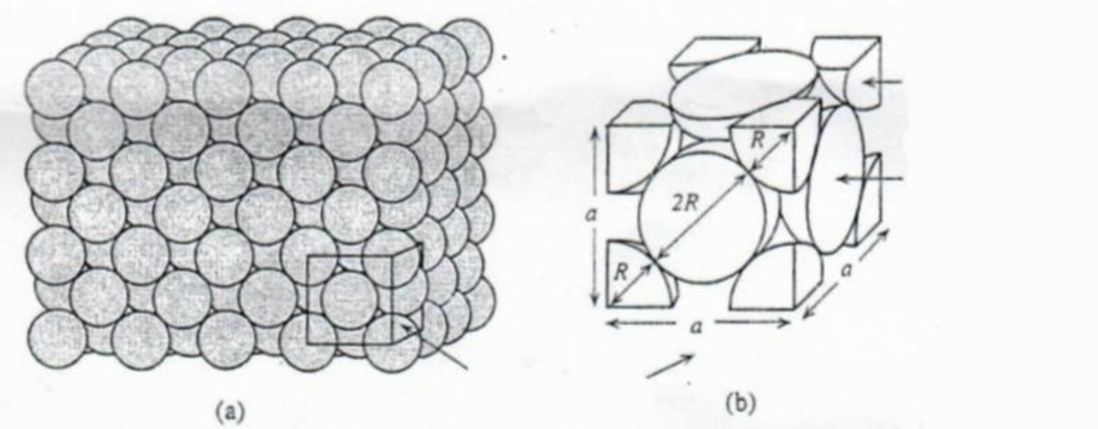
Elementarni kristali

1. Jedinična ćelija i FCC kristali

Elementarna ćelija je najpogodnija mala ćelija u kristalnoj strikturi koja nosi svojstva kristala. Ponavljanje jedinične ćelije u tri dimenzije generiše cijelu kristalnu strukturu kao na slici 1. Kubno povrsinski centralizovana (FCC) jedinicna ćelija ima površinu kocke sa po jednim atomom u svakom uglu kocke i jednim atomom u centru lica kocke. Međutim, samo jedna osmina svakog atoma u uglu lica pripada jedinstvenoj ćeliji kao što je prikazano na slici. Pored toga, samo polovina atoma u centru lica pripada jedinicnoj ćeliji. Dakle, u elementarnoj ćeliji postoje 4 atoma. Parametar rešetke *a* je stranica kocke. Atomski faktor pakovanja je udio zapremine u kristalu koji stvarno zauzimaju atomi.



Kristalna struktura srebra je kubno povrsinski centrirana (FCC). Atomi su postavljeni na dobro definisanim mjestima koja se periodično raspoređuju i u kristalu postoji redosled (uzorak) velikog dometa. (b) FCC jedinična ćelija sa zatvorenim sferama. Poluprecnik atoma je R, a parametar rešetke je a. Mnogi metali su FCC kristali, npr. Ag, Al, An, Cu, Ni, Pd, Pt, γ-Fe (> 912 ° C).

Slika 1

Problem: FCC karakteristike kristala

Srebro (Ag) ima FCC kristalnu strukturu. Atomska masa Ag je 107.87 $g\ mol^{-1}$. Ako je poluprečnik atoma srebra 0,1444 *nm*, pronađite parametar rešetke *a*, gustinu *ρ* i atomsku koncentraciju srebra. Pronađite i atomski faktor pakovanja (APF).

Rjesenje:

Uzmite u obzir dijagonalu lica kao što je prikazano na slici 1. Dva atoma u uglu i centralni atom su u kontaktu, a dužina dijagonale lica je 4R,

$$a^2 + a^2 = (4R)^2$$

I $a = \frac{a}{\sqrt{2}}R = 2\sqrt{2}$R

slijedi $a = 2\sqrt{2}(0.1444nm) = 0.4084nm$

Jedinična ćelija sadrzi 4 atoma. Postoji 8 uglova i svaki ugao sadrzi 1/8 atoma unutar jedinične ćelije. Pored toga, postoji 6 lica i svako lice ima pola atoma u svom središtu. Gustina je

$$\rho = \frac{masa\ atoma\ jedinicne\ celije}{zapremina\ jedinicne\ celije} = \frac{(broj\ atoma\ u\ jedinicnoj\ celiji)x(masa\ jednog\ atoma)}{zapremina\ jedinicne\ celiji}$$

to je, $\rho = \frac{4(\frac{M_{at}}{N_A})}{a^3} = \frac{4\left[\frac{107.87\times10^{-3}kg\ mol^{-1}}{6.022\times10^{23}mol^{-1}}\right]}{(0.4084\times10^{-9}m)^3}$

tj. $\rho = 1.05 \times 10^4 kg\ m^{-3}\ ili\ 10.5\ g\ cm^{-3}$

Atomska koncentracija su 4 atoma u kocki zapremine a^3 , tj.

$$n_{at} = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(0.4084 \times 10^{-9}m)^3} = 5.87 \times 10^{28} at\ m^3\ ili\ 5.87 \times 10^{22}\ at\ cm^3$$

