

**Sbírka řešených příkladů
z fyzikální metalurgie
II. díl**

Jiří Sobotka

Recenzent: Doc. Ing. Karel Daďourek, CSc.

© Jiří Sobotka – 2014

ISBN 978-80-7494-132-0

PŘEDMLUVA K PRVNÍMU VYDÁNÍ

Hlavním cílem všech dílů předkládaných **sbírek řešených příkladů z fyzikální metalurgie** je poskytnout studentům přehled nejdůležitějších typů a řešení příkladů z hlavních oblastí zaměření fyzikální metalurgie jako vědeckého oboru. Celá sbírka řešených příkladů je koncipována v souladu s celkovou koncepcí tohoto předmětu dle jeho garanta (prof. Ing. Iva Nová, CSc.). Vzhledem k velkému rozsahu tohoto zaměření je sbírka řešených příkladů rozdělena na více dílů. Tento **II. díl** zahrnuje další čtyři velké oblasti v rámci zaměření fyzikální metalurgie. Konkrétně se jedná o **Millerovy a Bravaisovy indexy směrů a rovin, mezirovinné vzdálenosti v krystalových mřížkách kovů, hustoty atomů dle daných směrů, rovin a objemů a termodynamiku kovů a slitin** z hlediska fyzikální metalurgie. Je však nutno znovu upozornit na skutečnost, že nelze zcela vyčerpát obsah těchto zaměření, snahou je podat alespoň přehled hlavních typů příkladů a přístupů k jejich řešení. Základní teoretická východiska k řešení příkladů jsou vždy shrnuta na začátku každé kapitoly. S ohledem na zaměření publikace však není teorii věnován širší prostor.

Prvním řešeným tématem jsou **Millerovy a Bravaisovy indexy směrů a rovin**. Na úvodní stránce jsou stručně shrnuty hlavní aspekty určování těchto indexů pro dvě hlavní mřížkové soustavy pro kovy - tedy pro kubickou a hexagonální soustavu. V následujících příkladech jsou pak určovány jak Millerovy tak Bravaisovy indexy směrů a rovin. Velmi důležité je pochopení provázání Millerových a Bravaisových indexů v rámci hexagonální soustavy. U každého příkladu je vždy také zobrazen příslušný obrázek ke snadnému pochopení aktuálně řešených indexů (směrů i rovin). Na konci příslušných částí této kapitoly jsou pak vždy přehledně graficky zobrazeny hlavní směry a roviny, které jsou důležité pro pochopení také dalších oblastí fyzikální metalurgie jako jsou např. skluzové směry a roviny při deformačním chování kovů.

Druhá kapitola (celkově tedy šestá) je zaměřena na **základní výpočty mezirovinných vzdáleností v krystalových mřížkách kovů**. Opět se jedná o "interdisciplinární" téma, jelikož nejenom vlastní zadání, ale také příslušné vzorce vyžadují pochopení Millerových indexů rovin. Příklady jsou pak opět zaměřeny na kubickou a hexagonální soustavu. Je nutné zmínit, že právě znalost mezirovinných vzdáleností představuje velmi důležitý aspekt např. v rentgenové difrakci.

Kapitola zahrnující výpočet **hustot atomů dle daných směrů, rovin a objemů** plynule navazuje na předchozí kapitolu. Jedná se totiž vždy o výpočty vycházející ze zadaných Millerových (nebo Bravaisových) indexů směrů a rovin. Z hlediska krystalových mřížek kovů jsou příklady věnovány nejdůležitějším z nich - kubické plošně centrované mřížce (FCC), kubické prostorově centrované mřížce (BCC) a také hexagonální těsně uspořádané mřížce (HCP). Pro každou z těchto mřížek je zadán příslušný prvek s danými mřížkovými parametry.

Poslední typy příkladů v tomto II. díle sbírky řešených příkladů z fyzikální metalurgie jsou zaměřeny na základní **termodynamické výpočty v oblasti kovů a slitin**. Konkrétně se jedná o výpočet množství tepla potřebného k ohřátí zadaného množství kovů na danou teplotu, objasnění vlivu fázových (nebo modifikačních) přeměn, výpočet entropie (jako míry nevratnosti děje) a také Gibbsovy energie.

Skripta jsou určena především pro studenty předmětu fyzikální metalurgie, který je vyučován ve III. ročníku na fakultě stojní v rámci bakalářského studijního programu. Lze je nicméně také využít v oborových předmětech v navazujícím magisterském studiu pro prohloubení a aplikaci znalostí ohledně fyzikální metalurgie.

Autor

Tato publikace byla vytvořena v rámci řešení
projektu "TECHNOMAT" (reg. č. CZ.1.07/2.2.00/28.0316), který je spolufinancován
Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.



OBSAH

Seznam použitých symbolů a zkratk	- 6 -
Komentář k obsahu a organizaci sbírky příkladů	- 7 -
5. Millerovy a Bravaisovy indexy směrů a rovin	- 8 -
6. Mezirovinné vzdálenosti v krystalových mřížkách kovů	- 44 -
7. Hustoty atomů dle daných směrů, rovin a objemů	- 53 -
8. Termodynamika kovů a slitin	- 72 -
Seznam použité literatury	- 86 -



Seznam použitých symbolů a zkratek

Použité symboly

Označení	Rozměr	Význam
a_0, a, c	[m]	Mřížkový parametr příslušného typu mřížky
$A_{r(X)}$	[1]	Relativní atomová hmotnost prvku X
$C_{p(X)}$	[J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹]	Molární tepelná kapacita prvku X za podmínky p = konst.
$G_{(X)}$	[J]	Gibbsova energie prvku X
$H_{(X)}$	[J]	Entalpie prvku X
$m_{(X)}$	[kg]	Hmotnost prvku (sloučeniny,...) X
$M_{m(X)}$	[g·mol ⁻¹]	Molární hmotnost prvku (sloučeniny,...) X
m_u	[kg]	Atomová hmotnostní konstanta
M_u	[g·mol ⁻¹]	Molární hmotnostní konstanta
$n_{(X)}$	[mol]	Látkové množství prvku (sloučeniny,...) X
$Q_{p(X)}$	[J]	Množství tepla přivedené do soustavy prvku X
$S_{(X)}$	[J·K ⁻¹]	Entropie prvku X
ρ_x	[atomu·m ^{-x}]	Hustota atomů (lineární, plošná, objemová; x = 1, 2, 3)

Použité zkratky

Označení	Význam
(h k l)	Bravaisovy indexy roviny
(h k l)	Millerovy indexy roviny
[p q s t]	Bravaisovy indexy směru
[u v w]	Millerovy indexy směru
BCC	Kubická prostorově středěná mřížka (B ody C entered C ubic)
BI-R	Bravaisovy indexy roviny
BI-S	Bravaisovy indexy směru
FCC	Kubická plošně středěná mřížka (F ace C entered C ubic)
HCP	Hexagonální těsně uspořádaná mřížka (H exagonal C lose P acked)
MI-ER	Millerovy indexy krystalograficky ekvivalentních rovin
MI-ES	Millerovy indexy krystalograficky ekvivalentních směrů
MI-R	Millerovy indexy roviny
MI-S	Millerovy indexy směru
SC	Kubická prostá (jednoduchá) mřížka (S imple C ubic)

Komentář k obsahu a organizaci sbírky příkladů

Vysvětlení ohledně uspořádání a řešení daných příkladů (pomocí příkladu 6.2):

Příklad 6.2 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 2 v kubické soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(200)**.

← **Slovní zadání příkladu**

(tučně zvýrazněné hlavní zadání)

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 2 v kubické soustavě

← **Určit** - co se má vypočítat (zkratka a jednotky)

Zadáno: Kubická soustava

← **Zadáno** - co je zadáno

Rovina 2 s MI-S (200) pro kubickou soustavu (viz obrázek 7.2)

(zkratka, hodnota a jednotky)

Řešení:

V kubické soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a_0^2} \quad [m]$$

← **Řešení** - shnutí hlavních vzorců z teoretické části řešené oblasti (vzorce a rozměrová analýza)

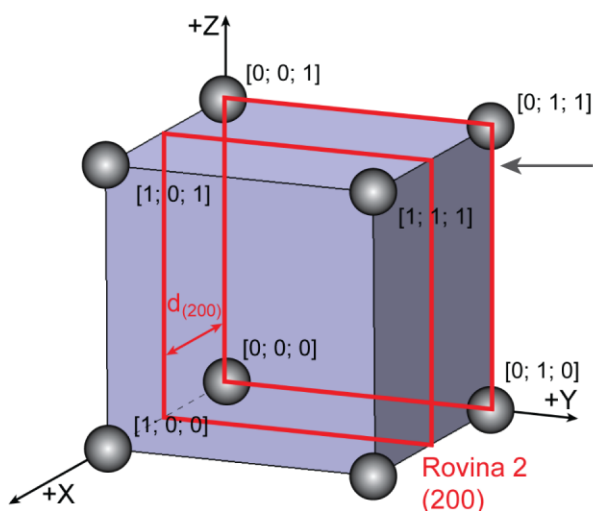
Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(200)}^2} = \frac{2^2 + 0^2 + 0^2}{a_0^2} = \frac{4}{a_0^2}$$

$$d_{(200)} = \sqrt{\frac{a_0^2}{4}} = \frac{a_0}{2}$$

← **Vlastní výpočet** - postup řešení daného příkladu (krok za krokem)

- využití výše uvedených vzorců
- rozměrová analýza
- odvození výsledných vzorců a jejich matematické úpravy
- číselný výpočet (zaokrouhleno většinou na tři desetinná místa)
- výsledek uveden v černém ohraničení



← **Obrázek** - se zvýrazněním zadáných a hledaných veličin

- ke snazšímu pochopení zadání

5. Millerovy a Bravaisovy indexy směrů a rovin

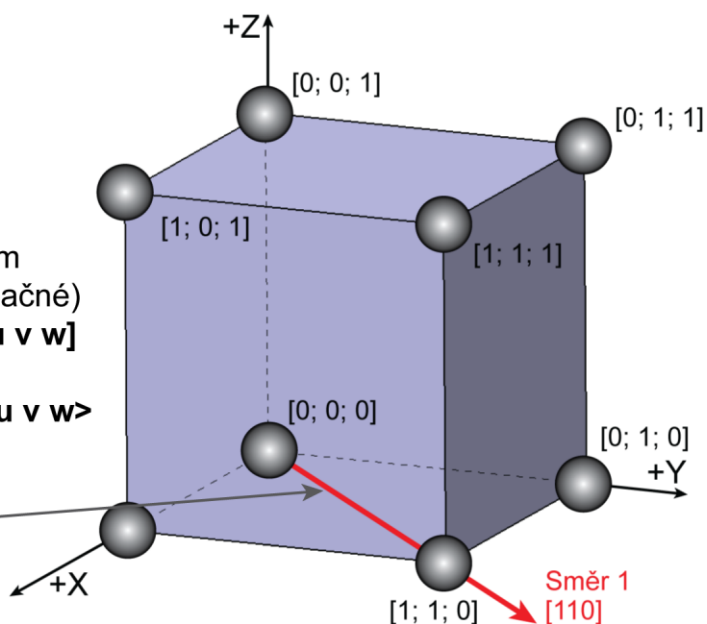
Přehled nejdůležitějších veličin a vzorců:

Millerovy indexy směrů a rovin byly zavedeny pro snazší popsání dějů, které se odehrávají v krystalové mřížce (např. popis skluzových rovin a směrů v rámci deformačního chování kovů). Obecně lze Millerovy indexy použít pro všechny krystalografické soustavy. V metalurgické praxi se používají zejména pro **kubickou soustavu**. Lze je využít také pro hexagonální soustavu, kde se nicméně častěji používají Bravaisovy indexy (viz další stránka).

Millerovy indexy směru

- celá nesoudělná čísla
- jednoznačně určují směr mřížkové přímky v dané krystalografické soustavě
- záporné směry se zapisují pomocí přeškrtnutí nad číslem (jedná se vlastně o směry opačné)
- jeden směr: $[u \ v \ w]$
- soustava ekvivalentních směrů: $\langle u \ v \ w \rangle$

Zadaný směr
(pomocí dvou bodů)

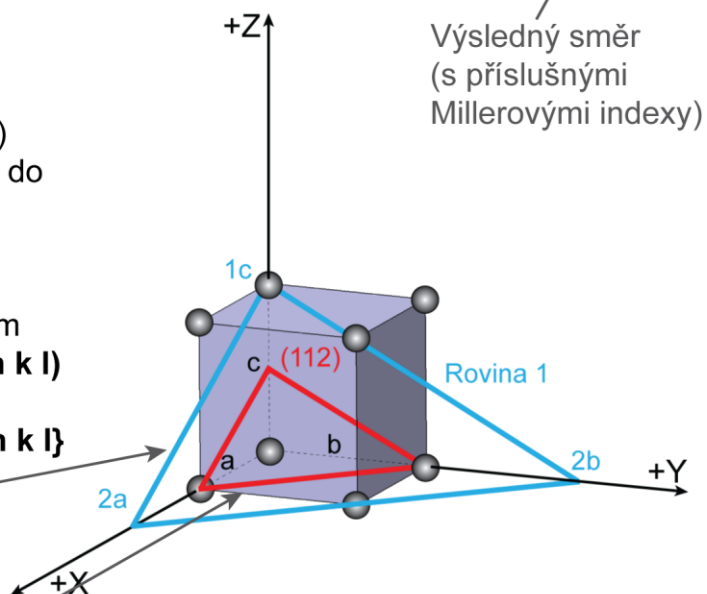


Millerovy indexy rovin

- celá nesoudělná čísla
- udávají, kolikrát se úseky vytknuté první rovinou ($n = 1$) na souřadných osách vejdou do periody identity odpovídajících os
- záporné směry se zapisují pomocí přeškrtnutí nad číslem
- jedna rovina: $(h \ k \ l)$
- soustava ekvivalentních rovin: $\{h \ k \ l\}$

Zadaná rovina
(s vytknutými úseky na osách)

Výsledná rovina
(s příslušnými Millerovými indexy)



V hexagonální soustavě lze znovu používat **Millerovy indexy směrů a rovin** využívající tzv. **ortohexagonální soustavu** $[X_1; X_2; Z]$ - zobrazena žlutou barvou. V případě hexagonální soustavy je nicméně častější použití čtyř os. V tomto případě se jedná o systém $[a_1; a_2; a_3; c]$, který využívají **Bravaisovy indexy směrů a rovin**.

Millerovy a Bravaisovy indexy směrů a rovin v **hexagonální soustavě**. V této soustavě jsou Millerovy indexy směrů a rovin odečítány ze systému $[X_1; X_2; Z]$. Bravaisovy indexy směrů a rovin jsou pak odečítány ze systému $[a_1; a_2; a_3; c]$.

Přepočet Millerových indexů směru do Bravaisových indexů směru:

- transformace systémů:

$$[X_1; X_2; Z] \rightarrow [a_1; a_2; a_3; c]$$

- transformace indexů směru:

$$[u \ v \ w] \rightarrow [p \ q \ s \ t]$$

$$p = \frac{1}{3}(2u - v)$$

$$q = \frac{1}{3}(2v - u)$$

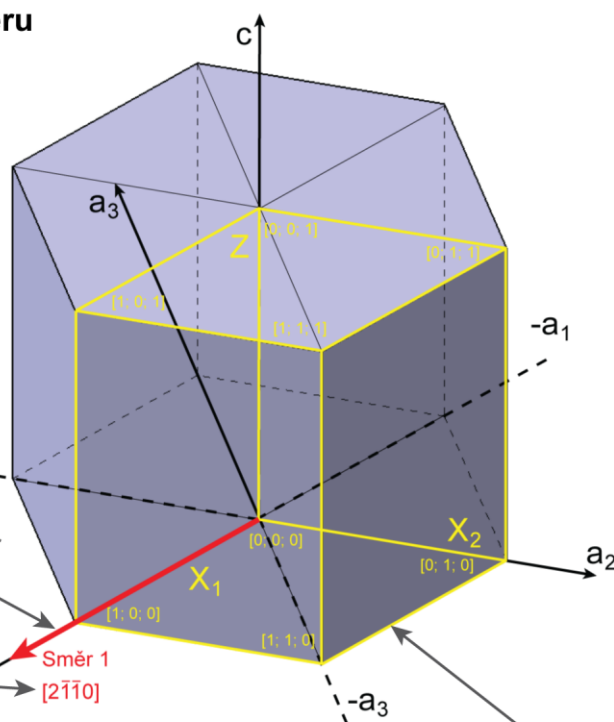
$$s = -\frac{1}{3}(u + v)$$

$$t = w$$

Výsledný směr

(s příslušnými Millerovými nebo Bravaisovými indexy)

Zadaný směr
(pomocí dvou bodů)



Přepočet Millerových indexů roviny do Bravaisových indexů roviny:

- transformace systémů:

$$[X_1; X_2; Z] \rightarrow [a_1; a_2; a_3; c]$$

- transformace indexů roviny:

$$(h \ k \ l) \rightarrow (h \ k \ i \ l)$$

$$h = h$$

$$k = k$$

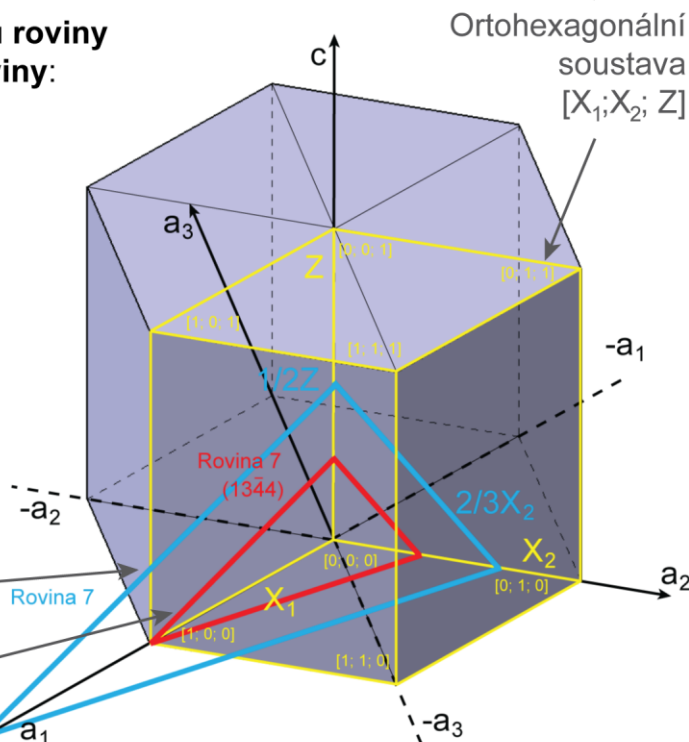
$$i = -(h + k)$$

$$l = l$$

Zadaná rovina

(s vytknutými úseky na osách)

Výsledná rovina
(s příslušnými Millerovými nebo Bravaisovými indexy)





Příklad 5.1 Stanovte Millerovy indexy $[u \ v \ w]$ daného krystalografického **směru 1** v kubické soustavě.

Určit: MI-S pro směr 1 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Směr 1 (směr dán dle obrázku 5.1)

Řešení:

Směr 1 $\rightarrow$ body $[0; 0; 0]$ a $[1; 1; 0]$

- odečtení patového (zadního) a hlavového (předního) bodu v daném směru 1

$[1; 1; 0] - [0; 0; 0] \rightarrow [1; 1; 0]$

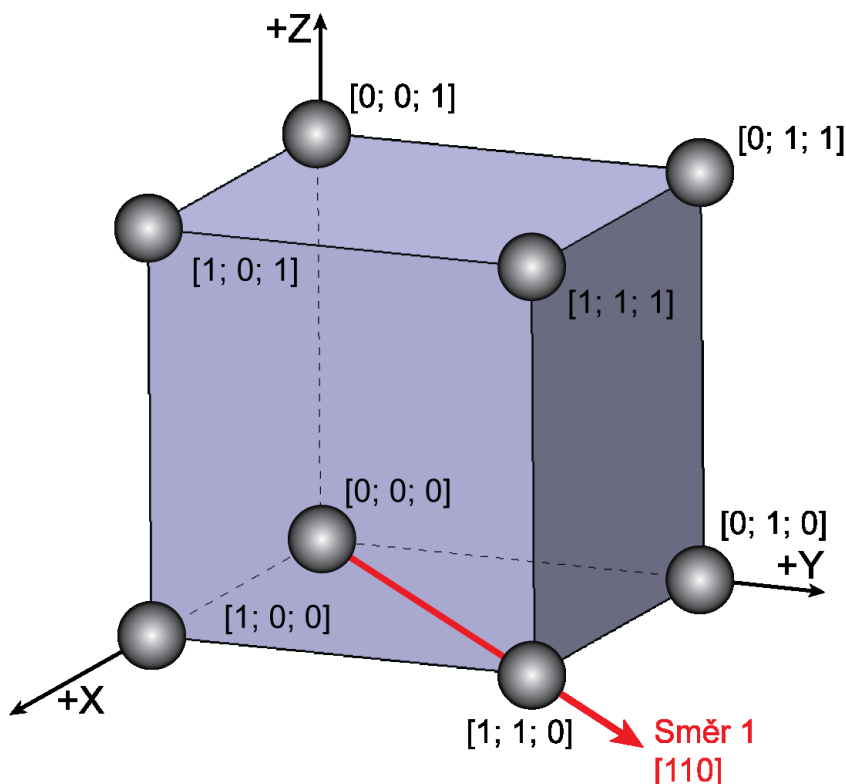
- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak MI-S

$$[1; 1; 0] \rightarrow \left[\frac{1; 1; 0}{1} \right] \rightarrow [1; 1; 0] \rightarrow [110]$$

- Millerovy indexy pro **směr 1** jsou **$[110]$**

Opačný směr:

$[0; 0; 0] - [1; 1; 0] \rightarrow [-1; -1; 0] \rightarrow$ v MI-S $[\bar{1}\bar{1}0]$



Obr. 5.1 Millerovy indexy směrů v kubické soustavě: **směr 1**

Příklad 5.2 Stanovte Millerovy indexy $[u \ v \ w]$ daného krystalografického **směru 2** v kubické soustavě.

Určit: MI-S pro směr 2 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Směr 2 (směr dán dle obrázku 5.2)

Řešení:

Směr 2 $\rightarrow$ body $[0; 0; 0]$ a $[1; 0; 1]$

- odečtení patového (zadního) a hlavového (předního) bodu v daném směru 1

$[1; 0; 1] - [0; 0; 0] \rightarrow [1; 0; 1]$

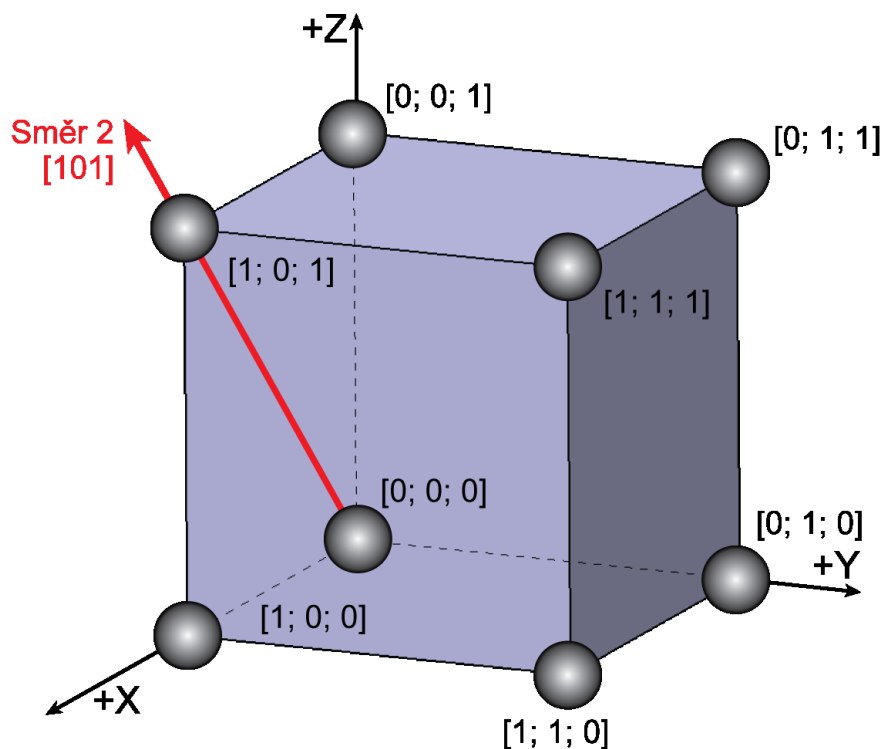
- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak MI-S

$$[1; 0; 1] \rightarrow \left[\frac{1; 0; 1}{1} \right] \rightarrow [1; 0; 1] \rightarrow [101]$$

- Millerovy indexy pro **směr 2** jsou **$[101]$**

Opačný směr:

$[0; 0; 0] - [1; 0; 1] \rightarrow [-1; 0; -1] \rightarrow$ v MI-S $[\bar{1}0\bar{1}]$



Obr. 5.2 Millerovy indexy směrů v kubické soustavě: **směr 2**

Příklad 5.3 Stanovte Millerovy indexy $[u \ v \ w]$ daného krystalografického **směru 3** v kubické soustavě.

Určit: MI-S pro směr 3 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Směr 3 (směr dán dle obrázku 5.3)

Řešení:

Směr 3 $\rightarrow$ body $[1/2; 1; 0]$ a $[0; 0; 1]$

- odečtení patového (zadního) a hlavového (předního) bodu v daném směru 3

$[0; 0; 1] - [1/2; 1; 0] \rightarrow [-1/2; -1; 1]$

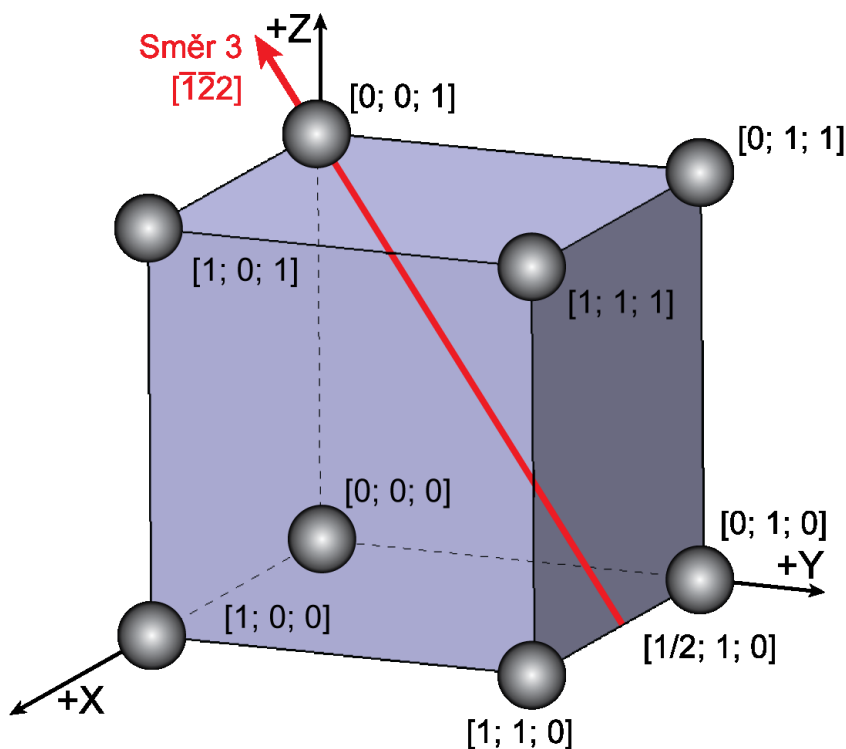
- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítecel je pak MI-S

$$\left[-\frac{1}{2}; -1; 1\right] \rightarrow \left[\frac{-1; -2; 2}{2}\right] \rightarrow [-1; -2; 2] \rightarrow [\bar{1} \bar{2} 2]$$

- Millerovy indexy pro **směr 3** jsou $[\bar{1} \bar{2} 2]$

Opačný směr:

$[1/2; 1; 0] - [0; 0; 1] \rightarrow [1/2; 1; -1] \rightarrow$ v MI-S $[12\bar{2}]$



Obr. 5.3 Millerovy indexy směrů v kubické soustavě: **směr 3**

Příklad 5.4 Stanovte Millerovy indexy $\langle u \ v \ w \rangle$ krystalograficky ekvivalentních směrů pro osy X, Y, Z v kubické soustavě.

Určit: MI-ES pro osy X, Y, Z v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Osy X, Y, Z

Řešení:

Ekvivalentní $\rightarrow$ rovnocenné (ohraničující tentýž mnohostěn)

- pozor na znaménka: $\langle u \ v \ w \rangle$ - soustava ekvivalentních směrů
 $[u \ v \ w]$ - jeden určitý směr

- zápis Millerových indexů směru pro jednotlivé osy (lze využít předešlé příklady):

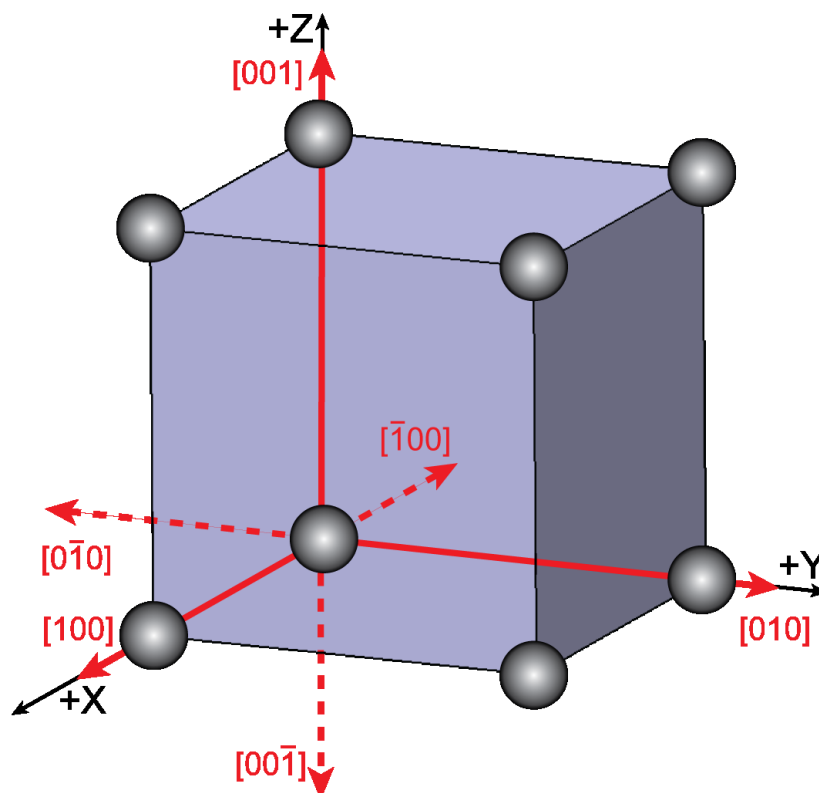
- **osa X:** $[100]$ + opačný směr $[\bar{1}00]$

- **osa Y:** $[010]$ + opačný směr $[0\bar{1}0]$

- **osa Z:** $[001]$ + opačný směr $[00\bar{1}]$

- z matematického pohledu se tedy vlastně jedná z zapsání všech možných kombinací jedné jedničky a dvou nul s přihlédnutím také k opačným směrům (celkem se tedy v tomto případě jedná o šest různých kombinací)

- Millerovy indexy krystalograficky ekvivalentních směrů pro osy X, Y, Z v kubické soustavě jsou: $\langle 100 \rangle = [100] + [010] + [001] + [\bar{1}00] + [0\bar{1}0] + [00\bar{1}]$



Obr. 5.4 Millerovy indexy krystalograficky ekvivalentních směrů pro osy X, Y, Z v kubické soustavě

BI-S: Směr 1 → body $[0; 0; 0]$ a $[1; 0; 0]$

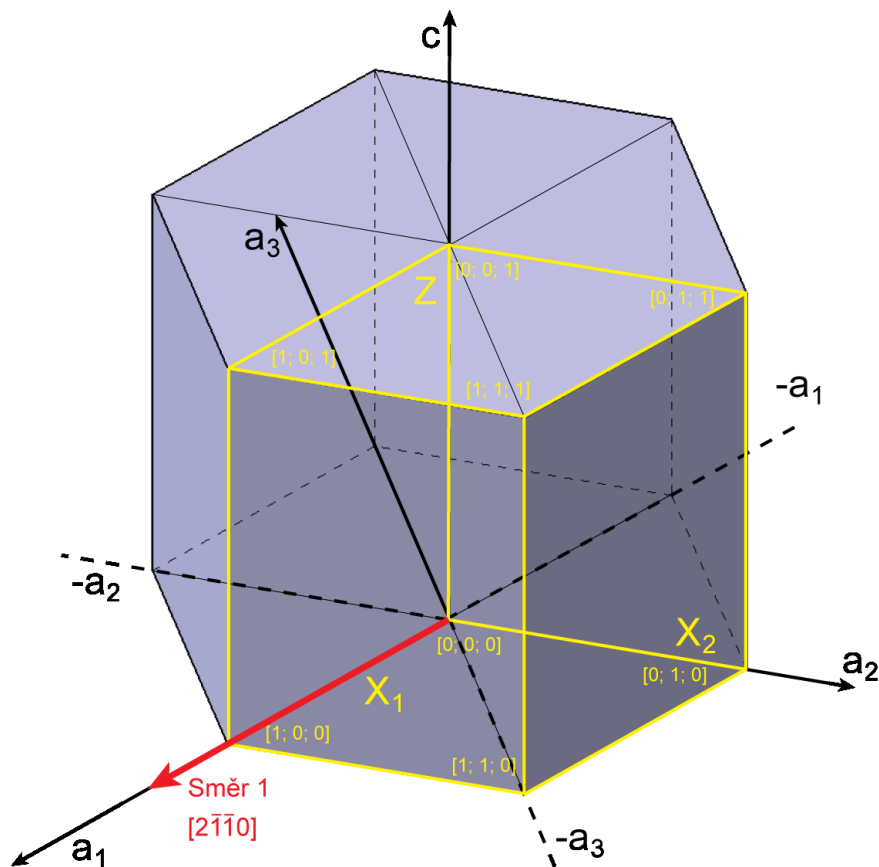
- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému → z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{3}(2u - v) \rightarrow \frac{1}{3}(2 \cdot 1 - 0) \rightarrow \frac{2}{3} \\ q &= \frac{1}{3}(2v - u) \rightarrow \frac{1}{3}(2 \cdot 0 - 1) \rightarrow -\frac{1}{3} \\ s &= -\frac{1}{3}(u + v) \rightarrow -\frac{1}{3}(1 + 0) \rightarrow -\frac{1}{3} \\ t = w &\rightarrow 0 \end{aligned}$$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak BI-S

$$\left[\frac{2}{3}; -\frac{1}{3}; -\frac{1}{3}; 0 \right] \rightarrow \left[\frac{2; -1; -1; 0}{3} \right] \rightarrow [2; -1; -1; 0] \rightarrow [2\bar{1}\bar{1}0]$$

- Bravaisovy indexy pro **směr 1** jsou **$[2\bar{1}\bar{1}0]$**



Obr. 5.6 Bravaisovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směr 1**

Příklad 5.6 Stanovte Millerovy $[u \ v \ w]$ a Bravaisovy $[p \ q \ s \ t]$ indexy daného krystalografického **směru 2** v hexagonální soustavě.

