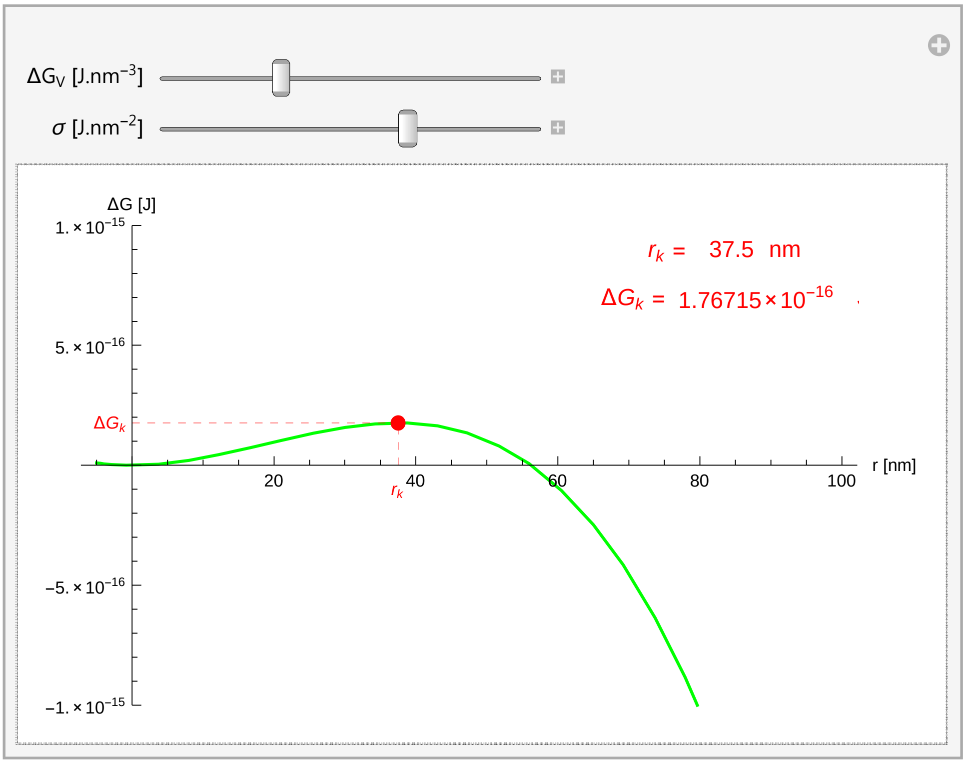
$\Delta G_k = -\frac{4}{3}\pi (r_k)^3 \Delta GV + 4\pi (r_k)^2 \sigma$

Out[239]= $\frac{2\sigma}{\Delta GV}$

Out[240]= $\frac{16\pi\sigma^3}{3\Delta GV^2}$

In[241]:=
```
Manipulate[Show[
  Plot[-V ΔGV + P σ, {r, -5, 100}, PlotRange → {-10^-15, 10^-15},
   AxesLabel → {"r [nm]", "ΔG [J]"}, PlotStyle → Green, ImageSize → 500],
  ListPlot[{{2 σ/ΔGV, 16 π σ^3/(3 ΔGV^2)}}, PlotRange → {{-5, 100}, {-10^-15, 10^-15}},
   PlotStyle → Red, PlotLabel →
    "Kritická velikost zárodku tuhé fáze a kritická změna volné entalpie",
   AxesLabel → {"rk [nm]", "ΔGk [J]"}, ImageSize → 450],
  Graphics[{Dashed, Red, Thin, {Line[{{2 σ/ΔGV, 0}, {2 σ/ΔGV, 16 π σ^3/(3 ΔGV^2)}}],
     Line[{{0, 16 π σ^3/(3 ΔGV^2)}, {2 σ/ΔGV, 16 π σ^3/(3 ΔGV^2)}}]}}],
  Graphics[{Text[Style["rk", Red], {2 σ/ΔGV, -1 10^-16}],
    Text[Style["ΔGk", Red], {-3, 16 π σ^3/(3 ΔGV^2)}]}],
  Graphics[{Text[Style["rk =                nm", Red, 12], {83.5, 9 × 10^-16}],
    Text[Style[2 σ/ΔGV, Red, 12], {84.5, 9 × 10^-16}],
    Text[Style["ΔGk =                        J", Red, 12], {85, 7 × 10^-16}],
    Text[Style[16 π σ^3/(3 ΔGV^2), Red, 12], {88, 7 × 10^-16}]}]
 ], {{ΔGV, 1.6 × 10^-21 , "ΔGV [J.nm^-3]"}, 1 × 10^-21, 3 × 10^-21},
 {{σ, 3 × 10^-20, "σ [J.nm^-2]"}, 1 × 10^-20, 4 × 10^-20}, ControlPlacement → Top]
```