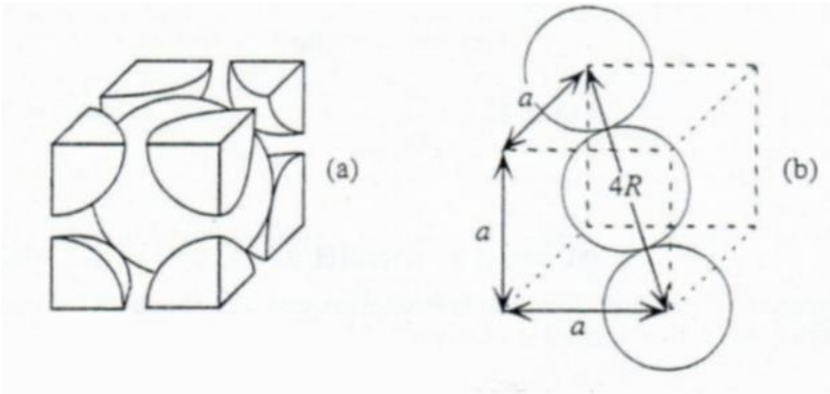
Atomski faktor pakovanja je definisan i dat kao

$$APF = \frac{(broj\ atoma\ u\ jedinicnoj\ celiji) \times (zapremina\ jednog\ atoma)}{zapremina\ jedinicne\ celije}$$

tj. $APF = \frac{4(\frac{4}{3}\pi R^3)}{a^3} = \frac{4(\frac{4}{3}\pi R^3)}{(2\sqrt{2}R)^3} = \frac{4(\frac{4}{3}\pi)}{(2\sqrt{2})^3} = 0.74\ ili\ 74\%$

2. BCC kristali

Jedinična kubna ćelija prostorno centrirana (BCC) ima atom u svakom uglu kocke i jedan atom u centru kocke. Međutim, samo jedna osmina svakog atoma u uglu pripada jedinici ćelije, kao što je prikazano na slici 2. U jedinicnoj ćeliji se, dakle, nalaze 2 atoma.



(a) Jedinična kubna ćelija prostorno centrirana (BCC). Primjeri su: alkalni metali (Li, Na, K, Rb), Cr, Mo, V, Mn, α -Fe (<912 ° C), β-Ti (> 882 ° C)..

(b) Dijagonala kocke je 4R

Slika 2

Problem: BCC karakteristike kristala

Gvožđe (ispod 912°C) ima BCC kristalnu strukturu. Atomska masa gvozdja (Fe) je 55,85$g\ mol^{-1}$. Ako je poluprečnik atoma gvozdja 0,1241 nm, pronađite parametar rešetke *a*, gustinu *ρ* i atomsku koncentraciju volframa. Pronadjite i atomski faktor pakovanja?

Rjesenje

Razmotrimo dijagonalu kocke kao što je prikazano na slici 2. Dva atoma u uglu i centralni atom su u kontaktu i dužina dijagonale je 4R. Pošto imamo kocku

$$a^2 + a^2 + a^2 = (4R)^2$$

i $a = \frac{a}{\sqrt{3}} R$

slijedi $a = (4\sqrt{3})(0.1241nm) = 0.2866nm$

U jediničnoj ćeliji postoje 2 atoma. Postoji 8 uglova i svaki ugao sadrzi 1/8 atoma unutar jedinične ćelije. Pored toga, u centru kocke je jedan cijeli atom. Gustina je

$$\rho = \frac{masa\ atoma\ jedinicne\ celije}{zapremina\ jedinicne\ celije} = \frac{(broj\ atoma\ u\ jedinicnoj\ celiji)x(masa\ jednog\ atoma)}{zapremina\ jedinicne\ celiji}$$

to je, $\rho = \frac{4(\frac{M_{at}}{N_A})}{a^3} = \frac{4\left[\frac{55.85\times10^{-3} kg\ mol^{-1}}{6.022\times10^{23} mol^{-1}}\right]}{(0.2866\times10^{-9} m)^3}$

tj. $\rho = 7.88 \times 10^3\ kg\ m^{-3}\ ili\ 7.88\ g\ cm^{-3}$

Atomska koncentracija su 2 atoma u kocki zapremine a^3 , tj.

$$n_{at} = \frac{2}{a^3} = \frac{2}{(0.2866 \times 10^{-9} m)^3} = 8.5 \times 10^{28}\ at\ m^{-3}\ ili\ 8.5 \times 10^{22} at\ cm^{-3}$$

Atomski faktor pakovanja je definisan i dat kao

$$APF = \frac{(broj\ atoma\ u\ jedinicnoj\ celiji) \times (zapremina\ jednog\ atoma)}{zapremina\ jedinicne\ celije}$$

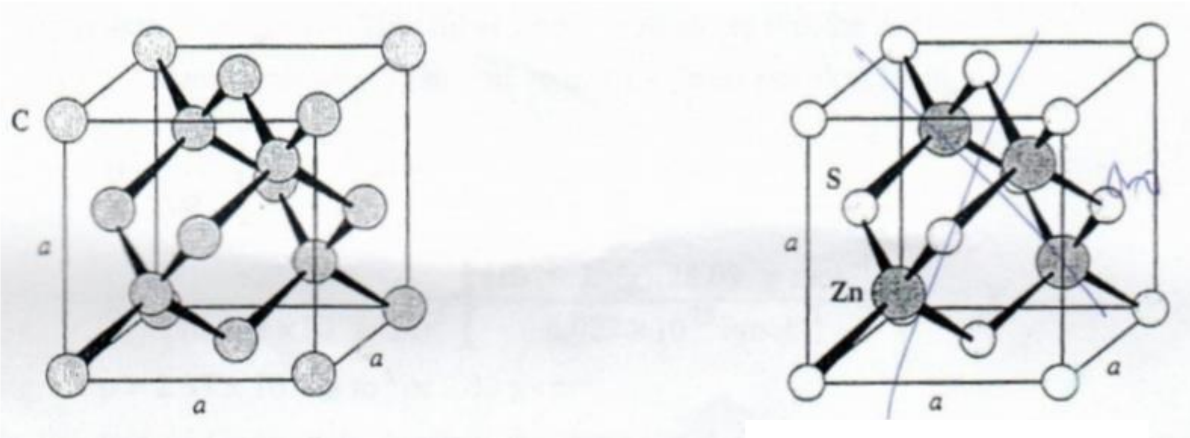
tj. $APF = \frac{2(\frac{4}{3}\pi R^3)}{a^3} = \frac{2(\frac{4}{3}\pi R^3)}{(\frac{4}{\sqrt{3}}R)^3} = \frac{2(\frac{4}{3}\pi)}{(\frac{4}{\sqrt{3}})^3} = 0.68\ \ ili\ 68\%$