Určit: MI-S a BI-S pro směr 2 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Směr 2 (směr dán dle obrázku 5.7)

Řešení:

MI-S: Směr 2 $\rightarrow$ body $[0; 0; 0]$ a $[0; 1; 0]$

- odečtení patového (zadního) a hlavového (předního) bodu v daném směru 2

$[0; 1; 0] - [0; 0; 0] \rightarrow [0; 1; 0]$

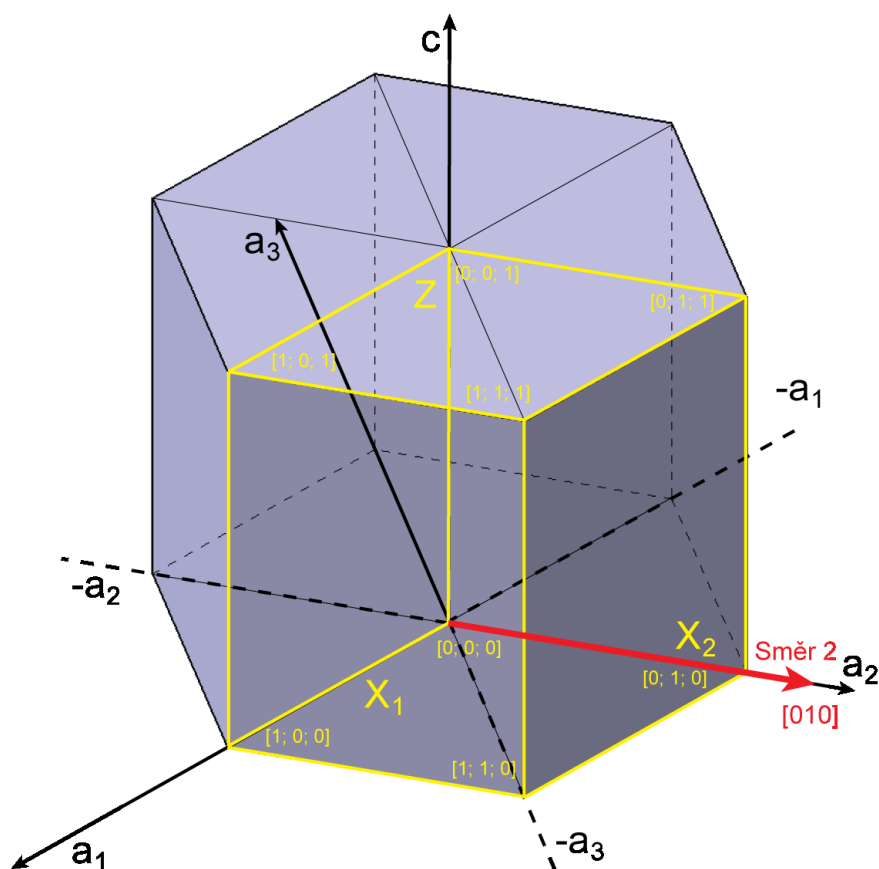
- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak MI-S

$$[0; 1; 0] \rightarrow \left[\frac{0; 1; 0}{1} \right] \rightarrow [0; 1; 0] \rightarrow [010]$$

- Millerovy indexy pro **směr 2** jsou **$[010]$**

Opačný směr:

$[0; 0; 0] - [0; 1; 0] \rightarrow [0; -1; 0] \rightarrow$ v MI-S $[0\bar{1}0]$



Obr. 5.7 Millerovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směr 2**

BI-S: Směr 2 → body $[0; 0; 0]$ a $[0; 1; 0]$

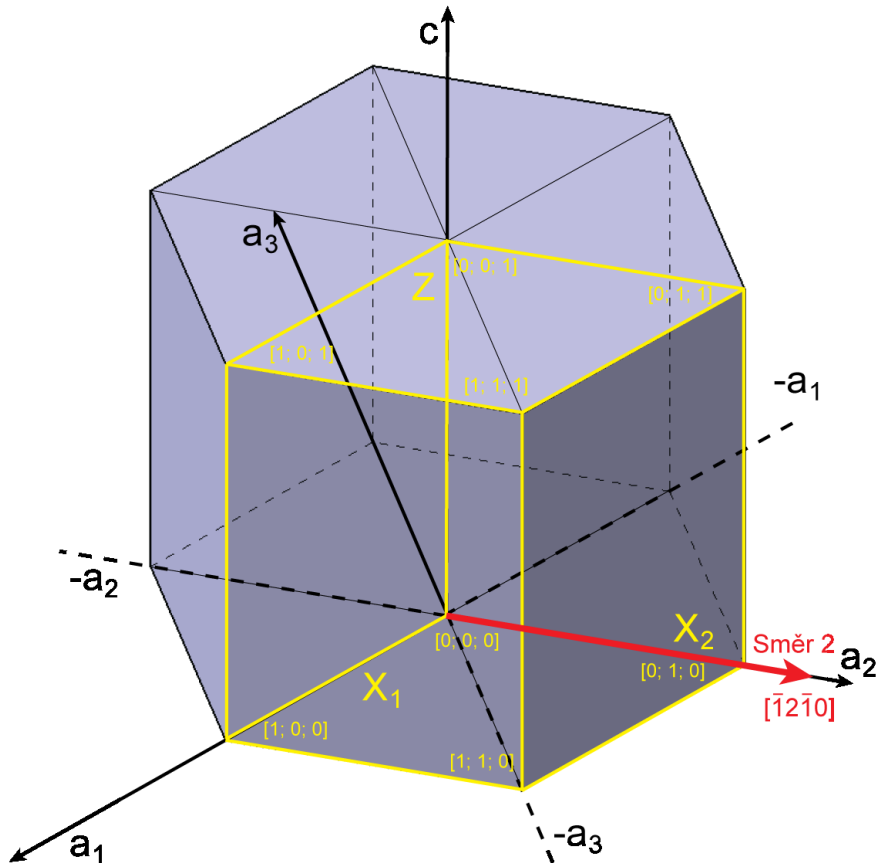
- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému → z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{3}(2u - v) \rightarrow \frac{1}{3}(2 \cdot 0 - 1) \rightarrow -\frac{1}{3} \\ q &= \frac{1}{3}(2v - u) \rightarrow \frac{1}{3}(2 \cdot 1 - 0) \rightarrow \frac{2}{3} \\ s &= -\frac{1}{3}(u + v) \rightarrow -\frac{1}{3}(0 + 1) \rightarrow -\frac{1}{3} \\ t = w &\rightarrow 0 \end{aligned}$$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak BI-S

$$\left[-\frac{1}{3}; \frac{2}{3}; -\frac{1}{3}; 0\right] \rightarrow \left[\frac{-1; 2; -1; 0}{3}\right] \rightarrow [-1; 2; -1; 0] \rightarrow [\bar{1} 2 \bar{1} 0]$$

- Bravaisovy indexy pro **směr 2** jsou $[\bar{1} 2 \bar{1} 0]$



Obr. 5.8 Bravaisovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směr 2**

Příklad 5.7 Stanovte Millerovy $[u \ v \ w]$ a Bravaisovy $[p \ q \ s \ t]$ indexy daného krystalografického **směru 3** v hexagonální soustavě.

Určit: MI-S a BI-S pro směr 3 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Směr 3 (směr dán dle obrázku 5.9)

Řešení:

MI-S: Směr 3 $\rightarrow$ body $[0; 0; 0]$ a $[-1; -1; 0]$

- odečtení patového (zadního) a hlavového (předního) bodu v daném směru 3

$[-1; -1; 0] - [0; 0; 0] \rightarrow [-1; -1; 0]$

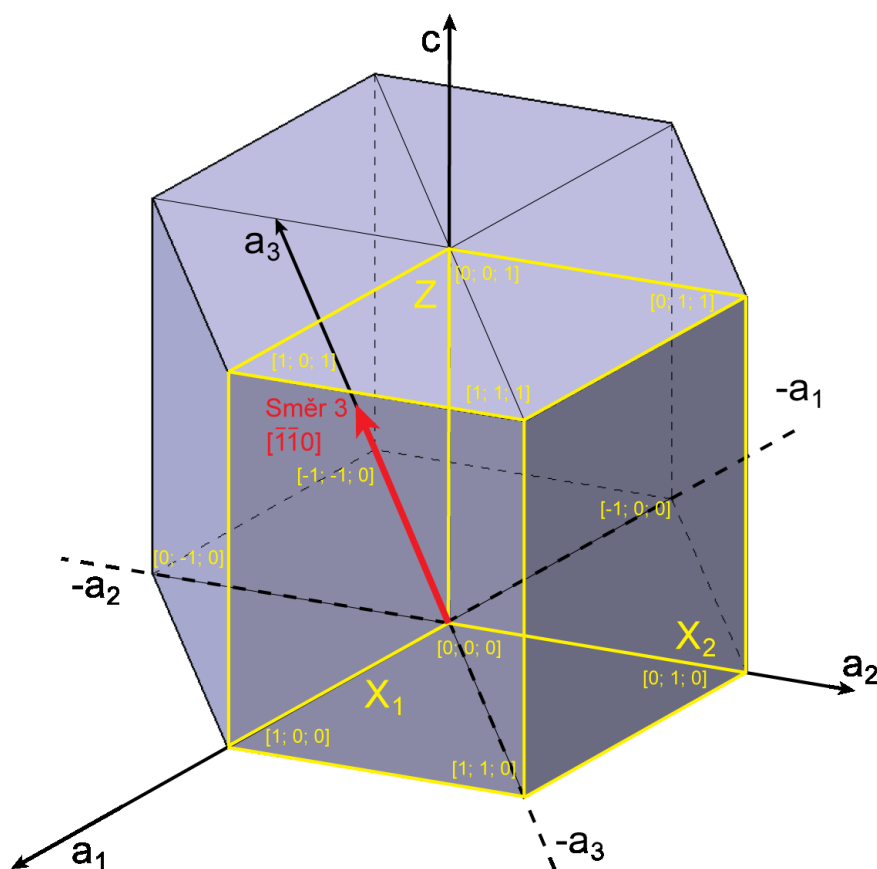
- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak MI-S

$$[-1; -1; 0] \rightarrow \left[\frac{-1; -1; 0}{1} \right] \rightarrow [-1; -1; 0] \rightarrow [\bar{1} \ \bar{1} \ 0]$$

- Millerovy indexy pro **směr 3** jsou $[\bar{1}\bar{1}0]$

Opačný směr:

$[0; 0; 0] - [-1; -1; 0] \rightarrow [1; 1; 0] \rightarrow$ v MI-S $[110]$



Obr. 5.9 Millerovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směr 3**

BI-S: Směr 3 → body $[0; 0; 0]$ a $[-1; -1; 0]$

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému → z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

$$p = \frac{1}{3}(2u - v) \rightarrow \frac{1}{3}[2 \cdot (-1) - (-1)] \rightarrow -\frac{1}{3}$$

$$q = \frac{1}{3}(2v - u) \rightarrow \frac{1}{3}[2 \cdot (-1) - (-1)] \rightarrow -\frac{1}{3}$$

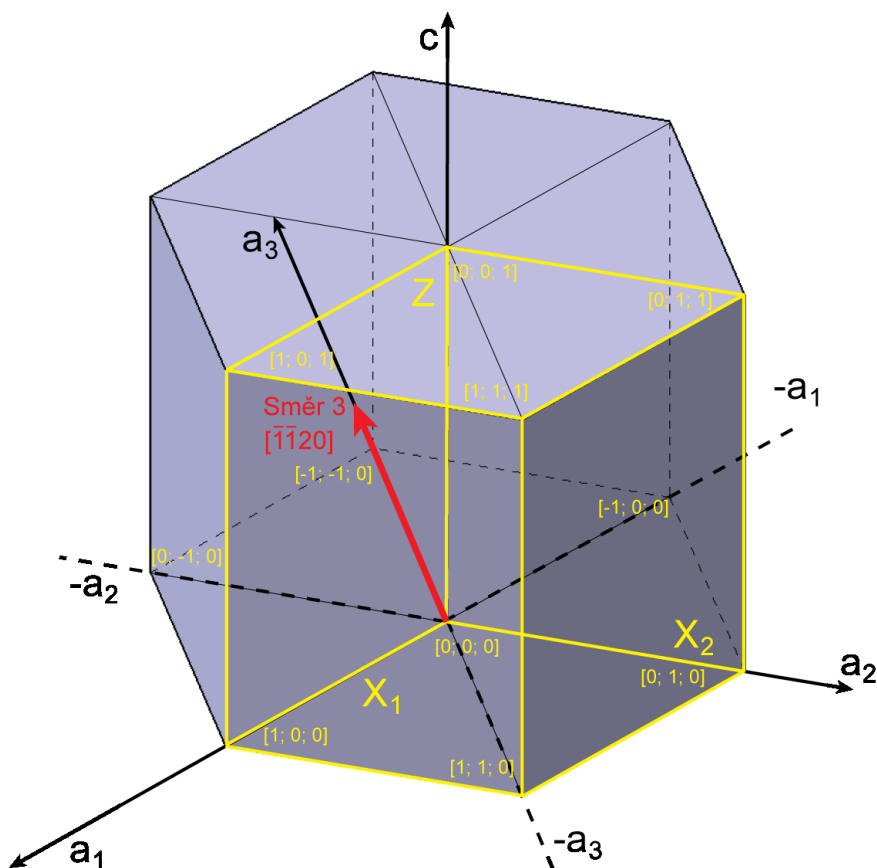
$$s = -\frac{1}{3}(u + v) \rightarrow -\frac{1}{3}[(-1) + (-1)] \rightarrow \frac{2}{3}$$

$$t = w \rightarrow 0 \rightarrow 0$$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak BI-S

$$\left[-\frac{1}{3}; -\frac{1}{3}; \frac{2}{3}; 0\right] \rightarrow \left[\frac{-1; -1; 2; 0}{3}\right] \rightarrow [-1; -1; 2; 0] \rightarrow [\bar{1} \bar{1} 20]$$

- Bravaisovy indexy pro **směr 3** jsou $[\bar{1}\bar{1}20]$



Obr. 5.10 Bravaisovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směr 3**

Příklad 5.8 Stanovte Millerovy **[u v w]** a Bravaisovy **[p q s t]** indexy daného krystalografického **směru 4** v hexagonální soustavě.

Určit: MI-S a BI-S pro směr 4 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Směr 4 (směr dán dle obrázku 5.11)

Řešení:

MI-S: Směr 4 → body $[0; 0; 0]$ a $[0; 0; 1]$

- odečtení patového (zadního) a hlavového (předního) bodu v daném směru 4

$[0; 0; 1] - [0; 0; 0] \rightarrow [0; 0; 1]$

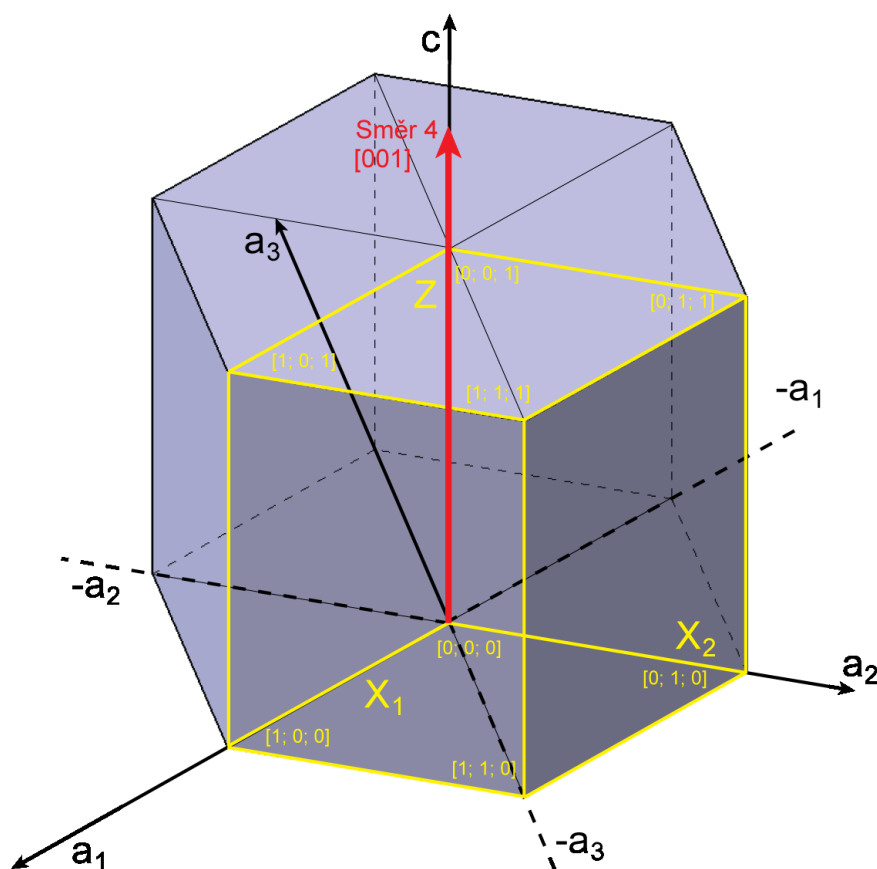
- převedení na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-S

$$[0; 0; 1] \rightarrow \left[\frac{0; 0; 1}{1} \right] \rightarrow [0; 0; 1] \rightarrow [001]$$

- Millerovy indexy pro **směr 4** jsou **[001]**

Opačný směr:

$[0; 0; 0] - [0; 0; 1] \rightarrow [0; 0; -1] \rightarrow$ v MI-S $[00\bar{1}]$



Obr. 5.11 Millerovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směr 4**

BI-S: Směr 4 → body $[0; 0; 0]$ a $[0; 0; 1]$

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému → z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

$$p = \frac{1}{3}(2u - v) \rightarrow \frac{1}{3}(2 \cdot 0 - 0) \rightarrow 0$$

$$q = \frac{1}{3}(2v - u) \rightarrow \frac{1}{3}(2 \cdot 0 - 0) \rightarrow 0$$

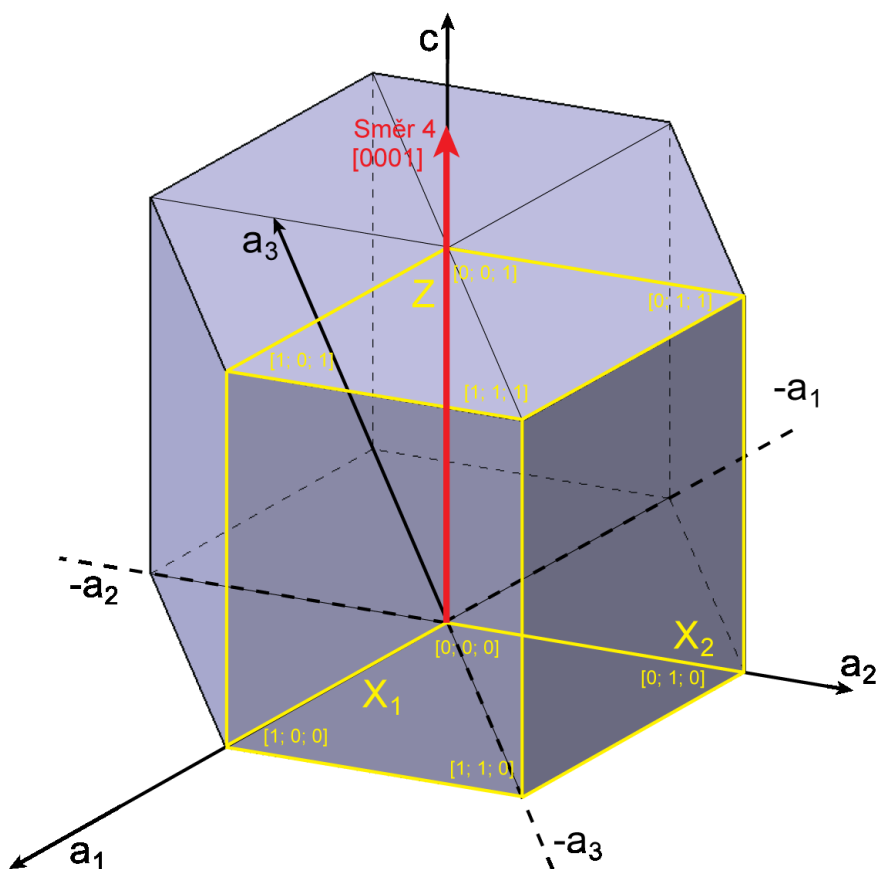
$$s = -\frac{1}{3}(u + v) \rightarrow -\frac{1}{3}(0 + 0) \rightarrow 0$$

$$t = w \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak BI-S

$$[0; 0; 0; 1] \rightarrow \left[\frac{0; 0; 0; 1}{1} \right] \rightarrow [0; 0; 0; 1] \rightarrow [0001]$$

- Bravaisovy indexy pro **směr 4** jsou **[0001]**



Obr. 5.12 Bravaisovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směr 4**

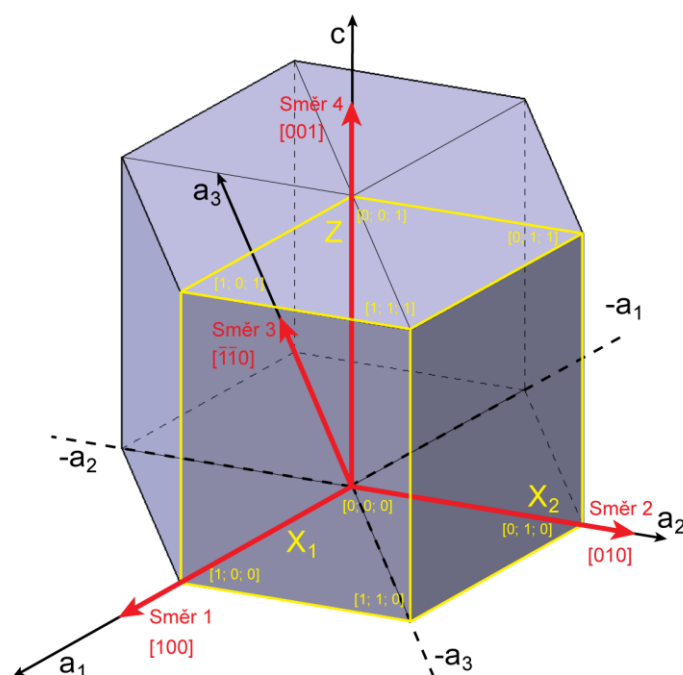
Příklad 5.9 Graficky znázorněte Millerovy $[u \ v \ w]$ a Bravaisovy $[p \ q \ s \ t]$ indexy předešlých krystalografických **směrů 1 až 4** v hexagonální soustavě.

Určit: MI-S a BI-S pro směry 1 až 4 v hexagonální soustavě

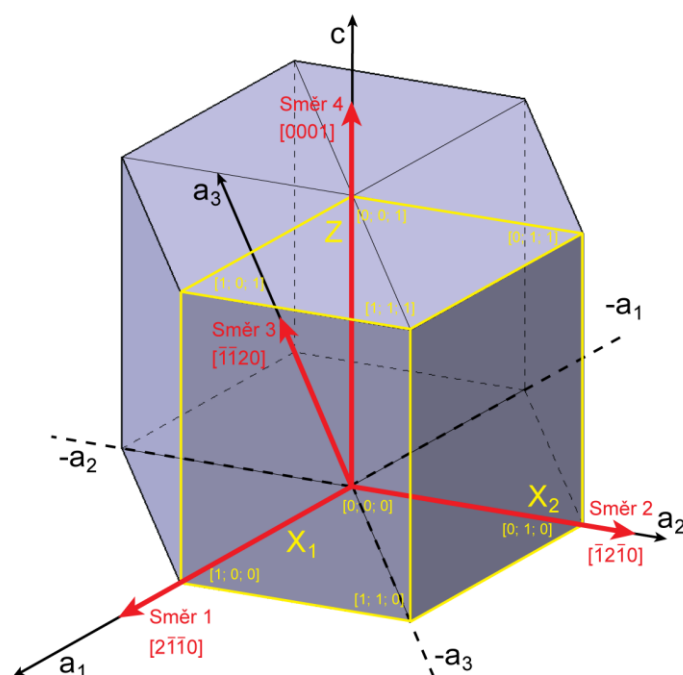
Zadáno: Hexagonální soustava

Směry 1 až 4 (směry dány dle obrázku 5.13)

Řešení:



Obr. 5.13 Millerovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směry 1 až 4**



Obr. 5.14 Bravaisovy indexy směrů v hexagonální soustavě: **směry 1 až 4**



Příklad 5.10 Stanovte Millerovy indexy (**h k l**) krystalografické **roviny 1** v kubické soustavě. Tato rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: 2, 2, 1.

Určit: MI-R pro rovinu 1 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 1 (dané vytknuté úseky na osách X, Y, Z - viz obr. 5.15)

Řešení:

Rovina 1 → vytknuté úseky: 2, 2, 1 → **2a, 2b, 1c**

- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 1

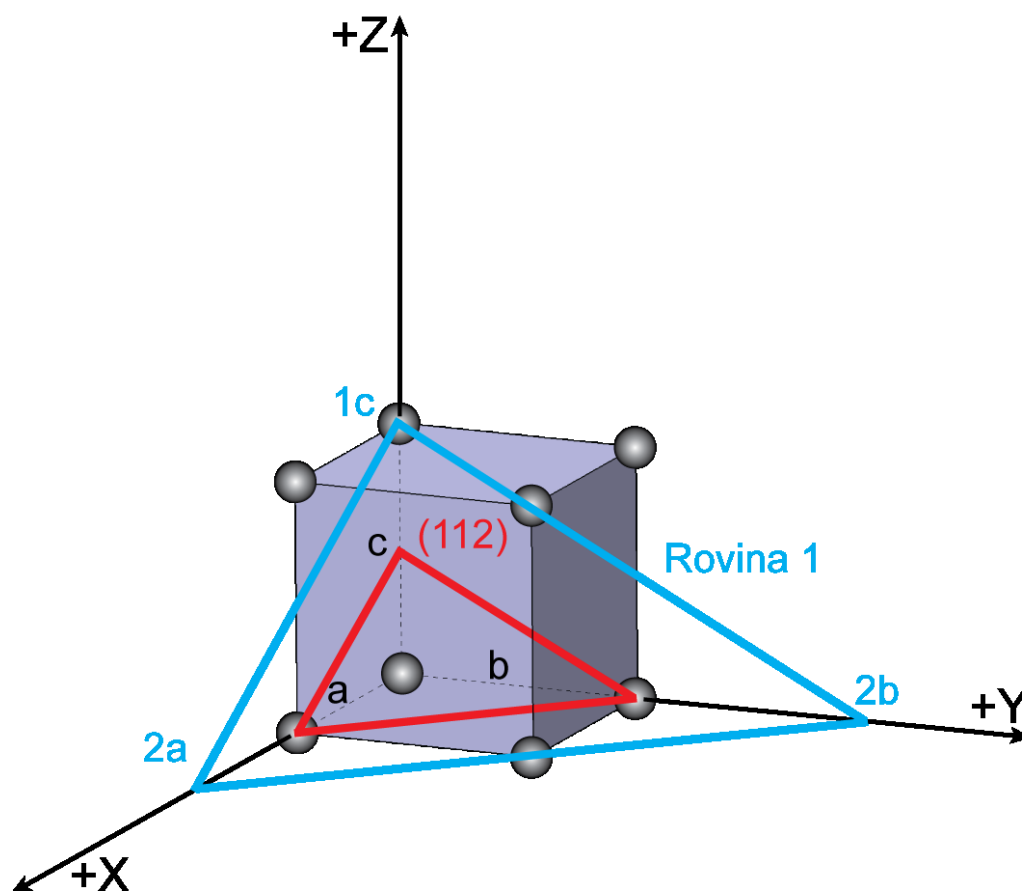
$$\frac{2}{1}, \frac{2}{1}, \frac{1}{1} \rightarrow \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1}$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1} \rightarrow \frac{1,1,2}{2} \rightarrow 1,1,2 \rightarrow (112)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 1** jsou **(112)**

(2 znamená dva úseky na ose Z → 1/2 na ose Z)



Obr. 5.15 Millerovy indexy rovin v kubické soustavě: **rovinu 1**

Příklad 5.11 Stanovte Millerovy indexy (**h k l**) krystalografické **roviny 2** v kubické soustavě. Tato rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: 3, 1, 2.