Out[241]=

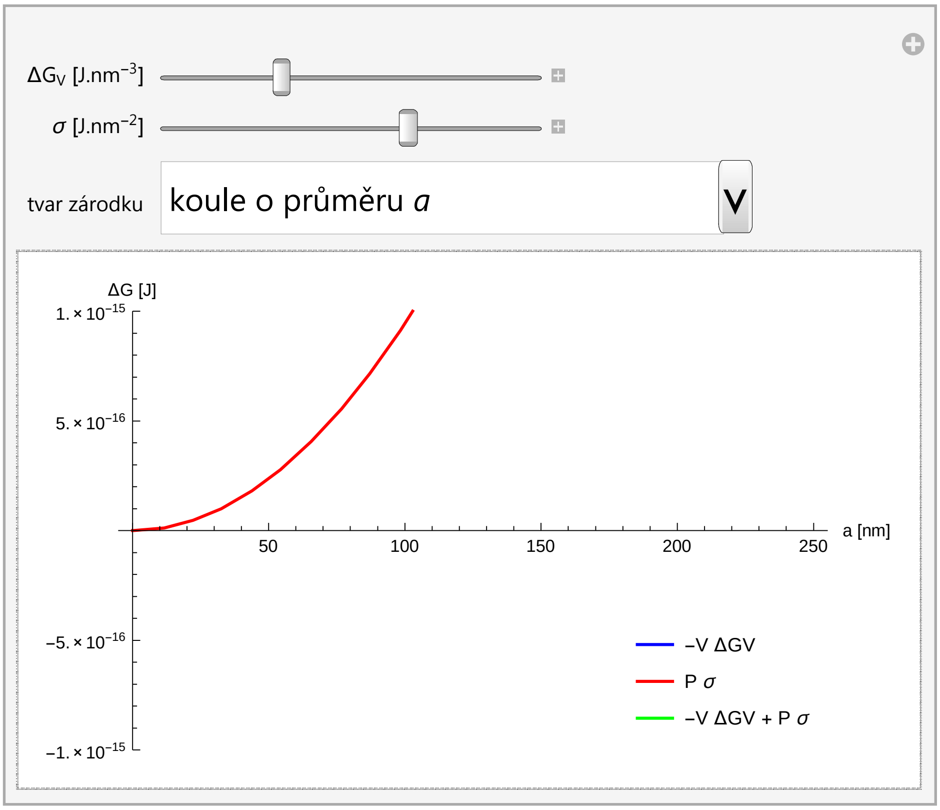


Obr. 49: Závislost změny Gibbsovy energie na poloměru zárodku tuhé fáze s uvedením kritického poloměru zárodku

Zárodky tuhé fáze mohou být obecně libovolného tvaru. Níže jsou uvedeny křivky reprezentující změny Gibbsov energie pro zárodek ve tvaru koule o průměru a, krychle s délkou hrany a a pravidelného čtyřstěnu s délkou hrany a. Je zřejmé, že růst tuhé fáze ze zárodků ve tvaru čtyřstěnu je málo pravděpodobný, neboť stabilní krystalizační zárodky musí dosahovat podstatně vyšších rozměrů než v případě kulového či krychlového tvaru.

In[242]:=
```
vkoule = 4/3 Pi (a/2)^3; vkrychle = a^3; vp4sten = Sqrt[2]/12 a^3;
p[v_] :=
  Piecewise[{{4 π (a/2)^2, v == vkoule}, {6 a^2, v == vkrychle}, {Sqrt[3] a^2, v == vp4sten}}];
p[
  v];

Manipulate[Show[
  Plot[{-v ΔGV, p[v] σ, -v ΔGV + p[v] σ}, {a, -10, 250}, RegionFunction → Function[a, 0 < a],
   PlotRange → {-10^-15, 10^-15}, AxesLabel → {"a [nm]", "ΔG [J]"},
   PlotLegends → Placed[{"-V ΔGV", "P σ", "-V ΔGV + P σ"}, {Right, Bottom}],
   PlotStyle → {Blue, Red, Green}, ImageSize → 500]],
 {{ΔGV, 1.6 × 10^-21 , "ΔGV [J.nm-3]"}, 1 × 10^-21, 3 × 10^-21},
 {{σ, 3 × 10^-20, "σ [J.nm-2]"}, 1 × 10^-20, 4 × 10^-20},
 {{v, vkoule, "tvar zárodku"},
  {vkoule → "koule o průměru a", vkrychle → "krychle s délkou hrany a",
   vp4sten → "pravidelný čtyřstěn s délkou hrany a"},
  ControlType → PopupMenu}, ControlPlacement → Top]
```

