

Stavová rovnice pro ideální plyn

$$pV = NkT$$

$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ je **Boltzmannova konstanta**

$$pV = nR_m T$$

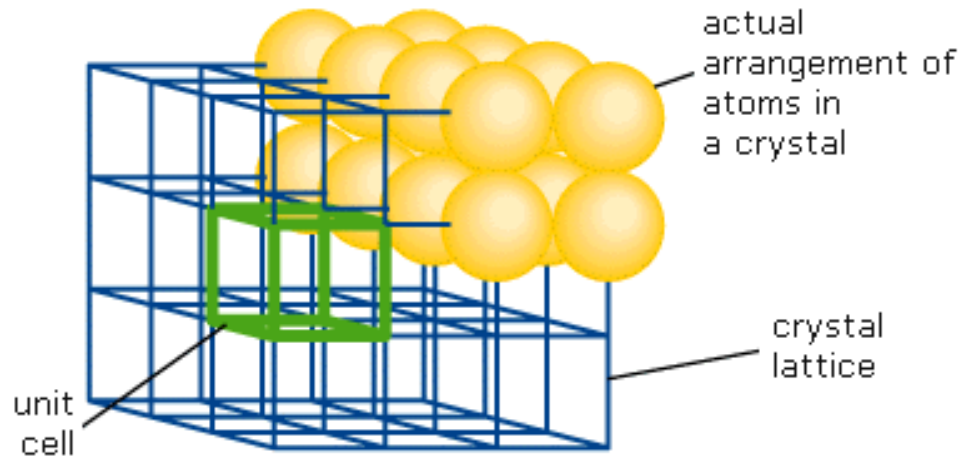
$$pV_m = R_m T$$

$R_m = kN_A = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ je **molární plynová konstanta**

$$pV = \frac{m}{M_m} R_m T$$

$$\frac{p_1 V_1}{T_1} = \frac{p_2 V_2}{T_2}$$

Základní (elementární) buňka (krystalu krychlové soustavy)



Prostorová mřížka – vychází z určitého bodu, jeho počátku a postupuje ve třech směrech po krocích o velikostech a , b , c ., - Tím se vytyčí určité body zvané uzlové body, – prostorová mřížka je souborem uzlových bodů v prostoru (v rámci krystalu)
Elementární buňka - nejmenší část prostorové mřížky, která se periodicky opakuje (uzly při 1 kroku).


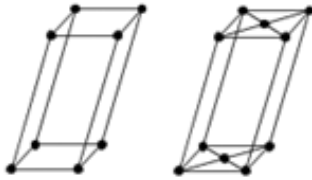
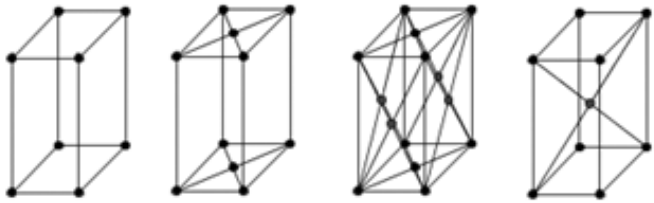
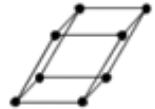
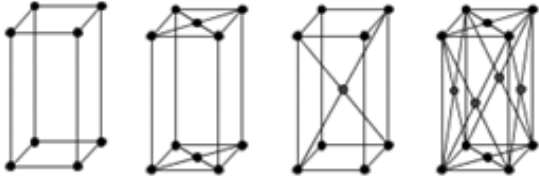

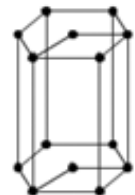
Mřížkové parametry a , b , c – délky hran elementární buňky v směre souřadných os.
Podle velikosti uhlů α , β , γ mezi nimi a vzájemném poměru délky mřížkových parametrů rozdělujeme krystalické látky do 7 krystalografických soustav.

koordinální číslo

počet nejbližších sousedů

koeficient zaplnění

$\frac{\text{celkový objem atomů v buňce}}{\text{celkový objem buňky}}$

Soustava	Primitivní buňka	Charakteristika
trojklonná (triklinická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
jednoklonná (monoklinická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
kosočtverečná (rombická)		$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
čtverečná (tetragonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
šesterečná (hexagonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
krychlová (kubická)		$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
klencová (trigonální)		$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$