Určit: MI-R pro rovinu 2 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 2 (dané vytknuté úseky na osách X, Y, Z - viz obr. 5.16)

Řešení:

Rovina 2 → vytknuté úseky: 3, 1, 2 → **3a, 1b, 2c**

- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 2

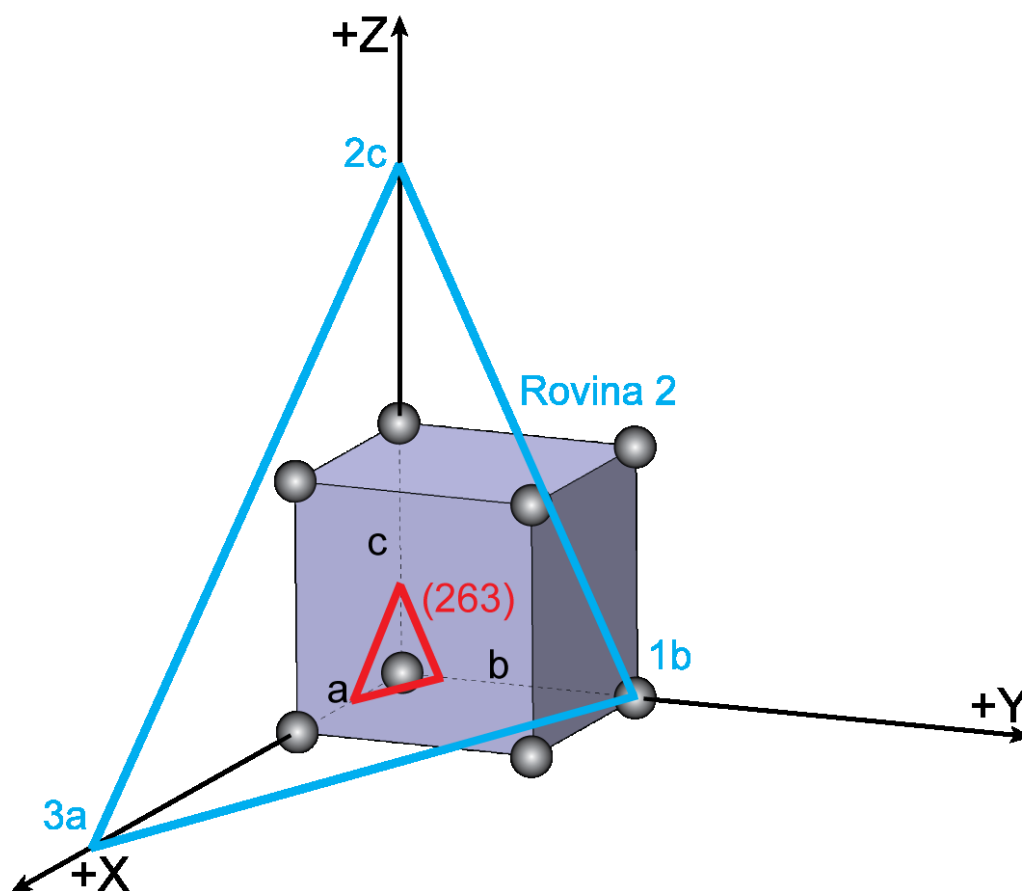
$$\frac{3}{1}, \frac{1}{1}, \frac{2}{1} \rightarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2}$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$\frac{1}{3}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2} \rightarrow \frac{2,6,3}{6} \rightarrow 2,6,3 \rightarrow (263)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 2** jsou **(263)**

(2 znamená dva úseky na ose X → 1/2 na ose X, 1/6 na ose Y a 1/3 na ose Z)



Obr. 5.16 Millerovy indexy rovin v kubické soustavě: **rovinu 2**

Příklad 5.12 Stanovte Millerovy indexy (**h k l**) krystalografické **roviny 3** v kubické soustavě. Tato rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: $1/2$, $1/3$, ∞ .

Určit: MI-R pro rovinu 3 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 3 (dané vytknuté úseky na osách X, Y, Z - viz obr. 5.17)

Řešení:

Rovina 3 $\rightarrow$ vytknuté úseky: $1/2$, $1/3$, $\infty \rightarrow 1/2a$, $1/3b$, $c = \infty$

- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 3

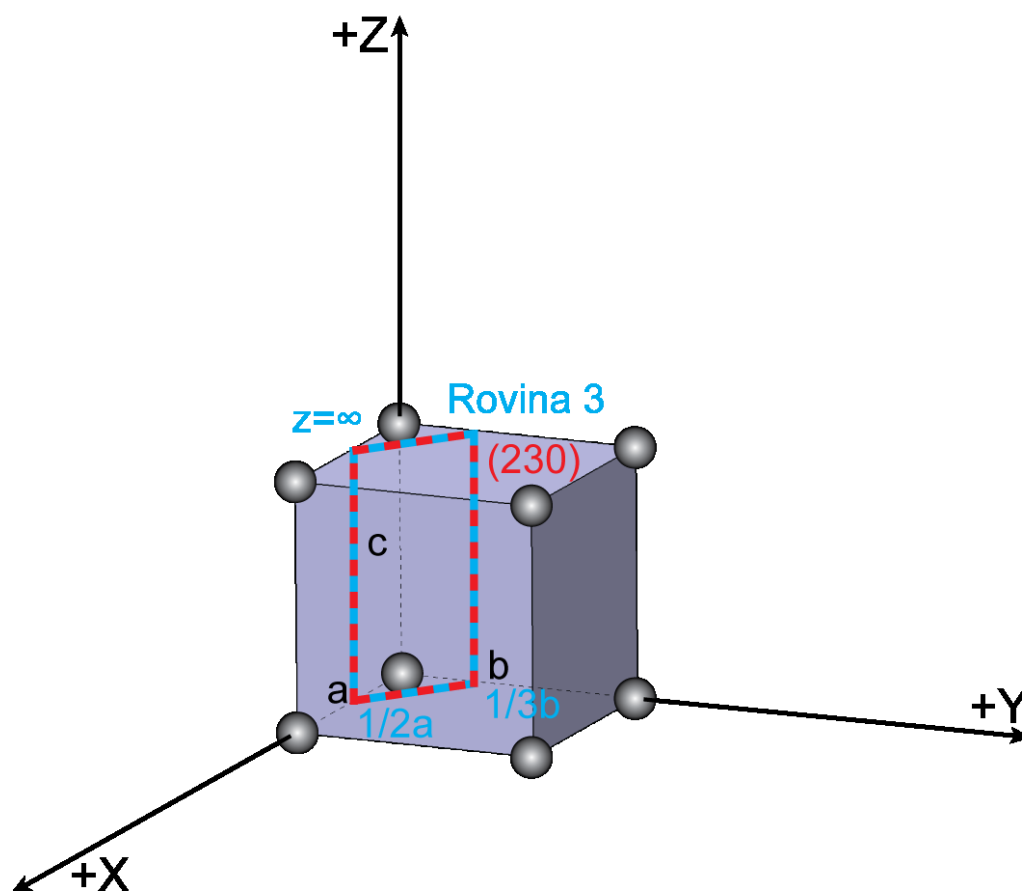
$$\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{\infty} \rightarrow \frac{2}{1}, \frac{3}{1}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 2, 3, 0$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$2, 3, 0 \rightarrow \frac{2, 3, 0}{1} \rightarrow 2, 3, 0 \rightarrow (230)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 3** jsou **(230)**

(0 znamená žádný úsek na ose Z $\rightarrow \infty$ na ose Z; obě roviny jsou shodné)



Obr. 5.17 Millerovy indexy rovin v kubické soustavě: **rovinu 3**

Příklad 5.13 Stanovte Millerovy indexy (**h k l**) krystalografické **roviny 4** v kubické soustavě. Tato rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: 1, ∞ , ∞ .

Určit: MI-R pro rovinu 4 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 4 (dané vytknuté úseky na osách X, Y, Z - viz obr. 5.18)

Řešení:

Rovina 4 $\rightarrow$ vytknuté úseky: 1, ∞ , $\infty \rightarrow 1a, b = \infty, c = \infty$

- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 4

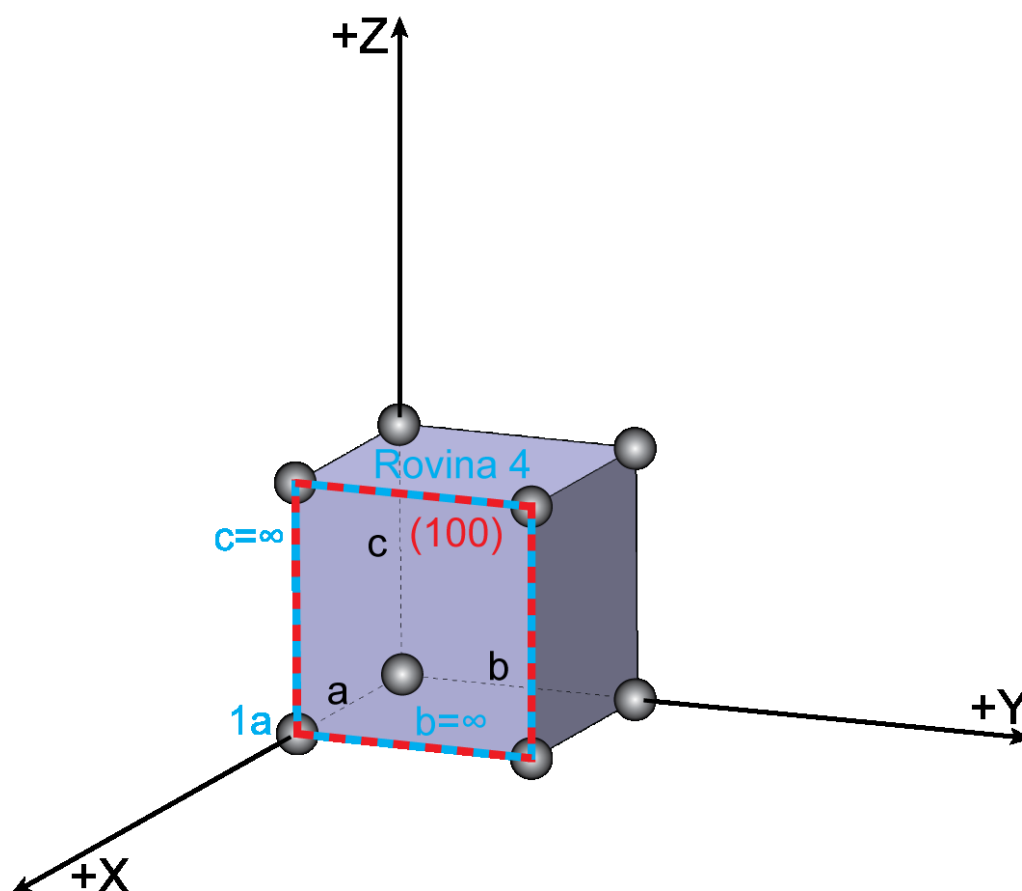
$$1, \infty, \infty \rightarrow \frac{1}{1}, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 1, 0, 0$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak MI-R

$$1, 0, 0 \rightarrow \frac{1, 0, 0}{1} \rightarrow 1, 0, 0 \rightarrow (100)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 4** jsou **(100)**

(0 znamená žádné úseky na osách $\rightarrow \infty$ na těchto osách; obě roviny jsou shodné)



Obr. 5.18 Millerovy indexy rovin v kubické soustavě: **rovina 4**



Příklad 5.14 Stanovte Millerovy indexy (**h k l**) krystalografické **roviny 5** v kubické soustavě. Tato rovina na osách X, Y, Z vytíná následující úseky: -1, ∞, ∞.

Určit: MI-R pro rovinu 5 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 5 (dané vytknuté úseky na osách X, Y, Z - viz obr. 5.19)

Řešení:

Rovina 5 → vytknuté úseky: -1, ∞, ∞ → **-1 a, b = ∞, c = ∞**

- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 5

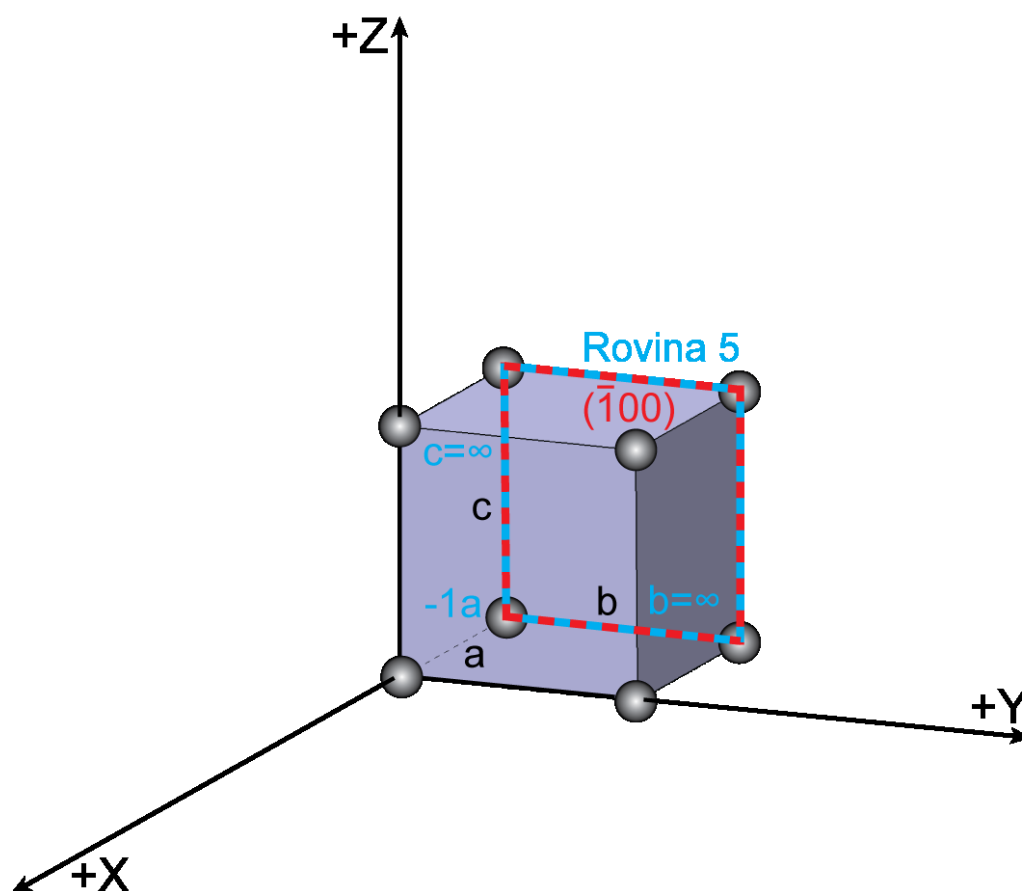
$$-\frac{1}{1}, \frac{\infty}{1}, \frac{\infty}{1} \rightarrow -\frac{1}{1}, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty} \rightarrow -1, 0, 0$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$-1, 0, 0 \rightarrow \frac{-1, 0, 0}{1} \rightarrow -1, 0, 0 \rightarrow (\bar{1}00)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 5** jsou **($\bar{1}00$)**

(0 znamená žádné úseky na osách → ∞ na těchto osách; obě roviny jsou shodné)



Obr. 5.19 Millerovy indexy rovin v kubické soustavě: **rovina 5**

Příklad 5.15 Stanovte Millerovy indexy $\{h\ k\ l\}$ krystalograficky ekvivalentních rovin pro plochy stěn mřížky v kubické soustavě.

Určit: MI-ER pro plochy stěn mřížky v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Plochy stěn mřížky v kubické soustavě

Řešení:

Ekvivalentní $\rightarrow$ rovnocenné (ohraničující tentýž mnohostěn)

- pozor na znaménka: $\{h\ k\ l\}$ - soustava ekvivalentních rovin
(h k l) - jedna určitá rovina

- zápis Millerových indexů rovin pro hledané plochy (lze využít předešlé příklady):

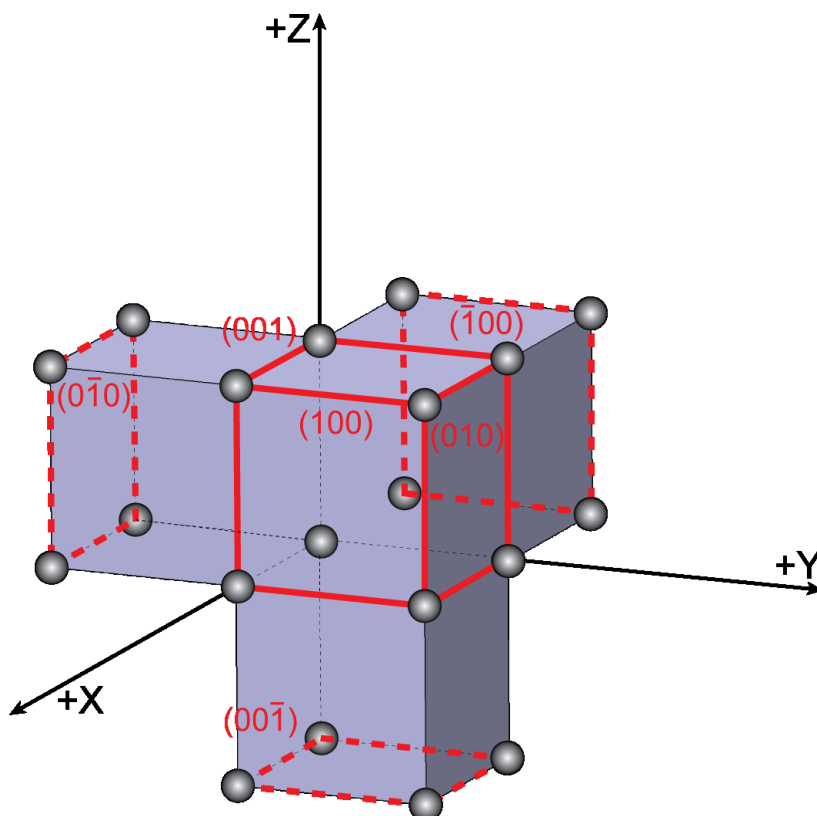
- **plocha YZ:** (100) + opačná rovina $(\bar{1}00)$

- **plocha ZX:** (010) + opačná rovina $(0\bar{1}0)$

- **plocha XY:** (001) + opačná rovina $(00\bar{1})$

- z matematického pohledu se tedy opět vlastně jedná z zapsání všech možných kombinací jedné jedničky a dvou nul s přihlédnutím také k opačným směrům (celkem se tedy znovu v tomto případě jedná o šest různých kombinací)

- Millerovy indexy krystalograficky ekvivalentních rovin pro plochy stěn mřížky v kubické soustavě jsou: $\{100\} = (100) + (010) + (001) + (\bar{1}00) + (0\bar{1}0) + (00\bar{1})$



Obr. 5.20 Millerovy indexy krystalograficky ekvivalentních rovin pro plochy stěn mřížky v kubické soustavě

Příklad 5.16 Stanovte Millerovy (**h k l**) a Bravaisovy (**h k i l**) indexy dané krystalografické **roviny 1** v hexagonální soustavě. V ortohexagonální rovině vytíná tato rovina 1 na osách X_1 , X_2 , Z následující úseky: 1, ∞ , ∞ .

Určit: MI-R a BI-R pro rovinu 1 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 1 (poloha dána dle obrázku 5.21)

Řešení:

MI-R: Rovina 1 $\rightarrow$ vytknuté úseky: 1, ∞ , ∞

- průsečíky roviny 1 v ortohexagonální soustavě (X_1 , X_2 , Z) tedy jsou: 1, ∞ , ∞

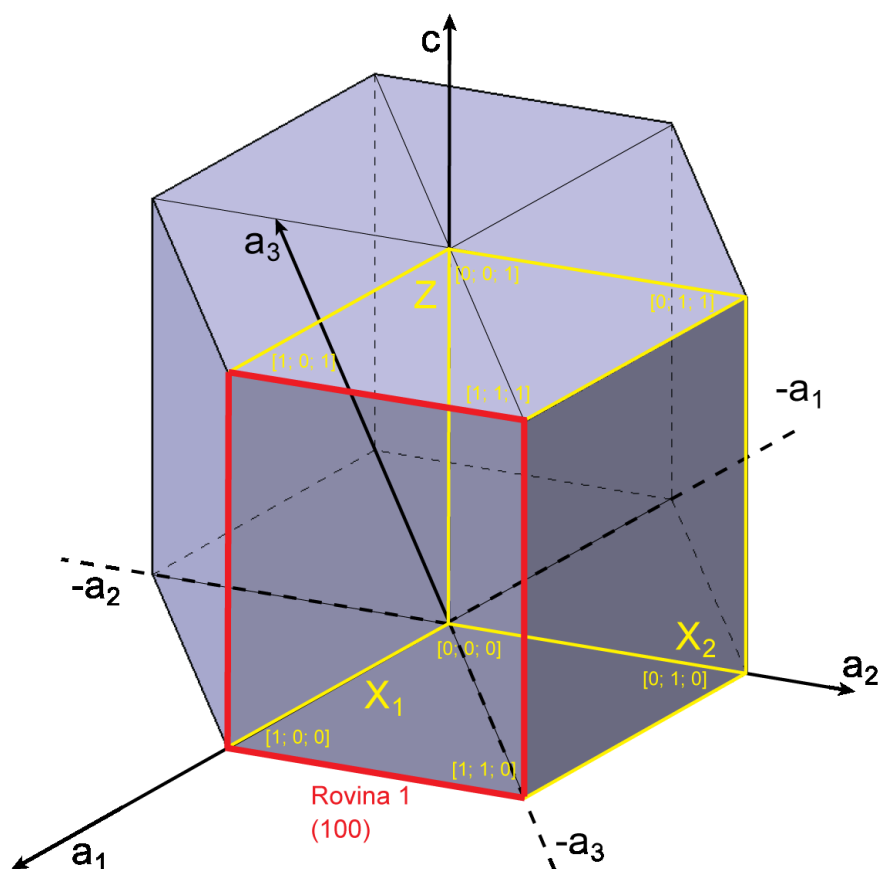
- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 1

$$1, \infty, \infty \rightarrow \frac{1}{1}, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 1, 0, 0$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$1, 0, 0 \rightarrow \frac{1, 0, 0}{1} \rightarrow 1, 0, 0 \rightarrow (100)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 1** jsou **(100)**



Obr. 5.21 Millerovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 1**

BI-S: Rovina 1

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému $\rightarrow$ z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

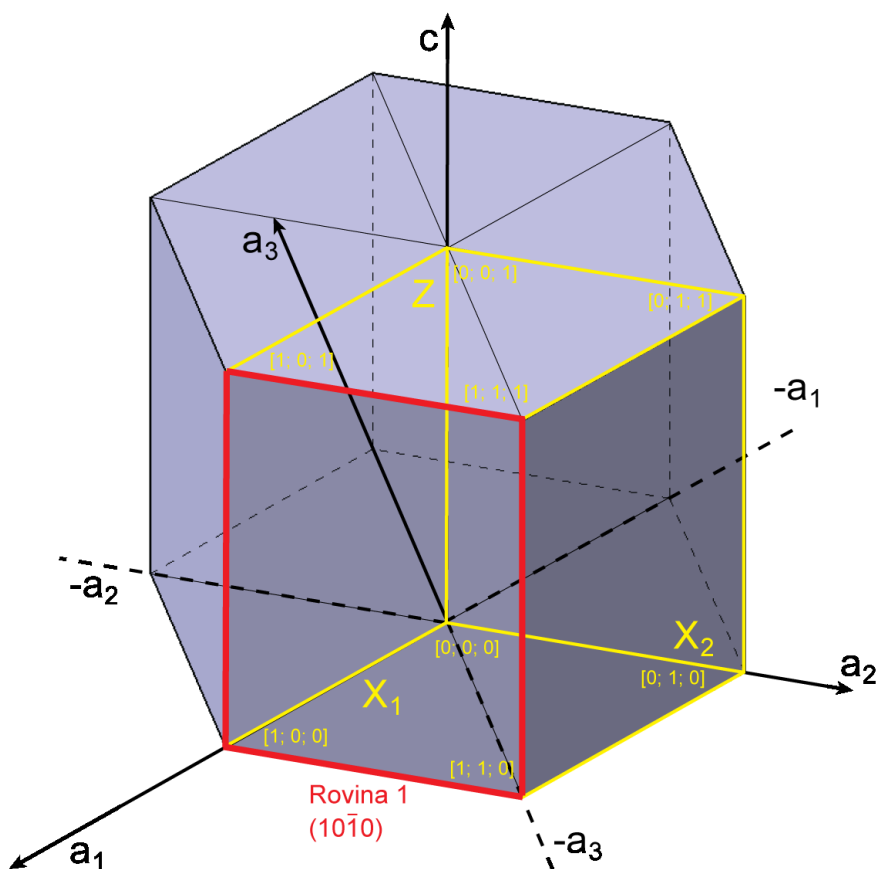
$h = h$	$\rightarrow 1$	$\rightarrow 1$
$k = k$	$\rightarrow 0$	$\rightarrow 0$
$i = -(h + k)$	$\rightarrow -(1 + 0)$	$\rightarrow -1$
$l = l$	$\rightarrow 0$	$\rightarrow 0$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak BI-R

$$1, 0, -1, 0 \rightarrow \frac{1, 0, -1, 0}{1} \rightarrow 1, 0, -1, 0 \rightarrow (10\bar{1}0)$$

- Bravaisovy indexy pro **rovinu 1** jsou **$(10\bar{1}0)$**

(je zřejmé, že se vlastně jedná o průsečíky roviny 1 s hexagonální soustavou o souřadnicích: $a_1; a_2; a_3; c$)



Obr. 5.22 Bravaisovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 1**

Příklad 5.17 Stanovte Millerovy (**h k l**) a Bravaisovy (**h k i l**) indexy dané krystalografické **roviny 2** v hexagonální soustavě. V ortohexagonální rovině vytíná tato rovina 2 na osách X_1 , X_2 , Z následující úseky: 1, -1, ∞ .

Určit: MI-R a BI-R pro rovinu 2 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 2 (poloha dána dle obrázku 5.23)

Řešení:

MI-R: Rovina 2 $\rightarrow$ vytknuté úseky: 1, -1, ∞

- průsečíky roviny 2 v ortohexagonální soustavě (X_1 , X_2 , Z) tedy jsou: **1, -1, ∞**

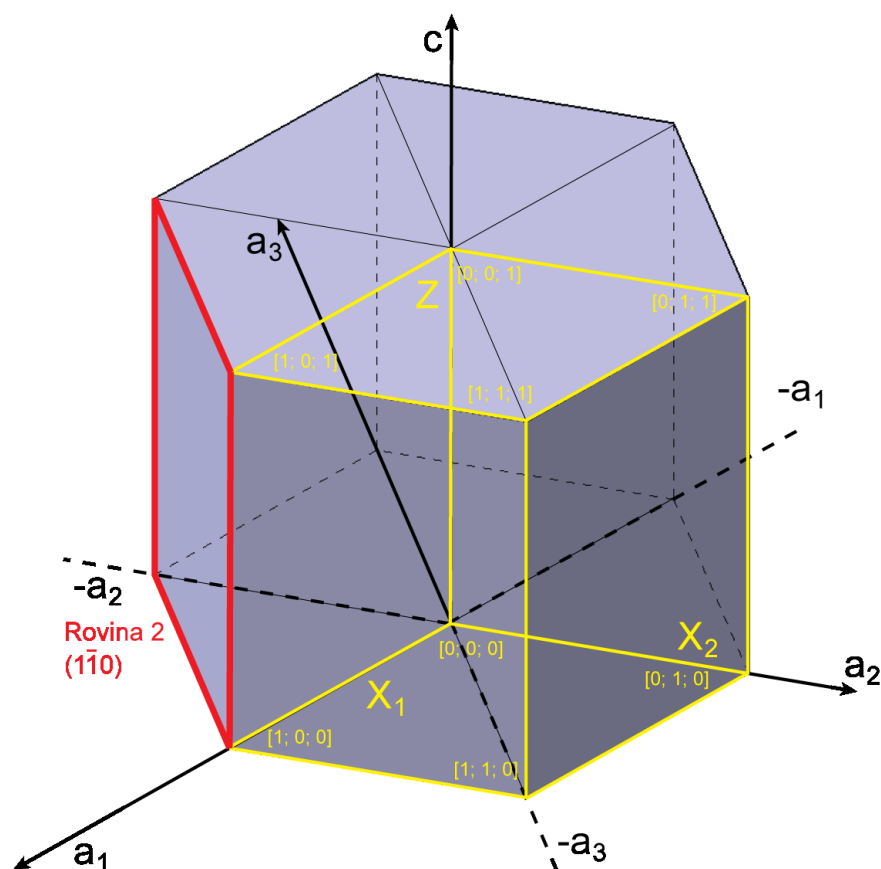
- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 2

$$1, -1, \infty \rightarrow \frac{1}{1}, -\frac{1}{1}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 1, -1, 0$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$1, -1, 0 \rightarrow \frac{1, -1, 0}{1} \rightarrow 1, -1, 0 \rightarrow (1 \bar{1} 0)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 2** jsou **(1 $\bar{1}$ 0)**



Obr. 5.23 Millerovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 2**

BI-S: Rovina 2

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému $\rightarrow$ z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

$$h = h \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

$$k = k \rightarrow -1 \rightarrow -1$$

$$i = -(h + k) \rightarrow -[1 + (-1)] \rightarrow 0$$

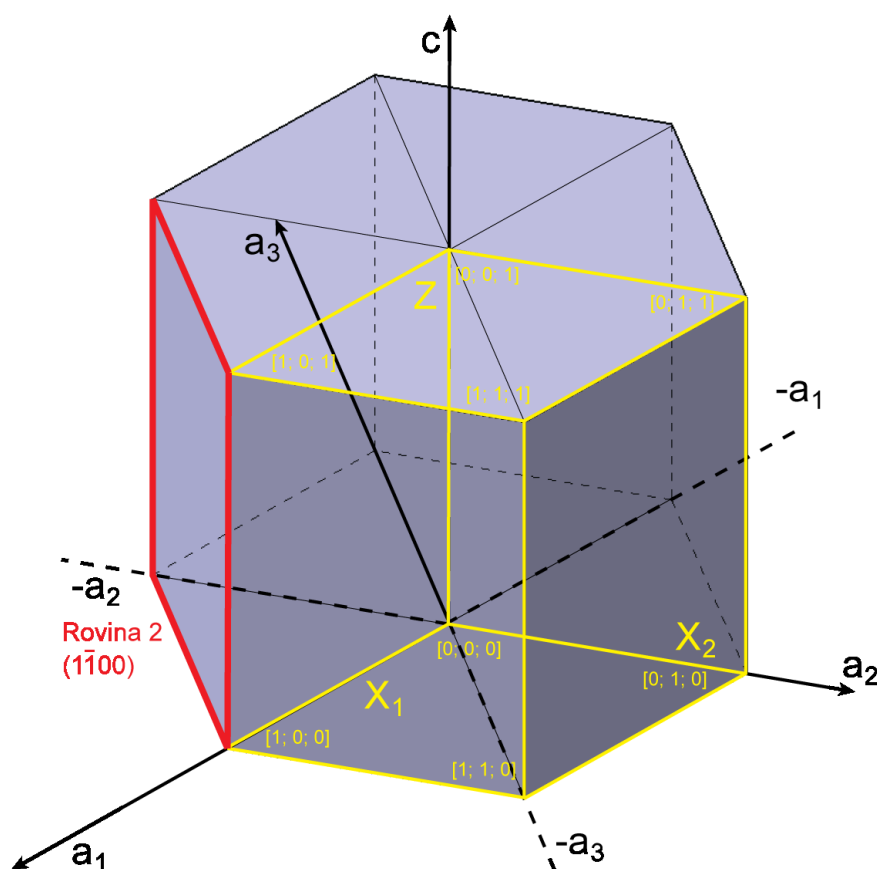
$$l = l \rightarrow 0 \rightarrow 0$$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak BI-R

$$1, -1, 0, 0 \rightarrow \frac{1, -1, 0, 0}{1} \rightarrow 1, -1, 0, 0 \rightarrow (1 \bar{1} 00)$$

- Bravaisovy indexy pro **rovinu 2** jsou **$(1\bar{1}00)$**

(je zřejmé, že se vlastně jedná o průsečíky roviny 2 s hexagonální soustavou o souřadnicích: $a_1; a_2; a_3; c$)



Obr. 5.24 Bravaisovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 2**

Příklad 5.18 Stanovte Millerovy (**h k l**) a Bravaisovy (**h k i l**) indexy dané krystalografické **roviny 3** v hexagonální soustavě. V ortohehexagonální rovině vytíná tato rovina 3 na osách X_1, X_2, Z následující úseky: $\infty, \infty, 1$.