Out[245]=



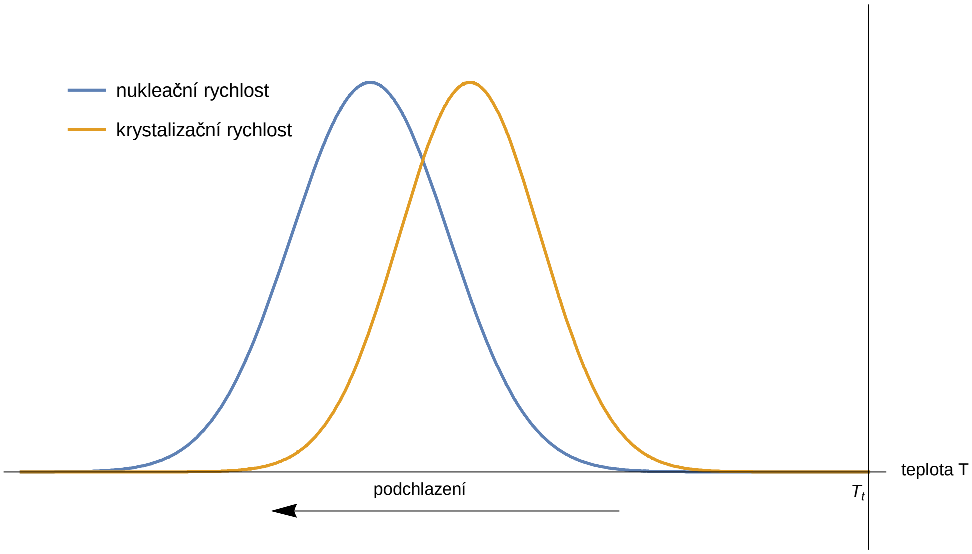
Obr. 50: Závislost změny Gibbsovy energie na rozměru zárodku tuhé fáze pro vybrané tvary zárodků

Krystalizaci určují spontánní krystalizační schopnost a lineární krystalizační rychlost. Krystalizační schopnost (nukleační rychlost) reprezentuje rychlost tvorby zárodků tuhé fáze, tedy kolik zárodků vznikne v objemu taveniny za daný čas. Je úměrná součinu pravděpodobnosti překročení aktivační energie nukleace zárodku a difúzní schopnosti atomů taveniny. Při ochlazování z teploty tavení krystalizační schopnost roste až dosáhne svého jediného maxima a následně klesá. Je tedy zřejmé, že vznik zárodků tuhé fáze schopných dalšího růstu vyžaduje určité podchlazení pod teplotu tuhnutí. Při malém podchlazení vzniká málo zárodků, což vede k hrubozrnné struktuře. Při podchlazení odpovídajícím maximální nukleační rychlosti vyniká nejvíce zárodků nadkritické velikosti. Při velkém podchlazení není střední hodnota tepelných kmitů atomů dostatečná pro překonání aktivační energie nukleace a zárodek nadkritické velikosti nevznikne, tuhá fáze je amorfní.

Krystalizační rychlostí rozumíme rychlost růstu zárodku tuhé fáze. Jde o teplotně závislou veličinu, která má průběh obdobný jako nukleační rychlost s tím, že její maximum je vůči maximu nukleační rychlosti posunuto k vyšším teplotám. Při podchlazení v oblasti překryvu křivek se dosahuje nejjemnozrnnější struktury.

```
In[246]:= Show[Plot[{ⅇ^-(x+10)^2/5, ⅇ^-(x+8)^2/4}, {x, -17, 0},
   PlotRange → {-.2, 1.2}, AxesLabel → {"teplota T", ""}, Ticks → None,
   PlotLegends → Placed[{"nukleační rychlost", "krystalizační rychlost"}, {.2, .8}],
   ImageSize → Large],
  Graphics[Text["Tt", {-.2, -.05}]],
  Graphics[Text["podchlazení", {-9, -.05}]],
  Graphics[{Arrowheads[.03], Arrow[{{-5, -.1}, {-12, -.1}}]}]]
```

