

13.1 Určete hustotu wolframu. Wolfram krystalizuje v prostorově centrované kubické mřížci s mřížovým parametrem $a = 3,16 \cdot 10^{-10}$ m, relativní atomová hmotnost je $A_r = 183,8$.

(atomová hmotnostní konstanta $m_u = 1,66 \cdot 10^{-27}$ kg)

Vydeme se vztahu pro hustotu a přímo dostaneme výsledek (n je počet atomů v základní buňce (BCC))

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{nA_r m_u}{a^3} \sim 19 \cdot 10^3 \text{ kgm}^{-3}.$$

13.2 Při pokojové teplotě krystalizuje cín (tzv. bílý, β cín) v prostorově centrované tetragonální mřížci s parametry $a = 5,8 \cdot 10^{-10}$ m a $c = 3,18 \cdot 10^{-10}$ m. Určete mřížový parametr nízkoteplotní α (šedý cín) modifikace krystalizující v plošně centrované kubické mřížci, víte-li, že hustota β cínu je 7365 kgm^{-3} a hustota α cínu je 5770 kgm^{-3} .

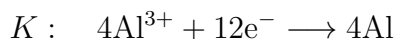
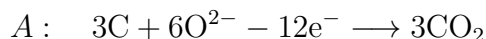
Vzorec pro hustotu z minulého příkladu si napíšeme pro obě modifikace

$$\rho_\beta = \frac{n_\beta A_r m_u}{a_\beta^2 c}$$
$$\rho_\alpha = \frac{n_\alpha A_r m_u}{a_\alpha^3}.$$

Spojením těchto dvou vztahů (eliminace neznámého $A_r m_u$) dostaneme výsledek

$$a_\alpha^3 = \frac{n_\alpha \rho_\beta a_\beta^2 c}{n_\beta \rho_\alpha} \Rightarrow a_\alpha = 6,4 \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

13.3 Elektrolytická výroba hliníku je založená na elektrolýze oxidu hlinitého Al_2O_3 . Děje probíhající na anodě a katodě jde zapsat následovně:



Určete kolik kg uhlíkové anody se spotřebuje na výrobu jednoho kg hliníku. Molární hmotnost Al je $M_{m \text{ Al}} = 0,027 \text{ kgmol}^{-1}$ a uhlíku $M_{m \text{ C}} = 0,012 \text{ kgmol}^{-1}$

Ze zápisu chemických reakcí vidíme, že počet spotřebovaných atomů uhlíku je čtvrtinový proti počtu elektronů, zatímco počet vzniklých atomů hliníku je třetinový $3N_C = 12N_e = 4N_{Al}$. Počty atomů jsou svázány s Avogadrovou konstantou $N_{\text{atomu}} = \frac{m_{\text{atomu}}}{M_{\text{atomu}}} N_A$, takže můžeme psát

$$3 \frac{m_C}{M_{m \text{ C}}} N_A = 4 \frac{m_{Al}}{M_{m \text{ Al}}} N_A$$

a tedy

$$m_C = \frac{3}{4} \frac{M_{\text{m Al}}}{M_{\text{m CmAl}}} = 1,6 \text{ kg} .$$

13.4 Ukažte pomocí maticové reprezentace, ze dvojí aplikací C_4 dostaneme C_2 .

Sestavíme maticovou reprezentaci C_2 (viz 2.2) a vynasobíme ji samu se sebou

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

což je maticová reprezentace C_2 .

13.5 Nalezněte prvky symetrie následujících molekul: oxidu uhličitého (CO_2), metan (CH_4), propandien (allen, C_3H_4)

• CO_2

$D_{\infty h}$: identita, inverze, nekonečně čttná osa rotace, nekonečný počet dvoučetných os, nekonečný počet vertikálních rovin zrcadlení, horizontální rovina zrcadlení

• CH_4

T_d : identita, čtyři trojčetné osy (atom–těžište), tři dvojčetné osy, tři inverzní čtyřčetné osy, šest rovin zrcadlení

• C_3H_4

D_{2d} : identita, tři dvojčetné osy, inverzní čtyřčetná osa, dvě vertikální roviny zrcadlení

13.6 Určete meziróvinné vzdálenosti pro osnovu rovin (310) a (301) v kubické a tetragonální mříži.

Viz 4.3.

13.7 Jaká je vlnová délka elektronu urychleného napětím 100 kV? Jakou vlnovou délku by měl foton se stejnou energií?

Využijeme de Broglieho vztahů (6.2 — 6.4) a pro vlnovou délku elektronu dostaneme $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 3,8 \cdot 10^{-13} \text{ m}$ kde $E = eV$ je energie elektronu. V druhém případě platí pro energii fotonu vztah $E = \frac{hc}{\lambda}$ a tedy $\lambda = 1,2 \cdot 10^{-12} \text{ m}$.

13.8 Určete stabilní vzdálenost dvou částic v Leonard-Jonesově potenciálu:

$$V(r) = 4E \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] .$$

Z podmínky na nulovost první derivace (viz 3.4) dostáváme $r_0 = \sigma \sqrt[6]{2}$.

13.9 Určete pravidla pro vyhasínání reflexí u prostorově centrované kubické mříže.

Zkonstruujeme strukturní faktor analogicky jako v 5.2. V BCC struktuře máme dva atomy na souřadnicích (0, 0, 0) a $(1/2, 1/2, 1/2)$, tj. strukturní faktor má tvar

$$F = f (1 + e^{-i\pi(h+k+l)})$$

a tedy strukturní faktor je nenulový pro ty reflexe jejich součet indexů je sudý.

13.10 Pomocí Hundových pravidel určete termy následujících atomů: N ($[He]2s^2 2p^3$), F ($[He]2s^2 2p^5$).

N ($^4S_{\frac{3}{2}}$), F ($^2P_{\frac{3}{2}}$),