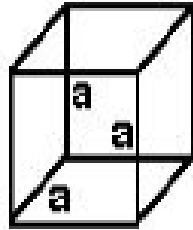


7 základních strukturních typů

krychlová

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



trigonální

$$a = b = c$$

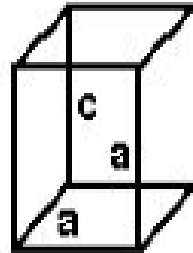
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



čtverečná

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

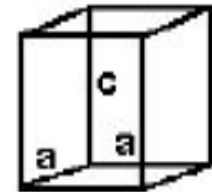


šesterečná

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

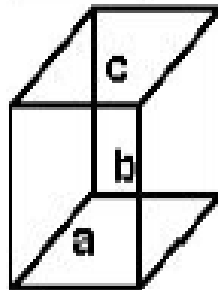
$$\gamma = 120^\circ$$



kosočtverečná

$$a \neq b \neq c$$

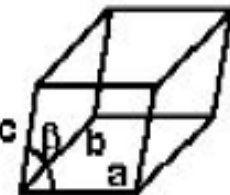
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



jednoklonná

$$a \neq b \neq c$$

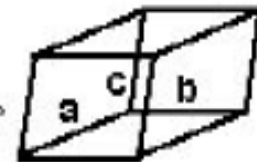
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



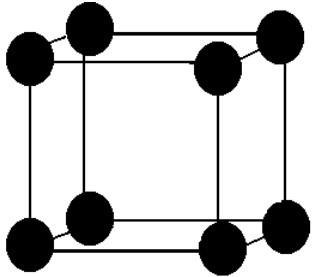
trojklonná

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

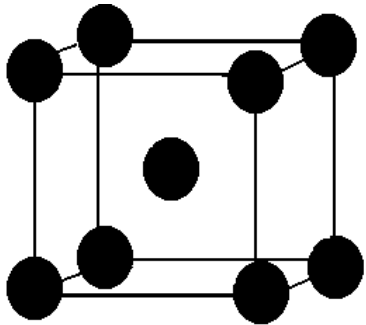


Základní strukturní typy



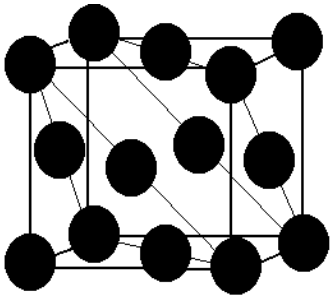
jednoduchá, kubická (typ Polonium)

8 částic v rozích (základní buňce patří $1/8$)
základní buňka obsahuje jednu částici



prostorově centrované kubické uspořádání (typ W, Fe)

8 částic v rozích (základní buňce patří $1/8$)
1 částice ve středu buňky (základní buňce patří 1)
základní buňka obsahuje 2 částice



kubická plošně centrovaná (typ Cu nejtěsnější kubické uspořádání)

8 částic v rozích (základní buňce patří 1/8)

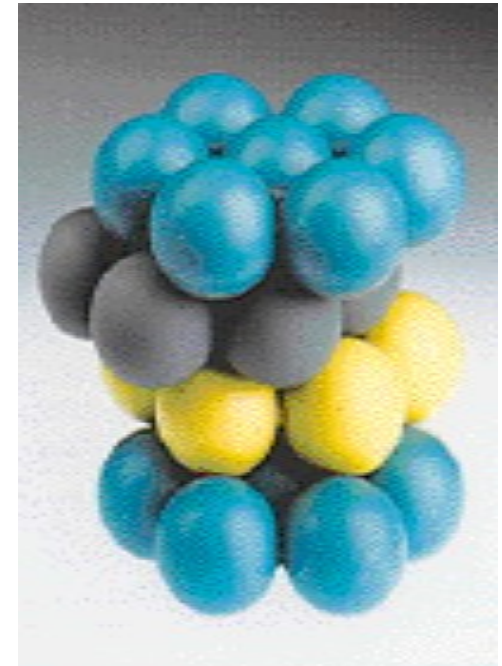
6 částic ve středu stěny krychle (základní buňce patří 1/2)