Out[246]=



Obr. 51: Závislost nukleační a krystalizační rychlosti na teplotě

7.3 Rovnovážný diagram jednosložkové a dvousložkové soustavy

Změny skupenství je možné zobrazovat pomocí rovnovážných diagramů. Jsou to souřadnicové systémy, v nichž každá osa reprezentuje jednu veličinu, která se v průběhu přeměny může měnit. Prvním rovnovážným diagramem, se kterým se setkají studenti už na základní škole, je rovnovážný *p*-*T* diagram vody, ve kterém je obvykle na horizontální ose vynesena teplota *T* a na vertikální ose tlak *p*. Objemové změny při fázových (skupenských) transformacích vody se zanedbávají. Jde o typický příklad rovnovážného diagramu jednosložkové soustavy. Složkou rozumíme látkovou náplň soustavy, tedy prvek nebo sloučeninu. V případě vody jsou jí molekuly H_2O. V soustavě se může v závislosti na teplotě a tlaku nacházet v rovnováze pouze určitý počet fází. V případě vody jsou fázemi pára, led a kapalná voda. Počet stupňů volnosti udává, kolik veličin můžeme v soustavě nezávisle měnit, aniž by byla narušena rovnováha fází, tedy počet koexistujících fází. Vztah mezi počtem složek *s*, počtem fází *f*, které mohou být vzájemně v rovnováze a počtem stupňů volnosti *v* soustavy je dán Gibbsovým fázovým pravidlem $v = s - f + 2$.

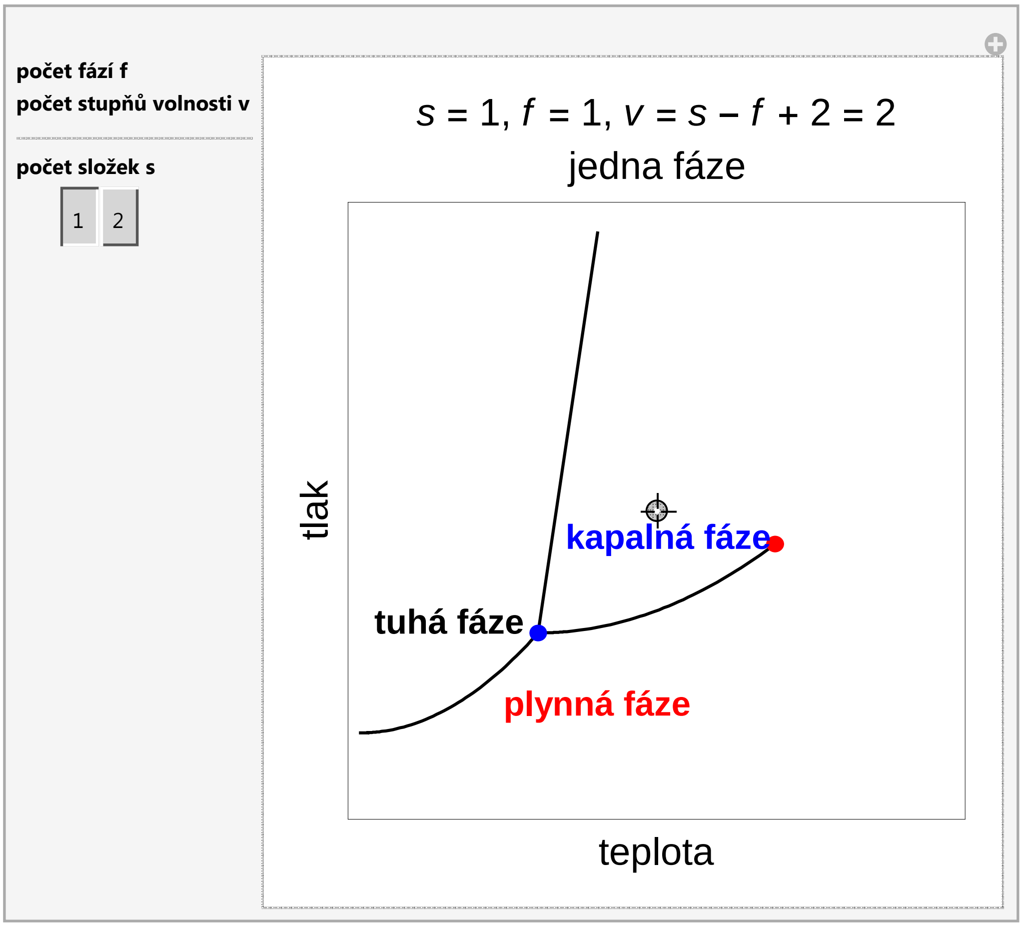
V *p*-*T* diagramu vody jsou vyneseny tři křivky - křivka vypařování/kondenzace, křivka tuhnutí/tání a křivka sublimace/desublimace. Body ležící na těchto křivkách reprezentují podmínky, za kterých jsou v rovnováze dvě fáze, tedy přítomna dvě skupenství současně. Koexistence všech tří fází je možná pouze při jediné hodnotě teploty a tlaku, a to v průsečíku všech tří křivek, který označujeme jako trojný bod (v níže uvedeném diagramu označen modře). Mimo tyto křivky je v soustavě přítomno jediné skupenství.

