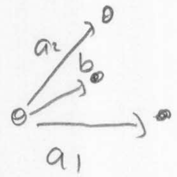
(1)



גרפין:

בראווה:

$$a_1 = a\hat{x}$$

$$a_2 = \frac{1}{2}a\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}$$

בסיס:

$$o,\quad b = \frac{1}{3}(a_1+a_2)$$

$$= \frac{1}{2}a\hat{x} + \frac{1}{2\sqrt{3}}a\hat{y}$$

הנקודה הקריטית:

$$\begin{cases} r_> = \frac{1}{2}a & \text{אטומי A נוגעים זה בזה,} \\ r_> + r_< = \|b\| & \text{וגם אטומי A ו-B נוגעים} \end{cases}$$

$$X_c = \frac{r_<}{r_>} = \frac{\|b\|}{r_>} - 1 = \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \simeq 0.15$$

עבור $x < X_c$:

$$R_< = \frac{\pi(1+x^2)}{\frac{\sqrt{3}}{2}\cdot 4} = \frac{\pi(1+x^2)}{2\sqrt{3}}$$

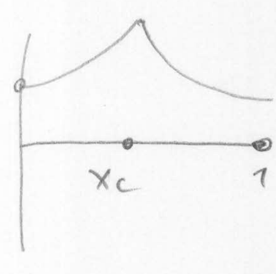
$x > X_c$:

$$R_> = \frac{\pi(r_<^2+r_>^2)}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2}, \qquad a = \underbrace{\frac{\sqrt{3}}{2}}_{\cos(30)}\cdot 2(r_>+r_<)$$

$$= \frac{\pi(1+x^2)}{\frac{\sqrt{3}}{2}\,3(1+x)^2}$$

$$R_>(1) = \frac{\pi}{3\sqrt{3}}$$

$$R_<(0) = \frac{\pi}{2\sqrt{3}}$$

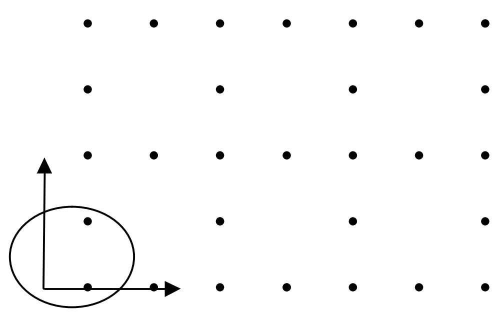


תרגיל בית 2

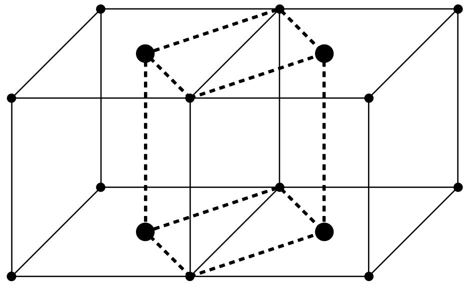
פתרון

1. ראינו כי אם רדיוס כל אטום הוא r אז הצלע של הבסיס הקובי ממורכז הגוף שווה ל- $a(BCC)=4r/\sqrt{3}$. כיון שכל תא מכיל 2 אטומים, הצפיפות פר אטום (מספר האטומים ליחידת נפח) היא $\rho(BCC)=2/a(BCC)^3=3\sqrt{3}/(32r^3)$. מפתרון שאלה 2.5.4 ראינו כי $a(FCC)=2\sqrt{2}r$, ולכן הצפיפות פר אטום עבור סריג ה-FCC היא $\rho(FCC)=4/a(FCC)^3=1/(4\sqrt{2}r^3)$. מכאן,
$$\rho(FCC)/\rho(BCC)=8/(3\sqrt{6})\approx 1.086.$$
המסה של אטום ברזל היא מסת הפרוטון כפול המסה האטומית שלו, כלומר $m(Fe)=55.85\times 1.6726\times 10^{-27}kg=9.34\times 10^{-26}kg$. לכן, $\rho(BCC)=7900/m(Fe)=8.46\times 10^{28}/m^3$, ומהקשר $\rho(BCC)=2/a(BCC)^3$ נקבל
$$a(BCC)=\sqrt[3]{2/\rho(BCC)}=0.287nm=2.87\mathring{A}.$$

1. (א) הסביבות של שני סוגי האתרים אינן זהות. לכן, זה אינו סריג Bravais. תא היחידה הפרימיטיבי הוא הריבוע המקורי, והבסיס מכיל שלוש נקודות, למשל אלו המוקפות באליפסה:



(ב) זהו סריג Bravais. האיור הבא מראה את תא היחידה של הסריג הטטרגונלי שמתאים למקרה זה.