Metal Elements from the Periodic Table

Li	Be																			
Na	Mg																			Al
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga								
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn							
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb							
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb					

				
CCP	HCP	HCP	HC	?
(Cubic Close Packing)	(Hexagonal Close Packing)	(Body Centered Cubic)	(4H)	(Other)

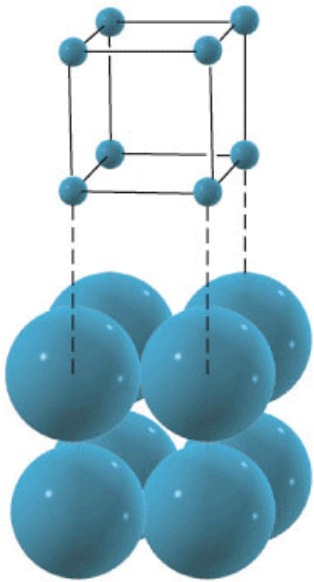
© 2013/2008 shendiga.com

Kubická (krychlová) mřížka

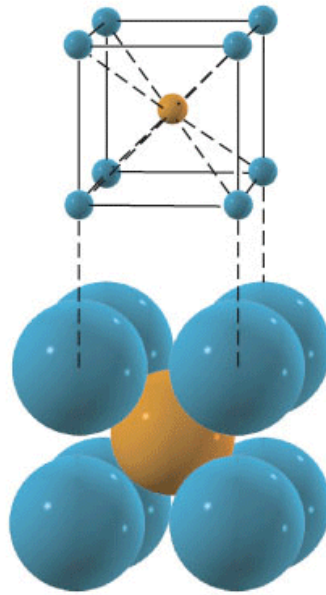
(i) For simple cubic structure (SC),
Coordination number = 6

(ii) For Face-centred cubic structure (FCC)
Coordination number = 12

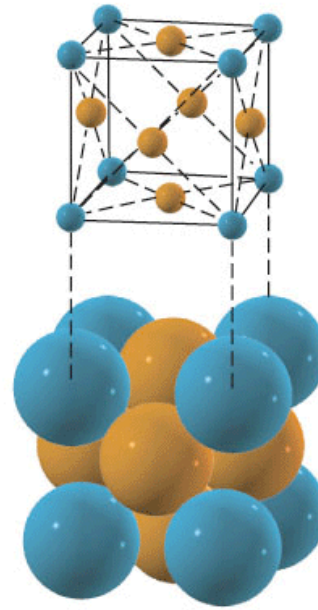
(iii) For Body-centred cubic structure (BCC)
Coordination number = 8