Určit: MI-R a BI-R pro rovinu 3 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 3 (poloha dána dle obrázku 5.25)

Řešení:

MI-R: Rovina 3 → vytknuté úseky: $\infty, \infty, 1$

- průsečíky roviny 3 v ortohehexagonální soustavě (X_1, X_2, Z) tedy jsou: $\infty, \infty, 1$

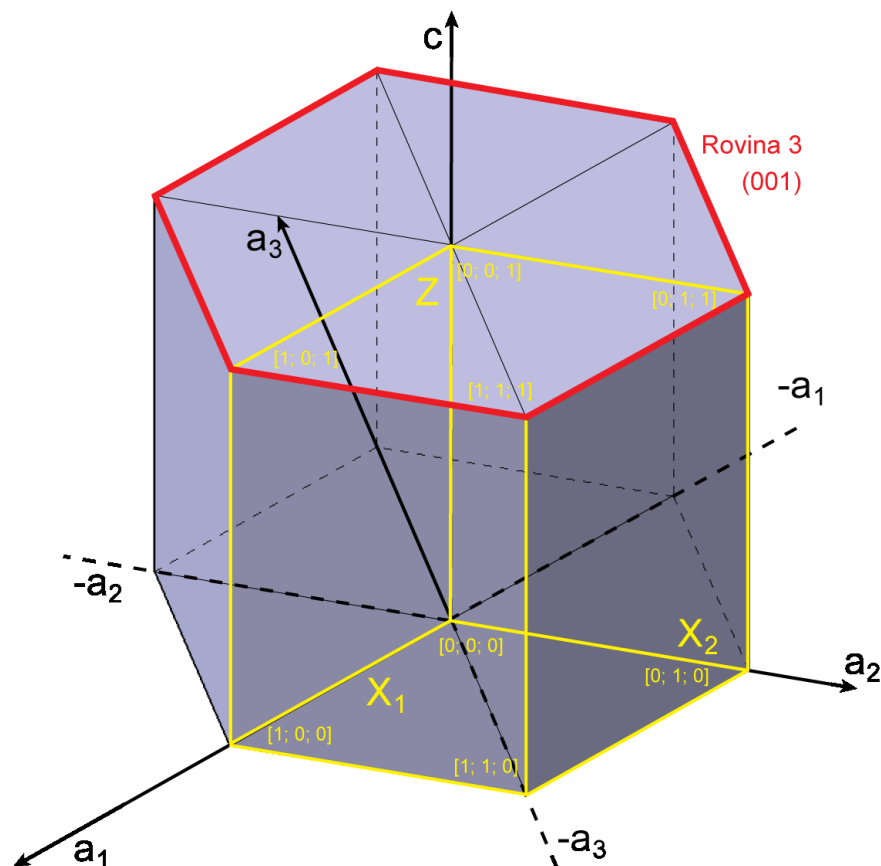
- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 3

$$\infty, \infty, 1 \rightarrow \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{1} \rightarrow 0, 0, 1$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a čísel je pak MI-R

$$0,0,1 \rightarrow \frac{0,0,1}{1} \rightarrow 0,0,1 \rightarrow (001)$$

- Millerovy indexy pro rovinu 3 jsou (001)



Obr. 5.25 Millerovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 3**

BI-S: Rovina 3

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému $\rightarrow$ z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

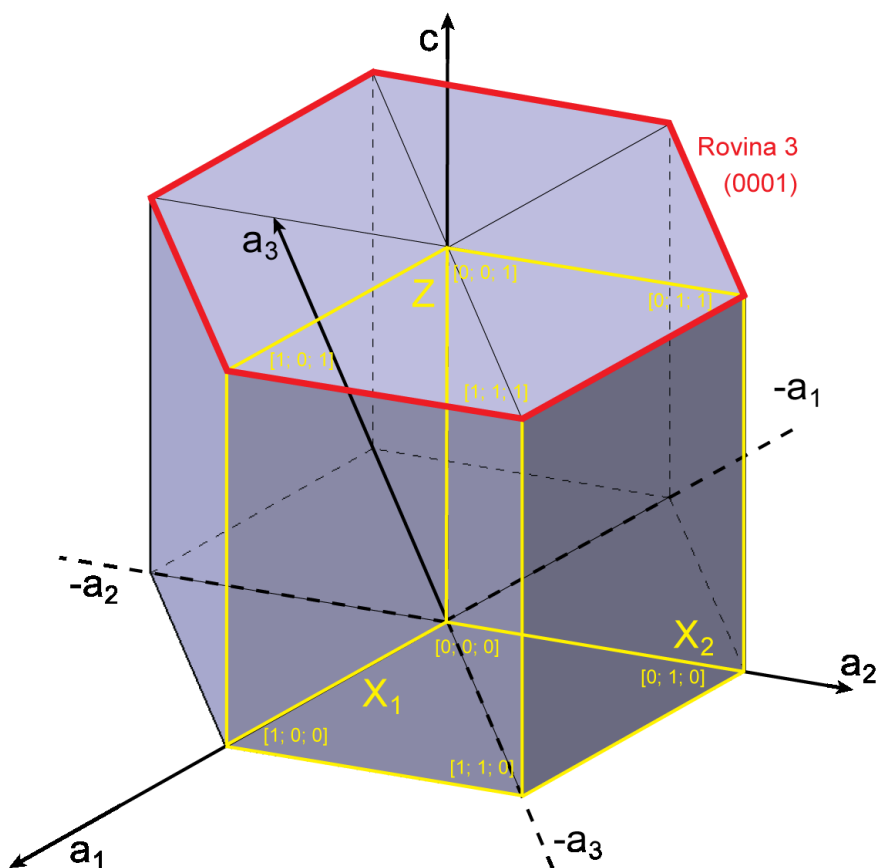
$h = h$	$\rightarrow 0$	$\rightarrow 0$
$k = k$	$\rightarrow 0$	$\rightarrow 0$
$i = -(h + k)$	$\rightarrow -(0 + 0)$	$\rightarrow 0$
$l = l$	$\rightarrow 1$	$\rightarrow 1$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak BI-R

$$0,0,0,1 \rightarrow \frac{0,0,0,1}{1} \rightarrow 0,0,0,1 \rightarrow (0001)$$

- Bravaisovy indexy pro **rovinu 3** jsou **(0001)**

(je zřejmé, že se vlastně jedná o průsečíky roviny 3 s hexagonální soustavou o souřadnicích: $a_1; a_2; a_3; c$)



Obr. 5.26 Bravaisovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 3**

Příklad 5.19 Stanovte Millerovy (**h k l**) a Bravaisovy (**h k i l**) indexy dané krystalografické **roviny 4** v hexagonální soustavě. V ortohexagonální rovině vytíná tato rovina 4 na osách X_1 , X_2 , Z následující úseky: 1, 1, ∞ .

Určit: MI-R a BI-R pro rovinu 4 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 4 (poloha dána dle obrázku 5.27)

Řešení:

MI-R: Rovina 4 $\rightarrow$ vytknuté úseky: 1, 1, ∞

- průsečíky roviny 4 v ortohexagonální soustavě (X_1 , X_2 , Z) tedy jsou: **1, 1, ∞**

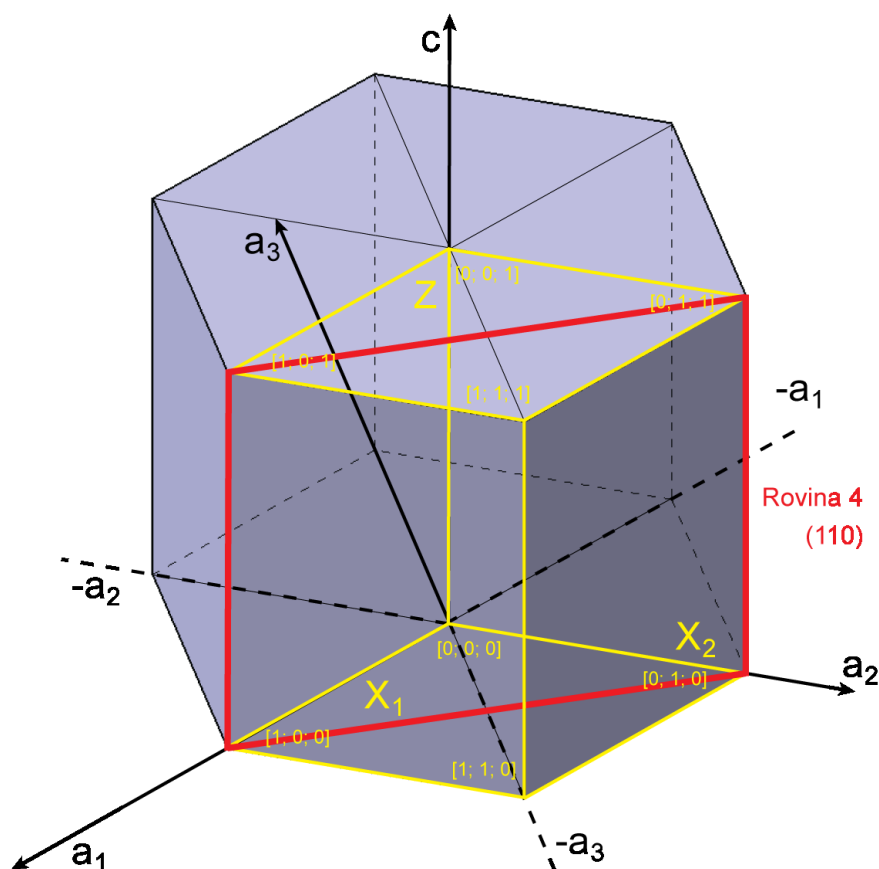
- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 4

$$1, 1, \infty \rightarrow \frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{\infty} \rightarrow 1, 1, 0$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$1, 1, 0 \rightarrow \frac{1, 1, 0}{1} \rightarrow 1, 1, 0 \rightarrow (110)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 4** jsou **(110)**



Obr. 5.27 Millerovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 4**

BI-S: Rovina 4

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému $\rightarrow$ z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

$$h = h \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

$$k = k \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

$$i = -(h + k) \rightarrow -(1 + 1) \rightarrow -2$$

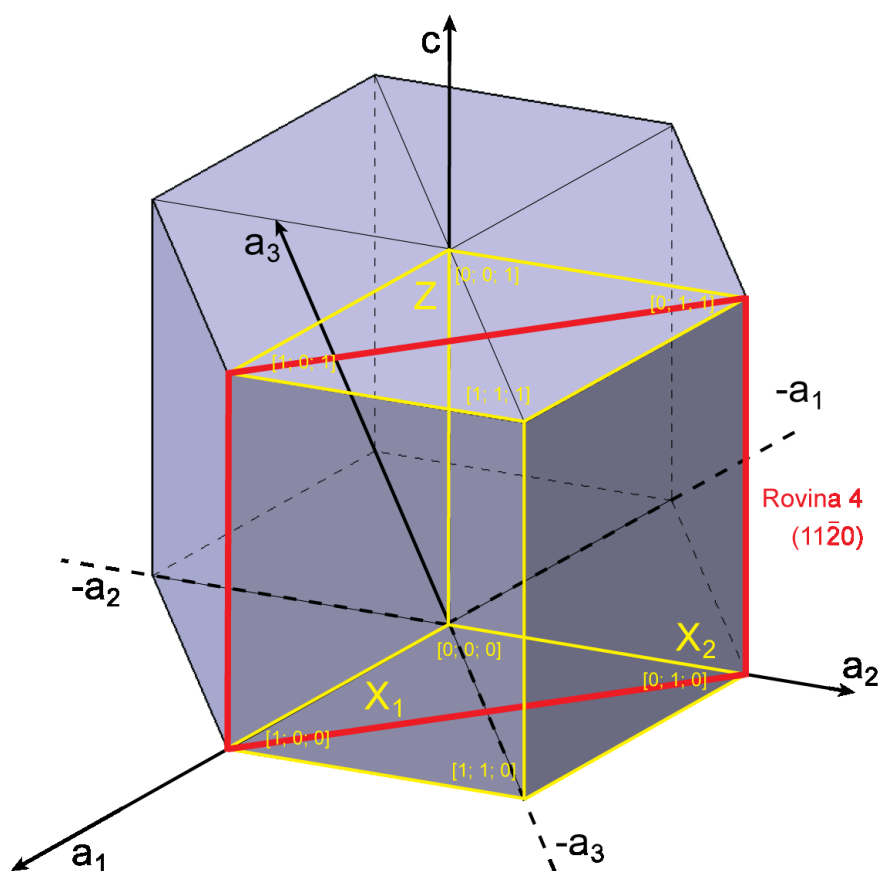
$$l = l \rightarrow 0 \rightarrow 0$$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak BI-R

$$1, 1, -2, 0 \rightarrow \frac{1, 1, -2, 0}{1} \rightarrow 1, 1, -2, 0 \rightarrow (11\bar{2}0)$$

- Bravaisovy indexy pro **rovinu 4** jsou **$(11\bar{2}0)$**

(je zřejmé, že se vlastně jedná o průsečíky roviny 4 s hexagonální soustavou o souřadnicích: $a_1; a_2; a_3; c$)



Obr. 5.28 Bravaisovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 4**

Příklad 5.20 Stanovte Millerovy (**h k l**) a Bravaisovy (**h k i l**) indexy dané krystalografické **roviny 5** v hexagonální soustavě. V ortohexagonální rovině vytíná tato rovina 5 na osách X_1 , X_2 , Z následující úseky: 1, 1, 1.

Určit: MI-R a BI-R pro rovinu 5 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 5 (poloha dána dle obrázku 5.29)

Řešení:

MI-R: Rovina 5 $\rightarrow$ vytknuté úseky: 1, 1, 1

- průsečíky roviny 5 v ortohexagonální soustavě (X_1 , X_2 , Z) tedy jsou: **1, 1, 1**

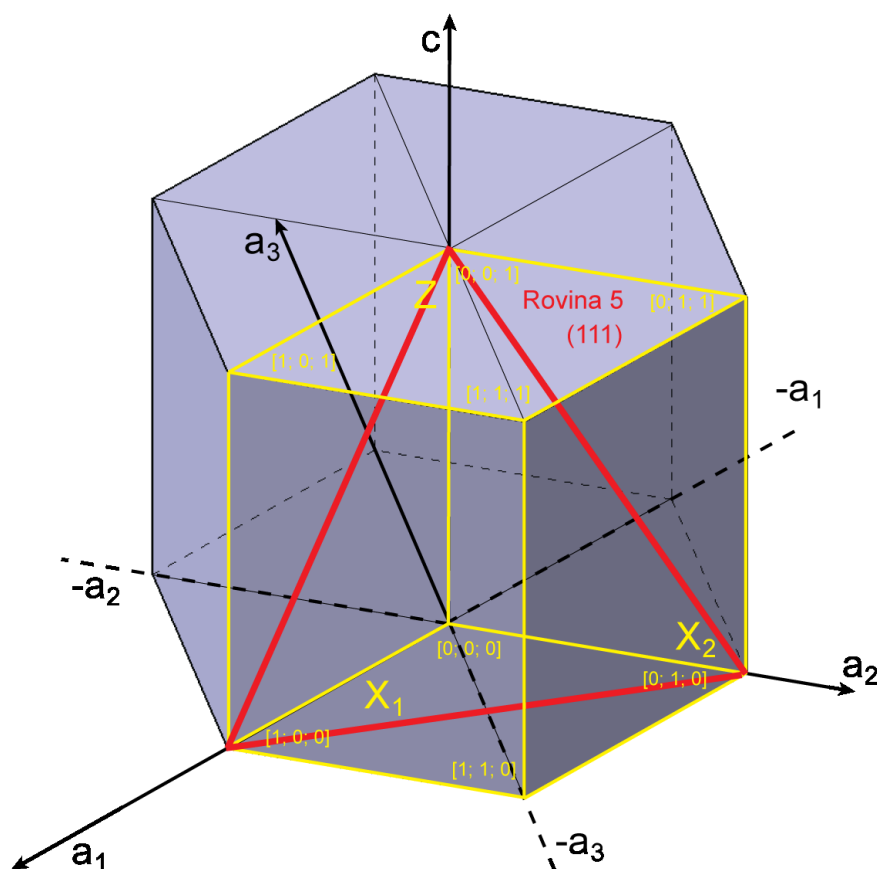
- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 5

$$1, 1, 1 \rightarrow \frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{1} \rightarrow 1, 1, 1$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$1, 1, 1 \rightarrow \frac{1, 1, 1}{1} \rightarrow 1, 1, 1 \rightarrow (111)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 5** jsou **(111)**



Obr. 5.29 Millerovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 5**

BI-S: Rovina 5

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému $\rightarrow$ z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

$$h = h \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

$$k = k \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

$$i = -(h + k) \rightarrow -(1 + 1) \rightarrow -2$$

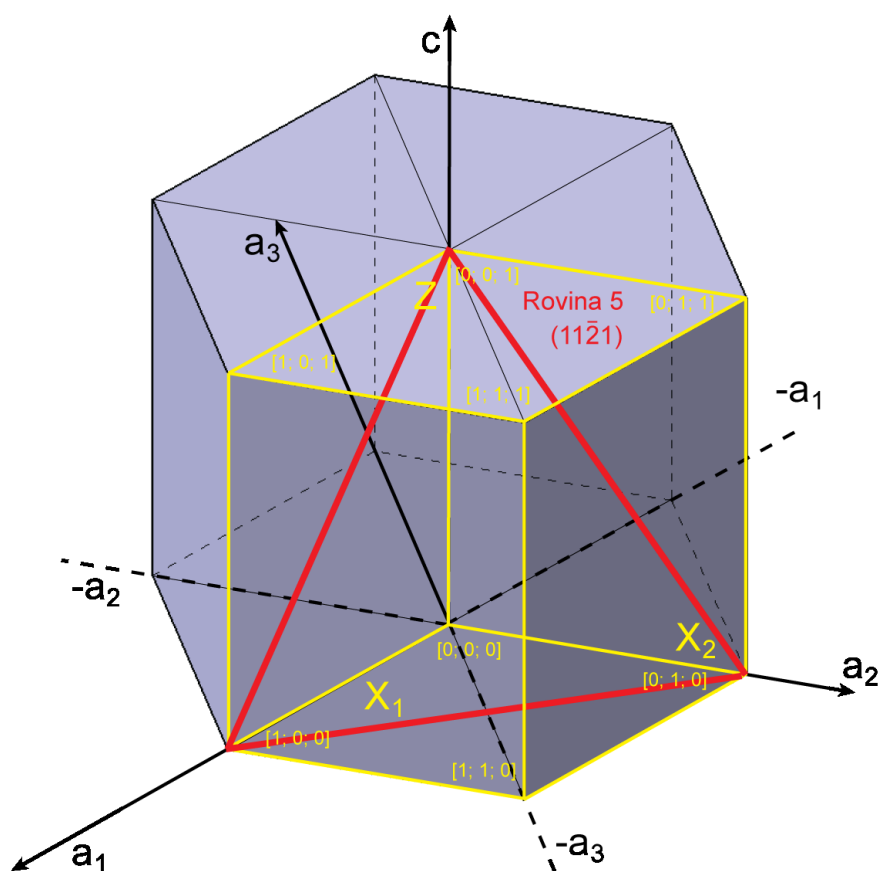
$$l = l \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak BI-R

$$1, 1, -2, 1 \rightarrow \frac{1, 1, -2, 1}{1} \rightarrow 1, 1, -2, 1 \rightarrow (11\bar{2}1)$$

- Bravaisovy indexy pro **rovinu 5** jsou **$(11\bar{2}1)$**

(je zřejmé, že se vlastně jedná o průsečíky roviny 5 s hexagonální soustavou o souřadnicích: $a_1; a_2; a_3; c$)



Obr. 5.30 Bravaisovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 5**

Příklad 5.21 Stanovte Millerovy (**h k l**) a Bravaisovy (**h k i l**) indexy dané krystalografické **roviny 6** v hexagonální soustavě. V ortohexagonální rovině vytíná tato rovina 6 na osách X_1 , X_2 , Z následující úseky: 1, $1/2$, $1/2$.

Určit: MI-R a BI-R pro rovinu 6 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 6 (poloha dána dle obrázku 5.31)

Řešení:

MI-R: Rovina 6 $\rightarrow$ vytknuté úseky: 1, $1/2$, $1/2$

- průsečíky roviny 5 v ortohexagonální soustavě (X_1 , X_2 , Z) tedy jsou: **1, $1/2$, $1/2$**

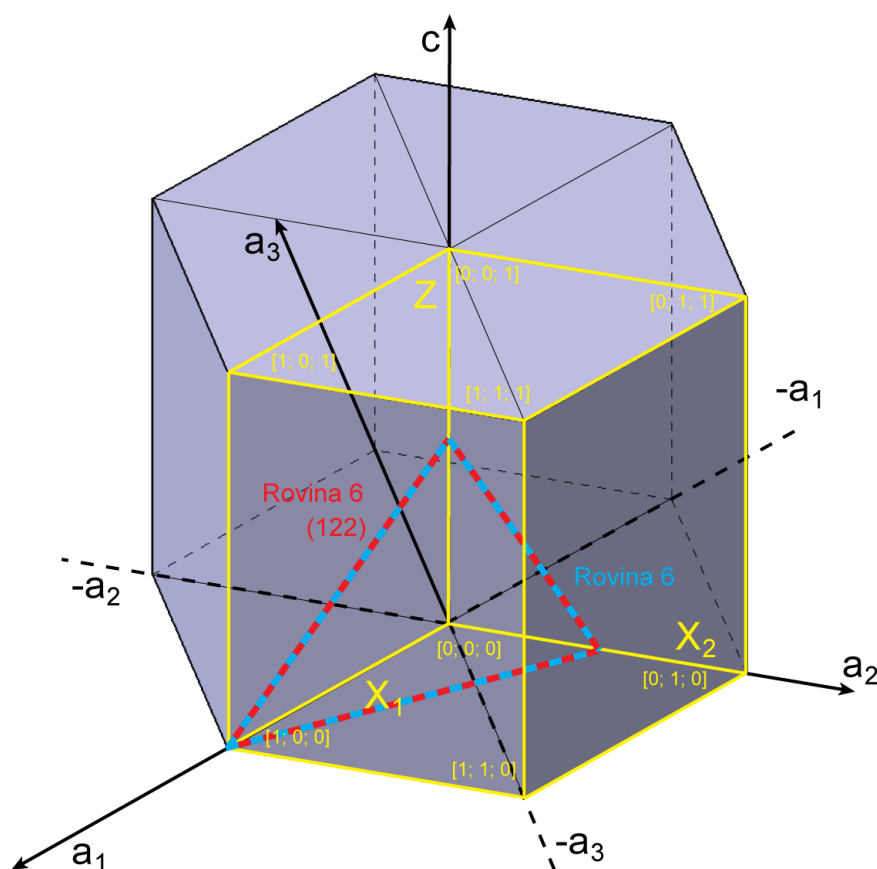
- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 6

$$1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{1}, \frac{2}{1}, \frac{2}{1} \rightarrow 1, 2, 2$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$1, 2, 2 \rightarrow \frac{1, 2, 2}{1} \rightarrow 1, 2, 2 \rightarrow (122)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 6** jsou **(122)**



Obr. 5.31 Millerovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovinu 6**

BI-S: Rovina 6

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému $\rightarrow$ z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

$$h = h \rightarrow 1 \rightarrow 1$$

$$k = k \rightarrow 2 \rightarrow 2$$

$$i = -(h + k) \rightarrow -(1 + 2) \rightarrow -3$$

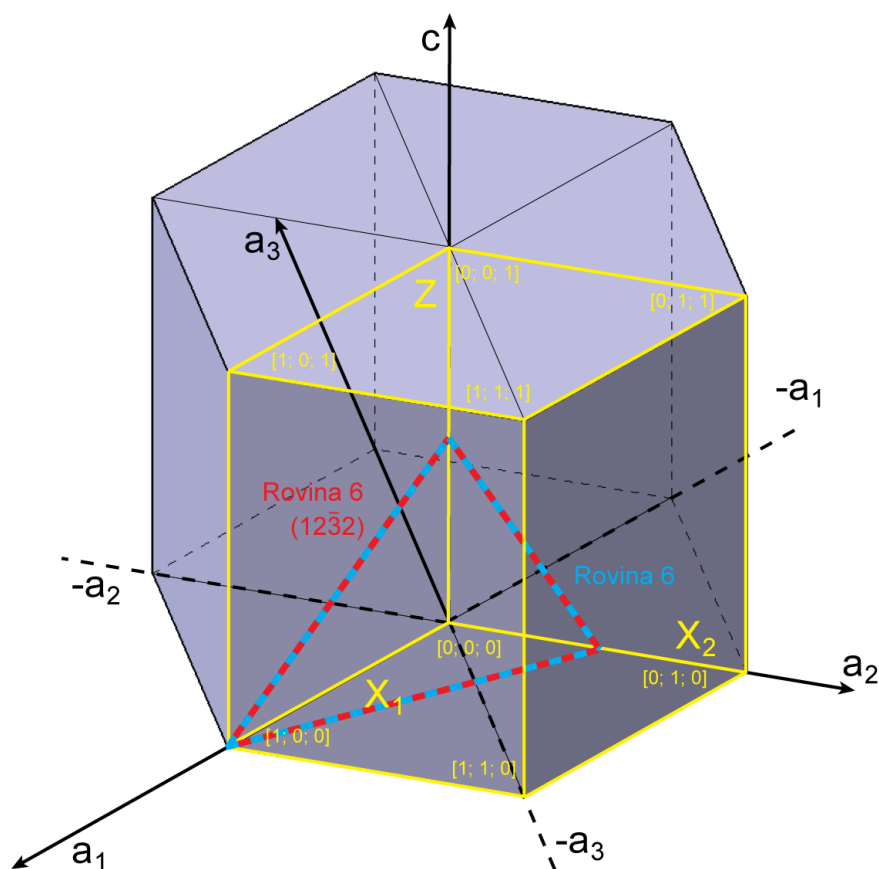
$$l = l \rightarrow 2 \rightarrow 2$$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak BI-R

$$1, 2, -3, 2 \rightarrow \frac{1, 2, -3, 2}{1} \rightarrow 1, 2, -3, 2 \rightarrow (12\bar{3}2)$$

- Bravaisovy indexy pro **rovinu 6** jsou **$(12\bar{3}2)$**

(je zřejmé, že se vlastně jedná o průsečíky roviny 6 s hexagonální soustavou o souřadnicích: $a_1; a_2; a_3; c$)



Obr. 5.32 Bravaisovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 6**

Příklad 5.22 Stanovte Millerovy (**h k l**) a Bravaisovy (**h k i l**) indexy dané krystalografické **roviny 7** v hexagonální soustavě. V ortohexagonální rovině vytíná tato rovina 7 na osách X_1 , X_2 , Z následující úseky: 2, $2/3$, $1/2$.

