

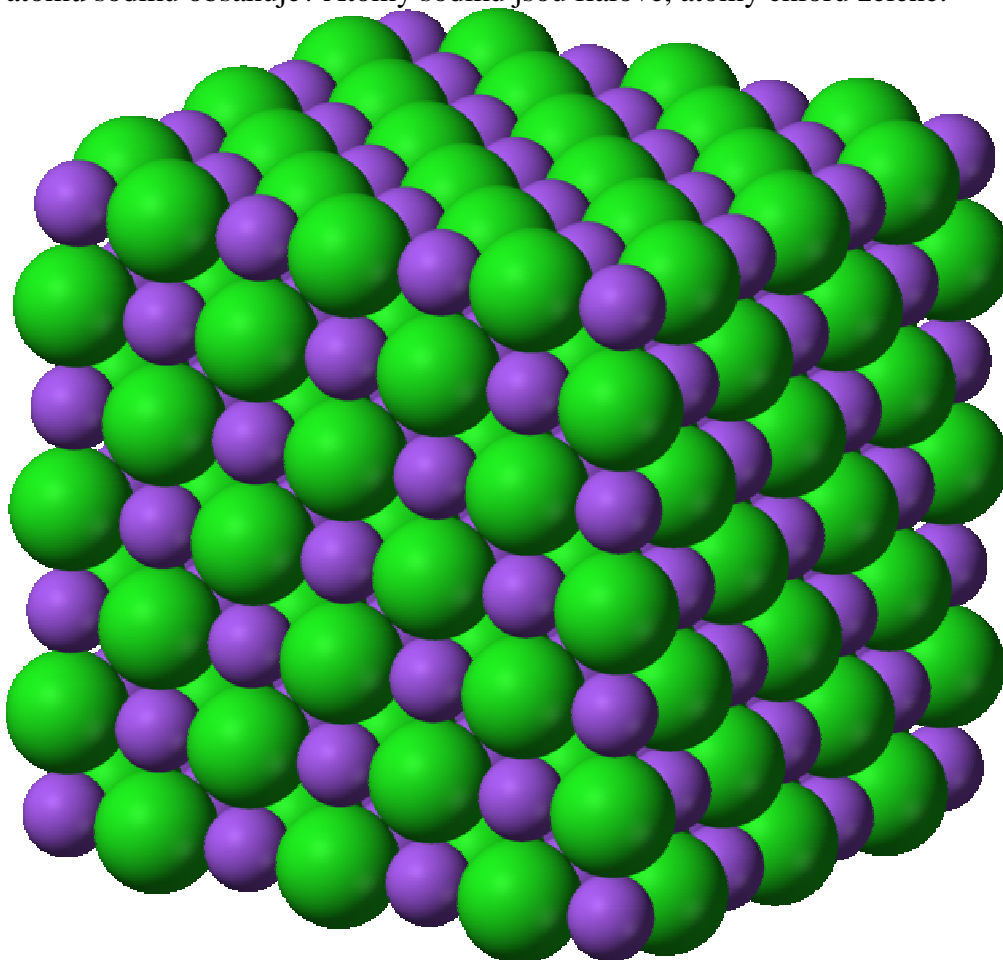
2.4.2 Ideální krystalová mřížka

Předpoklady: 2401

Krystal je pravidelná, opakující se struktura \Rightarrow existuje základní stavební prvek (**elementární buňka**) \Rightarrow spojením těchto buněk vznikne ideální krystalová mřížka.

Dále budeme zkoumat pouze krystaly, jejichž základní buňkou je krychle (krychlová soustava).

Př. 1: Najdi na obrázku krystalu soli NaCl základní buňku. Kolik atomů chloru a kolik atomů sodíku obsahuje? Atomy sodíku jsou fialové, atomy chloru zelené.



Pokud budeme postupovat z pravého předního horního rohu, stačí se posunout v každém směru o jeden sodíkový atom. Buňka obsahuje:

- osm iontů sodíku ve svých vrcholech a šest iontů ve svých stěnách \Rightarrow celkem 14 iontů sodíku.
- po čtyřech iontech chloru v přední a zadní stěně, po dvou dalších iontech v bočních stěnách a jeden iont uprostřed buňky \Rightarrow celkem 13 iontů chloru.