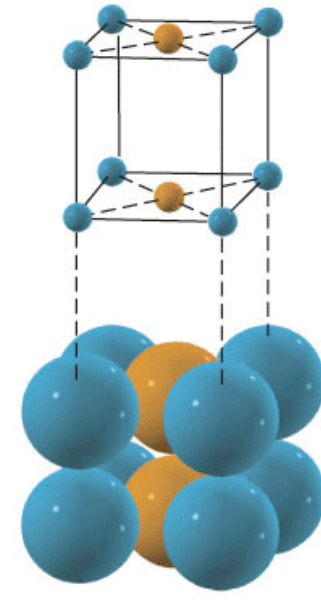
Simple



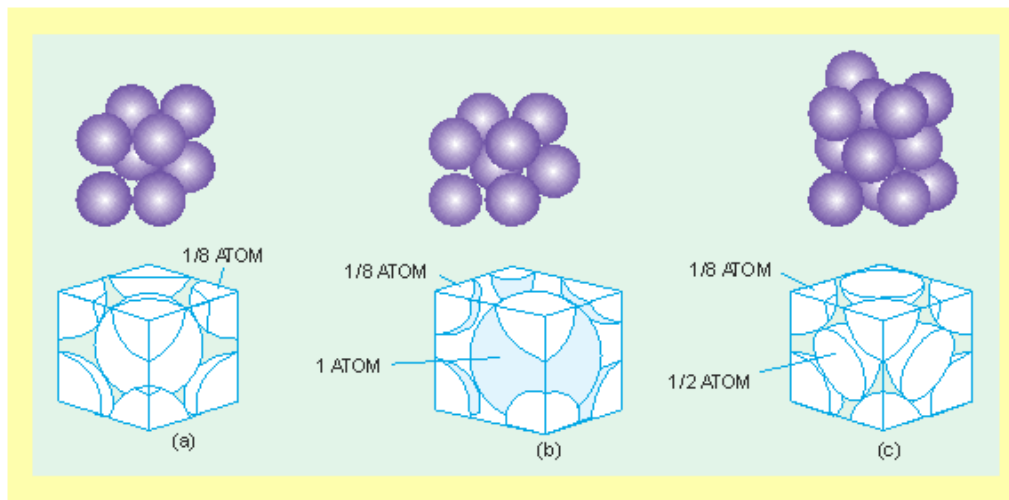
Body-centered



Face-centered



Base-centered



1. Contribution by atom at the corner of a unit cell = $\frac{1}{8}$

Hence, number of atoms in simple cubic unit cell

$$= 8 (\text{corner atoms}) \times \frac{1}{8} \text{ atom per unit cell} = 1$$

2. Contribution by an atom within the body of a unit cell = 1

Hence, Number of atoms in body-centred cubic unit cell

$$= 8 \times \frac{1}{8} + 1 (\text{body-centred atom}) \times 1 \text{ atom / unit cell}$$

$$= 1 + 1 = 2$$

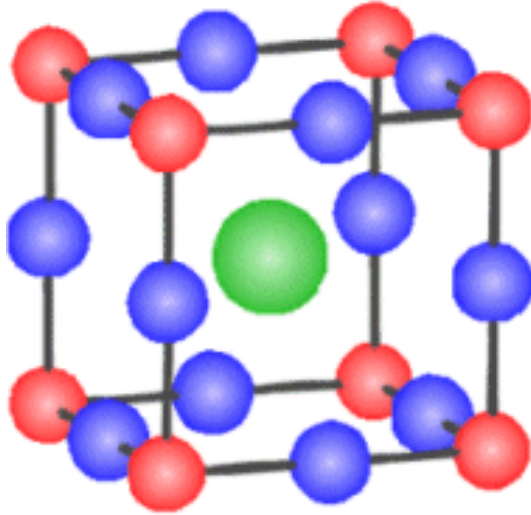
3. Contribution by an atom on the face of a unit cell = $\frac{1}{2}$

Hence, number of atoms in face-centred cubic unit cell

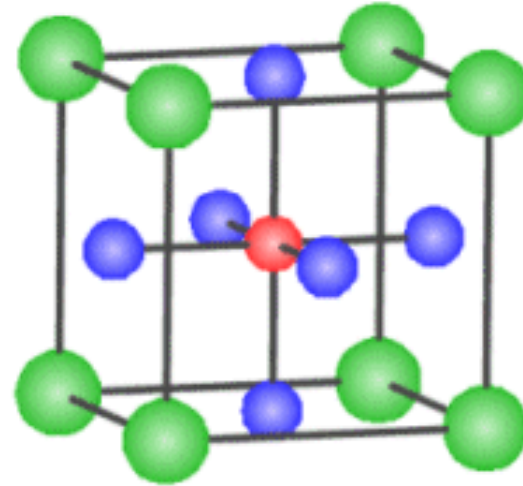
$$= 8 \times \frac{1}{8} + 6 (\text{face centred atoms}) \times \frac{1}{2} (\text{atom per unit cell})$$