Určit: MI-R a BI-R pro rovinu 7 v hexagonální soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 7 (poloha dána dle obrázku 5.33)

Řešení:

MI-R: Rovina 7 $\rightarrow$ vytknuté úseky: 2, $2/3$, $1/2$

- průsečíky roviny 7 v ortohexagonální soustavě (X_1 , X_2 , Z) tedy jsou: **2, $2/3$, $1/2$**

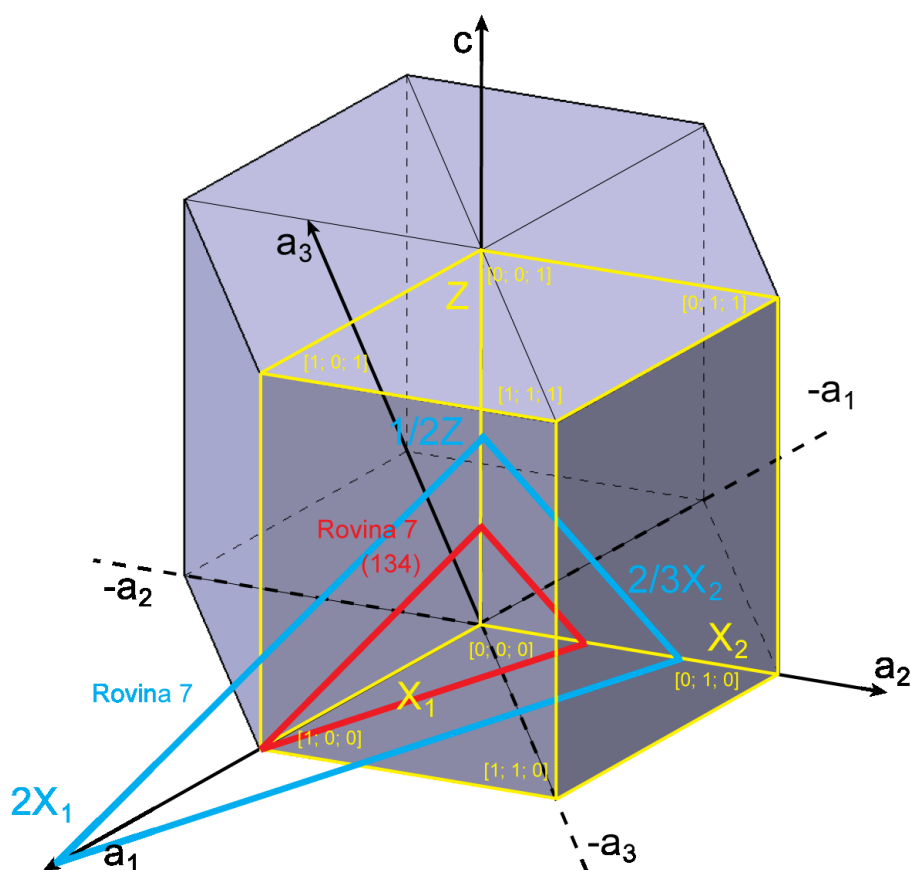
- stanovení převrácených hodnot dle vytknutých úseků pro rovinu 7

$$\frac{2}{1}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{2}{1}$$

- převedení těchto hodnot na nejmenší možná celá čísla a číselník je pak MI-R

$$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{2}{1} \rightarrow \frac{1, 3, 4}{2} \rightarrow 1, 3, 4 \rightarrow (134)$$

- Millerovy indexy pro **rovinu 7** jsou **(134)**



Obr. 5.33 Millerovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 7**

BI-S: Rovina 7

- ke stanovení Bravaisových indexů je nutno provést přepočty do nového krystalografického systému $\rightarrow$ z $[X_1; X_2; Z]$ do $[a_1; a_2; a_3; c]$

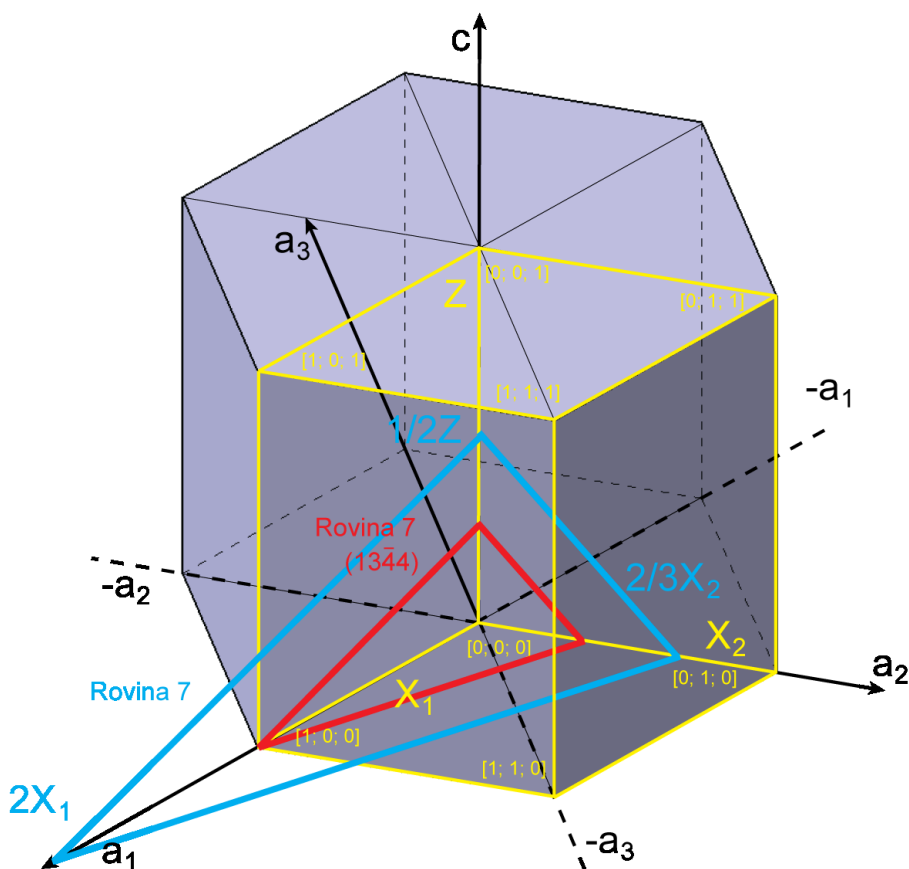
$h = h$	$\rightarrow 1$	$\rightarrow 1$
$k = k$	$\rightarrow 3$	$\rightarrow 3$
$i = -(h + k)$	$\rightarrow -(1 + 3)$	$\rightarrow -4$
$l = l$	$\rightarrow 4$	$\rightarrow 4$

- převedení na nejmenší možná celá čísla a čítec je pak BI-R

$$1, 3, -4, 4 \rightarrow \frac{1, 3, -4, 4}{1} \rightarrow 1, 3, -4, 4 \rightarrow (1\bar{3}\bar{4}4)$$

- Bravaisovy indexy pro **rovinu 7** jsou **$(1\bar{3}\bar{4}4)$**

(je zřejmé, že se vlastně jedná o průsečíky roviny 6 s hexagonální soustavou o souřadnicích: $a_1; a_2; a_3; c$)



Obr. 5.34 Bravaisovy indexy rovin v hexagonální soustavě: **rovina 7**

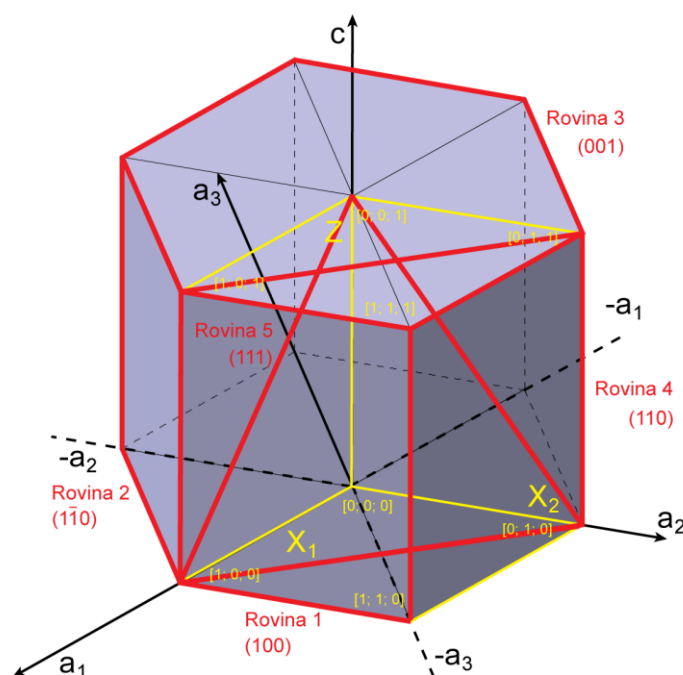
Příklad 5.23 Graficky znázorněte Millerovy ($h\ k\ l$) a Bravaisovy ($h\ k\ i\ l$) indexy předešlých krystalografických rovin 1 až 5 v hexagonální soustavě.

Určit: MI-S a BI-S pro roviny 1 až 5 v hexagonální soustavě

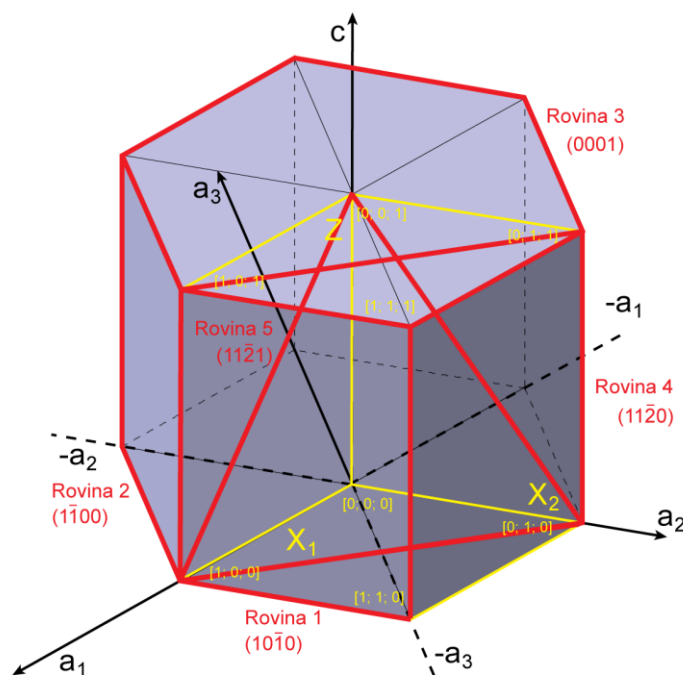
Zadáno: Hexagonální soustava

Roviny 1 až 5 (polohy dány dle obrázku 5.35)

Řešení:



Obr. 5.35 Millerovy indexy směrů v hexagonální soustavě: roviny 1 až 5



Obr. 5.36 Bravaisovy indexy směrů v hexagonální soustavě: roviny 1 až 5

6. Mezirovinné vzdálenosti v krystalových mřížkách kovů

Přehled nejdůležitějších veličin a vzorců:

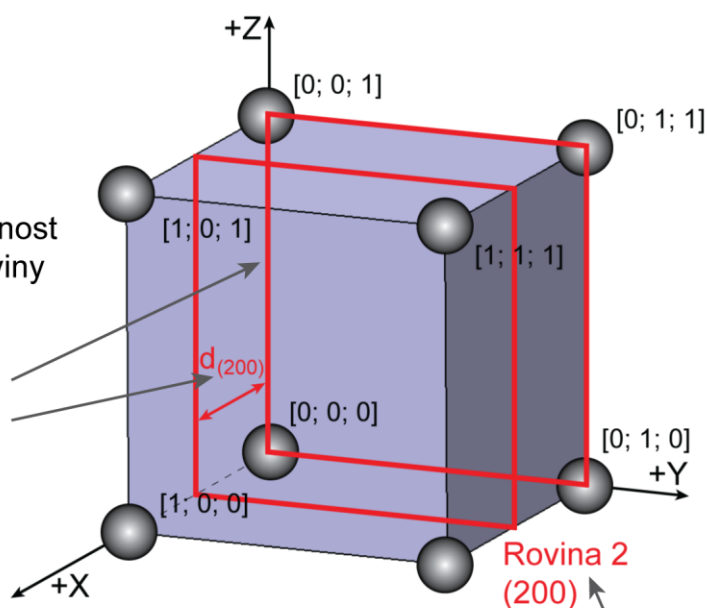
Millerovy (a také Bravaisovy) indexy směrů a rovin neslouží pouze k popsání směrů a rovin v příslušných krystalografických soustavách, s jejich pomocí lze totiž také definovat či vypočítat další poměrně významné ukazatele. Jedním z nejdůležitějších je znalost **mezirovinných vzdáleností** mezi rovinami se stejnými Millerovými indexy rovin, která nachází široké uplatnění zejména při měření a zkoumání krystalové mřížky pomocí rentgenové difrakce.

Kubická soustava

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a_0^2}$$

d - mezirovinná vzdálenost
(h k l) - Millerovy indexy roviny
a₀ - mřížkový parametr

Nejbližší rovnoběžná rovina
Mezirovinná vzdálenost

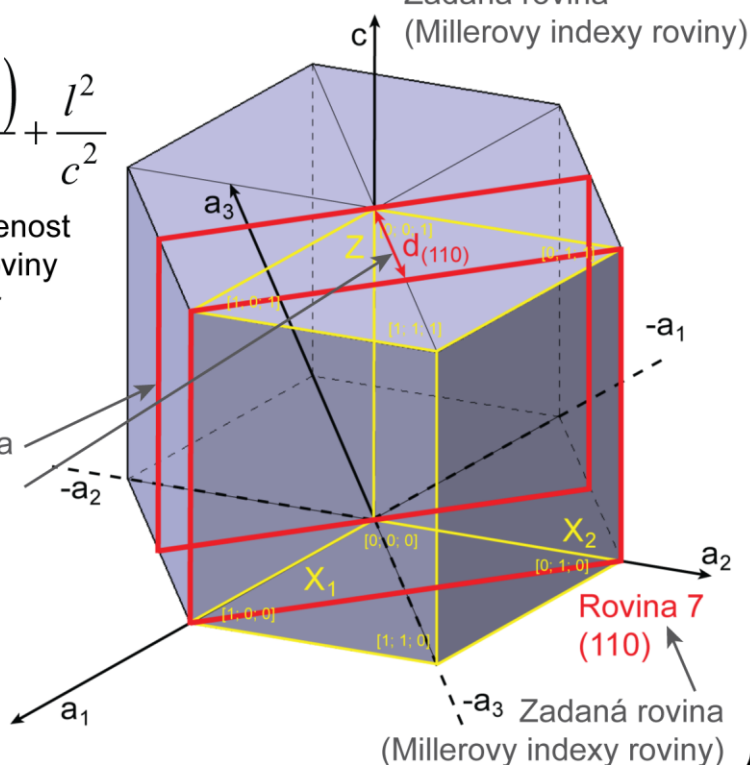


Hexagonální soustava

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4(h^2 + hk + k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

d - mezirovinná vzdálenost
(h k l) - Millerovy indexy roviny
a - mřížkový parametr (hrana hexagonu)
c - výška mřížky

Nejbližší rovnoběžná rovina
Mezirovinná vzdálenost



Příklad 6.1 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 1 v kubické soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(100)**.

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 1 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 1 s MI-S (100) pro kubickou soustavu (viz obrázek 6.1)

Řešení:

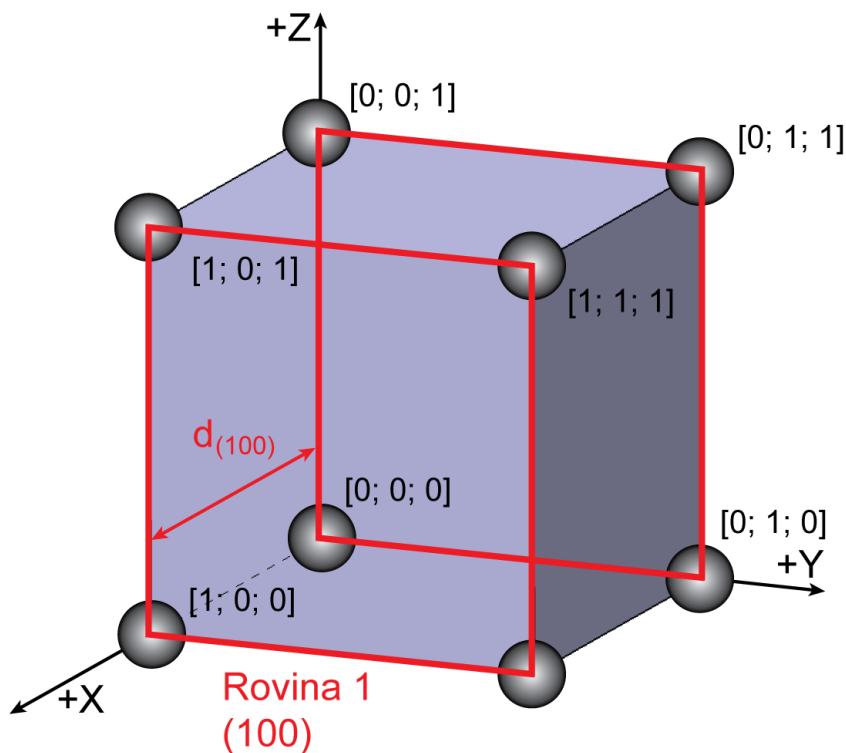
V kubické soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a_0^2} \quad [m]$$

Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(100)}^2} = \frac{1^2 + 0^2 + 0^2}{a_0^2} = \frac{1}{a_0^2}$$

$$d_{(100)} = \sqrt{a_0^2} = a_0$$



Obr. 6.1 Mezirovinná vzdálenost pro **rovinu 1** v kubické soustavě

Příklad 6.2 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 2 v kubické soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(200)**.

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 2 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 2 s MI-S (200) pro kubickou soustavu (viz obrázek 6.2)

Řešení:

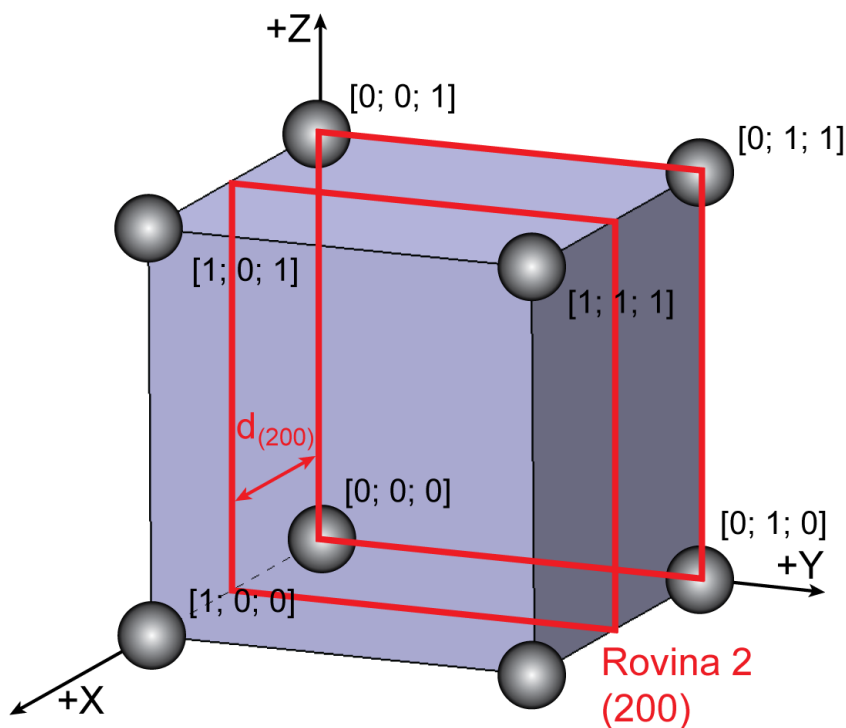
V kubické soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a_0^2} \quad [m]$$

Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(200)}^2} = \frac{2^2 + 0^2 + 0^2}{a_0^2} = \frac{4}{a_0^2}$$

$$d_{(200)} = \sqrt{\frac{a_0^2}{4}} = \frac{a_0}{2}$$



Obr. 6.2 Mezirovinná vzdálenost pro **rovinu 2** v kubické soustavě

Příklad 6.3 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 3 v kubické soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(110)**.

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 3 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 3 s MI-S (110) pro kubickou soustavu (viz obrázek 6.3)

Řešení:

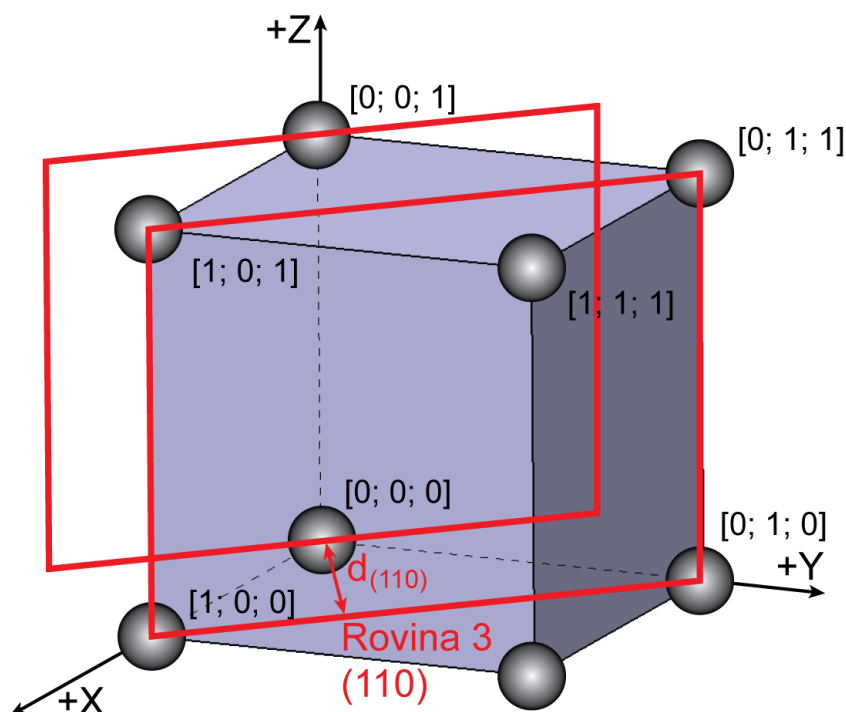
V kubické soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a_0^2} \quad [m]$$

Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(110)}^2} = \frac{1^2 + 1^2 + 0^2}{a_0^2} = \frac{2}{a_0^2}$$

$$d_{(110)} = \sqrt{\frac{a_0^2}{2}} = \frac{a_0}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot a_0$$



Obr. 6.3 Mezirovinná vzdálenost pro **rovinu 3** v kubické soustavě

Příklad 6.4 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 4 v kubické soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(111)**.

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 4 v kubické soustavě

Zadáno: Kubická soustava

Rovina 4 s MI-S (111) pro kubickou soustavu (viz obrázek 6.4)

Řešení:

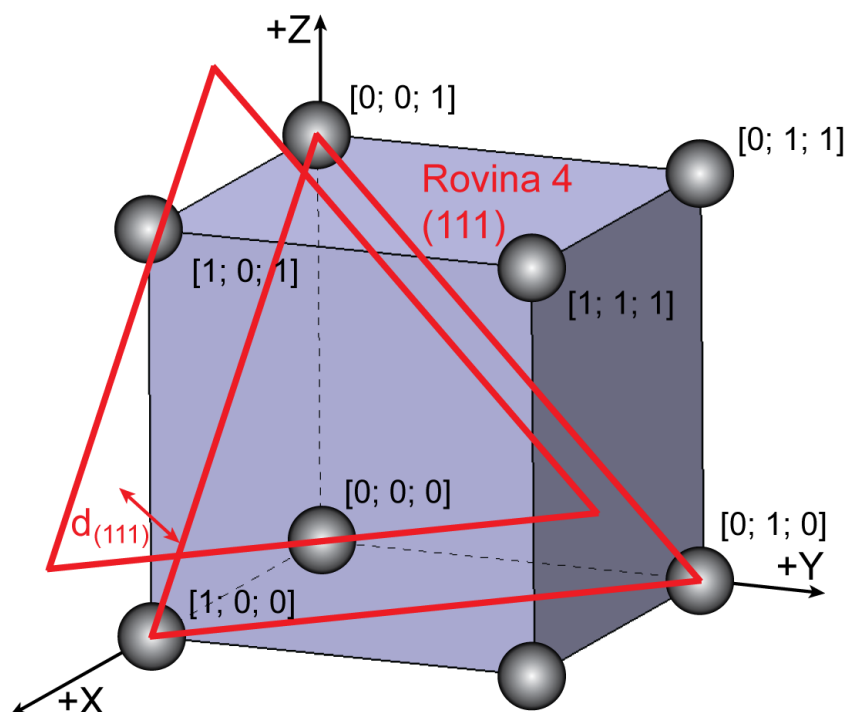
V kubické soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a_0^2} \quad [m]$$

Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(111)}^2} = \frac{1^2 + 1^2 + 1^2}{a_0^2} = \frac{3}{a_0^2}$$

$$d_{(111)} = \sqrt{\frac{a_0^2}{3}} = \frac{a_0}{\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{3} \cdot a_0$$



Obr. 6.4 Mezirovinná vzdálenost pro **rovinu 4** v kubické soustavě

Příklad 6.5 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 5 v hexagonální soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(100)**.

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 5 v kubické soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 5 s MI-S (100) pro hexagonální soustavu (viz obrázek 6.5)

Řešení:

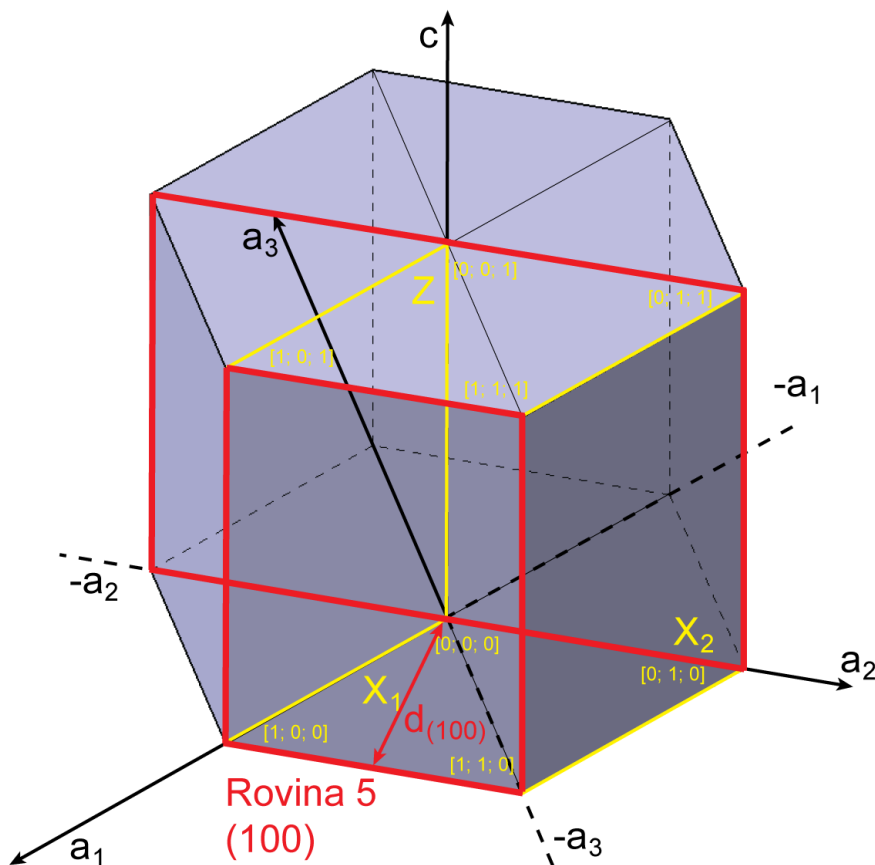
V hexagonální soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4(h^2 + hk + k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad [m]$$

Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(100)}^2} = \frac{4(1^2 + 1 \cdot 0 + 0^2)}{3a^2} + \frac{0^2}{c^2} = \frac{4}{3a^2}$$

$$d_{(100)} = \sqrt{\frac{3a^2}{4}} = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a$$



Obr. 6.5 Mezirovinná vzdálenost pro rovinu 5 v hexagonální soustavě

Příklad 6.6 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 6 v hexagonální soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(001)**.

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 6 v kubické soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 6 s MI-S (001) pro hexagonální soustavu (viz obrázek 6.6)

Řešení:

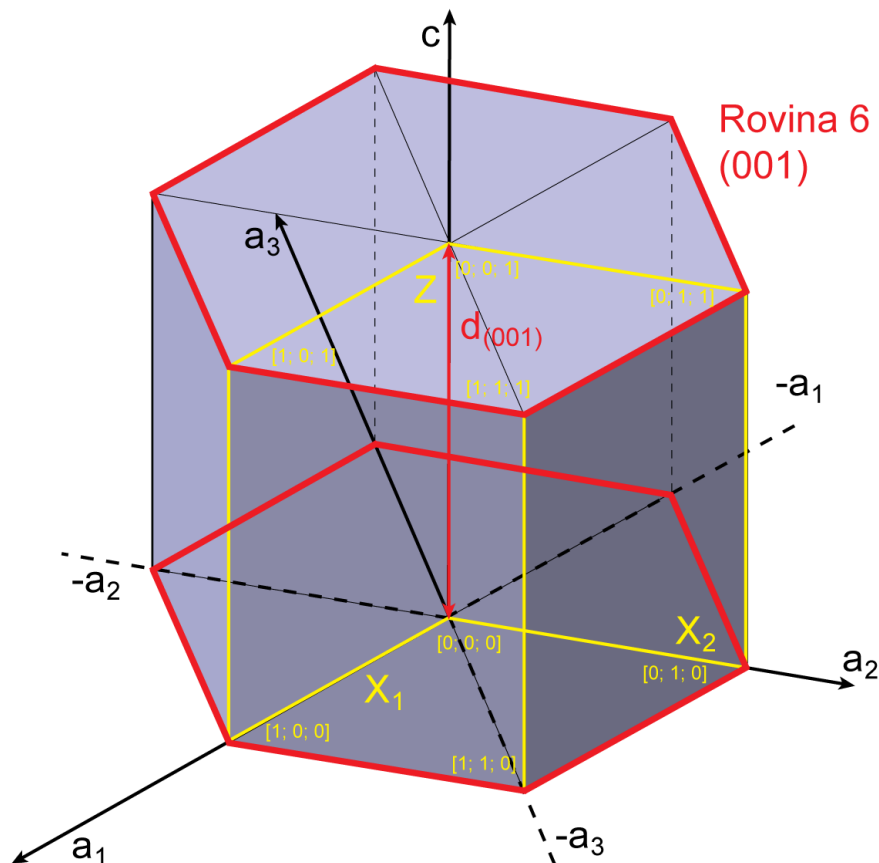
V hexagonální soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4(h^2 + hk + k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad [m]$$

Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(001)}^2} = \frac{4(0^2 + 0 \cdot 0 + 0^2)}{3a^2} + \frac{1^2}{c^2} = \frac{1}{c^2}$$

$$d_{(001)} = \sqrt{c^2} = c$$



Obr. 6.6 Mezirovinná vzdálenost pro rovinu 6 v hexagonální soustavě

Příklad 6.7 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 7 v hexagonální soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(110)**.

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 7 v kubické soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 7 s MI-S (110) pro hexagonální soustavu (viz obrázek 6.7)

Řešení:

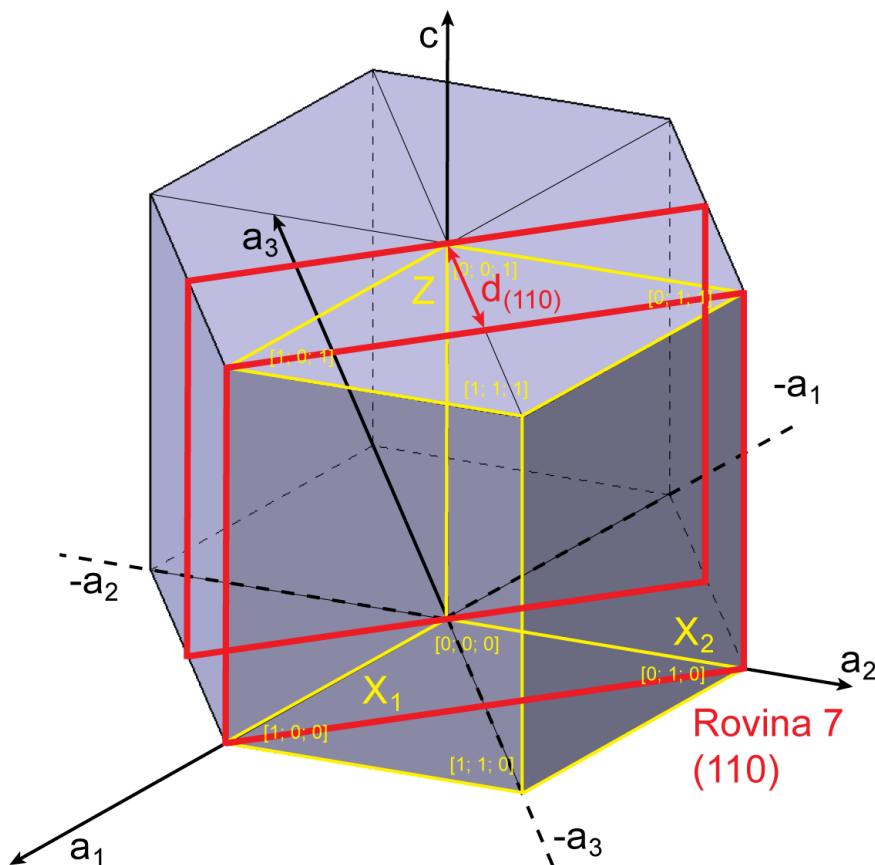
V hexagonální soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4(h^2 + hk + k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad [m]$$

Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(110)}^2} = \frac{4(1^2 + 1 \cdot 1 + 1^2)}{3a^2} + \frac{0^2}{c^2} = \frac{12}{3a^2} = \frac{4}{a^2}$$

$$d_{(110)} = \sqrt{\frac{a^2}{4}} = \frac{a}{2}$$



Obr. 6.7 Mezirovinná vzdálenost pro rovinu 7 v hexagonální soustavě

Příklad 6.8 Vypočítejte **mezirovinnou vzdálenost** roviny 8 v hexagonální soustavě, která vykazuje Millerovy indexy roviny **(111)**.