Př. 2: Vysvětli, zda výsledek předchozího příkladu znamená, že krystal soli obsahuje více iontů sodíku než chloru.

Krystal soli musí obsahovat obou iontů stejný počet (jinak by byl elektricky nabitý a stav by neodpovídal chemické značce soli $NaCl$).

Náš výsledek závisí na obrázku. Kdyby byl v horním rohu nakreslen iont chloru, získali bychom opačný výsledek: 14 atomů chloru a 13 atomů sodíku.

Při našem počítání jsme nezohlednili, že téměř všechny počítané ionty nepatří pouze jediné elementární buňce, ale jsou sdíleny několika buňkami najednou \Rightarrow kdybychom spočetli kolik iontů obou prvků připadá na jednu elementární buňku získali bychom zřejmě stejný výsledek.

Pedagogická poznámka: Při počítání buněk, kterým náleží jednotlivé atomy používám kostky. Na první kostce (první buňce) označíme jeden atom a přikládáme k původní kostce další, které tento atom sdílejí.

Zkusíme spočítat do kolika elementární buněk jednotlivé ionty patří:

sodík

- Každý iont ve vrcholu náleží do osmi buněk.
- Každý iont uprostřed stěny náleží do dvou buněk.

Na jednu elementární buňku připadají $\frac{8}{8} + \frac{6}{2} = 4$ ionty sodíku.

chlor

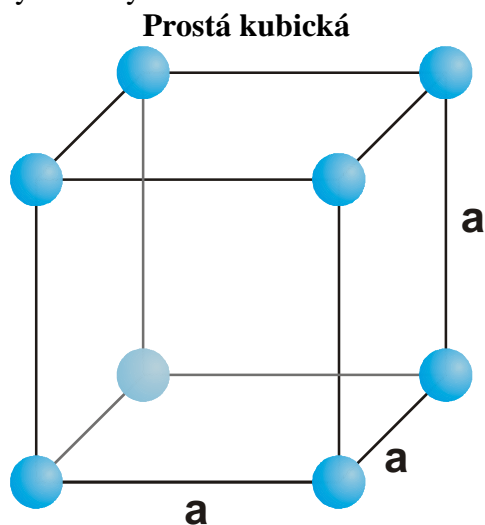
- Každý iont ve středu hrany náleží do čtyř buněk.
- Každý iont uprostřed buňky náleží do jediné buňky.

Na jednu elementární buňku připadají $\frac{4+4+4}{4} + \frac{1}{1} = 4$ ionty sodíku.

Ještě jednou: **POZOR, většina atomů krystalové mřížky patří do několika buněk.**

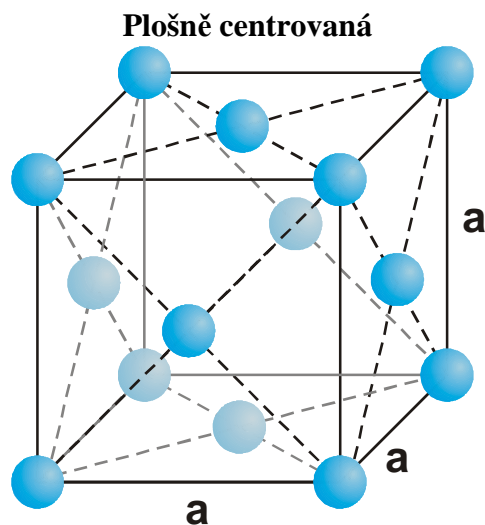
Délka elementární buňky (hrany krychle) = **mřížkový parametr a** (mřížková konstanta).

Druhy kubických buněk:



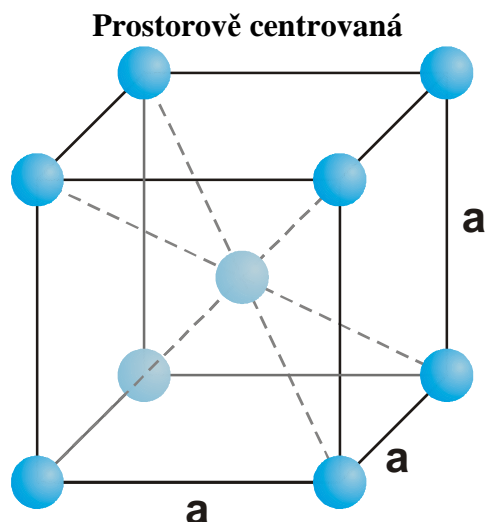
Elementární buňku tvoří krychle s částicemi ve vrcholech.

Výjimečná jen polonium.



Elementární buňku tvoří krychle s částicemi ve vrcholech a částice ve středu každé stěny.

Hliník, nikl, měď...



Elementární buňku tvoří krychle s částicemi ve vrcholech a částice ve středu krychle.
chrom, sodík, draslík ...

Př. 3: Kolik atomů v krystalové mřížce polonia připadá na jednu základní prostou buňku.

Krychle základní buňky má 8 vrcholů v každém je jeden atom polonia. Každý vrchol náleží osmi krychlím.

$$\text{počet atomů: } \frac{8}{8} = 1$$

Na jednu základní prostou buňku v krystalové mřížce polonia připadá jeden atom.

Př. 4: Kolik atomů v krystalové mřížce hliníku připadá na jednu základní plošně centrovanou buňku.

Krychle základní buňky má 8 vrcholů v každém je jeden atom hliníku, každý vrchol náleží osmi krychlím.

V každé ze šesti stěn je jeden atom \Rightarrow 6 atomů, každý atom náleží dvěma buňkám.

$$\text{Počet atomů: } \frac{8}{8} + \frac{6}{2} = 4.$$

Na jednu základní plošně centrovanou buňku v krystalové mřížce hliníku připadají 4 atomy.

Př. 5: Kolik atomů v krystalové mřížce chromu připadá na jednu základní prostorově centrovanou buňku.

Krychle základní buňky má 8 vrcholů v každém je jeden atom chromu, každý vrchol náleží osmi krychlím.

Uvnitř buňky je jeden atom, který náleží pouze této buňce.

$$\text{Počet atomů: } \frac{8}{8} + 1 = 2.$$

Na jednu základní prostorově centrovanou buňku v krystalové mřížce chromu připadají 2 atomy.

Př. 6: Urči hustotu hliníku v pevném skupenství, je-li mřížkový parametr $a = 405 \text{ nm}$. Hliník krystaluje v kubické plošně centrované soustavě.

$$A_{r(\text{Al})} = 26,98 \quad m_u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad a = 405 \text{ nm} = 4,05 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

Z předchozího příkladu víme, že na jednu buňku připadají čtyři atomy.

$$\rho = \frac{m}{V}$$

$$\rho = \frac{4 \cdot m_{\text{Al}}}{a^3} = \frac{4 \cdot A_r \cdot m_u}{a^3}$$

$$\rho = \frac{4 \cdot A_r \cdot m_u}{a^3} = \frac{4 \cdot 26,98 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}}{(4,05 \cdot 10^{-7})^3} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} = 2700 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

Hustota hliníku je $2700 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, což dobře odpovídá hodnotě uvedené v tabulkách.

Př. 7: Urči mřížkový parametr prostorově centrované krychlové základní buňky železa Fe_α . Hustota železa v této krystalové soustavě je rovna $7870 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, relativní atomová hmotnost železa je 55,85.

$$A_r(\text{Fe}) = 56,85, \quad m_u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \quad \rho = 7870 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}, \quad a = ?$$

Z předchozího příkladu víme, že na jednu prostorově centrovanou krychlovou buňku připadají dva atomy.

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{2 \cdot m_{\text{Fe}}}{a^3} = \frac{2 \cdot A_r(\text{Fe}) \cdot m_u}{a^3} \Rightarrow a = \sqrt[3]{\frac{2 \cdot A_r(\text{Fe}) \cdot m_u}{\rho}}$$

$$a = \sqrt[3]{\frac{2 \cdot A_r(\text{Fe}) \cdot m_u}{\rho}} = \sqrt[3]{\frac{2 \cdot 55,85 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}}{7870}} \text{ m} = 2,87 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,287 \text{ nm}$$

Mřížkový parametr základní buňky železa Fe_α je 0,287 nm.

Shrnutí: Ideální krystalová mřížka se skládá z elementárních buněk. Většina atomů v mřížce náleží do několika elementárních buněk.