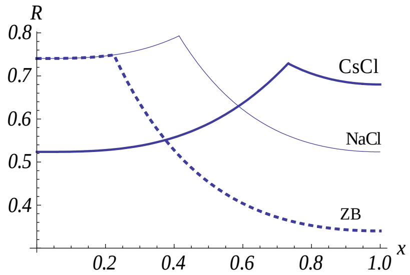
ג) התא הפרימיטיבי ממשיך להיות התא הקובי המקורי, והבסיס מכיל שלוש נקודות, למשל $(0,0,0),\ \ (0,a/2,a/2),\ \ (a/2,0,a/2)$.

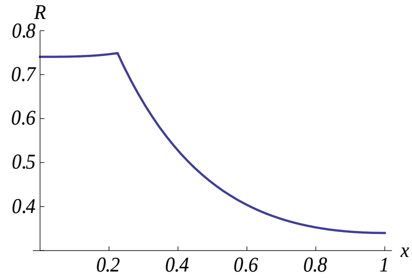
ד) גם כאן התא הפרימיטיבי ממשיך להיות התא הקובי המקורי, והבסיס הוא $(0,0,0),\ \ (a/2,0,0),\ \ (0,a/2,0),\ \ (0,0,a/2)$.

2. (א) בגבול $x=0$ מתחילים מסריג ה-FCC הצפוף, שעבורו מתקיים $a=2\sqrt{2}r_>$, כמו בפתרון לשאלה 2.5.4. יחס זה ימשיך להתקיים כל עוד היון הקטן נכנס לתוך הטטרהדרון המופיע באיור 2.5.6. כיון שהמרחק בין מרכזי שני היונים הקרובים שווה לרבע מאלכסון הקובייה, היונים הגדולים ימשיכו להשיק זה לזה כל עוד יתקיים אי השוויון $a\sqrt{3}/4>(r_<+r_>)$, או $x<\sqrt{6}/2-1$. בתחום הזה, יחס האריזה הוא $R=4\times(4\pi/3)(r_<^3+r_>^3)/a^3=\pi(x^3+1)/(3\sqrt{2})$.

(ב) באשר שני היונים משיקים זה לזה, מתקיים השוויון $a\sqrt{3}/4=(r_<+r_>)$, ואילו אלכסון הפיאה חייב לקיים $a\sqrt{2}>4r_>$, כלומר $x>\sqrt{6}/2-1$. בתחום הזה מתקיים $R=4\times(4\pi/3)(r_<^3+r_>^3)/a^3=\pi\sqrt{3}(x^3+1)/[4(x+1)^3]$.

(ג) השרטוט הימני להלן מראה את יחס האריזה. יהלום מתאים ליחס $x=1$, כאשר מתקבל $R=\pi\sqrt{3}/16\approx 0.34$. המכסימום, $R\approx 0.749$, מתקבל כאשר כל הכדורים משיקים, $x=\sqrt{6}/2-1\approx 0.225$. השרטוט השמאלי מראה את יחסי האריזה של שלושת סוגי הגבישים. עבור $x=1$, גביש הצזיום כלוריד הוא הצפוף ביותר. כשמקטינים את x, העדיפות עוברת למבנה מלח הבישול. עבור $x<\sqrt{2}-1$, צפיפויות האריזות של מלח בישול ושל צינק-בלנדה מתלכדות.





(א) נשתמש בתוצאות של חלק (ב) עבור המרחק בין שני היונים השכנים:

$a\sqrt{3}/4=(r_<+r_>)=0.234nm$. לכן $a=0.540nm$, והצפיפות היא

$4[m(Zn)+m(S)]/a^3=4(65.38+32.064)\times1.6726\times10^{-27}kg/a^3=4140kg/m^3$.

2.