Určit: Mezirovinnou vzdálenost d pro rovinu 8 v kubické soustavě

Zadáno: Hexagonální soustava

Rovina 8 s MI-S (111) pro hexagonální soustavu (viz obrázek 6.8)

Řešení:

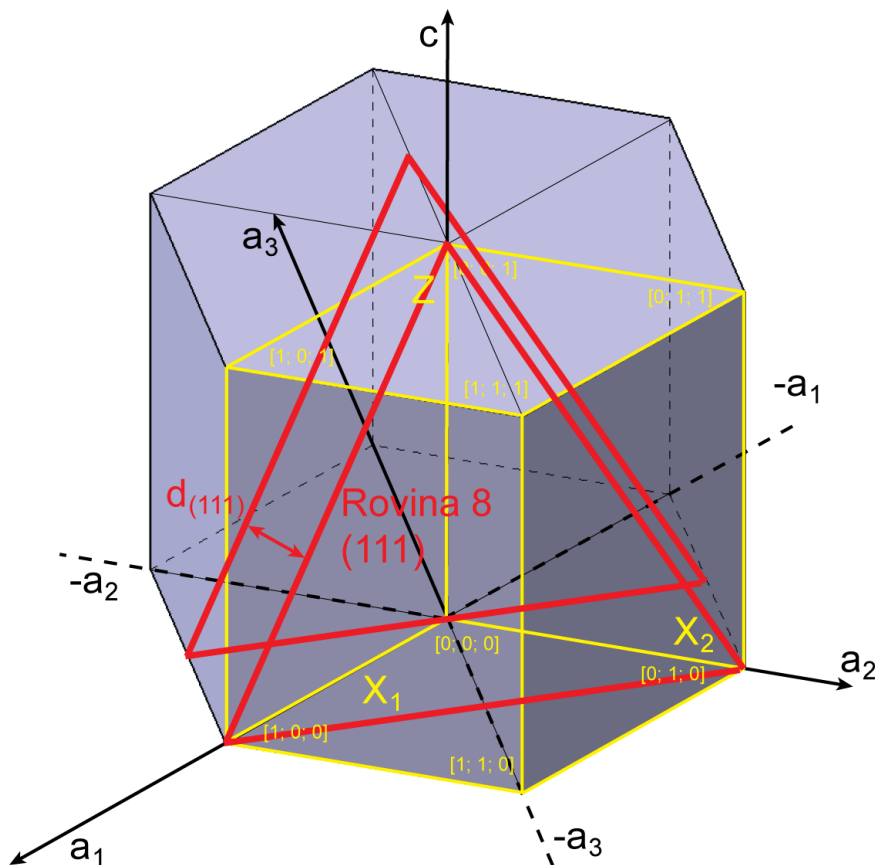
V hexagonální soustavě pro výpočet mezirovinné vzdálenosti d_{hkl} platí:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4(h^2 + hk + k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad [m]$$

Vlastní výpočet:

$$\frac{1}{d_{(111)}^2} = \frac{4(1^2 + 1 \cdot 1 + 1^2)}{3a^2} + \frac{1^2}{c^2} = \frac{12}{3a^2} + \frac{1}{c^2} = \frac{4}{a^2} + \frac{1}{c^2} = \frac{4c^2 + a^2}{a^2 c^2}$$

$$d_{(111)} = \sqrt{\frac{a^2 c^2}{4c^2 + a^2}} = \frac{ac}{\sqrt{4c^2 + a^2}}$$



Obr. 6.8 Mezirovinná vzdálenost pro rovinu 8 v hexagonální soustavě

7. Hustoty atomů dle daných směrů, rovin a objemů

Přehled nejdůležitějších veličin a vzorců:

Výpočet **hustoty atomů dle daných směrů, rovin a objemů** představuje jedno z propojení Millerových (popř. Bravaisových) indexů směrů a rovin s danými mřížkovými parametry jednotlivých prvků a slitin. Z výsledků těchto **lineárních, plošných a objemových hustot atomů** v různých směrech a rovinách lze nalézt poměrně značné rozdíly v rámci jednotlivých prvků a slitin.

Lineární hustota atomů - vyjadřuje počet atomů ve zvoleném směru (dle Millerových a Bravaisových indexů směrů) na jednotku délky.

Lineární hustota atomů pro
daný typ mřížky, směr a prvek

Počet atomů v daném směru

$$\rho_L(\text{Mrizka_Smer_Prvek}) = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{Mrizka_Smer_Prvek}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right]$$

Délka v daném typu mřížky, směru a prvku

Plošná hustota atomů - vyjadřuje počet atomů ve zvolené rovině (dle Millerových a Bravaisových indexů směrů) na jednotku plochy.

Plošná hustota atomů pro
daný typ mřížky, rovinu a prvek

Počet atomů v dané rovině

$$\rho_S(\text{Mrizka_Rovina_Prvek}) = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{Mrizka_Rovina_Prvek}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m^2} \right]$$

Plocha v daném typu mřížky, směru a prvku

Objemová hustota atomů - vyjadřuje počet atomů ve zvoleném objemu (dle typu mřížky) na jednotku objemu.

Objemová hustota atomů pro
daný typ mřížky a prvek

Počet atomů v daném objemu

$$\rho_V(\text{Mrizka_Prvek}) = \frac{X_{\text{Atomu_v_objemu}}}{V_{\text{Mrizka_Prvek}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m^3} \right]$$

Objem v daném typu mřížky a prvku

Příklad 7.1 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr [100] v kubické plošně centrované mřížce (FCC) hliníku.

Určit: ρ_L pro směr [100] a FCC mřížku

Zadáno: FCC mřížka

Směr [100]

$a_{0(\text{Al})} = 405 \text{ pm}$ (0,405 nm nebo $0,405 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

Podle obecného vzorce platí, že:

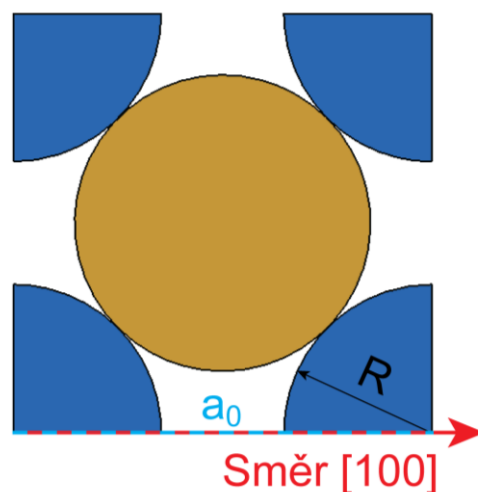
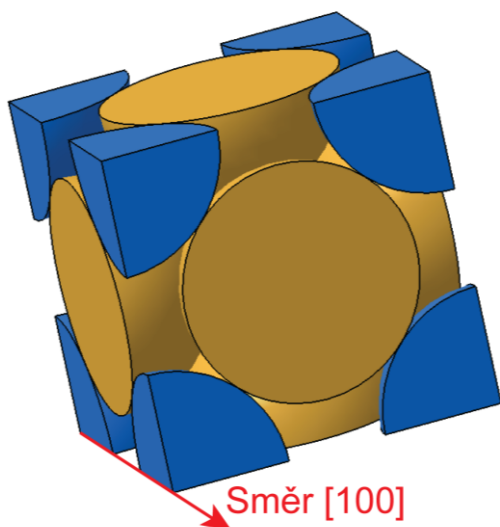
$$\rho_{L(\text{FCC}_{[100]}_{\text{Al}})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{FCC}_{[100]}_{\text{Al}}}} \quad \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{FCC}_{[100]}_{\text{Al}})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{FCC}_{[100]}_{\text{Al}}}} = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{a_{0(\text{Al})}} = \frac{1}{a_{0(\text{Al})}}$$

$$\rho_{L(\text{FCC}_{[100]}_{\text{Al}})} = \frac{1}{0,405 \cdot 10^{-9}} \cong 2,469 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\boxed{\rho_{L(\text{FCC}_{[100]}_{\text{Al}})} = 2,469 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}}$$



Obr. 7.1 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr [100] v FCC mřížce hliníku

Příklad 7.2 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr [110] v kubické plošně centrované mřížce (FCC) hliníku.

Určit: ρ_L pro směr [110] a FCC mřížku

Zadáno: FCC mřížka

Směr [110]

$a_{0(\text{Al})} = 405 \text{ pm}$ (0,405 nm nebo $0,405 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

V příkladu X.X a podle obecného vzorce platí, že:

$$X_1 = \sqrt{2} \cdot a_0$$

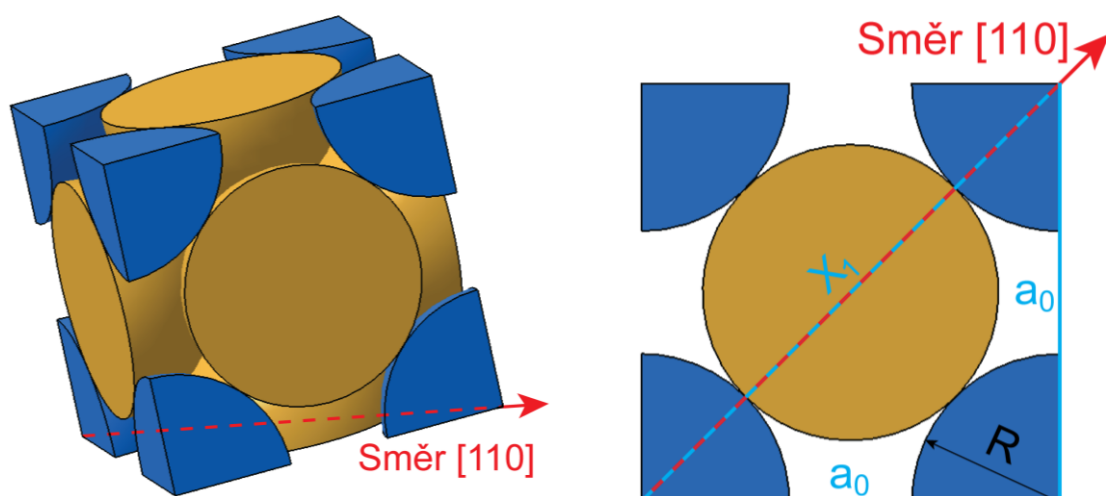
$$\rho_{L(\text{FCC}_{[110]}_{\text{Al}})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{FCC}_{[110]}_{\text{Al}}}} \quad \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{FCC}_{[110]}_{\text{Al}})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{FCC}_{[110]}_{\text{Al}}}} = \frac{\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2}}{X_1} = \frac{2}{\sqrt{2} \cdot a_{0(\text{Al})}}$$

$$\rho_{L(\text{FCC}_{[110]}_{\text{Al}})} = \frac{2}{\sqrt{2} \cdot (0,405 \cdot 10^{-9})} \cong 3,492 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\boxed{\rho_{L(\text{FCC}_{[110]}_{\text{Al}})} = 3,492 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}}$$



Obr. 7.2 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr [110] v FCC mřížce hliníku

Příklad 7.3 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr [110] v kubické plošně centrované mřížce (FCC) mědi.

Určit: ρ_L pro směr [110] a FCC mřížku

Zadáno: FCC mřížka

Směr [110]

$a_0(\text{Cu}) = 361 \text{ pm}$ (0,361 nm nebo $0,361 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

V příkladu X.X a podle obecného vzorce platí, že:

$$X_1 = \sqrt{2} \cdot a_0$$

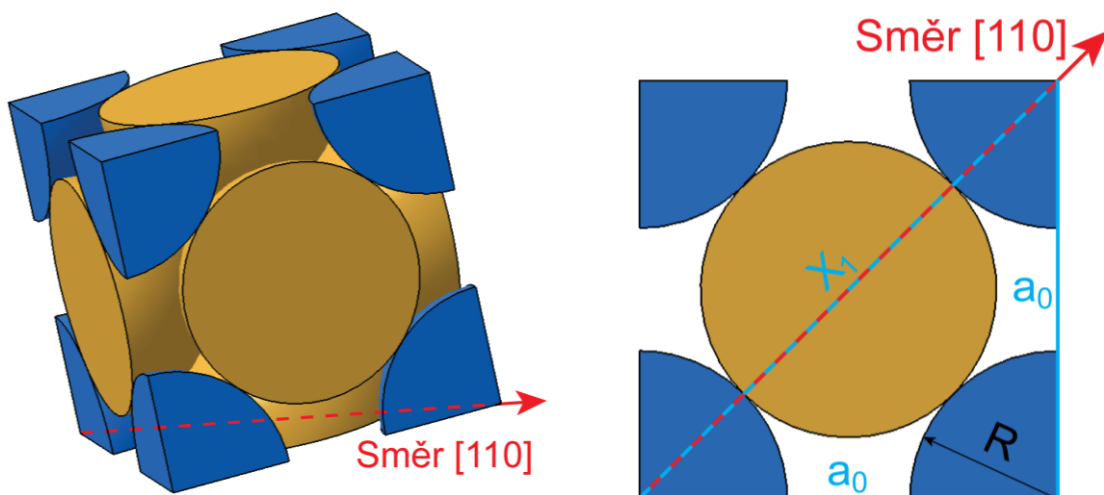
$$\rho_{L(\text{FCC}_{[110]}_{\text{Cu}})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{FCC}_{[110]}_{\text{Cu}}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{FCC}_{[110]}_{\text{Cu}})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{FCC}_{[110]}_{\text{Cu}}}} = \frac{\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2}}{X_1} = \frac{2}{\sqrt{2} \cdot a_0(\text{Cu})}$$

$$\rho_{L(\text{FCC}_{[110]}_{\text{Cu}})} = \frac{2}{\sqrt{2} \cdot (0,361 \cdot 10^{-9})} \cong 3,917 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\boxed{\rho_{L(\text{FCC}_{[110]}_{\text{Cu}})} = 3,917 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}}$$



Obr. 7.3 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr [110] v FCC mřížce mědi

Příklad 7.4 Vypočítejte plošnou hustotu atomů ρ_s [atomů/m²] pro rovinu (010) v kubické plošně centrované mřížce (FCC) hliníku.

Určit: ρ_s pro rovinu (010) a FCC mřížku

Zadáno: FCC mřížka

Rovina (010)

$a_{0(\text{Al})} = 405 \text{ pm}$ (0,405 nm nebo $0,405 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

V příkladu X.X a podle obecného vzorce platí, že:

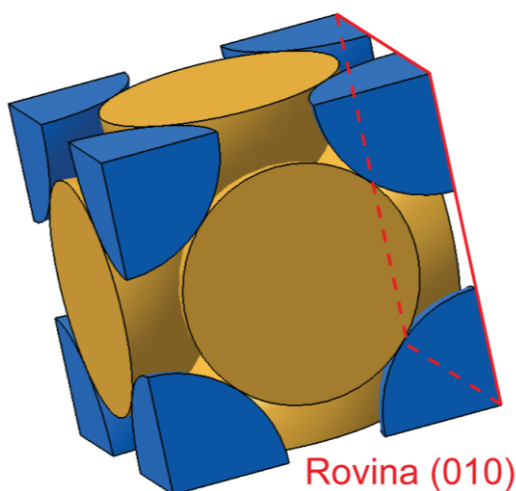
$$\rho_{S(\text{FCC}_{(010)}_{\text{Al}})} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{FCC}_{(010)}_{\text{Al}}}} \quad \left[\frac{\text{atomu}}{\text{m}^2} \right] = [\text{atomu} \cdot \text{m}^{-2}]$$

Vlastní výpočet:

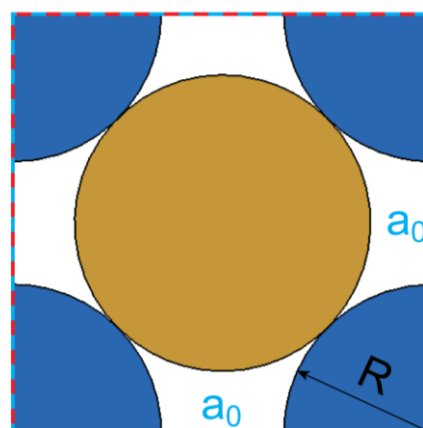
$$\rho_{S(\text{FCC}_{(010)}_{\text{Al}})} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{FCC}_{(010)}_{\text{Al}}}} = \frac{4 \cdot \frac{1}{4} + 1}{a_{0(\text{Al})} \cdot a_{0(\text{Al})}} = \frac{2}{a_{0(\text{Al})}^2}$$

$$\rho_{S(\text{FCC}_{(010)}_{\text{Al}})} = \frac{2}{(0,405 \cdot 10^{-9})^2} \cong 1,219 \cdot 10^{19} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-2}$$

$$\boxed{\rho_{S(\text{FCC}_{(010)}_{\text{Al}})} = 1,219 \cdot 10^{19} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-2}}$$



Rovina (010)



Rovina (010)

Obr. 7.4 Plošná hustota atomů ρ_s pro rovinu (010) v FCC mřížce hliníku

Příklad 7.5 Vypočítejte objemovou hustotu atomů ρ_V [atomů/m³] v kubické plošně centrované mřížce (FCC) hliníku.

Určit: ρ_V pro FCC mřížku

Zadáno: FCC mřížka

$a_{0(\text{Al})} = 405 \text{ pm}$ (0,405 nm nebo $0,405 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

Podle obecných vzorců platí, že:

$$V_{\text{FCC}_m} = a_0^3$$

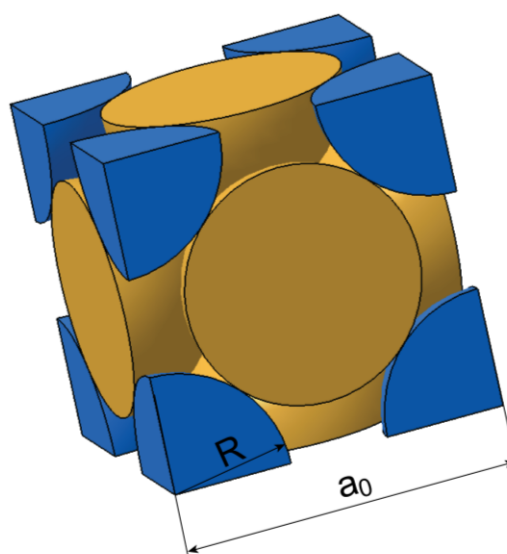
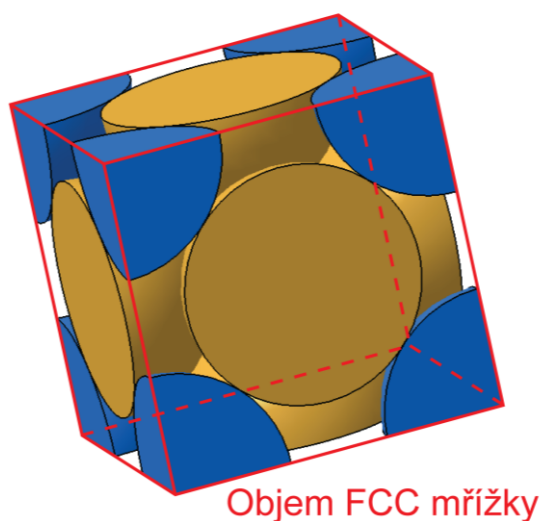
$$\rho_{V(\text{FCC}_\text{Al})} = \frac{X_{\text{Atomu}_v_\text{objemu}}}{V_{\text{FCC}_\text{Al}}} \left[\frac{\text{atomu}}{\text{m}^3} \right] = [\text{atomu} \cdot \text{m}^{-3}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{V(\text{FCC}_\text{Al})} = \frac{X_{\text{Atomu}_v_\text{objemu}}}{V_{\text{FCC}_\text{Al}}} = \frac{4}{a_{0(\text{Al})}^3}$$

$$\rho_{V(\text{FCC}_\text{Al})} = \frac{4}{(0,405 \cdot 10^{-9})^3} \cong 6,021 \cdot 10^{28} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-3}$$

$$\boxed{\rho_{V(\text{FCC}_\text{Al})} = 6,021 \cdot 10^{28} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-3}}$$



Obr. 7.5 Objemová hustota atomů ρ_V v FCC mřížce hliníku

Příklad 7.6 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr [100] v kubické prostorově centrované mřížce (BCC) sodíku.

Určit: ρ_L pro směr [100] a BCC mřížku

Zadáno: BCC mřížka

Směr [100]

$a_{0(\text{Na})} = 429 \text{ pm}$ (0,429 nm nebo $0,429 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

Podle obecného vzorce platí, že:

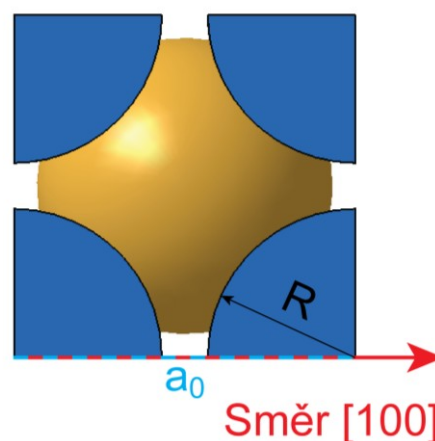
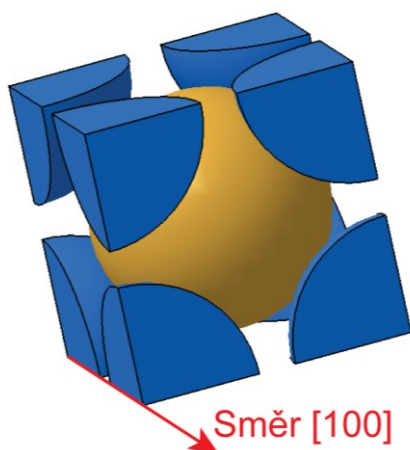
$$\rho_{L(\text{BCC}_{[100]}\text{Na})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{BCC}_{[100]}\text{Na}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{BCC}_{[100]}\text{Na})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{BCC}_{[100]}\text{Na}}} = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{a_{0(\text{Fe}_\alpha)}} = \frac{1}{a_{0(\text{Fe}_\alpha)}}$$

$$\rho_{L(\text{BCC}_{[100]}\text{Na})} = \frac{1}{0,429 \cdot 10^{-9}} \cong 2,331 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\boxed{\rho_{L(\text{BCC}_{[100]}\text{Na})} = 2,331 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}}$$



Obr. 7.6 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr [100] v BCC mřížce sodíku

Příklad 7.7 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr [100] v kubické prostorově centrované mřížce (BCC) železa alfa.

Určit: ρ_L pro směr [100] a BCC mřížku

Zadáno: BCC mřížka

Směr [100]

$a_{0(\text{Fe}\alpha)} = 287 \text{ pm}$ (0,287 nm nebo $0,287 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

Podle obecného vzorce platí, že:

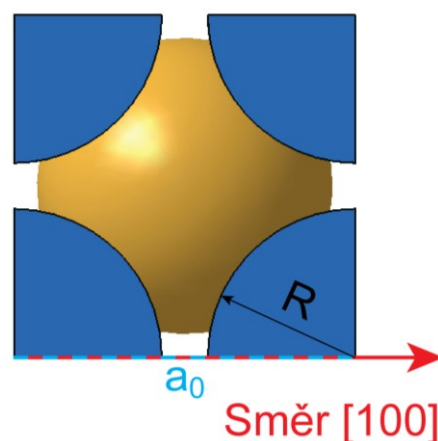
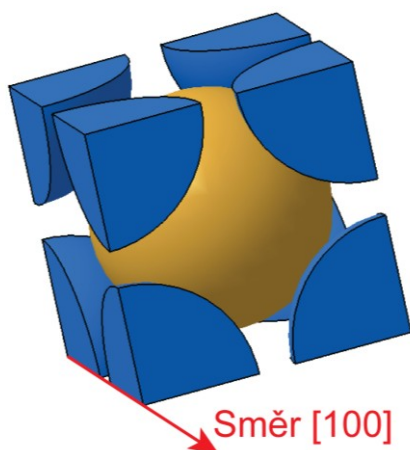
$$\rho_{L(\text{BCC}_{[100]} \text{Fe}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{BCC}_{[100]} \text{Fe}_\alpha}} \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{BCC}_{[100]} \text{Fe}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{BCC}_{[100]} \text{Fe}_\alpha}} = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{a_{0(\text{Fe}_\alpha)}} = \frac{1}{a_{0(\text{Fe}_\alpha)}}$$

$$\rho_{L(\text{BCC}_{[100]} \text{Fe}_\alpha)} = \frac{1}{0,287 \cdot 10^{-9}} \cong 3,484 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\boxed{\rho_{L(\text{BCC}_{[100]} \text{Fe}_\alpha)} = 3,484 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}}$$



Obr. 7.7 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr [100] v BCC mřížce železa alfa

Příklad 7.8 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr [110] v kubické prostorově centrované mřížce (BCC) železa alfa.

Určit: ρ_L pro směr [110] a BCC mřížku

Zadáno: BCC mřížka

Směr [110]

$a_{0(\text{Fe}\alpha)} = 287 \text{ pm}$ (0,287 nm nebo $0,287 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

V příkladu X.X a podle obecného vzorce platí, že:

$$X_1 = \sqrt{2} \cdot a_0$$

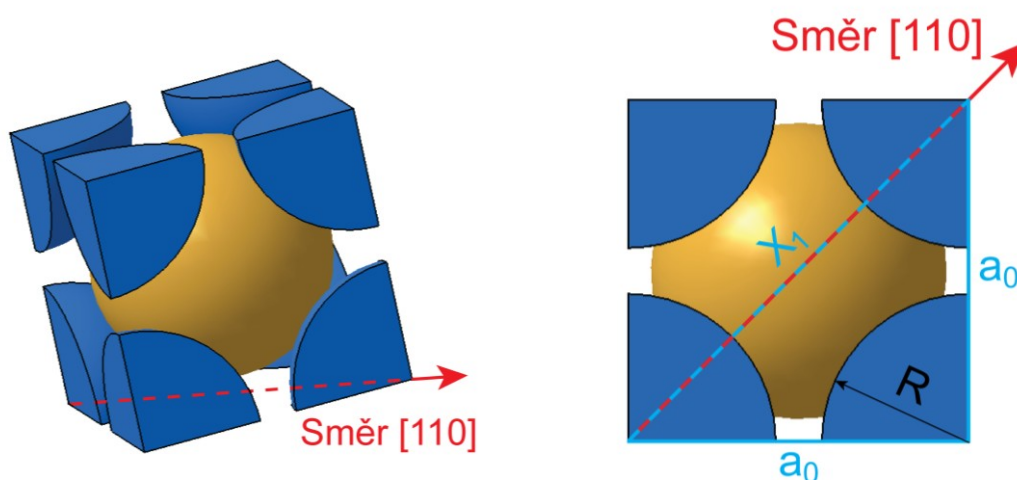
$$\rho_{L(\text{BCC}_{[110]\text{Fe}\alpha})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{BCC}_{[110]\text{Fe}\alpha}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{BCC}_{[110]\text{Fe}\alpha})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{BCC}_{[110]\text{Fe}\alpha}}} = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{X_1} = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot a_{0(\text{Fe}\alpha)}}$$

$$\rho_{L(\text{BCC}_{[110]\text{Fe}\alpha})} = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot (0,287 \cdot 10^{-9})} \cong 2,464 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\boxed{\rho_{L(\text{BCC}_{[110]\text{Fe}\alpha})} = 2,464 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}}$$



Obr. 7.8 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr [110] v BCC mřížce železa alfa

Příklad 7.9 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr [111] v kubické prostorově centrované mřížce (BCC) železa alfa.

Určit: ρ_L pro směr [111] a BCC mřížku

Zadáno: BCC mřížka

Směr [111]

$a_0(\text{Fe}_\alpha) = 287 \text{ pm}$ (0,287 nm nebo $0,287 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

V příkladu X.X a podle obecného vzorce platí, že:

$$X_2 = \sqrt{3} \cdot a_0$$

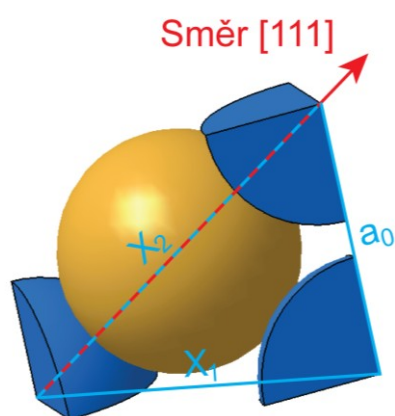
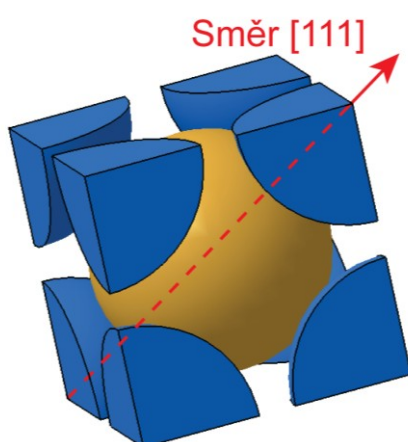
$$\rho_{L(\text{BCC}_{[111]}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{BCC}_{[111]}\text{Fe}_\alpha}} \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{BCC}_{[111]}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{BCC}_{[111]}\text{Fe}_\alpha}} = \frac{\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2}}{X_2} = \frac{2}{\sqrt{3} \cdot a_0(\text{Fe}_\alpha)}$$

$$\rho_{L(\text{BCC}_{[111]}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{2}{\sqrt{3} \cdot (0,287 \cdot 10^{-9})} \cong 4,023 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\boxed{\rho_{L(\text{BCC}_{[111]}\text{Fe}_\alpha)} = 4,023 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}}$$



Obr. 7.9 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr [111] v BCC mřížce železa alfa

Příklad 7.10 Vypočítejte plošnou hustotu atomů ρ_s [atomů/m²] pro rovinu (010) v kubické prostorově centrované mřížce (BCC) železa alfa.

Určit: ρ_s pro rovinu (010) a BCC mřížku

Zadáno: BCC mřížka

Rovina (010)

$a_{0(\text{Fe}\alpha)} = 287 \text{ pm}$ (0,287 nm nebo $0,287 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

Podle obecného vzorce platí, že:

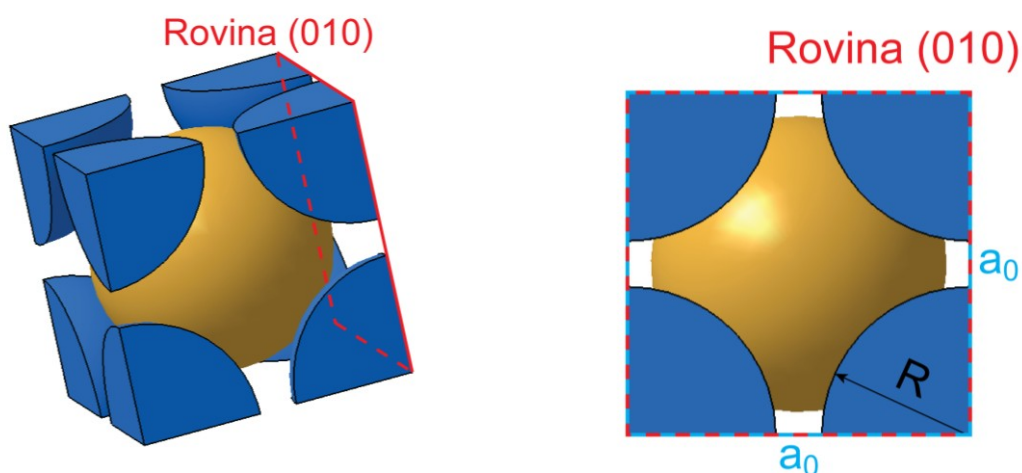
$$\rho_{S(\text{BCC}_{(010)}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{BCC}_{(010)}\text{Fe}_\alpha}} \left[\frac{\text{atomu}}{\text{m}^2} \right] = [\text{atomu} \cdot \text{m}^{-2}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{S(\text{BCC}_{(010)}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{BCC}_{(010)}\text{Fe}_\alpha}} = \frac{4 \cdot \frac{1}{4}}{a_{0(\text{Fe}_\alpha)} \cdot a_{0(\text{Fe}_\alpha)}} = \frac{1}{a_{0(\text{Fe}_\alpha)}^2}$$

$$\rho_{S(\text{BCC}_{(010)}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{1}{(0,287 \cdot 10^{-9})^2} \cong 1,214 \cdot 10^{19} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-2}$$

$$\boxed{\rho_{S(\text{BCC}_{(010)}\text{Fe}_\alpha)} = 1,214 \cdot 10^{19} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-2}}$$



Obr. 7.10 Plošná hustota atomů ρ_s pro rovinu (010) v BCC mřížce železa alfa

Příklad 7.11 Vypočítejte plošnou hustotu atomů ρ_s [atomů/m²] pro rovinu (110) v kubické prostorově centrované mřížce (BCC) železa alfa.

Určit: ρ_s pro rovinu (110) a BCC mřížku

Zadáno: BCC mřížka

Rovina (110)

$a_{0(\text{Fe}\alpha)} = 287 \text{ pm}$ (0,287 nm nebo $0,287 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

V příkladu X.X a podle obecného vzorce platí, že:

$$X_1 = \sqrt{2} \cdot a_0$$

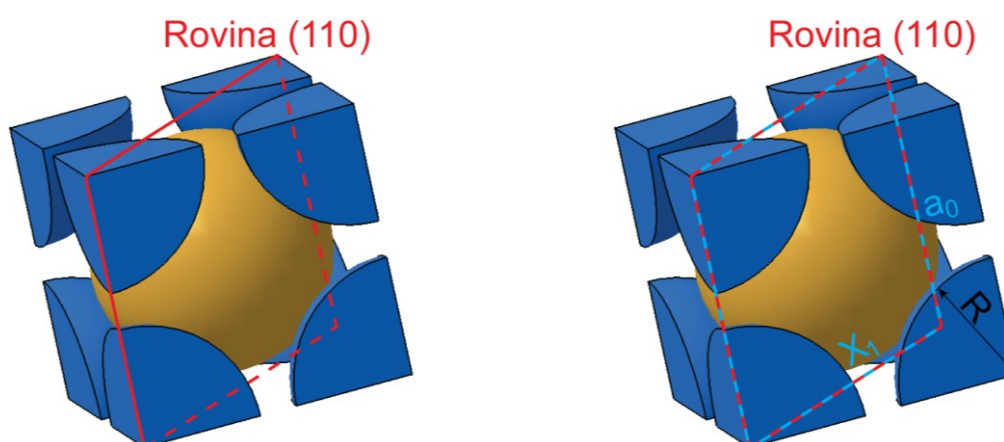
$$\rho_{S(\text{BCC}_{(110)}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{BCC}_{(110)}\text{Fe}_\alpha}} \left[\frac{\text{atomu}}{\text{m}^2} \right] = [\text{atomu} \cdot \text{m}^{-2}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{S(\text{BCC}_{(110)}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{BCC}_{(110)}\text{Fe}_\alpha}} = \frac{4 \cdot \frac{1}{4} + 1}{\sqrt{2} \cdot a_0 \cdot a_0} = \frac{2}{\sqrt{2} \cdot a_{0(\text{Fe}_\alpha)}^2}$$

$$\rho_{S(\text{BCC}_{(110)}\text{Fe}_\alpha)} = \frac{2}{\sqrt{2} \cdot (0,287 \cdot 10^{-9})^2} \cong 1,717 \cdot 10^{19} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-2}$$

$$\boxed{\rho_{S(\text{BCC}_{(110)}\text{Fe}_\alpha)} = 1,717 \cdot 10^{19} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-2}}$$



Obr. 7.11 Plošná hustota atomů ρ_s pro rovinu (110) v BCC mřížce železa alfa

Příklad 7.12 Vypočítejte objemovou hustotu atomů ρ_V [atomů/m³] v kubické prostorově centrované mřížce (BCC) železa alfa.

Určit: ρ_V pro BCC mřížku

Zadáno: BCC mřížka

$$a_{0(\text{Fe}\alpha)} = 287 \text{ pm} \quad (0,287 \text{ nm nebo } 0,287 \cdot 10^{-9} \text{ m})$$

Řešení:

Podle obecných vzorců platí, že:

$$V_{\text{BCC}_m} = a_0^3$$

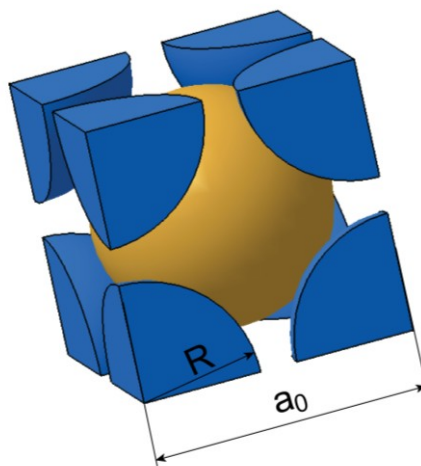
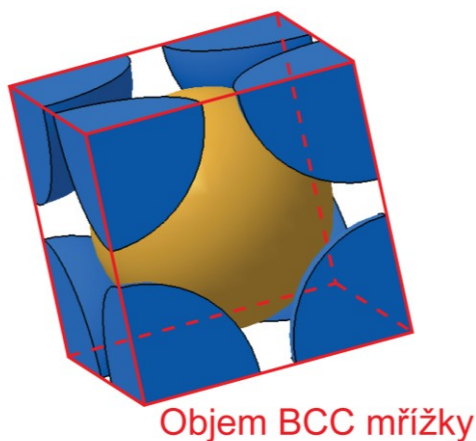
$$\rho_{V(\text{BCC}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu}_v_{\text{objemu}}}}{V_{\text{BCC}_\alpha}} \left[\frac{\text{atomu}}{m^3} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-3}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{V(\text{BCC}_\alpha)} = \frac{X_{\text{Atomu}_v_{\text{objemu}}}}{V_{\text{BCC}_\alpha}} = \frac{2}{a_{0(\text{Fe}_\alpha)}^3}$$

$$\rho_{V(\text{BCC}_\alpha)} = \frac{2}{(0,287 \cdot 10^{-9})^3} \cong 8,460 \cdot 10^{28} \text{ atomu} \cdot m^{-3}$$

$$\boxed{\rho_{V(\text{BCC}_\alpha)} = 8,460 \cdot 10^{28} \text{ atomu} \cdot m^{-3}}$$



Obr. 7.12 Objemová hustota atomů ρ_V v BCC mřížce železa alfa

Příklad 7.13 Vypočítejte objemovou hustotu atomů ρ_V [atomů/m³] v kubické prostorově centrované mřížce (BCC) sodíku.

Určit: ρ_V pro BCC mřížku

Zadáno: BCC mřížka

$a_{0(\text{Na})} = 429 \text{ pm}$ (0,429 nm nebo $0,429 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

Podle obecných vzorců platí, že:

$$V_{\text{BCC}_m} = a_0^3$$

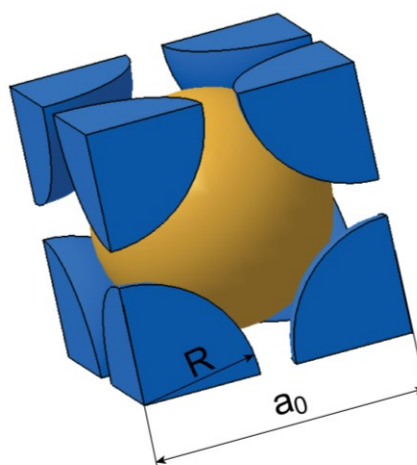
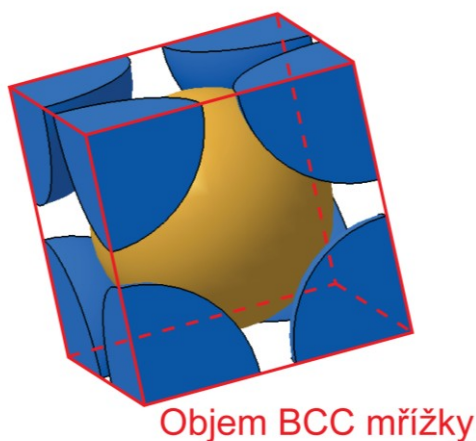
$$\rho_{V(\text{BCC}_m)} = \frac{X_{\text{Atomu}_v_{\text{objemu}}}}{V_{\text{BCC}_m}} \left[\frac{\text{atomu}}{m^3} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-3}]$$

Vlastní výpočet:

$$\rho_{V(\text{BCC}_m)} = \frac{X_{\text{Atomu}_v_{\text{objemu}}}}{V_{\text{BCC}_m}} = \frac{2}{a_{0(\text{Na})}^3}$$

$$\rho_{V(\text{BCC}_m)} = \frac{2}{(0,429 \cdot 10^{-9})^3} \cong 2,533 \cdot 10^{28} \text{ atomu} \cdot m^{-3}$$

$$\boxed{\rho_{V(\text{BCC}_m)} = 2,533 \cdot 10^{28} \text{ atomu} \cdot m^{-3}}$$



Obr. 7.13 Objemová hustota atomů ρ_V v BCC mřížce sodíku

Příklad 7.14 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr $[2\bar{1}\bar{1}0]$ v hexagonální těsně uspořádané mřížce (HCP) hořčíku.

Určit: ρ_L pro směr $[2\bar{1}\bar{1}0]$ a HCP mřížku

Zadáno: HCP mřížka

Směr $[2\bar{1}\bar{1}0]$

$a_{(\text{Mg})} = 320,9 \text{ pm}$ (0,3209 nm nebo $0,3209 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

$c_{(\text{Mg})} = 520,9 \text{ pm}$ (0,5209 nm nebo $0,5209 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

Podle obecného vzorce platí, že:

$$\rho_{L(\text{HCP}_{[2\bar{1}\bar{1}0]}\text{Mg})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{HCP}_{[2\bar{1}\bar{1}0]}\text{Mg}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

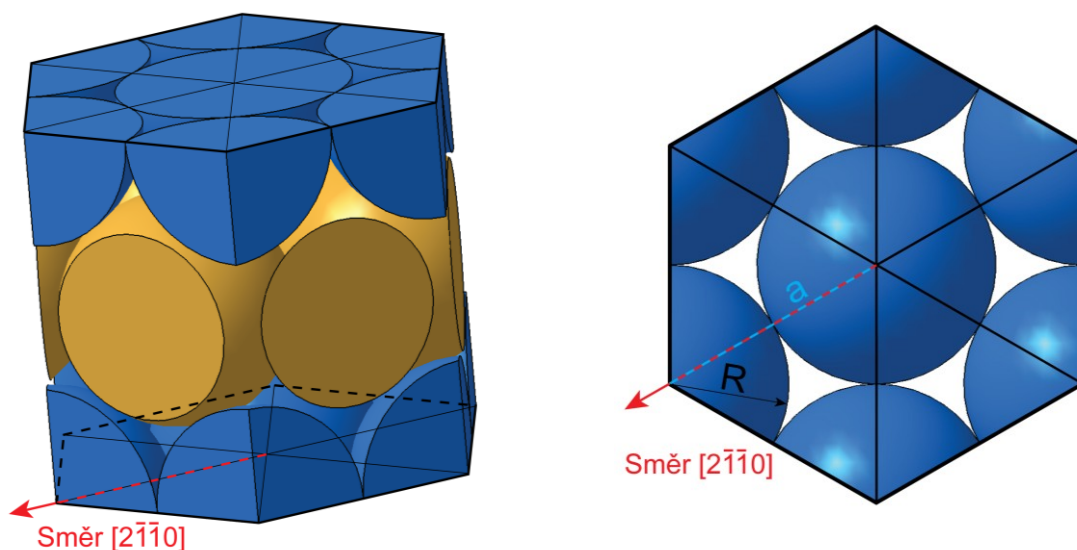
Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{HCP}_{[2\bar{1}\bar{1}0]}\text{Mg})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{HCP}_{[2\bar{1}\bar{1}0]}\text{Mg}}} = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{a_{(\text{Mg})}} = \frac{1}{a_{(\text{Mg})}}$$

$$\rho_{L(\text{HCP}_{[2\bar{1}\bar{1}0]}\text{Mg})} = \frac{1}{0,3209 \cdot 10^{-9}} \cong 3,116 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\rho_{L(\text{HCP}_{[2\bar{1}\bar{1}0]}\text{Mg})} = 3,116 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

Pozn.: Poměr $c/a_{\text{Mg}} = 1,623 < c/a_{\text{ideal}}$



Obr. 7.14 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr $[2\bar{1}\bar{1}0]$ v HCP mřížce hořčíku

Příklad 7.15 Vypočítejte lineární hustotu atomů ρ_L [atomů/m] pro směr [0001] v hexagonální těsně uspořádané mřížce (HCP) hořčíku.

Určit: ρ_L pro směr [0001] a HCP mřížku

Zadáno: HCP mřížka

Směr [0001]

$a_{(\text{Mg})} = 320,9 \text{ pm}$ (0,3209 nm nebo $0,3209 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

$c_{(\text{Mg})} = 520,9 \text{ pm}$ (0,5209 nm nebo $0,5209 \cdot 10^{-9} \text{ m}$)

Řešení:

Podle obecného vzorce platí, že:

$$\rho_{L(\text{HCP}_{[0001]}\text{Mg})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{HCP}_{[0001]}\text{Mg}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-1}]$$

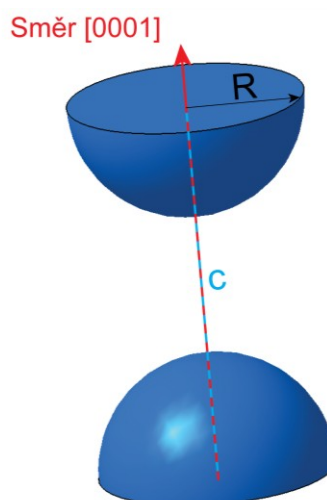
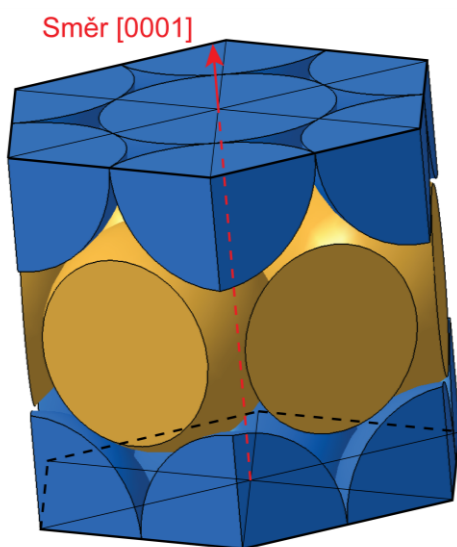
Vlastní výpočet:

$$\rho_{L(\text{HCP}_{[0001]}\text{Mg})} = \frac{X_{\text{Atomu_ve_smeru}}}{L_{\text{HCP}_{[0001]}\text{Mg}}} = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}}{c_{(\text{Mg})}} = \frac{1}{c_{(\text{Mg})}}$$

$$\rho_{L(\text{HCP}_{[0001]}\text{Mg})} = \frac{1}{0,5209 \cdot 10^{-9}} \cong 1,920 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}$$

$$\boxed{\rho_{L(\text{HCP}_{[0001]}\text{Mg})} = 1,920 \cdot 10^9 \text{ atomu} \cdot m^{-1}}$$

Pozn.: Poměr $c/a_{\text{Mg}} = 1,623 < c/a_{\text{ideal}}$



Obr. 7.15 Lineární hustota atomů ρ_L pro směr [0001] v HCP mřížce hořčíku

Příklad 7.16 Vypočítejte plošnou hustotu atomů ρ_s [atomů/m²] pro rovinu (10 $\bar{1}0$) v hexagonální těsně uspořádané mřížce (HCP) hořčíku.

Určit: ρ_s pro rovinu (10 $\bar{1}0$) a HCP mřížku

Zadáno: HCP mřížka a rovina (10 $\bar{1}0$)

$$a_{(\text{Mg})} = 320,9 \text{ pm} \quad (0,3209 \text{ nm nebo } 0,3209 \cdot 10^{-9} \text{ m})$$

$$c_{(\text{Mg})} = 520,9 \text{ pm} \quad (0,5209 \text{ nm nebo } 0,5209 \cdot 10^{-9} \text{ m})$$

Řešení:

Dle příkladu 3.14 (I. díl této sbírky) a podle obecného vzorce platí, že:

$$r = \frac{2R}{\sqrt{6}} \quad \rightarrow \quad \frac{\pi \cdot r^2}{\pi \cdot R^2} = \frac{2}{3}$$

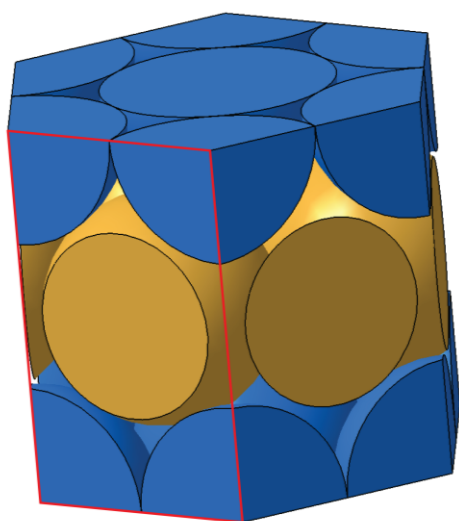
$$\rho_{S(\text{HCP}_{(10\bar{1}0)}_{\text{Mg}})} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{HCP}_{(10\bar{1}0)}_{\text{Mg}}}} \left[\frac{\text{atomu}}{\text{m}^2} \right] = [\text{atomu} \cdot \text{m}^{-2}]$$

Vlastní výpočet:

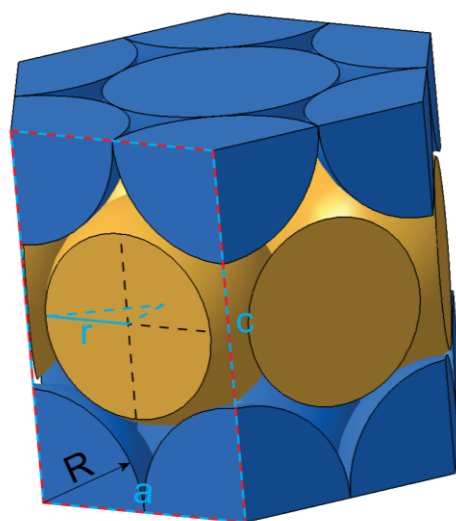
$$\rho_{S(\text{HCP}_{(10\bar{1}0)}_{\text{Mg}})} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{HCP}_{(10\bar{1}0)}_{\text{Mg}}}} = \frac{4 \cdot \frac{1}{4} + \frac{2}{3}}{a_{(\text{Mg})} \cdot c_{(\text{Mg})}} = \frac{5}{3a_{(\text{Mg})}c_{(\text{Mg})}}$$

$$\rho_{S(\text{HCP}_{(10\bar{1}0)}_{\text{Mg}})} = \frac{5}{3 \cdot (0,3209 \cdot 10^{-9}) (0,5209 \cdot 10^{-9})} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-2}$$

$$\rho_{S(\text{HCP}_{(10\bar{1}0)}_{\text{Mg}})} \cong 9,971 \cdot 10^{18} \text{ atomu} \cdot \text{m}^{-2}$$



Rovina (10 $\bar{1}0$)



Rovina (10 $\bar{1}0$)

Obr. 7.16 Plošná hustota atomů ρ_s pro rovinu (10 $\bar{1}0$) v HCP mřížce hořčíku

Příklad 7.17 Vypočítejte plošnou hustotu atomů ρ_s [atomů/m²] pro rovinu (0001) v hexagonální těsně uspořádané mřížce (HCP) hořčíku.

Určit: ρ_s pro rovinu (0001) a HCP mřížku

Zadáno: HCP mřížka a rovina (0001)

$$a_{(\text{Mg})} = 320,9 \text{ pm} \quad (0,3209 \text{ nm nebo } 0,3209 \cdot 10^{-9} \text{ m})$$

$$c_{(\text{Mg})} = 520,9 \text{ pm} \quad (0,5209 \text{ nm nebo } 0,5209 \cdot 10^{-9} \text{ m})$$

Řešení:

Dle příkladu 3.13 (I. díl této sbírky) a podle obecného vzorce platí, že:

$$S_{\text{Hexagonu}} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2$$

$$\rho_{S(\text{HCP}_{(0001)}_{\text{Mg}})} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{HCP}_{(0001)}_{\text{Mg}}}} \left[\frac{\text{atomu}}{m^2} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-2}]$$

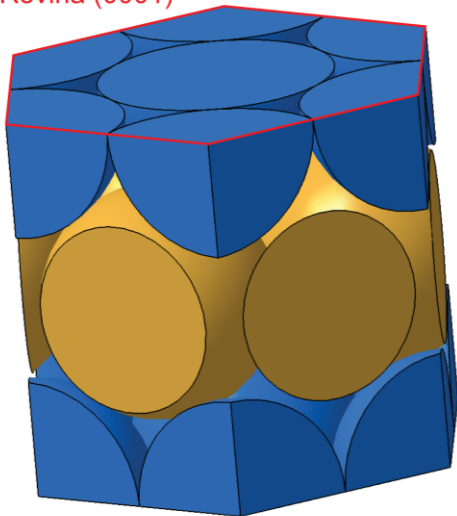
Vlastní výpočet:

$$\rho_{S(\text{HCP}_{(0001)}_{\text{Mg}})} = \frac{X_{\text{Atomu_v_rovine}}}{S_{\text{HCP}_{(0001)}_{\text{Mg}}}} = \frac{6 \cdot \frac{1}{3} + 1}{\frac{3\sqrt{3}}{2} a_{(\text{Mg})}^2} = \frac{2}{\sqrt{3} \cdot a_{(\text{Mg})}^2}$$

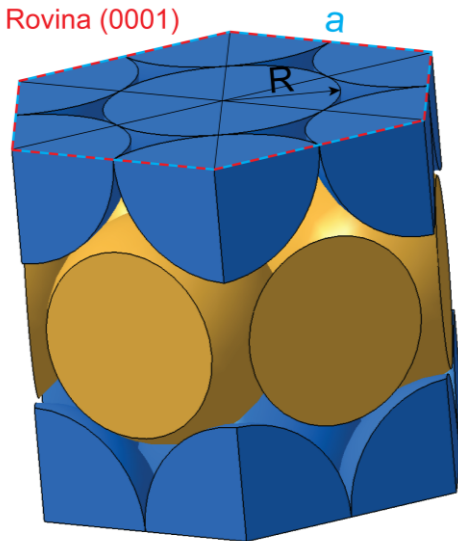
$$\rho_{S(\text{HCP}_{(0001)}_{\text{Mg}})} = \frac{2}{\sqrt{3} \cdot (0,3209 \cdot 10^{-9})^2} \cong 1,121 \cdot 10^{19} \text{ atomu} \cdot m^{-2}$$

$$\rho_{L(\text{HCP}_{(0001)}_{\text{Mg}})} = 1,121 \cdot 10^{19} \text{ atomu} \cdot m^{-2}$$

Rovina (0001)



Rovina (0001)



Obr. 7.17 Plošná hustota atomů ρ_s pro rovinu (0001) v HCP mřížce hořčíku

Příklad 7.18 Vypočítejte objemovou hustotu atomů ρ_V [atomů/m³] v hexagonální těsně uspořádané mřížce (HCP) hořčíku.

Určit: ρ_V pro HCP mřížku

Zadáno: HCP mřížka

$$a_{(\text{Mg})} = 320,9 \text{ pm} \quad (0,3209 \text{ nm nebo } 0,3209 \cdot 10^{-9} \text{ m})$$

$$c_{(\text{Mg})} = 520,9 \text{ pm} \quad (0,5209 \text{ nm nebo } 0,5209 \cdot 10^{-9} \text{ m})$$

Řešení:

Dle příkladu 3.13 (I. díl této sbírky) a podle obecného vzorce platí, že:

$$V_{\text{HCP}_m} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 \cdot c$$

$$\rho_{V(\text{HCP}_m)} = \frac{X_{\text{Atomu}_v_{\text{objemu}}}}{V_{\text{HCP}_m}} \left[\frac{\text{atomu}}{m^3} \right] = [\text{atomu} \cdot m^{-3}]$$

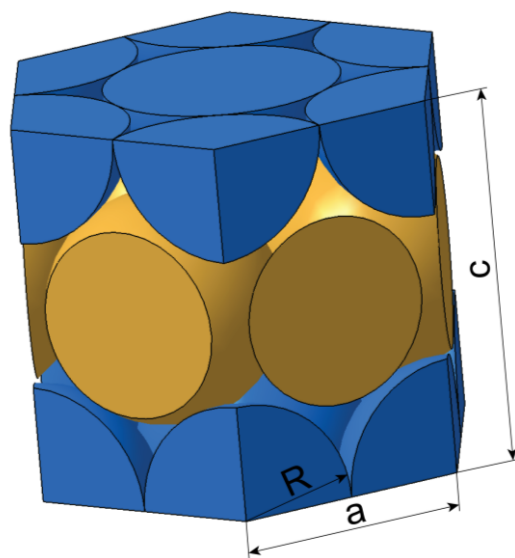
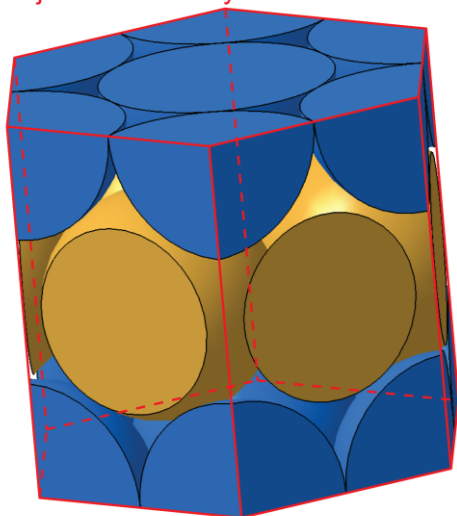
Vlastní výpočet:

$$\rho_{V(\text{HCP}_m)} = \frac{X_{\text{Atomu}_v_{\text{objemu}}}}{V_{\text{HCP}_m}} = \frac{6}{\frac{3\sqrt{3}}{2} a_{(\text{Mg})}^2 \cdot c_{(\text{Mg})}} = \frac{4}{\sqrt{3} \cdot a^2 \cdot c}$$

$$\rho_{V(\text{HCP}_m)} = \frac{4}{\sqrt{3} \cdot (0,3209 \cdot 10^{-9})^2 \cdot (0,5209 \cdot 10^{-9})}$$

$$\rho_{V(\text{HCP}_m)} \cong 4,305 \cdot 10^{28} \text{ atomu} \cdot m^{-3}$$

Objem HCP mřížky



Obr. 7.18 Objemová hustota atomů ρ_V v HCP mřížce hořčíku

8. Termodynamika kovů a slitin

Přehled nejdůležitějších veličin a vzorců:

Výpočty v **termodynamice kovů a slitin** (energetiky metalurgických dějů) představují poměrně širokou a důležitou aplikaci z oblasti termodynamických procesů (především chemické termodynamiky). Jedná se zejména o aplikaci I. a II. věty termodynamiky, tepelných kapacit a kritérií rovnováhy soustav.

Pro výpočet **množství tepla vneseného do materiálu** v rámci termodynamiky materiálů se nejčastěji používá vzorec vyplývající z Kirchhoffovy rovnice:

Množství vneseného tepla $\rightarrow$ Příslušné látkové množství $\rightarrow$ Pozn.: Uvedený vzorec platí pro změnu teploty bez fázové (nebo modifikační) přeměny.

$$Q_{p(X)} = \Delta H_{(X)} = n_{(X)} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_{p(X)} \cdot dT \quad [J]$$

Změna entalpie $\rightarrow$ Molární tepelná kapacita (izobarický děj $\rightarrow p = \text{konst.}$)

Závislost **molární tepelné kapacity** na teplotě se většinou vyjadřuje polynomem (hodnoty a , b , c jsou empirické konstanty, které se určují experimentálně a jsou tabelizované) a to **pro 1 mol** příslušného prvku:

$$C_{p(X)} = a_{(X)} + b_{(X)} \cdot T + c_{(X)} \cdot T^{-2}$$

Z II. věty termodynamiky (obecně popisující uskutečnitelnost a směr průběhu děje) vyplývá zavedení nové termodynamické funkce - **entropie**:

Entropie $\rightarrow$ Podmínka vratnosti děje (vratné děje = 0, nevratné děje $>$)

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \geq 0 \quad [J \cdot K^{-1}]$$

Reálně děje v izolované soustavě jsou nevratné děje. Entropie tedy roste a představuje tak zásadní kritérium pro **směr dějů**. Maximum entropie pak představuje dosažení termodynamické rovnováhy.

Standardní entropie $\rightarrow$ Změna entalpie při fázové (nebo modifikační) přeměně

$$\Delta S_{(X)} = S_{298(X)}^0 + \int_{T_{298}^0}^{T_{př}} \frac{C_{p(X)}}{T} dT + \frac{\Delta H_{př(X)}}{T_{př(X)}}$$

Pozn.: Uvedený vzorec platí pro 1 mol prvku

Příklad 8.1 Vypočítejte množství tepla, které je potřeba dodat pro ohřev **0,5 kg cínu** z teploty **27 °C** na **227 °C** při konstantním tlaku.

Určit: Q_p na ohřátí 0,5 kg cínu z $t_1 = 27^\circ\text{C}$ na $t_2 = 227^\circ\text{C}$

Zadáno: $m_{\text{Sn}} = 0,5 \text{ kg}$

$A_{r(\text{Sn})} = 118,710$

$t_1 = 27^\circ\text{C} \rightarrow T_1 = 27 + 273,15 = 300,15 \text{ K}$

$t_2 = 227^\circ\text{C} \rightarrow T_2 = 227 + 273,15 = 500,15 \text{ K}$

- z termodynamických tabulek pro cín (viz tab. 8.1) platí, že:

$C_{p(\text{Sn})} = 18,50 + 26,37 \cdot 10^{-3} T \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

Řešení:

Podle definic z teoretické části a také z výpočtů látkového množství platí, že:

$$M_{m(X)} = A_{r(X)} \cdot M_u \quad \left[1 \cdot g \cdot \text{mol}^{-1}\right] = \left[g \cdot \text{mol}^{-1}\right]$$

$$n_{(X)} = \frac{m_{(X)}}{M_{m(X)}} \quad \left[\frac{g}{g \cdot \text{mol}^{-1}}\right] = [\text{mol}]$$

$$C_{p(X)} = a_{(X)} + b_{(X)} \cdot T + c_{(X)} \cdot T^{-2} \quad \left[\frac{J}{\text{mol} \cdot K}\right]$$

$$Q_{p(X)} = n_{(X)} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_{p(X)} \cdot dT \quad \left[\text{mol} \cdot \frac{J}{\text{mol} \cdot K} \cdot K\right] = [J]$$

Vlastní výpočet:

Nejprve je nutné vypočítat látkové množství odpovídající dané hmotnosti cínu:

$$n_{(\text{Sn})} = \frac{m_{(\text{Sn})}}{M_{m(\text{Sn})}} = \frac{m_{(\text{Sn})}}{A_{r(\text{Sn})} \cdot M_u} = \frac{500g}{118,710g \cdot \text{mol}^{-1}} \cong 4,212 \text{ mol}$$

$$n_{(\text{Sn})} = 4,212 \text{ mol}$$

Tab. 8.1 Základní termodynamické hodnoty pro cín

Prvek	Modifikační přeměna		Tání		Tepelné kapacity C_p [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]			
	$t_{\text{př}}$ [°C]	$\Delta H_{\text{př}}$ [J/mol]	$t_{\text{tá}}$ [°C]	$\Delta H_{\text{tá}}$ [J/mol]	a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^{-5}$	Teplotní rozmezí [K]
Sn (s)	13,0	2090	232	7070	18,50	26,37		298 - $T_{\text{tá}}$
Sn (l)					30,56			$T_{\text{tá}}$ - 1300

Nyní již lze vypočítat množství potřebného tepla k danému ohřevu:

$$Q_{p(\text{Sn})} = n_{(\text{Sn})} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_{p(\text{Sn})} \cdot dT = 4,212 \cdot \int_{300,15}^{500,15} (18,50 + 26,37 \cdot 10^{-3} T) dT$$

$$Q_{p(\text{Sn})} = 4,212 \cdot \left[\int_{300,15}^{500,15} 18,50 dT + \int_{300,15}^{500,15} 26,37 \cdot 10^{-3} T dT \right]$$

$$\int_{300,15}^{500,15} 18,50 dT = 18,50 \cdot (500,15 - 300,15) = 3700$$

$$\int_{300,15}^{500,15} 26,37 \cdot 10^{-3} T dT = \frac{26,37 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (500,15^2 - 300,15^2) = 2110,391$$

$$Q_{p(\text{Sn})} = 4,212 \cdot (3700 + 2110,391) \cong 24473,37 J$$

$$Q_{p(\text{Sn})} = 24473,37 J = 24,473 kJ$$

Opakování z matematiky: Výpočet integrálů

$$\int_a^b C \cdot dx = C \cdot [x]_a^b = C \cdot (b - a)$$

$$\int_a^b C \cdot x^n dx = C \cdot \left[\frac{x^{n+1}}{n+1} \right]_a^b = \frac{C}{n+1} \cdot (b^{n+1} - a^{n+1})$$

50 Sn [Kr] 5s² 4d¹⁰ 5p² 118,710 Stannum Cín Ostatní kovy	Modifikační t_{př} [°C]		ΔH_{př} [J/mol]	Tepelné kapacity:		
	přeměna:			a	b·10 ³ c·10 ⁻⁵	
	<i>Pozn.: Cín má ve skutečnosti 3 modifikace (α - šedý cín, β - bílý cín a γ)</i>					
	Tání:	t_{tá} [°C]	ΔH_{tá} [J/mol]			
	Sn(s)	232	7070	18,50 26,37		
	Vypařování:	t_{vyp} [°C]	ΔH_{vyp}[J/mol]			
	Sn(l)	2750	270830	30,56		
	Standardní entropie:		S₂₉₈⁰ = 51,49 J·mol⁻¹·K⁻¹			

Obr. 8.1 Elektronová konfigurace a hlavní termodynamické hodnoty: Sn



Příklad 8.2 Vypočítejte množství tepla, které je potřeba dodat pro ohřev **1 kg mědi** z teploty 25 °C na 1000 °C při konstantním tlaku.

