

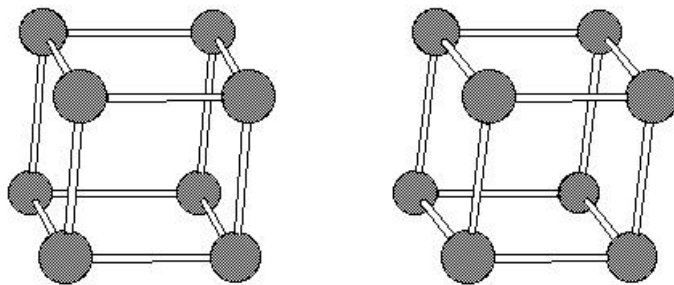
Domača naloga za predmet Fizika trdne snovi

Matevž Caserman

11. oktober 2007

Naloga: Določi zapolnitvena razmerja v kristalnih mrežah SC, BCC in FCC.

Najprej določimo zapolnitveno razmerje za kristalno strukturo SC. Če proučimo strukturo, lahko ugotovimo, da se atomi nahajajo v vsakem ogljišču, vendar je le osmina atoma vsebovana v celici. Ker imamo 8 ogljišč, je tako ravno 1 cela kroglja (atom) vsebovana v celici SC. Radij te krogle je določen s polovico dimenzije a strukture SC, saj se dve krogli na robu kocke stikata.



$$V_{SC} = 8 \frac{1}{8} \frac{4\pi(\frac{a}{2})^3}{3} = a^3 \frac{\pi}{6}$$

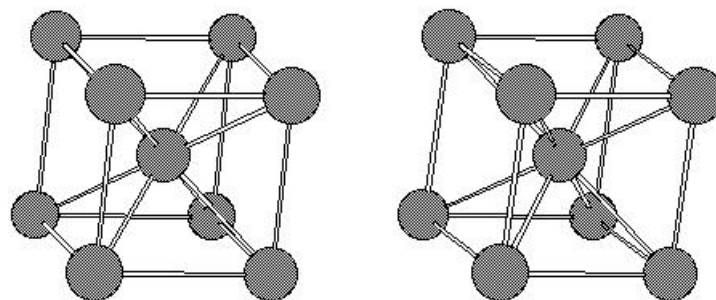
Splošno velja, da je zapolnitveno razmerje količnik med polnim volumnom atomov in volumnom osnovne celice:

$$\eta = \frac{V_{atomov}}{V_{osn.cel.}}$$

V prvem primeru je tako:

$$\eta_{SC} = \frac{V_{SC}}{V_{osn.cel.}} = \frac{a^3 \frac{\pi}{6}}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0,523$$

Če naredimo enak premislek za strukturo BCC, hitro lahko ugotovimo, da le ta vsebuje več atomov, saj je poleg osmink v ogljiščih prisoten tudi cel atom v centru celice. Tako sta skupaj v celici 2 cela atoma. Njihov radij pa lahko izračunamo tako, da predpostavimo, da se krogle po telesni diagonali celice stikajo in tako definirajo enačbo:



$$a\sqrt{3} = 4r$$

Zdaj je radij naslednji:

$$r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

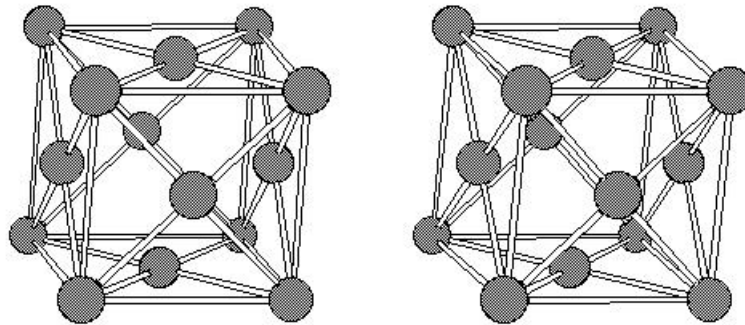
In polni volumen v BCC strukturi:

$$V_{BCC} = \left(8\frac{1}{8} + 1\right) \frac{4\pi\left(\frac{a\sqrt{3}}{4}\right)^3}{3} = a^3 \frac{\pi}{6} \frac{(\sqrt{3})^3}{4}$$

Zapolnitveno razmerje je za BCC strukturo:

$$\eta_{BCC} = \frac{\pi}{6} \frac{(\sqrt{3})^3}{4} = \frac{\pi}{6} 1,3 = 0,68$$

Ravno tako postopamo pri strukturi FCC, kjer je vsota vseh atomov znotraj celice kar 4 - osem osmink in šest polovic. Njihov radij pridobimo tako, da predpostavimo, da se krogle (atomi) stikajo na navadni diagonali naše celice in tako tvorijo naslednji pogoj:



$$a\sqrt{2} = 4r$$

Zdaj je radij naslednji:

$$r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$

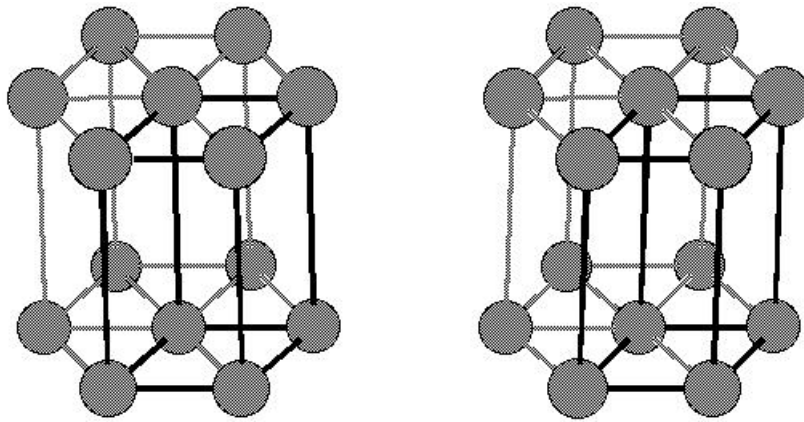
In polni volumen v FCC strukturi:

$$V_{FCC} = \left(8\frac{1}{8} + 6\frac{1}{2}\right) \frac{4\pi\left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{3} = a^3 \frac{\pi}{6} \frac{(\sqrt{2})^3}{2}$$

Zapolnitveno razmerje je za FCC strukturo:

$$\eta_{FCC} = \frac{\pi}{6} \frac{(\sqrt{2})^3}{2} = \frac{\pi}{6} 1,41 = 0,74$$

Podobno lahko izračunamo zapolnitveno razmerje za SH strukturo, kjer je znotraj celice ravno šest dvanaajstink atoma, torej ena polovica krogle (atoma). Njihov radij je sedaj še vedno polovica a , vendar se spremeni volumen osnovne celice:



$$r = \frac{a}{2}$$

$$V_{osn.cel.SH} = \frac{a^2\sqrt{3}}{4}a = \frac{\sqrt{3}}{4}a^3$$

In polni volumen v SH strukturi:

$$V_{SH} = \left(6 \frac{1}{12}\right) \frac{4\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3}{3} = a^3 \frac{\pi}{6} \frac{1}{2}$$

Zapolnitveno razmerje je za SH strukturo:

$$\eta_{SH} = \frac{1}{2} \frac{\pi}{6} \frac{4}{\sqrt{3}} = \frac{\pi}{6} \frac{2\sqrt{3}}{3} = \frac{\pi}{6} 1,155 = 0,60$$