3. Dijamantske strukture i struktura cinkovne smjese

Kristalne strukture dijamanta i smjese cinka imaju sličnosti. Oba su kubni kristali i oba imaju 8 atoma u jediničnoj ćeliji. U jediničnoj ćeliji smjese cinka, četiri su atoma cinka (Zn), a četiri atoma sumpora (S).

Problem: Gustina Si i GaAs i atomska koncentracija

Prikazane su kristalne strukture za Si i GaA na slici 3. S obzirona na date parametre resetke Si i GaAs, *a* =0,543 nm i *a* = 0,565 nm retrospektivno, odnosno atomske mase svakog elementa u Periodnom sistemu elemenata, izračunajte gustinu Si i GaAs. Kolika je atomska koncentracija, atoma po jedinici zapremine, u svakom kristalu?



(a) Dijamantska jedinicna ćelija je kubična. Ćelija ima osam atoma. Elementarni poluprovodnici Ge i Si kao i sivi Sn (α-Sn) imaju ovu kristalnu strukturu.

(b) Kubična kristalna struktura smjese cinka (ZnS). Mnoga važna kristalna jedinjenja imaju strukturu smjese cinka. Primjeri: AlAs, GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb, ZnS, ZnTe.

Slika 3

Rjesenje

Pozivajući se na dijamantsku kristalnu strukturu na slici 4, možemo identifikovati sledeće tipove atoma:

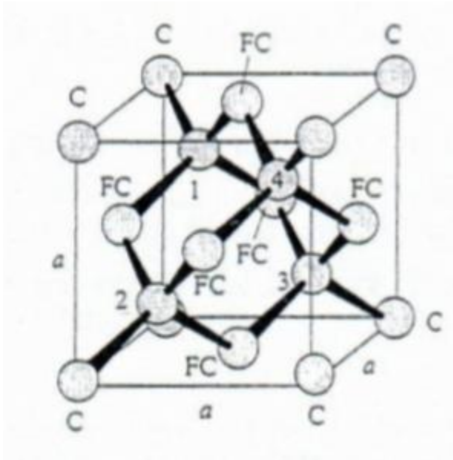
8 uglovnih atoma sa oznakom C,

6 atoma na sredini lica (sa oznakom FC) i

4 unutrašnja atoma sa oznakom 1,2,3,4,

Efektivni broj atoma unutar jedinične ćelije je

(8 uglova) x (1/8 C-atoma) + (6 lica) x (1/2 FC-atoma) + 4 atoma u ćeliji (1,2,3,4) = 8



Slika 4

Parametar rešetke (dužina stranice kocke) jedinične ćelije je a. Tako je atomska koncentracija u kristalu Si

$$n_{Si} = \frac{8}{a^3} = \frac{8}{(0.543 \times 10^{-9}m)^3} = 5.0 \times 10^{28} at\, m^{-3}$$

Ako je M_{at} atomska masa u Periodnom sistemu, onda je masa atoma u kg

$$m = (10^{-3})M_{at}/N_A \qquad (1)$$

gdje je N_A Avogadrov broj. Za Si, $M_{at} = M_{Si}$, pa je gustina Si

$$\rho = (broja\ atoma\ u\ jedinici\ zapremine) \times (masa\ atoma) = n_{Si}m_{at}$$

ili $\rho = (\frac{8}{a^3})\left[\frac{(10^{-3})M_{at}}{N_A}\right]$

tj. $\rho = \left(\frac{8}{(0.543\times10^{-9}m)^3}\right)\left[\frac{\left(\frac{10^{-3}kg}{g}\right)(28.09\ g\ mol^{-1})}{6.022\times10^{23}mol^{-1}}\right]$

racunajuci, $\rho = 2.33 \times 10^3\ kg\ m^{-3}\ ili\ 2.33\ g\ cm^{-3}$

U slucaju GaAs, ocigledno je da postoje 4 Ga i 4 As atoma u jedinicnoj celiji. Koncentracija Ga (ili As) automa u jedinici zapremine je

$$n_{Ga} = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(0.565 \times 10^{-9}m)^3} = 2.22 \times 10^{28}\ at\ m^{-3}$$

Ukupna atomska koncentracija (racunajuci i atome Ga i As) je dva puta n_{Ga}.

