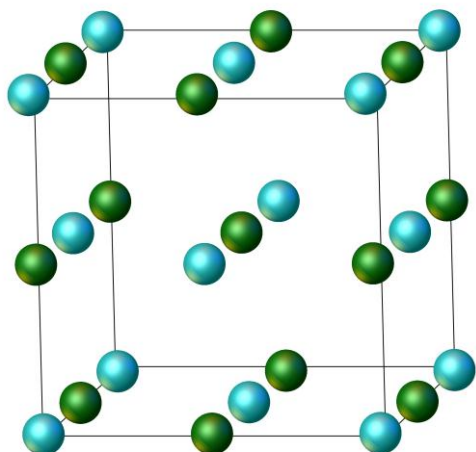


## STRUKTURA B1 CHLOREK SODU

komórka elementarna:



**Parametry komórki elementarnej chlorku sodu:**

$a_0$	$5.62 \text{ \AA}$
$b_0$	$5.62 \text{ \AA}$
$c_0$	$5.62 \text{ \AA}$
$\alpha$	$90^\circ$
$\beta$	$90^\circ$
$\gamma$	$90^\circ$

Źródło: Abrahams S. C., Bernstein J. L., Acta Crystallographica 1965, 18, 926-932

współrzędne jonów Cl<sup>-</sup>: 000;  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ ;  $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ ;  $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

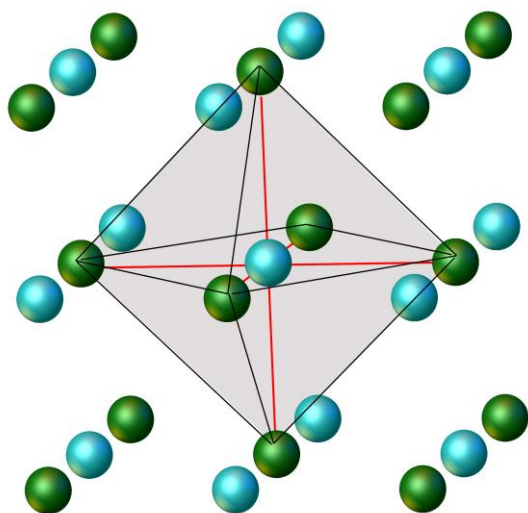
współrzędne jonów Na<sup>+</sup>:  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ ;  $\frac{1}{2} 0 0$ ;  $0 0 \frac{1}{2}$ ;  $0 \frac{1}{2} 0$

grupa przestrzenna: F m3m

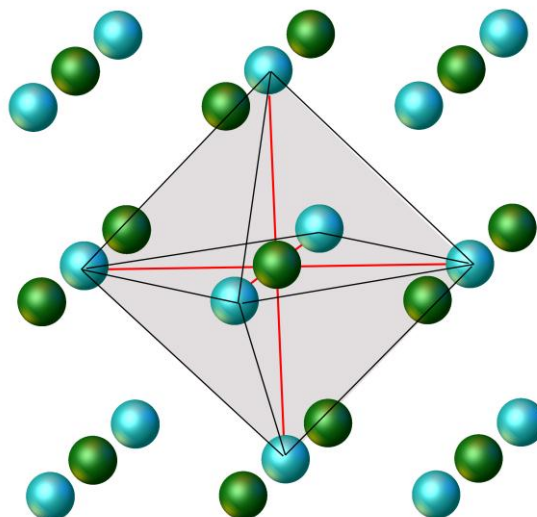
liczba koordynacji: Na = 6; Cl = 6

wielościان koordynacyjny:

Na: oktaedr

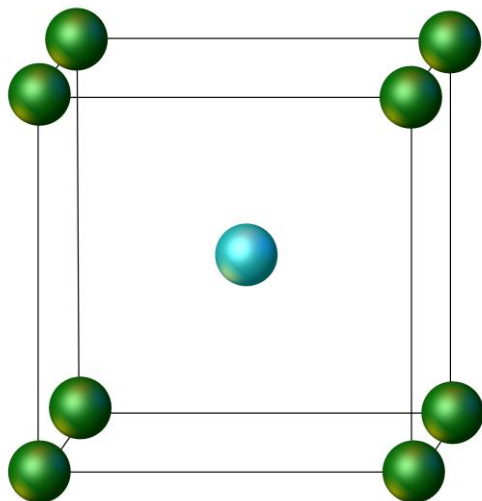


Cl: oktaedr



## STRUKTURA B2 CHLOREK CEZU

komórka elementarna:



Parametry komórki elementarnej chlorku cezu:	
$a_0$	4.123 Å
$b_0$	4.123 Å
$c_0$	4.123 Å
$\alpha$	90°
$\beta$	90°
$\gamma$	90°

Źródło: Wyckoff R. W. G., Crystal Structures, 1963, 1, 85-237

współrzędne jonów Cl: 000

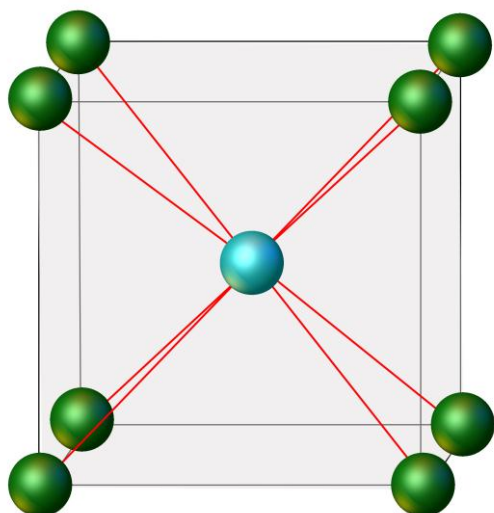
współrzędne jonów Cs<sup>+</sup>:  $\frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}$

grupa przestrzenna: P m3m

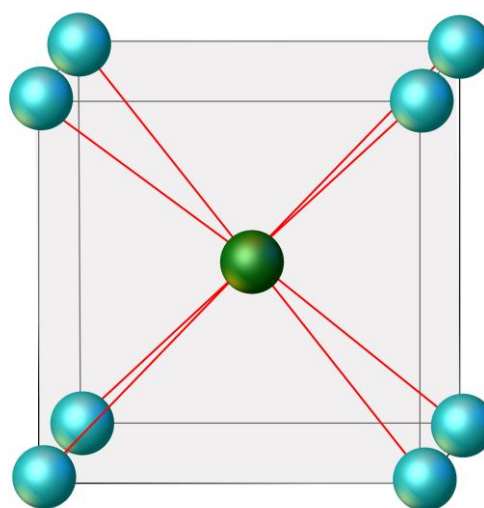
liczba koordynacji: Cs = 8; Cl = 8

wielościan koordynacyjny:

Cs: sześcian

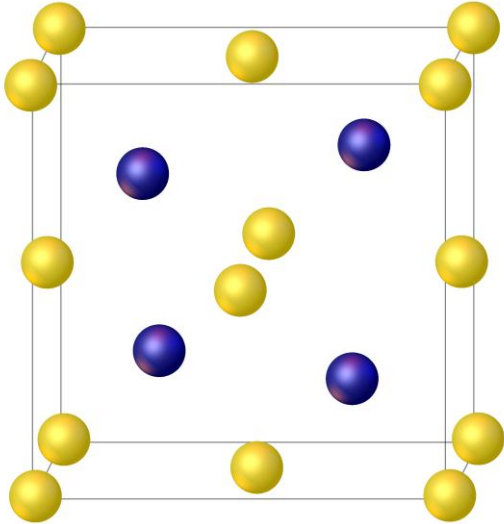


Cl: sześcian



## STRUKTURA B3 SFALERYT

komórka elementarna:



Parametry komórki elementarnej sfalerytu:	
$a_0$	5.4145 Å
$b_0$	5.4145 Å
$c_0$	5.4145 Å
$\alpha$	90°
$\beta$	90°
$\gamma$	90°