Určit: Q_p na ohřátí 1 kg mědi z $t_1 = 25^\circ\text{C}$ na $t_2 = 1000^\circ\text{C}$

Zadáno: $m_{\text{Cu}} = 1 \text{ kg}$

$A_{r(\text{Cu})} = 63,546$

$t_1 = 25^\circ\text{C} \rightarrow T_1 = 25 + 273,15 = 298,15 \text{ K}$

$t_2 = 1000^\circ\text{C} \rightarrow T_2 = 1000 + 273,15 = 1273,15 \text{ K}$

- z termodynamických tabulek pro měď (viz tab. 8.2) platí, že:

$C_{p(\text{Cu})} = 22,65 + 6,28 \cdot 10^{-3} T \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

Řešení:

Podle definic z teoretické části a také z výpočtů látkového množství platí, že:

$$M_{m(\text{X})} = A_{r(\text{X})} \cdot M_u \quad \left[1 \cdot g \cdot \text{mol}^{-1}\right] = \left[g \cdot \text{mol}^{-1}\right]$$

$$n_{(\text{X})} = \frac{m_{(\text{X})}}{M_{m(\text{X})}} \quad \left[\frac{g}{g \cdot \text{mol}^{-1}}\right] = [\text{mol}]$$

$$C_{p(\text{X})} = a_{(\text{X})} + b_{(\text{X})} \cdot T + c_{(\text{X})} \cdot T^{-2} \quad \left[\frac{J}{\text{mol} \cdot K}\right]$$

$$Q_{p(\text{X})} = n_{(\text{X})} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_{p(\text{X})} \cdot dT \quad \left[\text{mol} \cdot \frac{J}{\text{mol} \cdot K} \cdot K\right] = [J]$$

Vlastní výpočet:

Nejprve je nutné vypočítat látkové množství odpovídající dané hmotnosti mědi:

$$n_{(\text{Cu})} = \frac{m_{(\text{Cu})}}{M_{m(\text{Cu})}} = \frac{m_{(\text{Cu})}}{A_{r(\text{Cu})} \cdot M_u} = \frac{1000g}{63,546g \cdot \text{mol}^{-1}} \cong 15,737 \text{ mol}$$

$$n_{(\text{Cu})} = 15,737 \text{ mol}$$

Tab. 8.2 Základní termodynamické hodnoty pro měď

Prvek	Modifikační přeměna		Tání		Tepelné kapacity C_p [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]			
	$t_{\text{př}}$ [°C]	$\Delta H_{\text{př}}$ [J/mol]	$t_{\text{tá}}$ [°C]	$\Delta H_{\text{tá}}$ [J/mol]	a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^{-5}$	Teplotní rozmezí [K]
Cu (s)			1083	12580	22,65	6,28		298 - $T_{\text{tá}}$
Cu (l)					31,39			1600 - $T_{\text{tá}}$

Nyní již lze vypočítat množství potřebného tepla k danému ohřevu:

$$Q_{p(\text{Cu})} = n_{(\text{Cu})} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_{p(\text{Cu})} \cdot dT = 15,737 \cdot \int_{298,15}^{1273,15} (22,65 + 6,28 \cdot 10^{-3} T) dT$$

$$Q_{p(\text{Cu})} = 15,737 \cdot \left[\int_{298,15}^{1273,15} 22,65 dT + \int_{298,15}^{1273,15} 6,28 \cdot 10^{-3} T dT \right]$$

$$\int_{298,15}^{1273,15} 22,65 dT = 22,65 \cdot (1273,15 - 298,15) = 22083,75$$

$$\int_{298,15}^{1273,15} 6,28 \cdot 10^{-3} T dT = \frac{6,28 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (1273,15^2 - 298,15^2) = 4810,535$$

$$Q_{p(\text{Sn})} = 15,737 \cdot (22083,75 + 4810,535) \cong 423235,363$$

$$Q_{p(\text{Sn})} = 423235,363 \text{ J} = 423,2 \text{ kJ}$$

Opakování z matematiky: Výpočet integrálů

$$\int_a^b C \cdot dx = C \cdot [x]_a^b = C \cdot (b - a)$$

$$\int_a^b C \cdot x^n dx = C \cdot \left[\frac{x^{n+1}}{n+1} \right]_a^b = \frac{C}{n+1} \cdot (b^{n+1} - a^{n+1})$$

29 Cu [Ar] 4s¹ 3d¹⁰ 63,546 Cuprum Měď' Tranzitivní kovy	Modifikační t_{př} [°C]		ΔH_{př} [J/mol]	Tepelné kapacity:	
	přeměna:			a	b·10 ³ c·10 ⁻⁵
	Tání:	t_{tá} [°C]	ΔH_{tá} [J/mol]		
	Cu(s)	1083	12580	22,65	6,28
	Vypařování:	t_{vyp} [°C]	ΔH_{vyp} [J/mol]		
	Cu(l)	2750	306830	31,39	
Standardní entropie:			S₂₉₈⁰ = 33,32 J·mol⁻¹·K⁻¹		

Obr. 8.2 Elektronová konfigurace a hlavní termodynamické hodnoty: Cu



Příklad 8.3 Vypočítejte množství tepla, které je potřeba dodat pro ohřev **1 kg hliníku** z teploty 25 °C na 660 °C při konstantním tlaku.

Určit: Q_p na ohřátí 1 kg hliníku z $t_1 = 25^\circ\text{C}$ na $t_2 = 660^\circ\text{C}$

Zadáno: $m_{\text{Al}} = 1 \text{ kg}$

$A_{r(\text{Al})} = 26,982$

$t_1 = 25^\circ\text{C} \rightarrow T_1 = 25 + 273,15 = 298,15 \text{ K}$

$t_2 = 660^\circ\text{C} \rightarrow T_2 = 660 + 273,15 = 933,15 \text{ K}$

- z termodynamických tabulek pro hliník (viz tab. 8.3) platí, že:

$C_{p(\text{Al})} = 20,68 + 12,39 \cdot 10^{-3} T \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

Řešení:

Podle definic z teoretické části a také z výpočtů látkového množství platí, že:

$$M_{m(\text{X})} = A_{r(\text{X})} \cdot M_u \quad \left[1 \cdot g \cdot \text{mol}^{-1}\right] = \left[g \cdot \text{mol}^{-1}\right]$$

$$n_{(\text{X})} = \frac{m_{(\text{X})}}{M_{m(\text{X})}} \quad \left[\frac{g}{g \cdot \text{mol}^{-1}}\right] = [\text{mol}]$$

$$C_{p(\text{X})} = a_{(\text{X})} + b_{(\text{X})} \cdot T + c_{(\text{X})} \cdot T^{-2} \quad \left[\frac{J}{\text{mol} \cdot K}\right]$$

$$Q_{p(\text{X})} = n_{(\text{X})} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_{p(\text{X})} \cdot dT \quad \left[\text{mol} \cdot \frac{J}{\text{mol} \cdot K} \cdot K\right] = [J]$$

Vlastní výpočet:

Nejprve je nutné vypočítat látkové množství odpovídající dané hmotnosti hliníku:

$$n_{(\text{Al})} = \frac{m_{(\text{Al})}}{M_{m(\text{Al})}} = \frac{m_{(\text{Al})}}{A_{r(\text{Al})} \cdot M_u} = \frac{1000g}{26,982g \cdot \text{mol}^{-1}} \cong 37,062 \text{ mol}$$

$$n_{(\text{Al})} = 37,062 \text{ mol}$$

Tab. 8.3 Základní termodynamické hodnoty pro hliník

Prvek	Modifikační přeměna		Tání		Tepelné kapacity C_p [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]			
	$t_{\text{př}}$ [°C]	$\Delta H_{\text{př}}$ [J/mol]	$t_{\text{tá}}$ [°C]	$\Delta H_{\text{tá}}$ [J/mol]	a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^{-5}$	Teplotní rozmezí [K]
Al (s)			660	10460	20,68	12,39		298 - $T_{\text{tá}}$
Al (l)					29,30			$T_{\text{tá}}$ - 1273

Nyní již lze vypočítat množství potřebného tepla k danému ohřevu:

$$Q_{p(\text{Al})} = n_{(\text{Al})} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_{p(\text{Al})} \cdot dT = 37,062 \cdot \int_{298,15}^{933,15} (20,68 + 12,39 \cdot 10^{-3} T) dT$$

$$Q_{p(\text{Al})} = 37,062 \cdot \left[\int_{298,15}^{933,15} 20,68 dT + \int_{298,15}^{933,15} 12,39 \cdot 10^{-3} T dT \right]$$

$$\int_{298,15}^{933,15} 20,68 dT = 20,68 \cdot (933,15 - 298,15) = 13131,8$$

$$\int_{298,15}^{933,15} 12,39 \cdot 10^{-3} T dT = \frac{12,39 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (933,15^2 - 298,15^2) = 4843,719$$

$$Q_{p(\text{Al})} = 37,062 \cdot (13131,8 + 4843,719) \cong 666208,685$$

$$Q_{p(\text{Al})} = 666208,685 \text{ J} = 666,2 \text{ kJ}$$

Opakování z matematiky: Výpočet integrálů

$$\int_a^b C \cdot dx = C \cdot [x]_a^b = C \cdot (b - a)$$

$$\int_a^b C \cdot x^n dx = C \cdot \left[\frac{x^{n+1}}{n+1} \right]_a^b = \frac{C}{n+1} \cdot (b^{n+1} - a^{n+1})$$

13 Al [Ne] 3s² 3p¹ 26,982 Aluminium Hliník Ostatní kovy	Modifikační t_{př} [°C]		ΔH_{př} [J/mol]	Tepelné kapacity:	
	přeměna:			a	b · 10 ³ c · 10 ⁻⁵
	Tání:	t_{tá} [°C]	ΔH_{tá} [J/mol]		
	Al(s)	660	10460	20,68	12,39
	Vypařování:	t_{vyř} [°C]	ΔH_{vyř} [J/mol]		
	Al(l)	2500	291350	29,30	
Standardní entropie:		S₂₉₈⁰ = 28,33 J · mol⁻¹ · K⁻¹			

Obr. 8.3 Elektronová konfigurace a hlavní termodynamické hodnoty: Al



Příklad 8.4 Vypočítejte množství tepla, které je potřeba dodat pro ohřev **1 kg hliníku** z teploty 25 °C na 850 °C (tedy s fázovou přeměnou) při konstantním tlaku.

Určit: Q_p na ohřátí 1 kg hliníku z $t_1 = 25^\circ\text{C}$ na $t_2 = 850^\circ\text{C}$

Zadáno: $m_{\text{Al}} = 1 \text{ kg}$

$A_{r(\text{Al})} = 26,982$

$t_1 = 25^\circ\text{C} \rightarrow T_1 = 25 + 273,15 = 298,15 \text{ K}$

$t_2 = 850^\circ\text{C} \rightarrow T_2 = 850 + 273,15 = 1123,15 \text{ K}$

$t_{\text{tá}(\text{Al})} = 660^\circ\text{C} \rightarrow T_{\text{tá}(\text{Al})} = 660 + 273,15 = 933,15 \text{ K}$

- z termodynamických tabulek pro hliník (viz tab. 8.4) platí, že:

$C_{p(\text{Al}_{1 \rightarrow \text{Ttá}})} = 20,68 + 12,39 \cdot 10^{-3} T \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ - platí do $T_{\text{tá}}$

$C_{p(\text{Al}_{\text{Ttá} \rightarrow 2})} = 29,30 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ - platí od $T_{\text{tá}}$ do 1273 K

Řešení:

Podle definic z teoretické části a také z výpočtů látkového množství platí, že:

$$M_{m(\text{X})} = A_{r(\text{X})} \cdot M_u \quad \left[1 \cdot g \cdot \text{mol}^{-1} \right] = \left[g \cdot \text{mol}^{-1} \right]$$

$$n_{(\text{X})} = \frac{m_{(\text{X})}}{M_{m(\text{X})}} \quad \left[\frac{g}{g \cdot \text{mol}^{-1}} \right] = [\text{mol}]$$

$$C_{p(\text{X})} = a_{(\text{X})} + b_{(\text{X})} \cdot T + c_{(\text{X})} \cdot T^{-2} \quad \left[\frac{J}{\text{mol} \cdot K} \right]$$

$$Q_{p(\text{X})} = n_{(\text{X})} \cdot \int_{T_1}^{T_2} C_{p(\text{X})} \cdot dT \quad \left[\text{mol} \cdot \frac{J}{\text{mol} \cdot K} \cdot K \right] = [J]$$

- množství tepla s fázovou (nebo modifikační) přeměnou:

$$Q_{p(\text{X})} = n_{(\text{X})} \cdot \int_{T_1}^{T_{\text{tá}}} C_{p(\text{X}_{1 \rightarrow \text{Ttá}})} \cdot dT + n_{(\text{X})} \cdot \Delta H_{\text{tá}(\text{X})} + n_{(\text{X})} \cdot \int_{T_{\text{tá}}}^{T_2} C_{p(\text{X}_{\text{Ttá} \rightarrow 2})} \cdot dT$$

Vlastní výpočet:

Nejprve je nutné vypočítat látkové množství odpovídající dané hmotnosti hliníku:

$$n_{(\text{Al})} = \frac{m_{(\text{Al})}}{M_{m(\text{Al})}} = \frac{m_{(\text{Al})}}{A_{r(\text{Al})} \cdot M_u} = \frac{1000g}{26,982g \cdot \text{mol}^{-1}} \cong 37,062 \text{ mol}$$

$$\boxed{n_{(\text{Al})} = 37,062 \text{ mol}}$$

- stejné látkové množství jako v předchozím příkladě (stále máme 1000g hliníku)

Tab. 8.4 Základní termodynamické hodnoty pro hliník

Prvek	Modifikační přeměna		Tání		Tepelné kapacity C_p [$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$]			
	$t_{př}$ [$^{\circ}C$]	$\Delta H_{př}$ [J/mol]	$t_{tá}$ [$^{\circ}C$]	$\Delta H_{tá}$ [J/mol]	a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^{-5}$	Teplotní rozmezí [K]
Al (s)			660	10460	20,68	12,39		$298 - T_{tá}$
Al (l)					29,30			$T_{tá} - 1273$

Nyní již lze vypočítat množství potřebného tepla k danému ohřevu:

$$Q_{p(Al)} = n_{(Al)} \cdot \int_{T_1}^{T_{tá}} C_{p(Al_{1 \rightarrow tá})} \cdot dT + n_{(Al)} \cdot \Delta H_{tá(Al)} + n_{(Al)} \cdot \int_{T_{tá}}^{T_2} C_{p(Al_{tá \rightarrow 2})} \cdot dT$$

$$Q_{p(Al)} = n_{(Al)} \cdot \left[\int_{298,15}^{933,15} (20,68 + 12,39 \cdot 10^{-3} T) dT + 10460 + \int_{933,15}^{1123,15} 29,30 dT \right]$$

$$\int_{298,15}^{933,15} 20,68 dT = 20,68 \cdot (933,15 - 298,15) = 13131,8$$

$$\int_{298,15}^{933,15} 12,39 \cdot 10^{-3} T dT = \frac{12,39 \cdot 10^{-3}}{2} \cdot (933,15^2 - 298,15^2) = 4843,719$$

$$\int_{933,15}^{1123,15} 29,30 dT = 29,30 \cdot (1123,15 - 933,15) = 5567$$

$$Q_{p(Al)} = 37,062 \cdot (13131,8 + 4843,719 + 10460 + 5567) \cong 1260201,359$$

$$Q_{p(Al)} = 1260201,359 J = 1260,2 kJ$$

Opakování z matematiky: Výpočet integrálů

$$\int_a^b C \cdot dx = C \cdot [x]_a^b = C \cdot (b - a)$$

$$\int_a^b C \cdot x^n dx = C \cdot \left[\frac{x^{n+1}}{n+1} \right]_a^b = \frac{C}{n+1} \cdot (b^{n+1} - a^{n+1})$$

Příklad 8.5 Vypočítejte změnu entropie při tání **1 kg mědi** při konstantním tlaku.

Určit: $\Delta S_{(\text{Cu})}$ při tání 1 kg mědi [$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$]

Zadáno: $m_{\text{Cu}} = 1 \text{ kg}$

$A_{r(\text{Cu})} = 63,546$

$\Delta H_{\text{tá}(\text{Cu})} = 12580 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$

$t_{\text{tá}(\text{Cu})} = 1083^\circ\text{C} \rightarrow T_{\text{tá}(\text{Cu})} = 1083 + 273,15 = 1356,15 \text{ K}$

Řešení:

Podle definic z teoretické části a také z výpočtů látkového množství platí, že:

$$M_{m(\text{X})} = A_{r(\text{X})} \cdot M_u \quad \left[1 \cdot g \cdot \text{mol}^{-1}\right] = \left[g \cdot \text{mol}^{-1}\right]$$

$$n_{(\text{X})} = \frac{m_{(\text{X})}}{M_{m(\text{X})}} \quad \left[\frac{g}{g \cdot \text{mol}^{-1}}\right] = [\text{mol}]$$

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \geq 0 \quad \left[\text{J} \cdot \text{K}^{-1}\right]$$

→ pro 1 mol prvku X při jeho tání ($p = \text{konst.}$ a $T = \text{konst.}$):

$$\Delta S_{\text{tá}(\text{X})}^0 = \frac{\Delta H_{\text{tá}(\text{X})}}{T_{\text{tá}(\text{X})}} \quad \left[\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}\right]$$

→ pro n molů prvku X při jeho tání ($p = \text{konst.}$ a $T = \text{konst.}$):

$$\Delta S_{\text{tá}(\text{X})}^0 = n_{(\text{X})} \cdot \frac{\Delta H_{\text{tá}(\text{X})}}{T_{\text{tá}(\text{X})}} \quad \left[\text{mol} \cdot \frac{\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}}{\text{K}}\right] = \left[\text{J} \cdot \text{K}^{-1}\right]$$

Vlastní výpočet:

Nejprve je nutné vypočítat látkové množství odpovídající dané hmotnosti mědi:

$$n_{(\text{Cu})} = \frac{m_{(\text{Cu})}}{M_{m(\text{Cu})}} = \frac{m_{(\text{Cu})}}{A_{r(\text{Cu})} \cdot M_u} = \frac{1000g}{63,546g \cdot \text{mol}^{-1}} \cong 15,737 \text{ mol}$$

$$\boxed{n_{(\text{Cu})} = 15,737 \text{ mol}}$$

Nyní již lze vypočítat změnu entropie:

$$\Delta S_{\text{tá}(\text{Cu})}^0 = n_{(\text{Cu})} \cdot \frac{\Delta H_{\text{tá}(\text{Cu})}}{T_{\text{tá}(\text{Cu})}} = 15,737 \text{ mol} \cdot \frac{12580 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}}{1356,15 \text{ K}}$$

$$\boxed{\Delta S_{\text{Tá}}^0 \cong 145,981 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}}$$

Příklad 8.6 Vypočítejte změnu entropie **jednotkového množství železa** (pro 1 mol) z teploty 25°C na teplotu přeměny $\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta}$ (tzv. Curieho bod) při konstantním tlaku.

Určit: $\Delta S_{(\text{Fe})}$ z teploty 25°C na teplotu přeměny $\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta}$ pro 1 mol [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]

Zadáno: $n_{(\text{Fe})} = 1 \text{ mol}$

$t_1 = 25^\circ\text{C} \rightarrow T_1 = 25 + 273,15 = 298,15 \text{ K}$ (standardní teplota)

- hodnota standardní entropie pro železo (z tabulek):

$S_{298(\text{Fe})}^0 = 27,17 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

$t_{\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta}} = 760^\circ\text{C} \rightarrow T_{\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta}} = 760 + 273,15 = 1033,15 \text{ K}$

$\Delta H_{\text{př}(\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta})} = 2768 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$

- z termodynamických tabulek pro hliník (viz tab. 8.5) platí, že:

$C_{p(\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta})} = 19,26 + 21,01 \cdot 10^{-3} T \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ - platí do $T_{\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta}}$

Řešení:

Podle definic z teoretické části a také z výpočtů látkového množství platí, že:

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \geq 0 \quad \left[\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \right]$$

$\rightarrow$ pro 1 mol prvku X ze standardní teploty s modifikační přeměnou ($p = \text{konst.}$):

$$\Delta S_{(X)} = S_{298(X)}^0 + \int_{T_{298}}^{T_{\text{př}}} \frac{C_{p(X)}}{T} dT + \frac{\Delta H_{\text{př}(X)}}{T_{\text{př}(X)}} \quad \left[\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \right]$$

Vlastní výpočet:

Nejprve je nutné zapsat vzorec dle zadání:

$$\Delta S_{1033,15(\text{Fe}_{\beta})}^0 = S_{298(\text{Fe}_{\alpha})}^0 + \int_{298,15}^{1033,15} \frac{C_{p(\text{Fe}_{\alpha})}}{T} dT + \frac{\Delta H_{\text{př}(\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta})}}{T_{\text{př}(\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta})}}$$

Tab. 8.5 Základní termodynamické hodnoty pro železo

Prvek	Modifikační přeměna		Tání		Tepelné kapacity C_p [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]			
	$t_{\text{př}} [^\circ\text{C}]$	$\Delta H_{\text{př}} [\text{J/mol}]$	$t_{\text{tá}} [^\circ\text{C}]$	$\Delta H_{\text{tá}} [\text{J/mol}]$	a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^{-5}$	Teplotní rozmezí [K]
$\text{Fe}_{\alpha} (\text{s})$	760	2768			19,26	21,01		273 - 1033
$\text{Fe}_{\beta} (\text{s})$	907	920			37,67			1033 - 1181
$\text{Fe}_{\gamma} (\text{s})$	1401	1170			7,70	19,51		1181 - 1674
$\text{Fe}_{\delta} (\text{s})$			1534	15230	43,95			1674 - 1873
$\text{Fe} (\text{l})$					41,86			1873- $T_{\text{tá}}$
Standardní entropie $S_{298(\text{Fe})}^0$							27,17 $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	

$$\int_{298,15}^{1033,15} \frac{C_{p(\text{Fe}_\alpha)}}{T} dT = \int_{298,15}^{1033,15} \left(\frac{19,26 + 21,01 \cdot 10^{-3} T}{T} \right) dT$$

$$\int_{298,15}^{1033,15} \frac{C_{p(\text{Fe}_\alpha)}}{T} dT = \int_{298,15}^{1033,15} \frac{19,26}{T} dT + \int_{298,15}^{1033,15} \frac{21,01 \cdot 10^{-3} T}{T} dT$$

$$\int_{298,15}^{1033,15} \frac{19,26}{T} dT = 19,26 \ln \left(\frac{1033,15}{298,15} \right) \cong 23,936$$

$$\int_{298,15}^{1033,15} \frac{21,01 \cdot 10^{-3} T}{T} dT = 21,01 \cdot 10^{-3} \cdot (1033,15 - 298,15) \cong 15,442$$

$$\frac{\Delta H_{\text{př}(\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta})}}{T_{\text{př}(\text{Fe}_{\alpha \rightarrow \beta})}} = \frac{2768}{1033,15} \cong 2,679$$

$$\Delta S_{1033,15(\text{Fe}_\beta)}^0 = 27,17 + (23,936 + 15,442) + 2,679 = 69,227 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$\Delta S_{1033,15(\text{Fe}_\beta)}^0 = 69,227 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

Opakování z matematiky: Výpočet integrálů

$$\int_a^b \frac{C}{x} \cdot dx = C \cdot [\ln(x)]_a^b = C \cdot [\ln(b) - \ln(a)] = C \cdot \ln \left(\frac{b}{a} \right)$$

26 Fe [Ar] 4s² 3d⁶ 55,847 Ferrum Železo Tranzitivní kovy	Modifikační t_{př} [°C]		ΔH_{př} [J/mol]		Tepelné kapacity:	
	přeměna:				a	b·10 ³ c·10 ⁻⁵
	Fe(s,α)	760	2768		19,26	21,01
	Fe(s,β)	907	920		37,67	
	Fe(s,χ)	1401	1170		7,70	19,51
Tání:		t_{tá} [°C]	ΔH_{tá} [J/mol]			
		Fe(s,δ)	1534	15230	43,95	
Vypařování:		t_{vyp} [°C]	ΔH_{vyp}[J/mol]			
		Fe(l)	3070	340280	41,86	
Standardní entropie:		S₂₉₈⁰ = 27,17 J·mol⁻¹·K⁻¹				

Obr. 8.4 Elektronová konfigurace a hlavní termodynamické hodnoty: Fe

Příklad 8.7 Vypočítejte změnu Gibbsovy energie při tání **1 kg mědi**.

 Určit: $\Delta G_{(Cu)}$ při tání 1 kg mědi

 Zadáno: $m_{Cu} = 1 \text{ kg}$
 $A_{r(Cu)} = 63,546$
 $\Delta H_{tá(Cu)} = 12580 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$
 $t_{tá(Cu)} = 1083^\circ\text{C} \rightarrow T_{tá(Cu)} = 1083 + 273,15 = 1356,15 \text{ K}$

Řešení:

Podle definic z teoretické části a také z výpočtů látkového množství platí, že:

$$M_{m(X)} = A_{r(X)} \cdot M_u \quad \left[1 \cdot g \cdot \text{mol}^{-1}\right] = \left[g \cdot \text{mol}^{-1}\right]$$

$$n_{(X)} = \frac{m_{(X)}}{M_{m(X)}} \quad \left[\frac{g}{g \cdot \text{mol}^{-1}}\right] = [\text{mol}]$$

$$\Delta G_{(X)} = n_{(X)} \cdot \Delta H_{(X)} - T \cdot \Delta S_{(X)} \quad [J = J - K \cdot J \cdot K^{-1}]$$

$$\Delta S_{Tá(X)}^0 = n_{(X)} \cdot \frac{\Delta H_{Tá(X)}}{T_{Tá(X)}} \quad \left[\text{mol} \cdot \frac{J \cdot \text{mol}^{-1}}{K}\right] = [J \cdot K^{-1}]$$

 - z těchto vzorců je patrné, že hodnota $\Delta G_{(X)}$ při tání prvku X musí být rovna 0:

$$\Delta G_{Tá(X)} = n_{(X)} \cdot \Delta H_{Tá(X)} - T_{Tá(X)} \cdot n_{(X)} \cdot \frac{\Delta H_{Tá(X)}}{T_{Tá(X)}}$$

$$\Delta G_{Tá(X)} = n_{(X)} \cdot \Delta H_{Tá(X)} - n_{(X)} \cdot \Delta H_{Tá(X)} = 0$$

Vlastní výpočet:

Nejprve je nutné vypočítat látkové množství odpovídající dané hmotnosti mědi:

$$n_{(Cu)} = \frac{m_{(Cu)}}{M_{m(Cu)}} = \frac{m_{(Cu)}}{A_{r(Cu)} \cdot M_u} = \frac{1000g}{63,546g \cdot \text{mol}^{-1}} \cong 15,737 \text{ mol}$$

$$n_{(Cu)} = 15,737 \text{ mol}$$

Tab. 8.6 Základní termodynamické hodnoty pro měď

Prvek	Modifikační přeměna		Tání		Tepelné kapacity C_p [$J \cdot \text{mol}^{-1} \cdot K^{-1}$]			
	$t_{př}$ [$^\circ\text{C}$]	$\Delta H_{př}$ [J/mol]	$t_{tá}$ [$^\circ\text{C}$]	$\Delta H_{tá}$ [J/mol]	a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^{-5}$	Teplotní rozmezí [K]
Cu (s)			1083	12580	22,65	6,28		298 - $T_{tá}$
Cu (l)					31,39			1600 - $T_{tá}$



Nyní již lze vypočítat změnu Gibbsovy energie při tání 1 kg mědi:

$$\Delta G_{Tá(Cu)} = n_{(Cu)} \cdot \Delta H_{Tá(Cu)} - T_{Tá(X)} \cdot \Delta S_{Tá(Cu)}^0$$

$$\Delta S_{Tá(Cu)}^0 = n_{(Cu)} \cdot \frac{\Delta H_{Tá(Cu)}}{T_{Tá(Cu)}} = 15,737 \text{ mol} \cdot \frac{12580 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}}{1356,15 \text{ K}}$$

$$\Delta S_{Tá(Cu)}^0 = 145,981 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$$

- již bylo vypočítáno v příkladu 3.X

$$\Delta G_{Tá(Cu)} = n_{(Cu)} \cdot \Delta H_{Tá(Cu)} - T_{Tá(X)} \cdot \Delta S_{Tá(Cu)}^0$$

$$\Delta G_{Tá(Cu)} = 15,737 \text{ mol} \cdot 12580 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} - 1356,15 \text{ K} \cdot 145,981 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\Delta G_{Tá(Cu)} = 197971,46 \text{ J} - 197972,13 \text{ J}$$

$$\Delta G_{Tá(Cu)} = -0,67 \text{ J} \rightarrow 0 \text{ J}$$

Pozn.: Rozdíl oproti teoretické hodnotě je dán zaokrouhlovací chybou

29 Cu [Ar] 4s¹ 3d¹⁰ 63,546 Cuprum Měď' Tranzitivní kovy	Modifikační t_{př} [°C]		ΔH_{př} [J/mol]	Tepelné kapacity:	
	přeměna:			a	b·10 ³ c·10 ⁻⁵
	Tání:	t_{tá} [°C]	ΔH_{tá} [J/mol]		
	Cu(s)	1083	12580	22,65	6,28
	Vypařování:	t_{vyp} [°C]	ΔH_{vyp} [J/mol]		
	Cu(l)	2750	306830	31,39	
Standardní entropie:		S₂₉₈⁰ = 33,32 J·mol⁻¹·K⁻¹			

Obr. 8.5 Elektronová konfigurace a hlavní termodynamické hodnoty: **Cu**



Seznam použité literatury

- [1] SMALLMAN, R., E., NGAN, A., H., W. *Physical Metallurgy and Advanced Materials*. 7. vydání. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2007. 650 p. ISBN 978-0-7306-6906-1
- [2] CAHN, R., W., HAASEN, P. *Physical Metallurgy. Volume I*. 4. vydání. Amsterdam: North-Holland, 1996. 1042 p. ISBN 0-444-89875-1
- [3] KALOUSEK, Jaroslav et al. *Fyzikální chemie metalurgických procesů*. Liberec: VŠST, 1990. 324 s. 55-807-90

Název	Sbírka řešených příkladů z fyzikální metalurgie II. díl
Autoři	Ing. et Bc. Jiří Sobotka, Ph.D.
Určeno pro	studenty fakulty strojní
Vydavatel	Technická univerzita v Liberci
Schváleno	Rektorátem TU v Liberci dne 23.10.2014, čj. RE 102/14
Vyšlo	v říjnu 2014
Počet stran	87
Vydání	první
Rok prvního vydání	2014
Tiskárna	Vysokoškolský podnik Liberec, s.r.o. Hálkova 6, Liberec
Číslo publikace	55-102-14

Tato publikace neprošla redakční ani jazykovou úpravou.

ISBN 978-80-7494-132-0