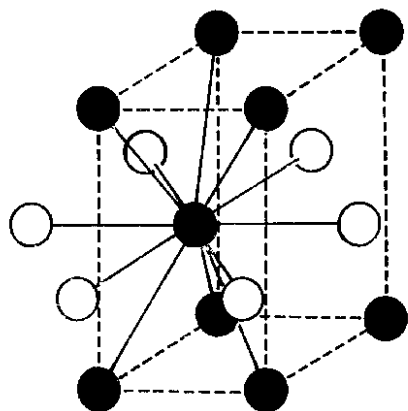
základní buňka obsahuje 4 částice

Považujeme-li atomy za tvrdé koule, pak se ve struktuře s nejtěsnějším kubickým uspořádáním dotýká každá koule 12 dalších koulí, z nichž šest je uspořádáno v téže rovině do šestiúhelníka a zbývajících šest tvoří dvě trojúhelníková uspořádání, jedno nad a jedno pod touto rovinou.

V případě kubického nejtěsnějšího uspořádání (CCP) je horní trojúhelník proti spodnímu pootočen o 60° , což způsobuje, že se zde vrstvy opakují podle schématu ABCABCABC. Obě nejtěsněji uspořádané struktury obsahují elementární buňku, složenou z N atomů, N oktaedrických mezer a $2N$ tetraedrických mezer.

Struktura s kubickým nejtěsnějším uspořádáním má za základ kubickou plošně centrovanou buňku (FCC). Tato buňka obsahuje čtyři atomy

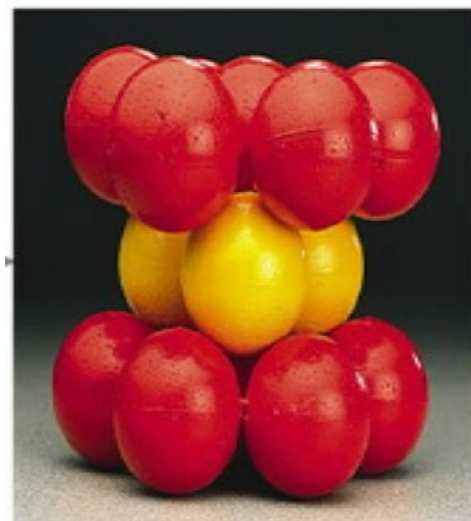




Typ Mg (nejtěsnější hexagonální uspořádání)