Źródło: Jumpertz E. A, Zeitschrift fuer Elektrochemie, 1955,  
59, 419-425

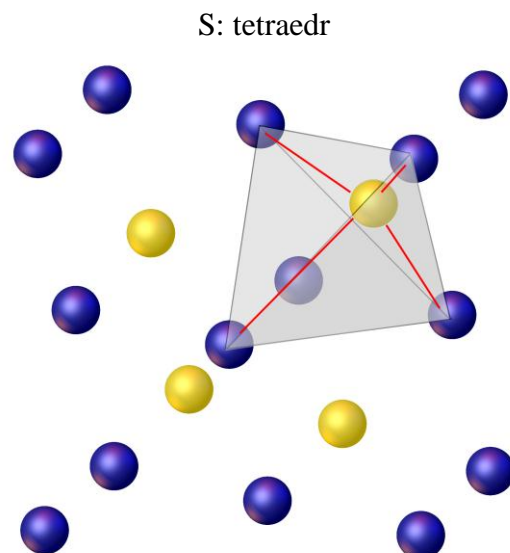
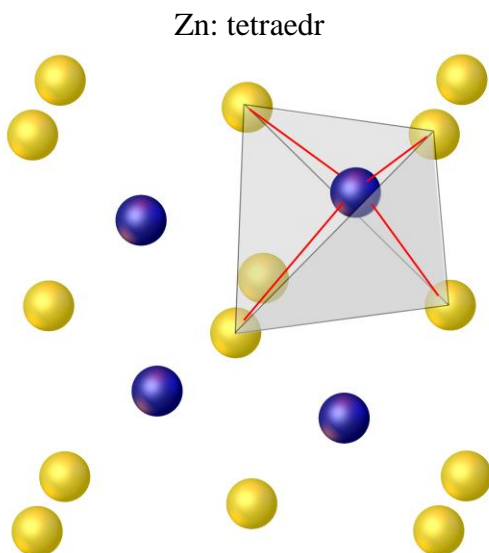
współrzędne atomów S: 000;  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ ;  $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ ;  $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

współrzędne jonów  $Zn^{2+}$ :  $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ ;  $\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$ ;  $\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}$ ;  $\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$

grupa przestrzenna: F -43m

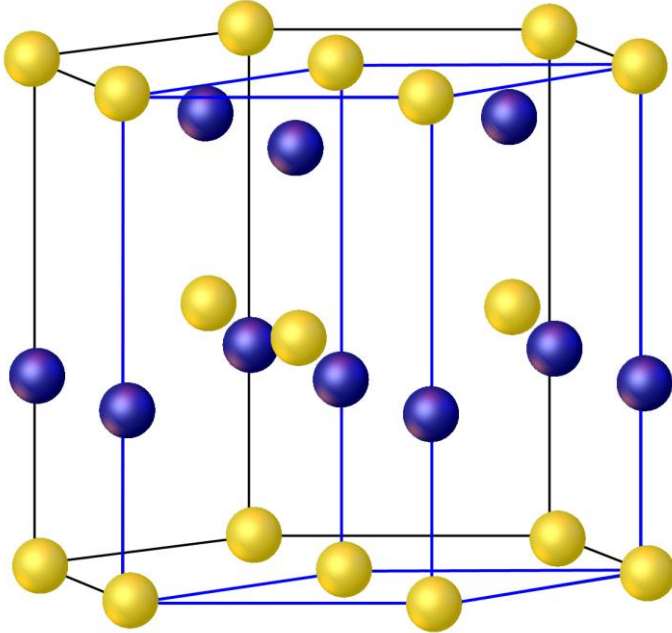
liczba koordynacji: Zn = 4; S = 4

wieloscian koordynacyjny:



## STRUKTURA B4 WURCYT

komórka elementarna:



**Parametry komórki elementarnej wurcytu:**

$a_0$	3.8227 Å
$b_0$	5.4145 Å
$c_0$	6.2607 Å
$\alpha$	90°
$\beta$	90°
$\gamma$	120°

Źródło: Kisi E. H., Elcombe M. M., Acta Crystallographica C, 1989, 45, 1867-1870

współrzędne atomów S: 000;  $\frac{2}{3}$   $\frac{1}{3}$   $\frac{1}{4}$

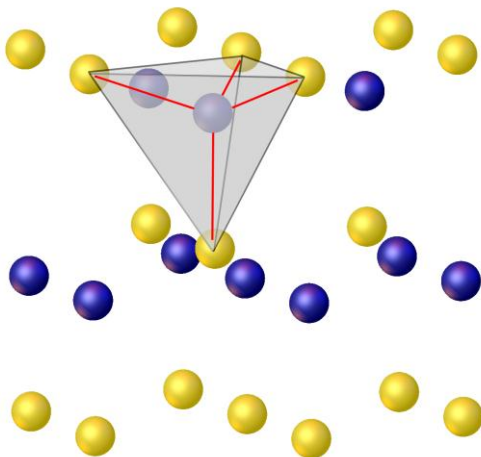
współrzędne jonów  $Zn^{2+}$ : 0 0 z;  $\frac{2}{3}$   $\frac{1}{3}$   $\frac{1}{4}+z$

grupa przestrzenna: P  $6_3mc$

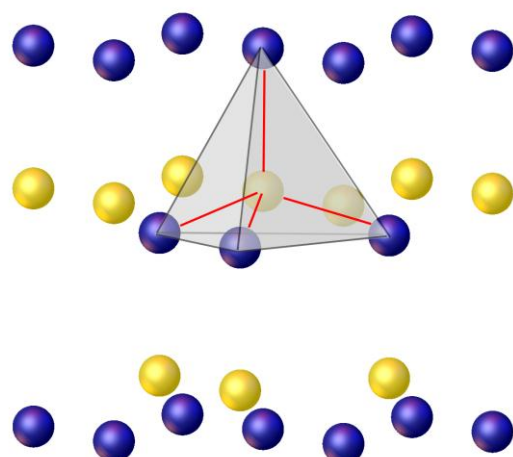
liczba koordynacji: Zn = 4; S = 4

wielościان koordynacyjny:

Zn: czworościan

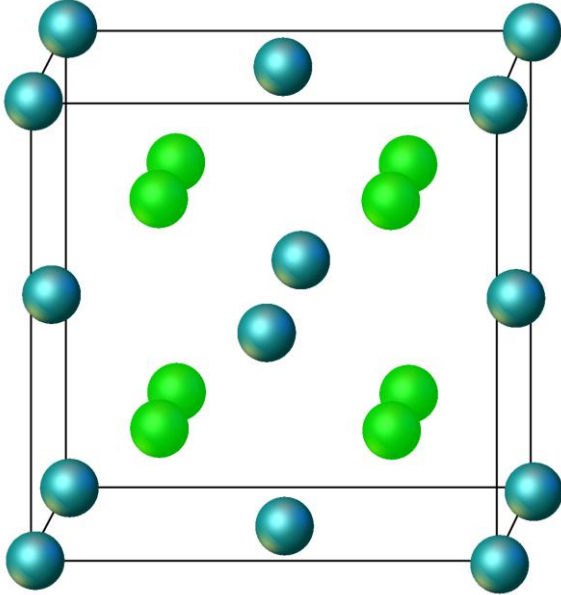


S: czworościan



## STRUKTURA C1 FLUORYT

komórka elementarna:



Parametry komórki elementarnej fluorytu:	
$a_0$	5.462 Å
$b_0$	5.462 Å
$c_0$	5.462 Å
$\alpha$	90°
$\beta$	90°
$\gamma$	90°

Źródło: Cheetham A. K., Fender B. E. F., Cooper M. J.,  
Journal of Physics C, 1971, 4, 3107-3121

współrzędne jonów  $\text{Ca}^{2+}$ : 000;  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ ;  $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ ;  $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