$$n_{ukupno} = 2n_{Ga} = 4.44 \times 10^{28}\ at\ m^{-3}$$

Postoje 2.22×10^{28} Ga-As parova. Mozemo izracunati masu Ga i As atoma preko njihovih relativnih atomskih masa u Periodnom sistemu elemenata koristeci jednacinu (1) sa $M_{at} = M_{Ga} = 69.72$ za Ga i $M_{at} = M_{As} = 74.92$ za As. Slijedi,

$$\rho = (\frac{4}{a^3})\left[\frac{(10^{-3})(M_{Ga} + M_{As})}{N_A}\right]$$

Ili $\rho = \left(\frac{4}{(0.565\times10^{-9}m)^3}\right)\left[\frac{(10^{-3})(69.72+74.92)}{6.022\times10^{23}}\right]$

tj. $\rho = 5.33 \times 10^3\ kg\ m^{-3}\ ili\ 5.33\ g\ cm^{-3}$

Problem: Parametar rešetke iz gustine za jedinicnu dijamantsku ćeliju (Ge)

Elementarni poluprovodnici Ge i Si imaju dijamantsku jjedinicnu ćeliju oblika kocka stranice a. U jediničnoj ćeliji ima 8 atoma. S obzirom na datu atomsku masu i gustinu možemo odrediti parametar rešetke a.

Germanijum ima dijamantsku kristalnu strukturu. Gustina Ge je 5,32 $g\ cm^{-3}$ i njegova atomska masa je 72,60$g\ mol^{-1}$, pronađite parametar rešetke a.

Rjesenje

U jedinici ćelije postoji 8 efektivnih atoma. Parametar rešetke (dužina stranice kocke) jedinične ćelije je *a.* Atomska masa Ge je M_{at}. Gustina *p* kristala je

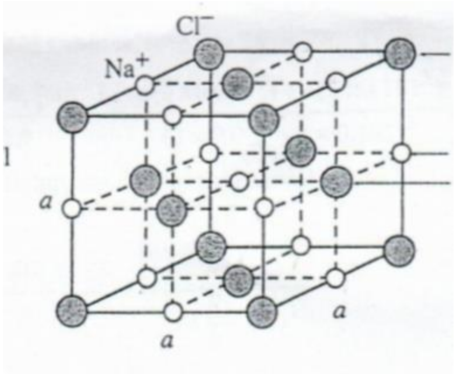
$$\rho = \frac{(broj\ atoma\ u\ jedinicnoj\ celiji)x(masa\ jednog\ atoma)}{zapremina\ jedinicne\ celiji} = \frac{8\left[\frac{(10^{-3})M_{at}}{N_A}\right]}{a^3}$$

slijedi, $a = \left[\frac{8(10^{-3})M_{at}}{\rho N_A}\right]^{1/3} = \left[\frac{8\left(10^{-3}\frac{kg}{g}\right)(72.6\frac{g}{mol})}{(5.33\times10^3\ kg\ m^{-3})(6.022\times10^{23} mol^{-1})}\right]^{1/3}$

racunajuci, $a = 5.659 \times 10^{-10}\ m\ ili\ 0.566\ nm$

4. NaCl kristali

Mnoge jonske čvrste supstance (npr. NaCl, AgCl, LiF, MgO, CaO) imaju NaCl jediničnu ćeliju koja je kubna, kao što je prikazano na slici 5. Parametar rešetke *a* odgovara strani kocke. Postoje 4 katjona (Na^+) i 4 anjona (Cl^-).



Slika 5

Problem: Gustina NaCl iz parametra rešetke

Parametar rešetke *a* NaCl je 0,564 nm. Atomske mase Na i Cl su 22,99 g mol^{-1} i 35,45 g mol^{-1} retrospektivno. Izračunajte gustinu NaCl.

Rjesenje

U jediničnoj ćeliji se efektivno nalaze 4 Na^+ jona i 4 Cl^- jona. Parametar rešetke (dužina stranice kocke) jedinične ćelije je *a*. Masa jona Na je M_{Na}/N_A grama. Masa jona Cl je M_{Cl}/N_A grama. Gustina p kristala je $\rho = \frac{4\frac{(10^{-3}M_{Na})}{N_A}+4\frac{(10^{-3}M_{Cl})}{N_A}}{a^3}$

Ili $\rho = \frac{4\frac{(10^{-3}kg/g)(22.99\ g\ mol^{-1})}{6.022\times10^{23}mol^{-1}}+4\frac{(10^{-3}kg/g)(35.45g\ mol^{-1})}{6.022\times10^{23}mol^{-1}}}{(0.564\times10^{-9}m)^3}$

tj. $\rho = 2.16\times10^3\ kg\ m^{-3}\ ili\ 2.16\ g\ cm^{-3}$

Problem: Faktor atomskog pakovanja (APF) za NaCl

a Uzimajuci poluprecnike jona Na^+ i Cl^- kao 0,097 nm i 0,181 nm u standardnim tabelama i parametar rešetke *a* = 0,564 nm, pronađite APF za kristal NaCl.

b Uzimajuci poluprecnike jona Na^+ i Cl^- kao pod **a**, pod pretpostavkom da se Na^+ i Cl^- joni samo dodiruju, pronađite APF za kristal NaCl.

c Uzimajuci da je odnos *x* poluprecnika jona Na^+ prema Cl^- 0,536, i pod pretpostavkom da se Na^+ i Cl^- joni samo dodiruju, pronađite APF. Koja je vaša računica?