uspořádání

aba



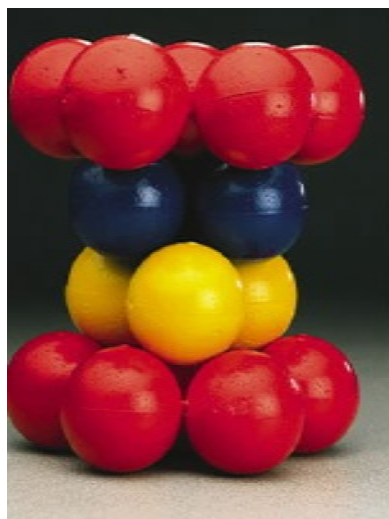
A

B

A

uspořádání

abca



A

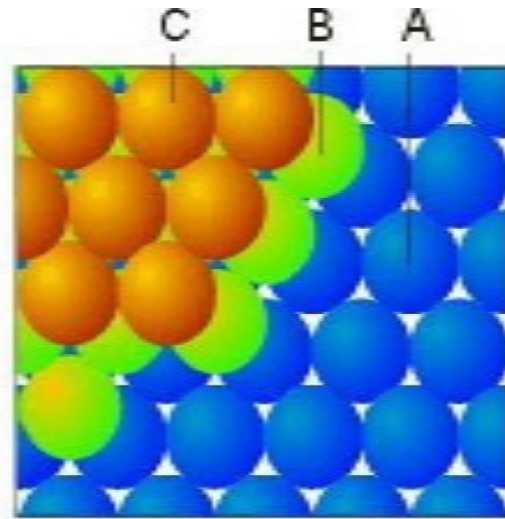
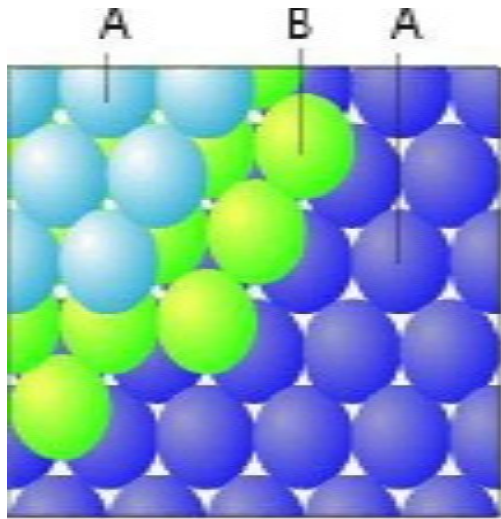
C

B

A

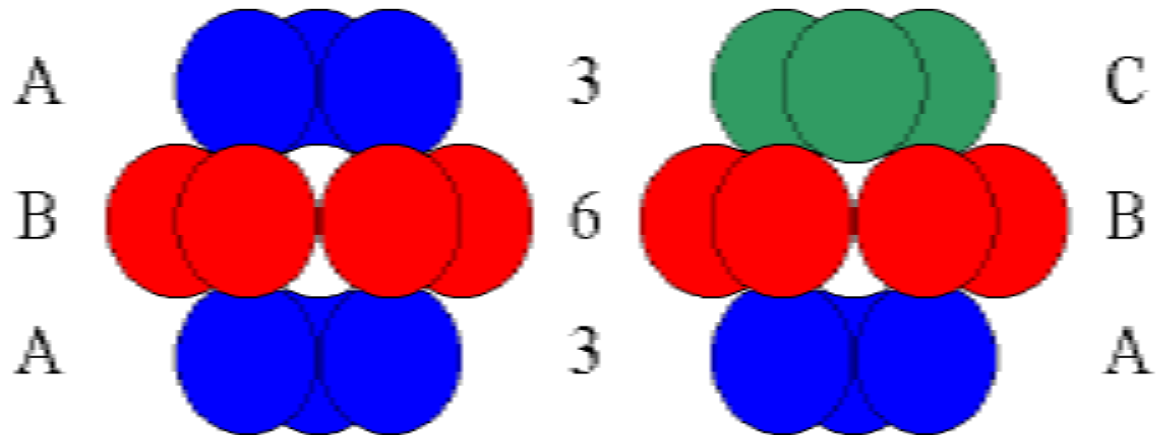
?

?

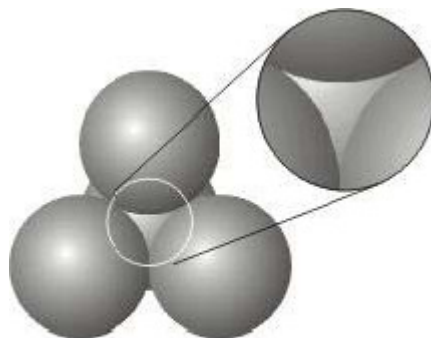
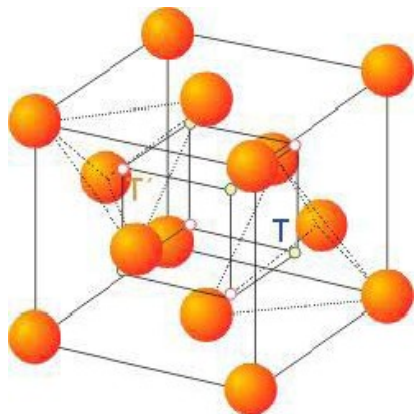
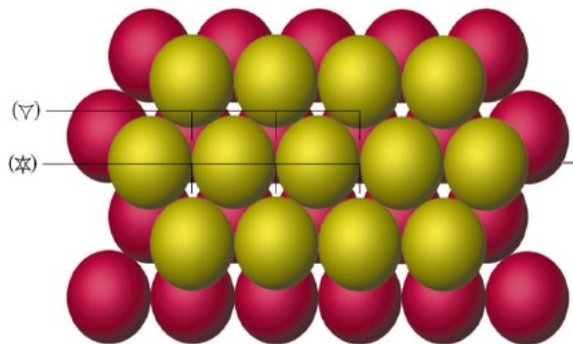


