

Příklad č. 1:

Atomy považujeme za pevné koule. Spočítejte koeficient zaplnění, koordinační číslo = počet nejbližších atomů pro následující struktury:

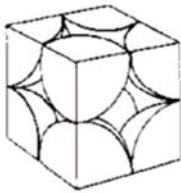
Pozn.:

1 Koeficient zaplnění: $f = V_n/V$, V_n - objem n atomů (iontů) obsažených v buňce, V - objem základní buňky.

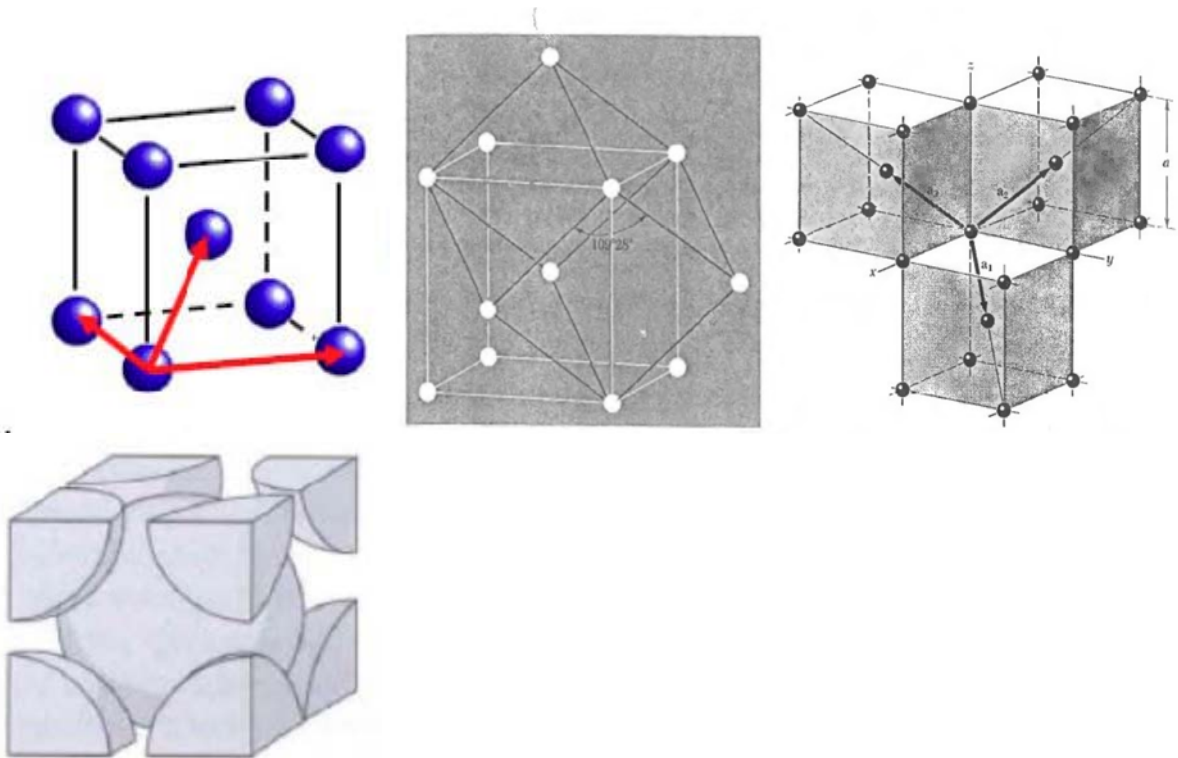
2 Hint pro řešení: a) určete kolik atomů připadá na buňku, b) spočítejte nejkratší vzdálenost v buňce.