Rjesenje

a Pretpostavljajuci da su R_+ i R_- poluprecnici Na^+ i Cl^- jona.

$$APF = \frac{zapremina\ svih\ jona\ u\ jedinicnoj\ celiji}{zapremina\ jedinicne\ celije} = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi R_+{}^3\right)+4\left(\frac{4}{3}\pi R_-{}^3\right)}{a^3}$$

$$\text{tj. } APF = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi 0.097^3\right)+4\left(\frac{4}{3}\pi 0.181^3\right)}{0.564^3} = 0.639$$

b Pretpostavljajuci „dodirivanje“ Na^+ i Cl^- jona, slijedi da je *a* = $2R_+ + 2R_-$. Slijedi,

$$APF = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi {R_+}^3\right) + 4\left(\frac{4}{3}\pi {R_-}^3\right)}{(2R_+ \ + 2R_- \ )^3} = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi 0.097^3\right) + 4\left(\frac{4}{3}\pi 0.181^3\right)}{(2 * 0.097 \ + 2 * 0.181 \ )^3} = 0.667$$

Uocite, *a* = $2R_+ + 2R$ = 0.556 nm je neznatno manje od stvarnog *a.*

c

$$APF = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi {R_+}^3\right) + 4\left(\frac{4}{3}\pi {R_-}^3\right)}{(2R_+ \ + 2R_- \ )^3} = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi \frac{R_+}{R_-}^3\right) + 4\left(\frac{4}{3}\pi\right)}{(2\frac{R_+}{R_-} \ + 2 \ )^3}$$

tj. $$APF = \left(\frac{2}{3}\pi\right)\frac{x^3+1}{(x^3+1)^3} = 0.766$$

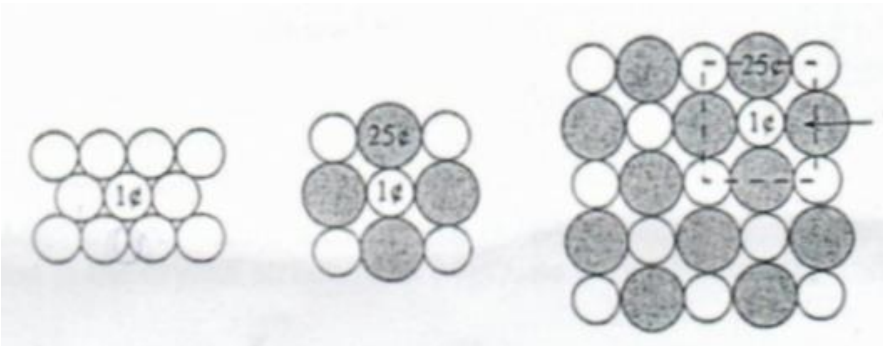
Pretpostavka dodirivanja jona dovodi do veće vrijednosti za APF.

5. Jonski kristali

U jonskim čvrstim supstancama katjoni (npr. Na+) i anioni (npr. Cl-) privlače jedni druge neusmjereno. Kristalna struktura zavisi od toga koliko se blisko mogu donijeti suprotni joni i koliko najbolje se isti joni mogu izbeći pri tome održavajući redosled dugog dometa, ili održavajući simetriju. Zavisi od relativnog naelektrisanja i veličine po jonu. Vrlo je jednostavno demonstrirati važnost efekta veličine u dvije dimenzije. Ako imamo identične kovanice, recimo peni (kovanice od 1 centa), možemo učiniti da najviše šest penija dodirne jedan peni kao što je prikazano na slici 6. S druge strane, ako moramo donijeti četvrtine (kovanice od 25 centi) da dodirnemo jedan peni, možemo najviše uciniti da pet četvrtina dodiruje peni. Ali ovaj aranžman se ne može proširiti tako da konstruiše dvodimenzionalni kristal sa periodičnošću. Da bismo ispunili zahtijev za dugotrajnom simetrijom kristala, možemo da koristimo samo četirtine da dodirnemo peni i tako izgradimo dvodimenzionalni kristal "cetvrtina penija" koji je prikazan na slici 6. U dvodimenzionalnom kristalu peni ima četiri cetvrtine kao najbliže komšije, i slično, cetvrtina ima četiri penija kao najbliže komšije. Pogodna jedinična ćelija je kvadratna ćelija sa 1/4 penija na svakom uglu i punom cetvrtinom u centru (kao što je prikazano na slici). Trodimenzionalni ekvivalent jedinicne celije kristala „cetvrtine penija" je NaCl jedinicna celija prikazana na slici 6. Na^+ jon je otprilike polovine veličine Cl^- jona mu što omogućava 6 najbližih suseda uz održavanje reda dugog dometa. U tabeli 1 navedeni su odnos poluprecnika katjon-anjona kao i odgovarajuće kristalne strukture.

R_+/R_-	< 0.155	0.155 - 0.225	0.225 – 0.414	0.414 – 0.732	0.732 - 1
CN	2	3	4	6	8
Primjer			ZnS	NaCl	CsCl

Odnos poluprecnika jona je R_+/R_-. CN je koordinacioni broj.

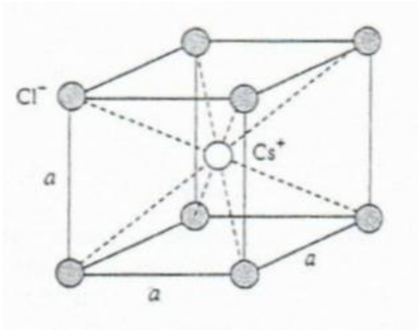


Pakovanje kovanica za izgradnju dvodimenzionalnog kristala.

Slika 6

Problem: CsCl

CsCl jedinicna celija je prikazana na slici 7. Poluprecnici jona Cs^+ i Cl^- su 0,170 nm i 0,181 nm, retrospektivno. Potvrdite da je koordinacioni broj (CN) 8 kao na slici i izračunajte parametar rešetke *a* i APF.