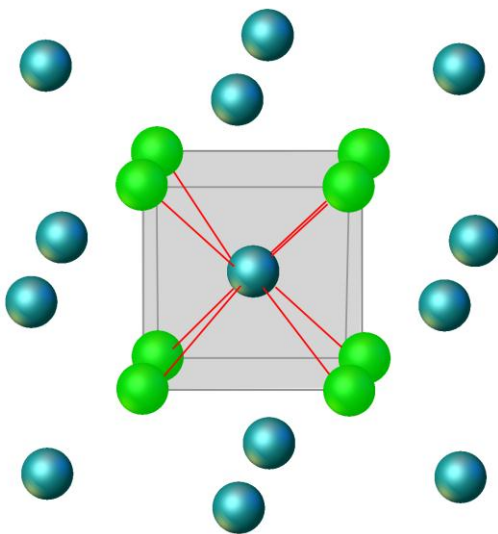
współrzędne jonów  $\text{F}^-$ :  $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ ;  $\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$ ;  $\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}$ ;  $\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$ ;  $\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$ ;  $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}$ ;  $\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ ;  $\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$ ;

grupa przestrzenna:  $F m\bar{3}m$

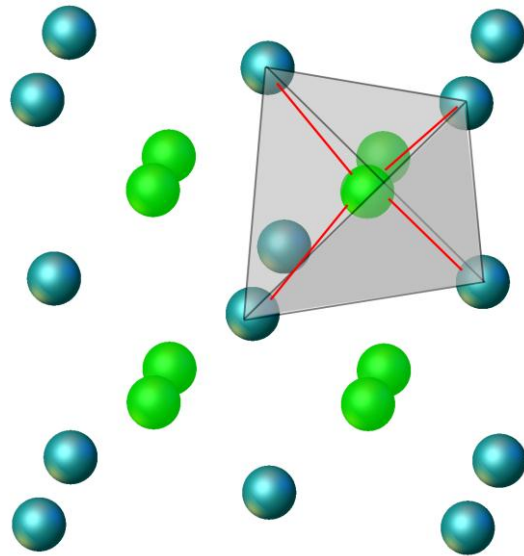
liczba koordynacji: Ca = 8; F= 4

wielościan koordynacyjny:

Ca: sześcian

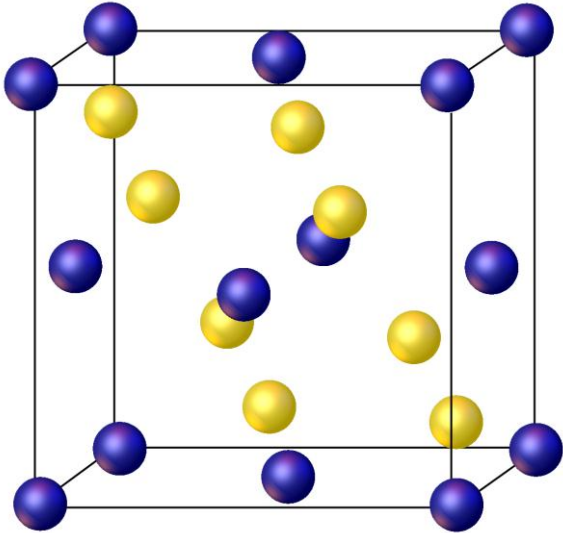


F: tetraedr



## STRUKTURA C2 PIRYT

komórka elementarna:



Parametry komórki elementarnej pirytu:	
$a_0$	5.4179 Å
$b_0$	5.4179 Å
$c_0$	5.4179 Å
$\alpha$	90°
$\beta$	90°
$\gamma$	90°

Źródło: Brostigen G., Kjekshus A.; Acta Chemica Scandinavica, 1969, 23, 2186-2188

współrzędne jonów  $\text{Fe}^{4+}$ : 000;  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ ;  $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ ;  $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