3 V obrázcích jsou ukázány jednotlivé mřížky, jejich primitivní buňky a primitivní vektory.

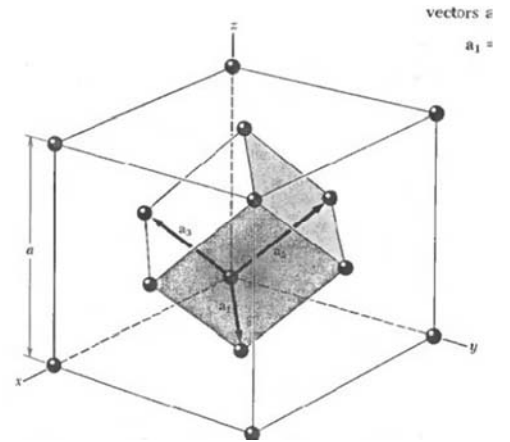
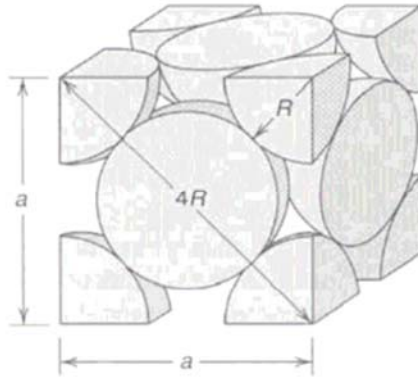
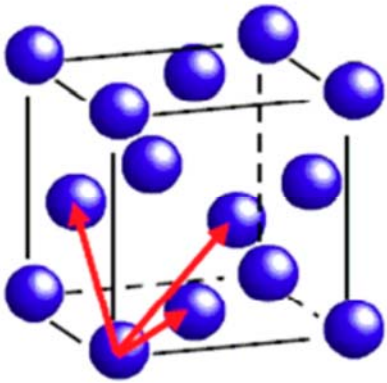
a) Prostá kubická mřížka.



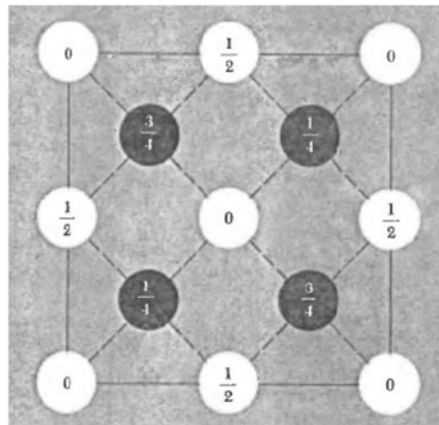
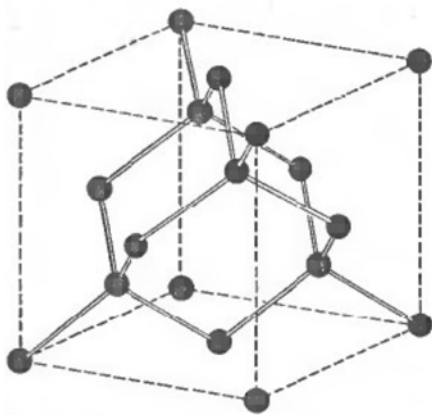
b) Kubická prostorově centrovaná mřížka. Primitivní translační vektory jsou: $\mathbf{a}_1 = 1/2a(\mathbf{x}+\mathbf{y}-\mathbf{z})$, $\mathbf{a}_2 = 1/2a(-\mathbf{x}+\mathbf{y}+\mathbf{z})$, $\mathbf{a}_3 = 1/2a(\mathbf{x}-\mathbf{y}+\mathbf{z})$, \mathbf{x} , \mathbf{y} , \mathbf{z} jsou jednotkové vektory kartézské souřadné soustavy.



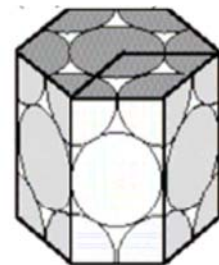
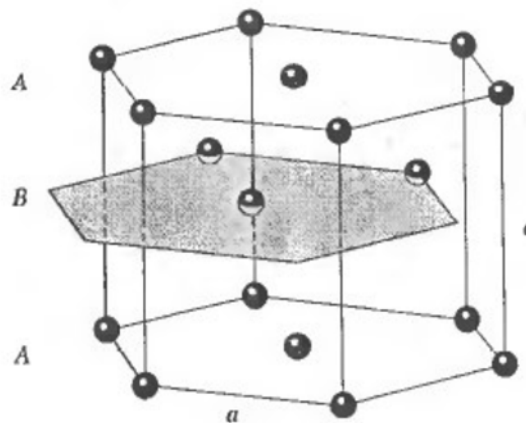
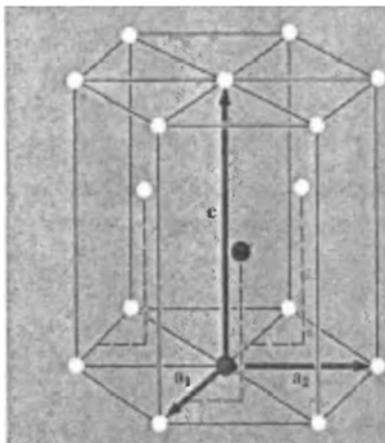
c) Kubická plošně centrovaná mřížka. Primitivní translační vektory jsou: $\mathbf{a}_1 = 1/2a(\mathbf{x}+\mathbf{y})$, $\mathbf{a}_2 = 1/2a(\mathbf{y}+\mathbf{z})$, $\mathbf{a}_3 = 1/2a(\mathbf{z}+\mathbf{x})$, \mathbf{x} , \mathbf{y} , \mathbf{z} jsou jednotkové vektory kartézské souřadné soustavy.



d) Kubická diamantová mřížka



e) Hexagonální těsně uspořádaná mřížka. Zde určete i „ideální poměr“ c/a .



Příklad č. 2:

Určete reciprokou mříž, primitivní translační vektory reciproké mříže, objem primitivní buňky reciproké mříže, předpis pro obecný vektor reciproké mříže k následujícím mřížím:

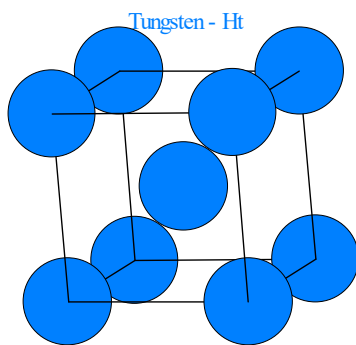
Pozn. Primitivní translační vektory mříží jsou v zadání příkladu 1.

- Prostá kubická mřížka (řešeno na přednášce)
- Kubická prostorově centrovaná mřížka
- Kubická plošně centrovaná mřížka

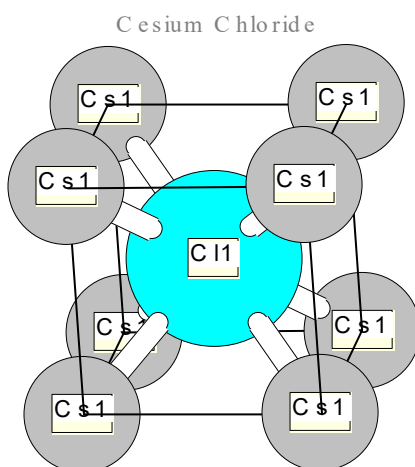
Příklad č. 3:

Spočtěte strukturní faktor pro následující struktury, diskutujte pro které kombinace h, k, l nabývá strukturní faktor „speciální“ hodnoty.

- Wolfram – bcc mříž (prostorová grupa $I m-3m$), atomy sedí v polohách 2a: $0\ 0\ 0$ a $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$



- CsCl – SC mříž (primitivní kubická) (prostorová grupa $P m-3m$), Cs^+ atomy sedí v polohách 1a: $0\ 0\ 0$ a Cl^- atomy v polohách 1b: $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$



- c) NaCl - FCC mříž (kubická plošně centrovaná) (prostorová grupa F m-3m), Na⁺ atomy sedí v polohách 4a: 0 0 0 a Cl⁻ atomy v polohách 4b: $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$. Uvažme translace plošného centrování:
- Na⁺ atomy: 0 0 0, $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$, $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$, $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$,
- Cl⁻ atomy: $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$, 0 0 $\frac{1}{2}$, 0 $\frac{1}{2}$ 0, $\frac{1}{2}$ 0 0.

Sodium Chloride