V případě dvousložkové soustavy, například slitiny dvou kovů, zanedbáváme změny tlaku a v rovnovážném diagramu je pak na vertikální ose vynesena teplota a na horizontální ose složení slitiny. Fázové přeměny u slitin neprobíhají při konstantní teplotě, jak je tomu u čistých kovů, ale v určitém teplotním intervalu, který je závislý na složení slitiny. V daném rozmezí teplot se nachází v soustavě plynná i kapalná nebo kapalná i tuhá fáze. Příklad rovnovážného diagramu soustavy dvou složek, které jsou v kapalném stavu zcela rozpustné a v tuhém stavu úplně nerozpustné je uveden níže spolu s *p-T* diagramem vody. Pro oba diagramy je podle Gibbsova fázového pravidla pro aktuální polohu kurzoru vypočten počet stupnů volnosti soustavy. Například nachází-li se dvousložková slitina ve stavu, kdy je přítomna jediná fáze, je počet stupňů volnosti roven třem. V takovém případě můžeme v určitých intervalech nezávisle měnit tři veličiny, a to teplotu, složení a tlak, aniž by se změnil počet fází soustavy.

```
In[247]:= Manipulate[
 g[c, p[[1]], p[[2]]],
 Style["počet fází f", Bold],
 Style["počet stupňů volnosti v", Bold],
 Delimiter,
 Style["počet složek s", Bold],
 {{c, 1, "     "}, {1 → "1", 2 → "2"}, Setter},
 {{p, {50, 50}}, {0, 0}, {100, 100}, Locator},
 ControlPlacement → Left, TrackedSymbols :→ {c, p},
 Initialization :→ (
   sv = Plot[10 + .02 t^2, {t, 0, 30}, PlotStyle → {Black, Thickness[.005]}];
   lv = Plot[28 + .01 (t - 30)^2, {t, 30, 70}, PlotStyle → {Black, Thickness[.005]}];
   sl = Graphics[{Black, Thickness[.005], Line[{{30, 28}, {40, 100}}], Blue,
      Disk[{30, 28}, 1.5], Red, Disk[{70, 44}, 1.5], Text[Style["tuhá fáze", 18, Bold,
        Black], {15, 30}], Text[Style["kapalná fáze", 18, Bold, Blue], {52, 45}],
      Text[Style["plynná fáze", 18, Bold, Red], {40, 15}]}];
   msg[1, x_, y_] := Which[(x - 30)^2 + (y - 28)^2 ≤ 2.25,
     Row[{Style["s", Italic], " = ", 1, ", ", Style["f", Italic], " = ", 3, ", ",
       Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ", Style["f", Italic],
       " + ", 2, " = ", 0, "\ntrojný bod"}], (x - 70)^2 + (y - 44)^2 ≤ 2.25,
     Row[{Style["s", Italic], " = ", 1, ", ", Style["f", Italic], " = ", 3, ", ",
       Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ", Style["f", Italic],
       " + ", 2, " = ", 0, "\nkritický bod"}], (9.5 + .02 x^2 ≤ y ≤ 10.5 + .02 x^2 && x < 30),
     Row[{Style["s", Italic], " = ", 1, ", ", Style["f", Italic], " = ",
       2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ",
       Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 1, "\nkřivka sublimace/desublimace"}],
     (.139 y + 25.4 ≤ x ≤ .139 y + 26.8 && y > 28),
     Row[{Style["s", Italic], " = ", 1, ", ", Style["f", Italic],
       " = ", 2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ",
       Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 1, "\nkřivka tuhnutí/tání"}],
     (27.5 + .01 (x - 30)^2 ≤ y ≤ 28.5 + .01 (x - 30)^2 && 30 < x < 70),
     Row[{Style["s", Italic], " = ", 1, ", ", Style["f", Italic], " = ", 2, ", ",
       Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ", Style["f", Italic],
       " + ", 2, " = ", 1, "\nkřivka vypařování/kondenzace"}], (x > 70 && y > 44),
     Row[{Style["s", Italic], " = ", 1, ", ", Style["f", Italic], " = ",
       1, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ",
       Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\nnadkritická kapalina"}],
     True, Row[{Style["s", Italic], " = ", 1, ", ", Style["f", Italic],
       " = ", 1, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic],
       " - ", Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\njedna fáze"}]
    ];
   g[1, x_, y_] := Show[sv, lv, sl,
     PlotRange → {{0, 100}, {0, 100}}, Axes → False, Frame → True, FrameTicks → None,
     FrameLabel → {Style["teplota", 20], Style["tlak", 20], Style[msg[1, x, y], 20]},
     AspectRatio → 1, ImageSize → 350];