Moguća redukovana sferna ćelija za kristal CsCl. Alternativna jedinična ćelija može imati zamjenu za Cs^+ i Cl^-. Primjeri: CsCl, CsBr, CsI, TICI, TlBr, TlI.

Slika 7

Rjesenje

Uzimajući R_+ = 0.167 nm i R_- = 0.181 nm, R_+/R_- = 0.923 što je između 0.732—1 i prema tome iz Tabele 1, CN = 8.

Stranica kocke *a* je parametar rešetke. Dijagonala kocke je $\sqrt{a^2+a^2+a^2}$. Pod pretpostavkom da se joni samo dodiruju, tada je dijagonala kocke takođe R_-+2R_++ R_-. Slijedi $a\sqrt{3} = 2(R_+ + R_-)$,

$$a = \frac{2}{\sqrt{3}}(R_+ + R_-) = \frac{2}{\sqrt{3}}(0.167 + 0.181) = 0.402$$

Sto je neznatno manje od a=0.412 iz eksperimenata sa difrakcijom x zraka. Prema slici 7, jedinicna celija ima dva jona: jedan Cs^+ u centru + 8 uglova sa po 1/8 jona Cl^- u svakom uglu.

$$APF = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi {R_+}^3\right) + 4\left(\frac{4}{3}\pi {R_-}^3\right)}{a^3} = \frac{1\left(\frac{4}{3}\pi 0.167^3\right) + 1\left(\frac{4}{3}\pi 0.181^3\right)}{0.402^3} = 0.68$$

Problem: MgO

Poluprecnici jona Mg^{2+} i O^{2-} su 0,066 nm i 0,184 nm, retrospektivno. Atomske mase Mg i O su 24,305 i 16 g mol^{-1}. Koja je kristalna struktura MgO, parametar rešetke *a* i gustina?

Rjesenje

Uzimajući R_+ = 0.066 nm i R_- = 0.184 nm, R_+/R_- = 0.47 sto je između 0.414—0.732 prema tome iz Tabele 1, CN=6 i MgO ima NaCl jedinicnu celiju. Pretpostavljajuci da se katjoni i anjoni samo dodiruju duz ivice kocke, a = 2(R_-+R_+) = 0.412 nm. Akos u M_{Mg} i M_O atomske mase Mg i O, slijedi

$$\rho = \frac{4\frac{M_{Mg}}{N_A} + 4\frac{M_O}{N_A}}{a^3} = \frac{4\frac{(24.305\ g\ mol^{-1})}{6.022\times 10^{23} mol^{-1}} + 4\frac{(16\ g\ mol^{-1})}{6.022\times 10^{23} mol^{-1}}}{(0.412\times 10^{-7} m)^3}$$

tj. $\rho = 3.8\ g\ cm^{-3}$

Problem: ZnS

Poluprecnici jona Zn^{2+} i S^{2-} su 0,074 nm i 0,184 nm, retrospektivno. Potvrdite da je koordinacioni broj 4 i izracunajte APF ako je dato *a* = 0.541 nm.

Rjesenje

Uzimajući R_+ = 0.074 nm i R_- = 0.184 nm, R_+/R_- = 0.40 sto je između 0.225—0.414 prema tome iz Tabele 1, CN=4. APF za ZnS je

$$APF = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi {R_+}^3\right) + 4\left(\frac{4}{3}\pi {R_-}^3\right)}{a^3} = \frac{1\left(\frac{4}{3}\pi 0.167^3\right) + 1\left(\frac{4}{3}\pi 0.181^3\right)}{0.541^3} = 0.70$$

6. Planarna koncentracija

Planarna koncentracija (ili gustina) je broj atoma po jedinici površine na datoj ravni u kristalu. To je površinska koncentracija atoma na datoj ravni. Da bismo izračunali ravansku koncentraciju $n_{(hkl)}$ na datoj (hkl) ravni, smatramo vezanu površinu A. U $n_{(hkl)}$ su uključeni samo atomi čiji su centri na A. Zatim za svaki atom procjenjujemo koji je dio presjeka atoma presječen ravni (hkl) sadržan u A.

Problem: (100) (110) i (111) planarnih koncentracija u FCC kristalima

Srebro (Ag) ima FCC kristalnu strukturu. Parametar resetke *a* srebra je 0.4084. Izracunajte planarnu koncentraciju ravni {100}, {110} i {111} prikazanim na slici 8.

Rjesenje

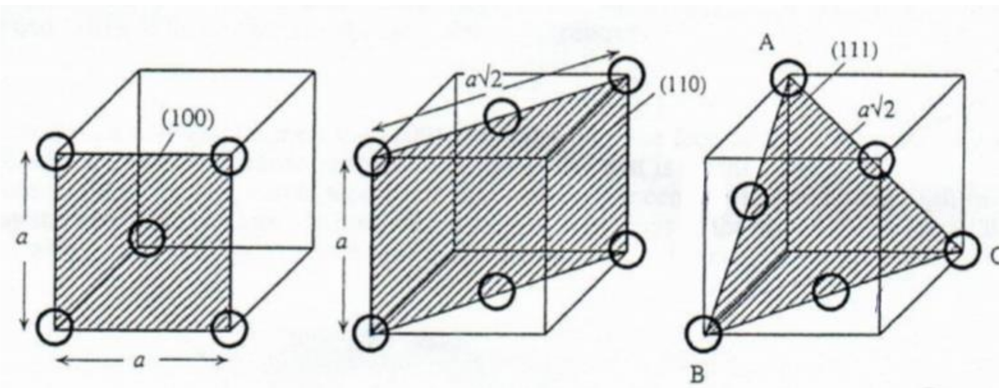
Ravni tipa (100), (110) i (111) u FCC kristalu su prikazane na slici 8. Ravan (100) odgovara površini kocke. Površina je a^2. U centru je jedan puni atom. Drugim riječima, ravan (100) presjeca jedan puni atom u centru lica. U dvije dimenzije treba uzeti u obzir atomski poprečni presjek koji je presječen datom ravni. Ako ravan presječe puni atom, presjek je krug kao na slici. Međutim, nisu svi atomi uglova unutar površine lica kocke. Ravan (100) presjca samo djelić uglovnog atoma. Samo je četvrtina kruga unutar lica.

Broj atoma na površini kocke površine a^2

= (4 ugla) x (1/4 atoma na uglu) + 1 atom u centru lica = 2

Planarna koncentracija $n_{(100)}$ je

$$n_{(100)} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right)+1}{a^2} = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{(0.4084 \times 10^{-9} m)^2} = 12 \times 10^{18}\ at\ m^{-2} \quad ili\ 12\ at\ nm^{-2}$$



Slika 8

Razmotrimo ravan (110).

Broj atoma u oblasti (a) (a$\sqrt{2}$) definisanoj pomoću dvije dijagonale lica i dvije stranice kocke

= (4 ugla) x (1/4 atoma u uglu)

+ (2 dijagonale lica) x (1/2 atoma u centru dijagonale) = 2

Planarna koncentracija je

$$n_{(110)} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right) + 2\left(\frac{1}{2}\right)}{(a)(a\sqrt{2})} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}} = \frac{2}{(0.4084 \times 10^{-9}m)^2\sqrt{2}} = 8.5 \times 10^{18}\ at\ m^{-2} \quad ili\ 8.5\ at\ nm^{-2}$$

Ravan (100), povrsina kocke, je gusce naseljena od ravni (110).

Razmotrimo ravan (111). Područje interesa ABC je jednakostranični trougao definisan dijagonalama lica dužine a$\sqrt{2}$. Visina trougla ABC je a$\sqrt{(3/2)}$ tako da je povrsina trougla ABC (1/2) (a$\sqrt{2}$) [a$\sqrt{(3/2)}$]. Atom u uglu samo doprinosi dijelu (60 °/360°) ovom području.

Broj atoma u ABC = (3 ugla) x (60 °/360 ° atoma na uglu)

+ (3 dijagonale lica) x (1/2 atoma u centru dijagonale) = 2

Planarna koncentracija $n_{(111)}$ je

$$n_{(111)} = \frac{3\left(\frac{60}{360}\right) + 3\left(\frac{1}{2}\right)}{\frac{1}{2}a\sqrt{2}\frac{(a\sqrt{3})}{2}} = \frac{2}{\frac{a^2\sqrt{3}}{2}} = \frac{2}{(0.4084 \times 10^{-9}m)^2\frac{\sqrt{3}}{2}}$$

$$n_{(111)} = 8.5 \times 10^{18}\ at\ m^{-2} \quad ili\ 8.5\ at\ nm^{-2}$$

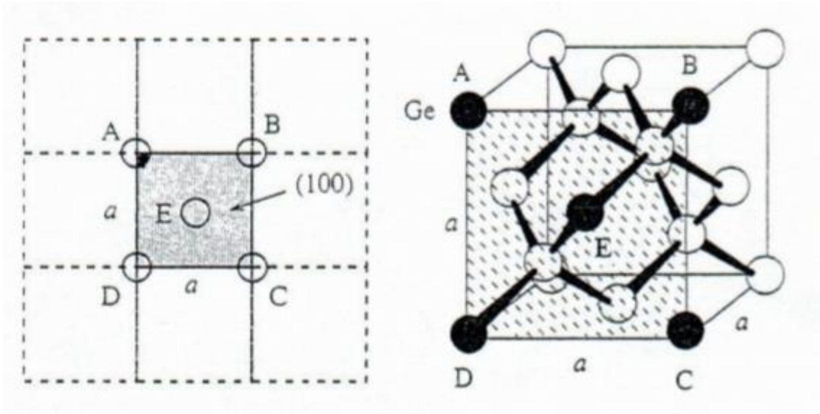
Ravni {100} imaju najmanju, a {111} ravni imaju najveću povrsinsku koncentraciju atoma u FCC kristalima.

Problem: Ravanska koncentracije u kristalnoj strukturi dijamanta

Germanijum ima dijamantsku kristalnu strukturu. Parametar rešetke *a* je 0,5659 nm. Izračunajte broj atoma u jedinici zapremine i povrsinske koncentracije (broj atoma po jedinici površine) na ravni (100), (110) i (111). Koja ravan ima najmanju povrsinsku koncentraciju?

Rešenje

Da biste izračunali ravansku koncentraciju na ravni (100), uzmite u obzir lice kocke koje ima površinu a^2. Razmatramo samo one atome čija središta leže na ravni, to su atomi A, B, C, D i E; prikazano crnom bojom na slici 9. Postoje četiri atoma u uglovima i jedan atom u centru. Međutim, samo 1/4 atoma u uglu je presječena površinom ABCD. Samo četvrtina atoma kod A pripada području ABCD. Podsjetimo se da kada ravan presječe cio atom u dvije dimenzije, rezultat je krug kao u slučaju atoma E u centru.