$$= 1 + 3 = 4$$

Perovskit



Perovskite A-type



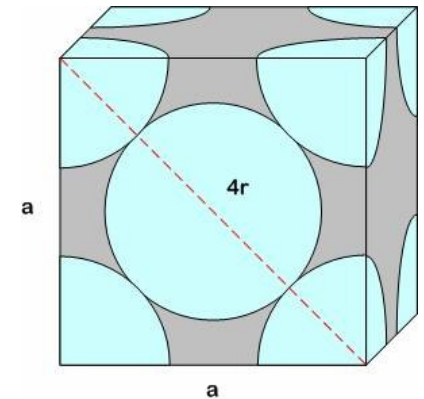
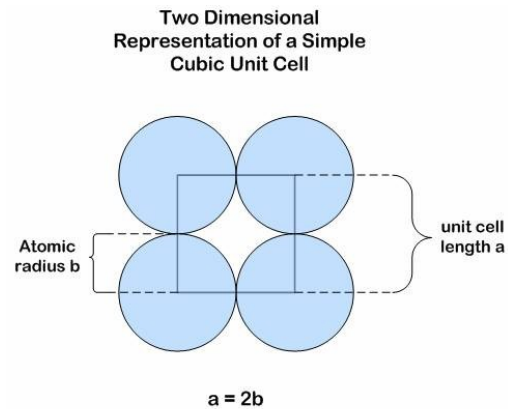
Perovskite B-type

$1 * 1$	Ba (zelená)
$1/8 * 8$	Ti (červená)
$1/4 * 12$	O (modrá)

$1/8 * 8$	Ba (zelená)
$1 * 1$	Ti (červená)
$1/2 * 6$	O (modrá)



Atomic Radius of an Atom in a Cubic System



It is defined as half the distance between nearest neighbouring atom in a crystal. It is expressed in terms of length of the edge (a) of unit cell of the crystal.

(i) Simple cubic structure (sc) : Radius of atom ' r ' = $\frac{a}{2}$ as atoms touch each other along the edges.

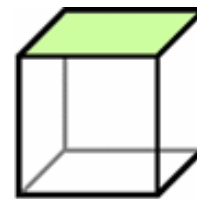
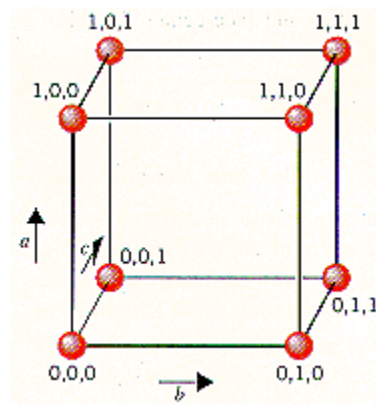
(ii) Face centred cubic structure (fcc) : Radius of atom ' r ' = $\frac{a}{2\sqrt{2}}$ as the atoms touch each other along the face diagonal of the cube.

(iii) Body centred cubic structure (bcc) : Radius of atom ' r ' = $\frac{\sqrt{3}a}{4}$ as the atoms touch each other along the cross diagonal of the cube.

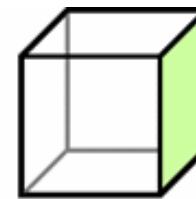
Millerovy indexy rovin :

indexy definující rovinu atomů v krystalu podle jejich průsečíků s krystalografickými osami.

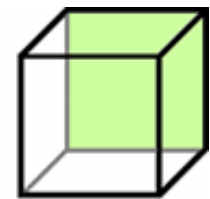
Najdou se průsečíky roviny s třemi základními krystalografickými osami a označí se jako délky hran elementární buňky. Pak se reciproké hodnoty těchto veličin vydělí jejich největším společným dělitelem tak, aby se dostaly tři nejmenší možná čísla. To jsou Millerovy indexy. Značí se h , k , l a jimi definovaná rovina (h k l !).



(001)



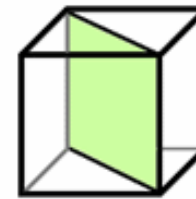
(100)



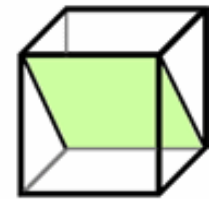
(010)



(101)



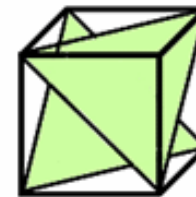
(110)



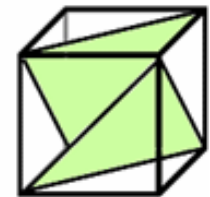
(011)



(111)



($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)



($\bar{1}\bar{1}1$)