   lv2 = Plot[{- .0030 z^2 + .70 z + 50, .0030 z^2 + .10 z + 50}, {z, 0, 100},
     PlotStyle → {{Thick, Black}, {Thick, Black}}];
   sl2 = Plot[{10, Piecewise[{{- .00525 z^2 - .04 z + 20, 0 ≤ z ≤ 40},
        {- .005944 z^2 + 1.2489 z - 30.44, 40 ≤ z ≤ 100}}]},
    {z, 0, 100}, PlotStyle → {{Thick, Black}, {Thick, Black}}];
```

```
tx = Graphics[{Text[Style["tuhá fáze", 18, Bold, Black], {50, 3.5}],
   Text[Style["tuhá fáze A + ", 18, Bold, Black], {9, 12}],
   Text[Style["tavenina", 18, Bold, Blue], {27, 12}],
   Text[Style["tuhá fáze B + ", 18, Bold, Black], {70, 12}],
   Text[Style["tavenina", 18, Bold, Blue], {88, 12}],
   Text[Style["tavenina", 18, Bold, Blue], {50, 44}],
   Text[Style["pára", 18, Bold, Red], {50, 90}],
   Text[Style["tavenina", 18, Bold, Blue], {45, 70}], Text[Style[" + ", 18,
     Bold, Black], {54, 70}], Text[Style["pára", 18, Bold, Red], {60, 70}],
   Text[Style["A", 20, Black], {0, 0}],
   Text[Style["B", 20, Black], {100, 0}]}];
msg[2, x_, y_] := Which[
  y < 10 ⋀ x < 1, Row[{Style["s", Italic], " = ", 2, ", ", Style["f", Italic],
    " = ", 2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic],
    " - ", Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\ntuhá fáze A"}],
  y < 10 ⋀ 1 < x < 39.5, Row[{Style["C", Italic], " = ", 2, ", ", Style["f", Italic],
    " = ", 2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ",
    Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\ntuhá fáze A + eutektikum AB"}],
  y < 10 ⋀ 39.5 ⩽ x ⩽ 40.5, Row[{Style["s", Italic], " = ", 2, ", ",
    Style["f", Italic], " = ", 2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic],
    " - ", Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\neutektikum AB"}],
  y < 10 ⋀ 40.5 < x < 99, Row[{Style["s", Italic], " = ", 2, ", ", Style["f", Italic],
    " = ", 2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ",
    Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\ntuhá fáze B + eutektikum AB"}],
  y < 10 ⋀ x > 99, Row[{Style["s", Italic], " = ", 2, ", ", Style["f", Italic],
    " = ", 2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic],
    " - ", Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\ntuhá fáze B"}],
  10 ⩽ y ≤ -.00525 x^2 - .04 x + 20 && x < 40, Row[{Style["C", Italic], " = ", 2, ", ",
    Style["f", Italic], " = ", 2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic],
    " - ", Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\ntuhá fáze A + tavenina"}],
  10 ⩽ y ⩽ -.005944 x^2 + 1.2489 x - 30.44 && 40 ⩽ x,
  Row[{Style["C", Italic], " = ", 2, ", ", Style["f", Italic], " = ",
    2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ",
    Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\ntuhá fáze B + tavenina"}],
  -.0030 x^2 + .70 x + 50 ≥ y ≥ .0030 x^2 + .10 x + 50,
  Row[{Style["C", Italic], " = ", 2, ", ", Style["f", Italic], " = ",
    2, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic], " - ",
    Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 2, "\ntavenina + pára"}],
  y ≥ .0030 x^2 + .10 x + 50, Row[{Style["s", Italic], " = ", 2, ", ",
    Style["f", Italic], " = ", 1, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic],
    " - ", Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 3, "\npára A+B"}],
  (x - 40)^2 + (y - 10)^2 < 1, Row[{Style["s", Italic], " = ", 2, ", ",
    Style["f", Italic], " = ", 3, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic],
    " - ", Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 1, "\neutektikum"}],
  True, Row[{Style["s", Italic], " = ", 2, ", ", Style["f", Italic],
    " = ", 1, ", ", Style["v", Italic], " = ", Style["s", Italic],
    " - ", Style["f", Italic], " + ", 2, " = ", 3, "\ntavenina A+B"}]];
g[2, x_, y_] := Show[lv2, sl2, tx, PlotRange → {{0, 100}, {0, 100}},
  Axes → False, Frame → True, FrameTicks → None,
  FrameLabel → {Style["podíl složky B ve slitině AB", 20], Style["teplota", 20],
    Style[msg[2, x, y], 20]}, AspectRatio → 1, ImageSize → 100])]
```