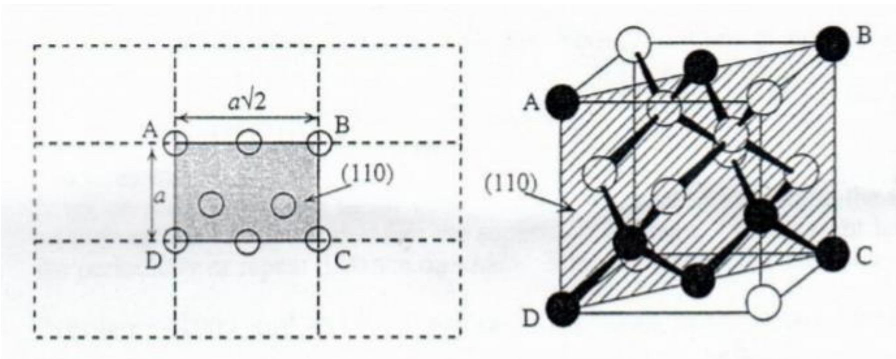


Slika 9

Planarna koncentracija $n_{(100)}$ je

$$n_{(100)} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right)+1}{a^2} = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{(0.5659 \times 10^{-9} m)^2} = 6.2\ at\ nm^{-2}$$

Razmatramo oblast ABCD na (110) ravni koja je ogranicena sa dvije dijagonale i dvije stranice kocke kao sto je prikazano na slici 10. Ova oblast je $(a)(a\sqrt{2})$. Atomi koji su uzeti u obzir pri racunanju su prikazani su crnom bojom.



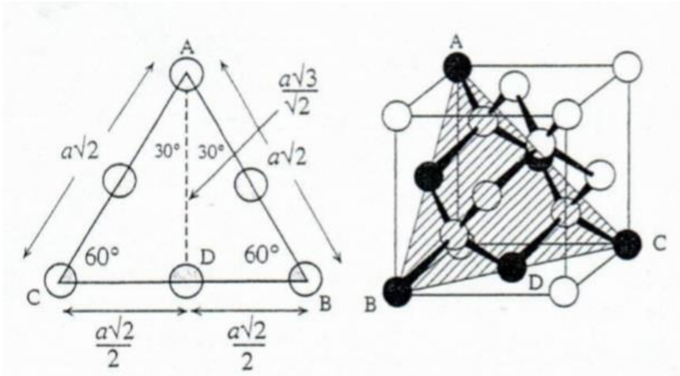
(110) ravan u kristalnoj strukturi dijamanta.

Slika 10

Planarna koncentracija $n_{(110)}$ je

$$n_{(110)} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right)+2\left(\frac{1}{2}\right)+2}{(a)(a\sqrt{2})} = \frac{4}{a^2\sqrt{2}} = \frac{4}{(0.5659)^2\sqrt{2}} = 8.8\ at\ nm^{-2}$$

Ravan (111) je dijagonalna ravan. Razmatramo površinu ABC omeđenu stranicama kocke kako je prikazano na slici 11. Ova površina je dvostruko veća od površine trougla ABD. Atomi koji su uključeni u proračun prikazani su crnom bojom.



(111) ravan u kristalnoj strukturi dijamanta.

Slika 11

Planarna koncentracija $n_{(111)}$ je

$$n_{(111)} = \frac{3\left(\frac{60}{360}\right) + 3\left(\frac{1}{2}\right)}{\frac{1}{2}a\sqrt{2}\frac{(a\sqrt{3})}{2}} = \frac{2}{\frac{a^2\sqrt{3}}{2}} = \frac{2}{(0.5659 \times 10^{-9}m)^2\frac{\sqrt{3}}{2}}$$

$$n_{(111)} = 7.2\ at\ nm^{-2}$$

7. Linearna atomska koncentracija

Linearna atomska koncentracija je broj tačaka (ili atoma) po jedinici dužine, duž datog smjera u kristalu. Da bismo pronašli linearnu koncentraciju, treba da odredimo koliko atoma sa centrima leži na datoj pravoj. Pretpostavimo da je L rastojanje dvije susjedne tačke resetke na liniji, odnosno L je periodičnost ili ponovljena udaljenost na <hkl>. Tada je linearna koncentracija n_L *1/L*.

Problem: <100> i <110> linearne koncentracije u kristalu dijamanta

Germanijum ima dijamantsku kristalnu strukturu. Parametar rešetke *a* je 0,5659 nm. Izračunajte broj atoma po jedinici dužine, to je linearna koncentracija atoma (atoma po nm dužine) duž pravca <100> i <110> (<hkl> predstavlja porodicu ekvivalentnih pravaca. Na primer, <110> bi predstavljalo skup [110], [101], [O11], ... pravaca koji su dijagonale lica).

Rjesenje

Da bismo izračunali linearnu koncentraciju na datoj liniji, moramo pronaći rastojanje tačaka resetke ili atoma na ovoj pravoj. Uzmite u obzir liniju <100> koja je stranica kocke, kao što je prikazano na slici 12.

Prava prolazi kroz središta atoma A i B i stoga i A i B leže na liniji. Očigledno je da se tačke ponavljaju na <100> na svakih *a* metaar. Na svakoj *a* udaljenosti koja se kretala duž <100> mi nalazimo jedan atom. Tako je linearna koncentracija jednaka *1/a.*

Generalno, ako je *L* periodičnost (ili ponovljena udaljenost) tačaka resetke duž datog <hkl> smjera, tada je linearna koncentracija duž <hkl>

$$n_L(hkl) = \frac{1}{L} = \frac{1}{a} = \frac{1}{0.5659\ nm} = 1.77\ at\ nm^{-1}$$