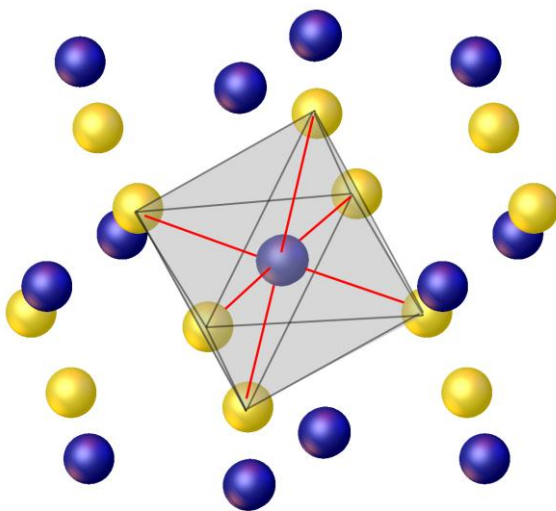
współrzędne jonów  $\text{S}^{2-}$ :  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ ;  $\frac{1}{2} 0 0$ ;  $0 0 \frac{1}{2}$ ;  $0 \frac{1}{2} 0$

grupa przestrzenna:  $P a\bar{3}$

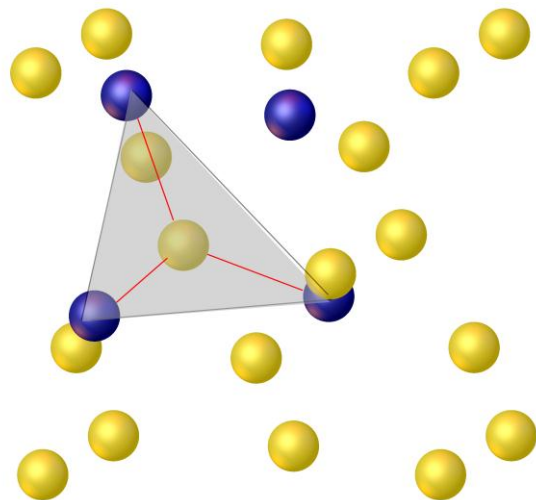
liczba koordynacji: Fe = 6; S = 3

wielościان koordynacyjny:

Fe: ośmiościan

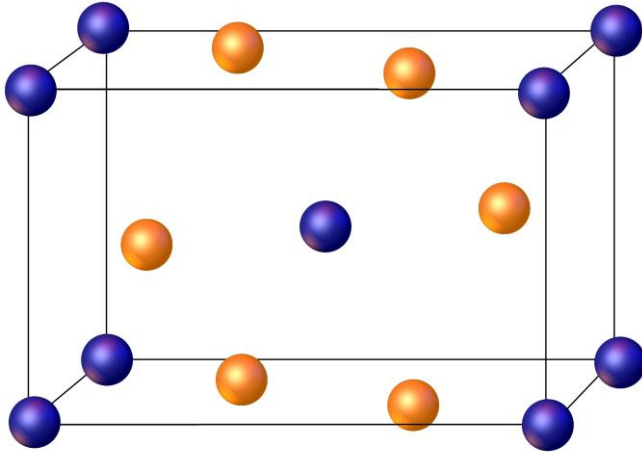


S: trójkąt równoboczny



## STRUKTURA C4 RUTYL

komórka elementarna:



Parametry komórki elementarnej rutylu:	
$a_0$	4.6107 Å
$b_0$	4.6107 Å
$c_0$	2.9732 Å
$\alpha$	90°
$\beta$	90°
$\gamma$	90°

Źródło: Seki H., Ishizawa N., Mizutani N., Kato M., Journal of the Ceramic Assoc. of Japan, 1984, 92, 219-223

współrzędne jonów  $Ti^{4+}$ : 000;  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