Out[247]=



Obr. 52: Fázový diagram jedno a dvousložkové soustavy

8 Závěr

Anotace

Publikace se věnuje využití programu *Mathematica* (verze 10.0) v biologii a chemii. Publikace Software *Mathematica* pro biology a chemiky podává teoretické informace k vybraným tématům a možnosti využití software *Mathematica* v těchto oborech. Na příkladech v publikaci můžeme vidět, jak provádět import reálných naměřených dat a následně data analyzovat a vytvářet z nich grafy a animace. V publikace je také využito modelování a simulace vybraných problému v biologii a chemii.
Publikace ukazuje, jak nezbytná je matematika v přírodovědných oborech. Publikace je určena především, studentům, pedagogickým pracovníkům a vědeckým pracovníkům v přírodovědných disciplínách.

Závěr

V textu publikace jsou vybrány některé zajímavé problémy, které jsou zpracovány a popsány s využitím programu *Mathematica*. Matematika je dnes nezbytný nástroj pro studium v přírodovědných disciplínách a také i odpovídajících učitelských oborech.
Dnešní doba je charakteristická využívání výkonných počítačů, notebooků a aktuálně i tabletů, které se stávají běžnou součástí dne a vstupují větší měrou do vyučování. Je důležité vést studenty, aby začali progresivní techniku smysluplně a efektivně využívat nejen ve výuce, ale i při domácí přípravě nebo tvorbě bakalářských, diplomových, či disertačních prací. Smysluplným využíváním profesionálního matematického softwaru *Mathematica* podporujeme zkvalitnění vyučovacího procesu náročných oborů, jako je biologie a chemie.

Summary

This publication presents some interesting selected problems that have been processed and described using the program *Mathematica*. Today mathematics is an indispensable tool in natural disciplines studying as well as the corresponding teaching fields.
Our time is characterized by the use of powerful computers, laptops and, currently, tablets as well. They have become an internal part of our everyday life already and are enhancing into the classroom. It is important to encourage students to use the advanced technology meaningfully and effectively not only while teaching, but also while doing homework or working on bachelors, masters and doctoral dissertations. An application of mathematical software *Mathematica* and professional, meaningful utilization of it supports the improvement of the teaching process for such intensive disciplines as biology or chemistry.

9 Použitá literatura

Adamec, J., Adamec, R.: *EKG podle Holtera: elektrokardiografická interpretace.* Dotisk 1. vyd. Praha: Galén, 2009, 113 s. ISBN 978-807-2624-836.

Akční potenciál v srdci, [online]. [cit. 15. 1. 2014]. Dostupné z: www.wikiskripta.eu/index.php/Akční_potenciál_v_srdci.

Bláha, P. et al.: *Antropometrie Československé populace od 6 do 55 let.* Československá spartakiáda 1985, díl I., část 1, část 2. Praha, 1986.

Bláha, P. et al.: *Antropometrie českých předškolních dětí ve věku od 3 do 7 let.* Praha, 1990.

Blinder, S. M.: *"The Seven Crystal Classes" from the Wolfram Demonstrations Project,* [online]. [cit. 26. 11. 2013]. Available from: http://demonstrations.wolfram.com/TheSevenCrystalClasses/.

Blinder, S. M.: *"Gibbs Phase Rule for One- and Two-Component Systems" from the Wolfram Demonstrations Project,* [online]. [cit. 25. 11. 2013]. Available from: http://demonstrations.wolfram.com/GibbsPhaseRuleForOneAndTwoComponentSystems/.

Cameron, J. et al.: *Physics of the Body.* 2nd ed. Madison, Wis.: Medical Physics Pub., 1999, 394 p. ISBN 09-448-3891-X.

Cameron, N.: *Fat and fat pattering.* In: Ulijaszek S. J., Johnston F. E., Preece M. A. et al.: The Cambridge Encyclopedia of Human Growth and Development. Cambridge University Press, United Kingdom, 1998.

Campbell, F. C.: *Phase Diagrams: Understanding the Basics*, ASM International, 2012.

Cavazos, D.: *"Crystallographic Planes for Cubic Lattices" from the Wolfram Demonstrations Project,* [online]. [cit. 15. 11. 2013]. Available from: http://demonstrations.wolfram.com/CrystallographicPlanesForCubicLattices/.

Čihák, J.: *Biofyzikální snímače, sondy a elektrody.* 1. vyd. Olomouc, 1985.

Davidovits, P.: *Physics in biology and medicine.* 3rd ed. Boston: Elsevier/Academic Press, c2008. ISBN 978-012-3694-119.

Durdil, V.: *Srdeční osa, její určení a význam.* Practicus. Vol. 3, 2009, s 38 -39, [online]. [cit. 10. 9. 2013]. Available from: http://web.practicus.eu/sites/cz/Archive/practicus09-03.pdf.

Eifert, B.: *"Cubic Crystal Lattices" from the Wolfram Demonstrations Project,* [online]. [cit. 14. 12. 2013]. Available from: http://demonstrations.wolfram.com/CubicCrystalLattices/.

Farský, Š.: *EKG do kapsy*. 1. vyd. Martin: Vydavateľstvo Osveta, c1996, 107 s., grafy. ISBN 80-888-2417-6.

Fetter, V., Tittelbachová, S., Hajniš, K.: *Antropologie a somatologie pro posluchače biologie na přírodovědeckých fakultách*, SPN, Praha, 1967.

Grimm, H.: *Základy konstituční biologie a antropometrie.* Praha: Státní zdravotnické nakladatelství, 1961.

HAMPTON, John R. EKG stručně, jasně, přehledně. 1. české vyd. Grada, 2013, 192 s. ISBN 978-802-4742-465.

HAMPTON, John R. EKG v praxi: překlad 4. vydání. Překlad Eliška Potluková. Praha: Grada, 2007, 362 s. ISBN 978-802-4714-486.

Hillert, M. Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations: Their Thermodynamic Basis. 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.

Hobbie, R. K.: *Intermediate physics for medicine and biology.* 3rd ed. Berlin: Springer-Verlag, c1997, xii, 575 s. ISBN 15-639-6458-9.

Jirka Z. a kol.: *Praktikum z tělovýchovného lékařství.* LF UP, Olomouc, 1986.

Kelly, A. A., Knowles, K. M.: *Crystallography and Crystal Defects*, 2nd Edition, Wiley, 2012.

Kittnar, O.: *Lékařská fyziologie.* 1. vyd. Praha: Grada, 2011, 790 s. ISBN 978-802-4730-684.

KALIPER SK, [online]. [cit. 12. 11. 2013]. Dostupné z: http://www.kaliper.cz/provedeni.html.

Mangano, Sal. *Mathematica cookbook*. 1st ed. Sebastopol, CA: O'Reilly, c2010, xxiv, 800 p. ISBN 978-059-6520-991.

Pařízková, J.: *Složení těla a lipidový metabolismus za různého pohybového režimu.* Praha: Avicenum, zdravotnické nakladatelství, 1973.

Pařízková, J., Lisá, L., et al.: *Obezita v dětství a dospívání. Terapie a prevence.* Praha: Nakladatelství Galén a Karolinum, 2007.

Pluhař, J., Korrita, J.: *Strojírenské materiály.* SNTL, Praha, 1979.

Převodní systém srdeční, [online]. [cit. 5. 1. 2014]. Dostupné z: www.wikiskripta.eu/index.php/Převodní_systém_srdeční.

Riegrová, J., Přidalová, M., Ulbrichová, M.: *Aplikace fyzické antropologie v tělesné výchově a sportu: (příručka funkční antropologie)*, Hanex, Olomouc, 2006.

Sovová,E.: *EKG pro sestry.* Praha: Grada, 2006, 112 s. ISBN 80-247-1542-2.

Silbernagl, S., Despopoulos, A.: *Atlas fyziologie člověka.* 6. přeprac. a rozš. vyd. Praha: Grada, 2004, XII, 435 s. ISBN 80-247-0630-X.

Tělesné složení, [online]. [cit. 12. 11. 2013]. Dostupné z: http://eamos.pf.jcu.cz/amos/kat_tv/externi/antropomotorik/morfologick-a_stavba/stranky/tel_slozeni.htm.

VERNIER, [online]. [cit. 1. 11. 2013]. Available from: www.vernier.com.

Vignerová J., Bláha P. (Eds): *Sledování růstu českých dětí a dospívajících* (Norma, vyhublost, obezita). SZÚ a PřF UK v Praze,

2001. ISBN 80-7071-173-6.
Wellin, Paul R. *An introduction to programming with Mathematica*. 3rd ed. Oxford: Oxford University Press, 2005, 550 s. ISBN 05-218-4678-1.
WolframAlpha, [online]. [cit. 12. 12. 2013]. Available from: Dostupné z: http://www.wolframalpha.com.
Zeleny, E.: *"Miller Indices for a Simple Cubic Lattice" from the Wolfram Demonstrations Project,* [online]. [cit. 2. 12. 2013]. Available from: http://demonstrations.wolfram.com/MillerIndicesForASimpleCubicLattice/.

Mgr. Marie Volná a kolektiv

Software Mathematica pro biology a chemiky

Výkonný redaktor Prof. RNDr. Zdeněk Dvořák, DrSc., Ph.D.
Odpovědná redaktorka Mgr. Jana Kreiselová
Technická redakce autor

Určeno pro studenty a akademické pracovníky VŠ

Vydala a vytiskla Univerzita Palackého v Olomouci
Křížkovského 8, 771 47 Olomouc
www.upol.cz/vup
e-mail: vup@upol.cz

Olomouc 2015
1. vydání

z. č. 2015/0080

Edice - Odborné publikace

ISBN 978-80-244-4473-4

Neprodejná publikace