(a)

(b)



tetraedrické a oktaedrické mezery



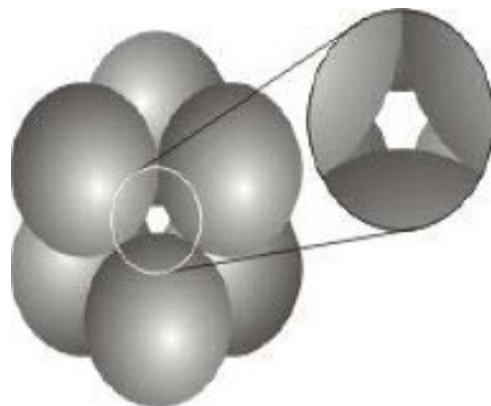
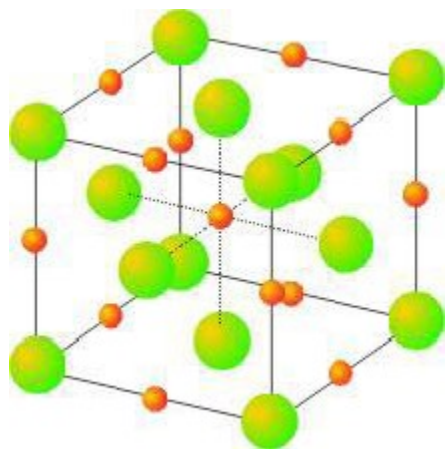
5 Tetrahedral hole

$$Z = 4$$

počet atomů v buňce

$$N = 8$$

počet tetraedrických
mezer



2 Octahedral hole

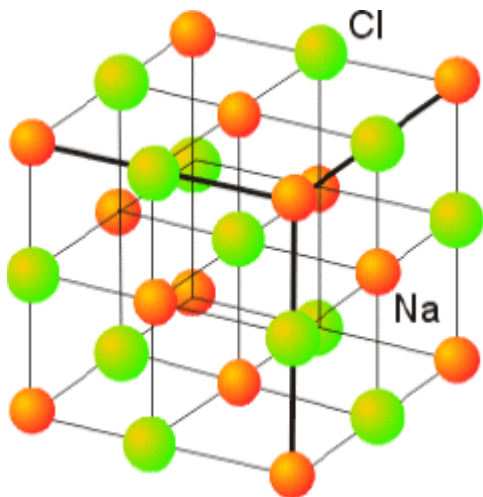
$$Z = 4$$

počet atomů v buňce

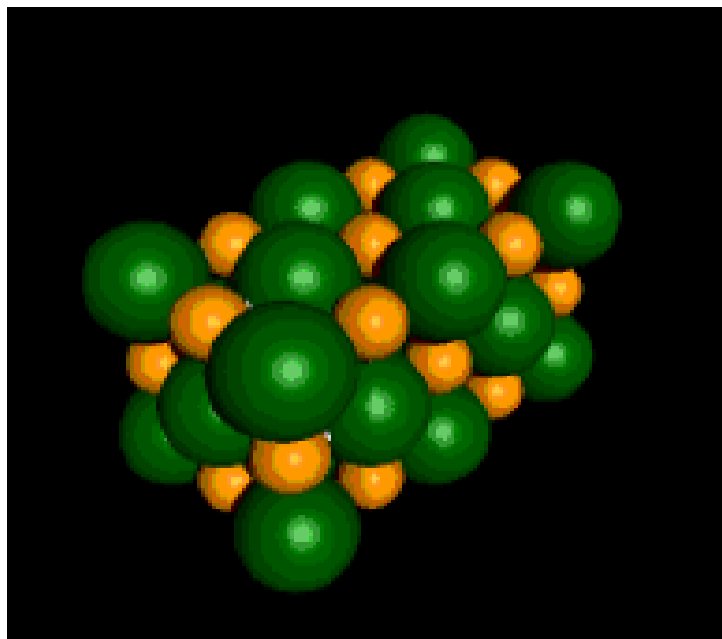
$$N = 1 + 12/4 = 4$$

počet oktaedrických
mezer

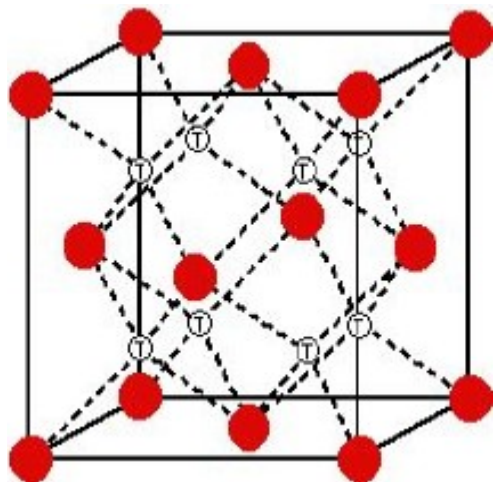
NaCl: oktaedrické mezery vyplněny kationtem/aniontem (základní buňka Na_4Cl_4)



koordinální číslo NaCl - 6:6



Li_2O : tetraedrické mezery vyplněny kationtem (základní buňka Li_8O_4)

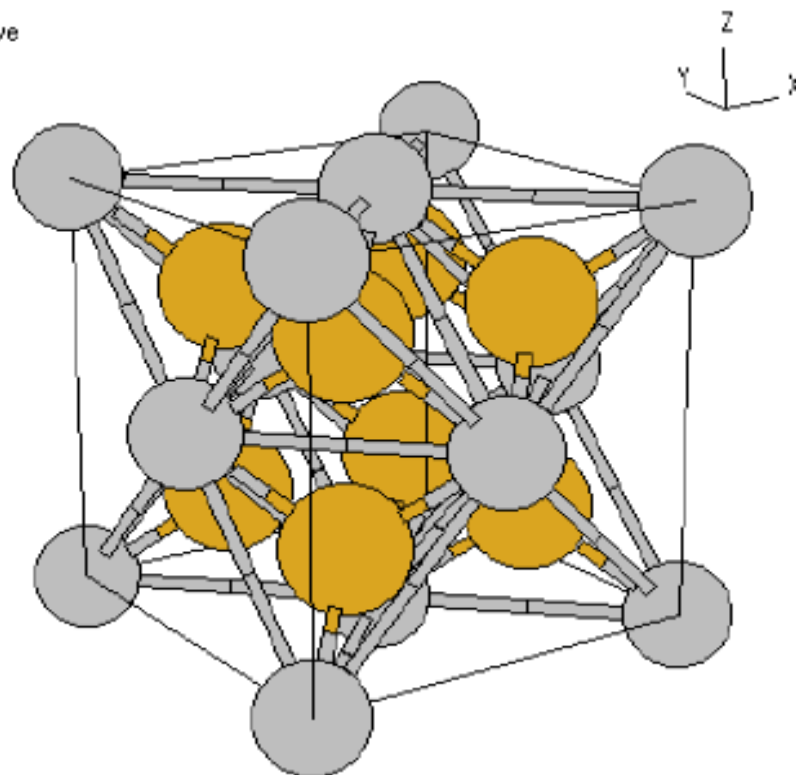


koordinací číslo Li_2O - 4:8

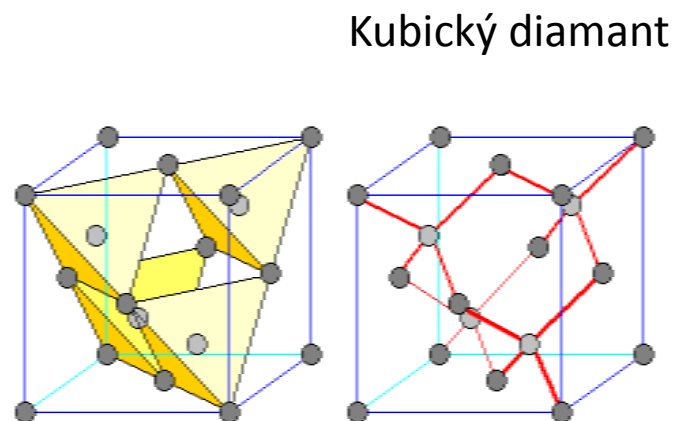
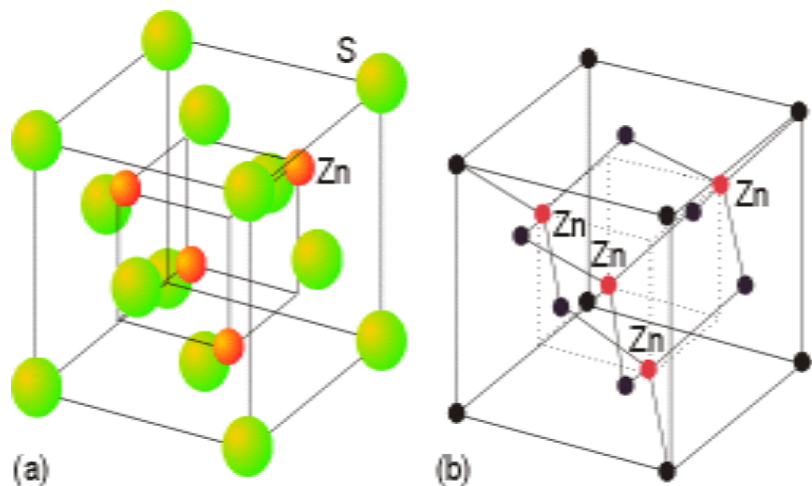
CaF_2 - základní buňka?, koordinací číslo?

(inverzní struktury)

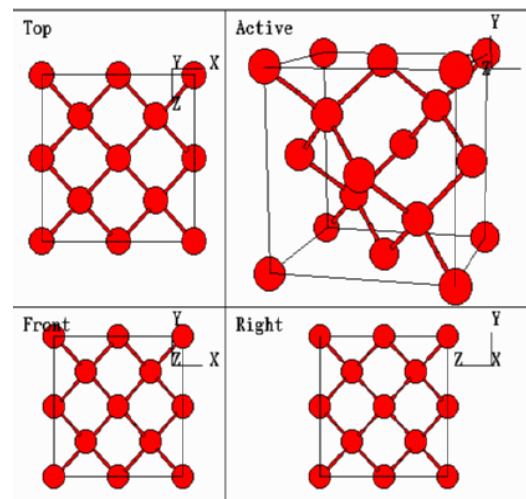
Active



ZnS: každá druhá tetraedrická mezera vyplněna kationtem (základní buňka Zn_4S_4)



koordináční číslo ZnS - 4:4



$$\rho = m/V = A_r(\text{počet atomů})/\text{objem buňky}$$

skripta str. 49 - 50

příklad 6, příklad 8