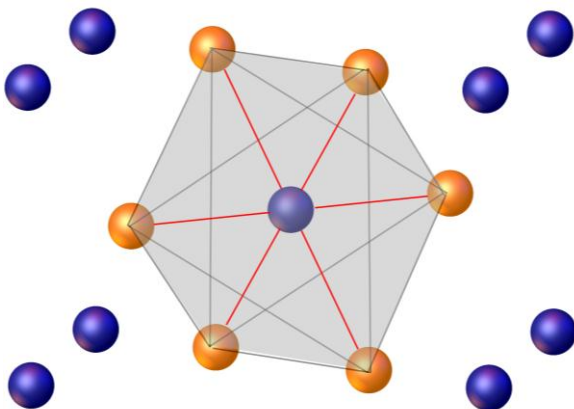
współrzędne jonów  $O^{2-}$ :  $x \ x \ 0$ ;  $-x \ -x \ 0$ ;  $\frac{1}{2}+x \ \frac{1}{2}-x \ \frac{1}{2}$ ;  $\frac{1}{2}-x \ \frac{1}{2}+x \ \frac{1}{2}$

grupa przestrzenna:  $P 4_2/m \ n \ m$

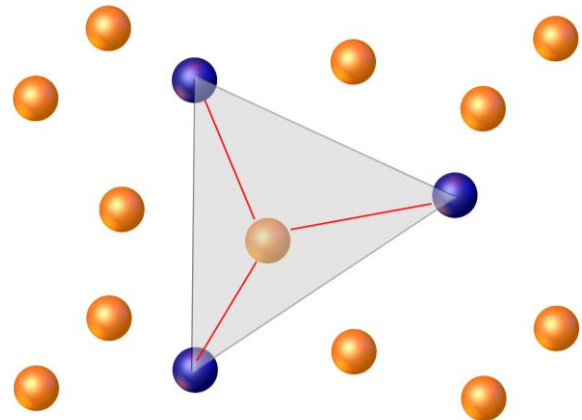
liczba koordynacji: Ti = 6; O = 3

wielościان koordynacyjny:

Ti: zdeformowany ośmiościan

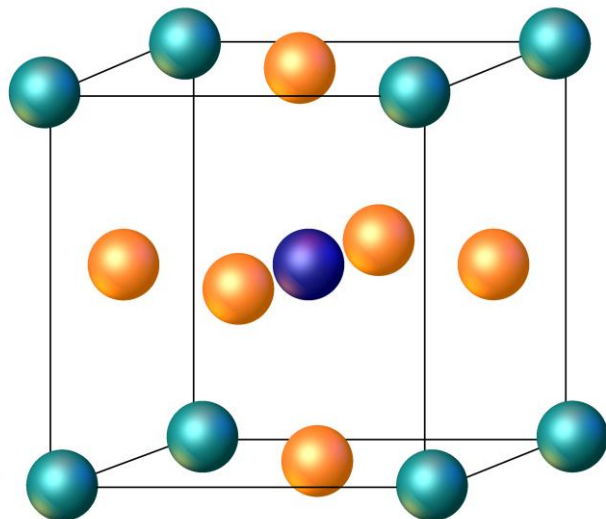


O: trójkąt równoramienny



## STRUKTURA E2<sub>1</sub> PEROWSKIT

komórka elementarna:



**Parametry komórki elementarnej perowskitu:**

$a_0$	$3.795 \text{ \AA}$
$b_0$	$3.795 \text{ \AA}$
$c_0$	$3.795 \text{ \AA}$
$\alpha$	$90^\circ$
$\beta$	$90^\circ$
$\gamma$	$90^\circ$

Źródło: Barth T., Norsk Geologisk Tidsskrift,  
1925, 8, 201-216

współrzędne jonów  $\text{Ca}^{2+}$ : 000

współrzędne jonów  $\text{Ti}^{4+}$ :  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

współrzędne jonów  $\text{O}^{2-}$ :  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$ ;  $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ ;  $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

grupa przestrzenna: P m3m

liczba koordynacji: Ca = 12; Ti = 6; O = 4 dla Ca; O = 2 dla Ti

wielościán koordynacyjny:

