Øving 1

1

a) Forklar hva som menes med en enhetscelle.

b) Hvor mange krystallsystemer, og hvor mange Bravais-gitter er det? Hva er forskjellen på et krystallsystem og et Bravais-gitter?

c) Hva kjennetegner det kubiske krystallsystemet?

d) Hva kjennetegner det tetragonale krystallsystemet?

a) Det er den minste repeterende enheten i krystallstrukturen. Den kan brukes til å beskrive hele krystallstrukturen. Ved å kombinere flere enhetsceller kan hele krystallstrukturen bygges opp.

b) Vi har 7 krystallsystem og 14 Bravais-gitter. Krystallsystemer beskriver geometrien til enhetscellen, imens Bravais-gitterene i tillegg plasserer atomer i gitterpunkter i enhetscellen.

c) $a = b = c, \ \alpha = \beta = \gamma = 90°$

d) $a = b \neq c, \ \alpha = \beta = \gamma = 90°$

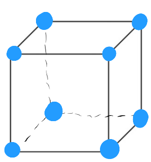
2

a) Tegn de tre enhetscellene i det kubiske krystallsystemet. Hvor mange atomer er det i hver av disse enhetscellene? Hvilke(n) av disse enhetscellene kan beskrives som tetteste kulepakning?

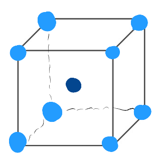
b) Tegn enhetscellen til heksagonal tetteste kulepakning (HCP). Vis hvor mange atomer det er per enhetscelle i HCP.

c) En gullfolie er 0,08 mm tykk og har arealet 670 mm^2. Sidekanten i enhetscellen er 0,4076 nm. Beregn antall enhetsceller i folien. Beregn massen av en enhetscelle dersom tettheten av gull er 19,32 g/cm^3.

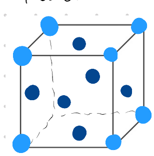
a) Simple cubic: SC



Body centered cubic: BCC

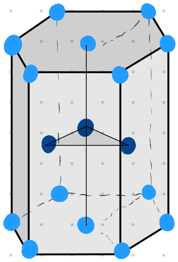


Face centered cubic: FCC



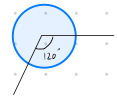
FCC har tetteste kulepakning

Antall atomer: $8 \cdot \frac{1}{8} = \underline{\underline{1}}$ $\quad 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = \underline{\underline{2}}$ $\quad 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = \underline{\underline{4}}$

b) 

HCP

På de heksagonale flatene er det ett ½ atom og $6 \cdot \frac{1}{6}$ atom
(1/6 fordi de er "kuttet" i 2 og "delt i 3)
Midt inni er det 3 hele atom



$$\Rightarrow N = 3 + 2\left(\frac{1}{2} + 6 \cdot \frac{1}{6}\right)$$

$$\underline{\underline{N = 6}}$$

c) Gull har FCC struktur => Kubisk, $V = a^3$

$$V_{folie} = 0{,}08\ mm \cdot 670\ mm^2 = 53{,}6\ mm^3$$

$$a = 0{,}4076\ nm = 4{,}076 \cdot 10^{-7}\ mm$$

$$V_{celle} = a^3 = 6{,}7718 \cdot 10^{-20}\ mm^3$$

$$N_{enhetsceller} = \frac{53{,}6\ mm^3}{6{,}7718 \cdot 10^{-20}\ mm^3} = \underline{\underline{7{,}9152 \cdot 10^{20}}}$$

$$a = 4{,}076 \cdot 10^{-8}\ cm$$

$$\rho = \frac{m}{V} \Rightarrow m = \rho V = \rho a^3 = 19{,}32\ g/cm^3 \cdot (4{,}076 \cdot 10^{-8}\ cm)^3$$

$$\underline{\underline{m = 1{,}308 \cdot 10^{-21}\ g}}$$

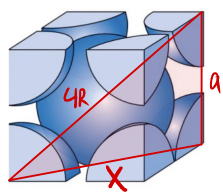
$\boxed{3}$

a) Vis at pakningsfaktoren for en BCC enhetscelle er 0,68.

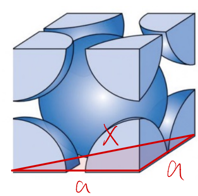
b) Vis at pakningsfaktoren for en FCC enhetscelle er 0,74.

c) Beregn teoretisk tetthet til nikkel. Nikkel har krystallstrukturen FCC og atomradius 0,1246 nm.

a) Må bruke pythagoras to ganger for å finne a:
4R = diagonal gjennom senter
x = diagonal på sideflate

I 

$$\text{I}: (4R)^2 = x^2 + a^2 \Rightarrow a^2 = 16R^2 - x^2$$

II 

$$\text{II}: x^2 = a^2 + a^2 \Rightarrow x^2 = 2a^2$$

$$\text{II} \rightarrow \text{I}: a^2 = 16R^2 - 2a^2$$

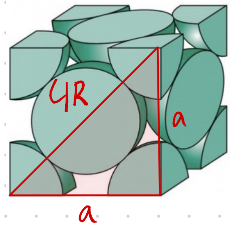
$$\underline{a = \frac{4}{\sqrt{3}} R}$$

BCC, n=2

$$APF = \frac{V_{atomer}}{V_{celle}} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}} R\right)^3} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0{,}68$$

$\Rightarrow \underline{APF = 68\%}$

b) $(4R)^2 = a^2 + a^2$ FCC, $n=4$



$\Rightarrow a = 2\sqrt{2} R$

$$APF = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3}{(2\sqrt{2}R)^3} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi = 0{,}74$$

$\Rightarrow \underline{APF = 74\%}$

c) FCC $\Rightarrow n = 4$, $M = 58{,}69$ g/mol

$$\rho_{Ni} = \frac{n M}{V N_A} = \frac{4 \cdot 58{,}69}{(2\sqrt{2} \cdot 0{,}1246 \cdot 10^{-7})^3 \cdot 6{,}022 \cdot 10^{23}}$$

$\underline{\rho_{Ni} = 8{,}91 \text{ g/cm}^3}$

$\boxed{4}$

a) Hva menes med allotroper? Gi to eksempler på allotroper.

b) Beregn % tetthetsendring når α-jern som har BCC-struktur går over til γ-jern som har FCC-struktur ved 910°C. Er dette en økning eller en reduksjon av volumet?

FCC-Fe (γ-jern): Volum enhetscelle = 0,04860 nm^3 ved 910°C.

BCC-Fe (α-jern): Volum enhetscelle = 0,02464 nm^3 ved 910°C.

a) Allotroper er ulike krystallstrukturer av det samme faste stoffet. Hvilken allotrop stoffet har avhenger av trykk og temperatur.
Eks: α- og β-Sn, α-Fe, γ-Fe

b)
$$\left.\begin{aligned} \rho_\alpha &= \frac{n_{BCC} M_{Fe}}{V_\alpha N_A} \\ \rho_\gamma &= \frac{n_{FCC} \cdot M_{Fe}}{V_\gamma N_A} \end{aligned}\right\} \quad \Delta\rho = \frac{\rho_\gamma - \rho_\alpha}{\rho_\alpha} \cdot 100\% = \frac{\frac{n_{FCC}}{V_\gamma} - \frac{n_{BCC}}{V_\alpha}}{\frac{n_{BCC}}{V_\alpha}} \cdot 100\%$$

$$\Delta\rho = \frac{\frac{4}{0{,}04860} - \frac{2}{0{,}02464}}{\frac{2}{0{,}02464}} \cdot 100\% = 1{,}40\%$$

Tettheten øker med 1,40%

Ettersom $n_{FCC} = 2 \cdot n_{BCC}$, vil antallet enhetsceller halveres $\left(n_\alpha^{celler} = 2 \cdot n_\gamma^{celler}\right)$

$$\frac{V_\alpha^{tot}}{V_\gamma^{tot}} = \frac{n_\alpha^{celler} \cdot V_\alpha}{n_\gamma^{celler} \cdot V_\gamma} = \frac{2\, \cancel{n_\gamma^{celler}}\, V_\alpha}{\cancel{n_\gamma^{celler}} \cdot V_\gamma} = \frac{2V_\alpha}{V_\gamma} = \frac{2 \cdot 0{,}02464}{0{,}04860} = 1{,}01 > 1$$

=> Volumet reduseres

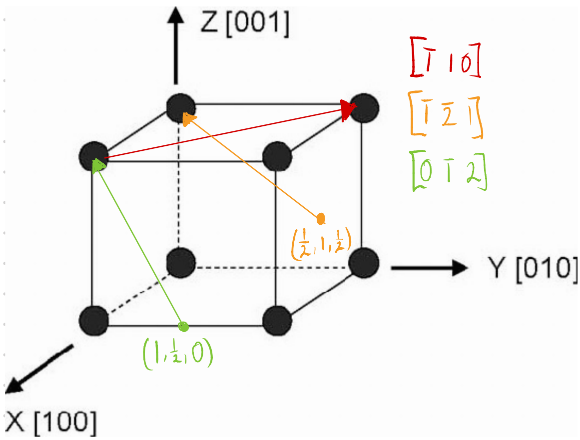
Eventuelt: Massebevaring gjør at massen er uendret, men tettheten er større. Da er massen fordelt over ett mindre volum. => Volumet reduseres

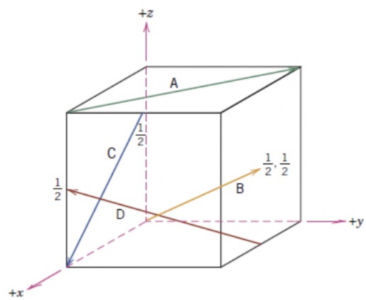
$\boxed{5}$

a) Tegn retningene $[\bar{1}10]$, $[\bar{1}\bar{2}1]$ og $[0\bar{1}2]$ i en kubisk enhetscelle.

b) Finn [u v w] for retningene i den kubiske enhetscellen i Figur 1.

a)





b) $A = (0,1,0) - (1,0,0)$

$\underline{A = [\bar{1}\ 1\ 0]}$

$B = (\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}) - (0,0,0)$

$\underline{B = [1\ 2\ 1]}$

c) $C = (1,0,0) - (1, \frac{1}{2}, 1)$

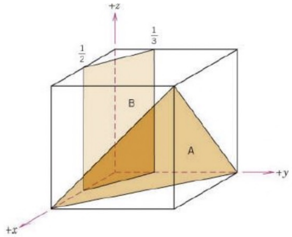
$\underline{C = [0\ \bar{1}\ \bar{2}]}$

d) $D = (1, 0, \frac{1}{2}) - (\frac{1}{2}, 1, 0)$

$\underline{D = [1\ \bar{2}\ 1]}$

6

a) Finn Miller indeksene for planene i enhetscellen i Figur 2.



a) Plan A:

	A	B	C
Krysser	1	1	-1
Resiprok	1	1	-1
Heltall	1	1	-1

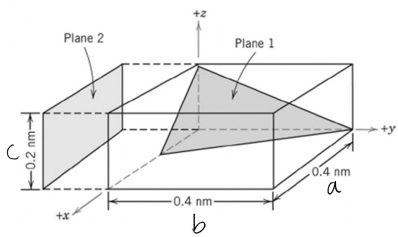
Miller $(1\,1\,\bar{1})$

Plan B

	A	B	C
Krysser	½	⅓	∞
Resiprok	2	3	0
Heltall	2	3	0

Miller $(2\,3\,0)$

b) Finn Miller indeksene for planene i enhetscellen i Figur 3.



b) Plan 1:

	A	B	C
Krysser	$\frac{a}{2}$	b	c
Resiprok	$\frac{2}{a}$	$\frac{1}{b}$	$\frac{1}{c}$
Normaliserer	2	1	1
Heltall	2	1	1

Miller $(2\,1\,1)$

Plan 2:

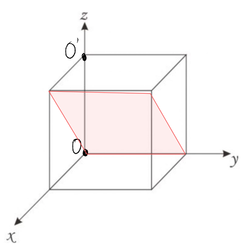
	A	B	C
Krysser	∞	$-\frac{b}{2}$	∞
Resiprok	0	$-\frac{2}{b}$	0
Normaliserer	0	-2	0
Heltall	0	-2	0

Miller $(0\,\bar{2}\,0)$

c) Skisser planene $(10\bar{1})$, $(2\bar{1}1)$, (012), $(3\bar{1}3)$ i en kubisk enhetscelle.

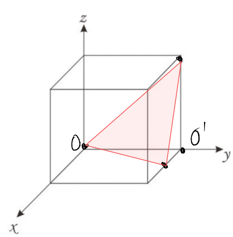
$(1\,0\,\bar{1})$

	A	B	C
Heltall	1	0	-1
Resiprok	1	0	-1
Krysser	1	∞	-1

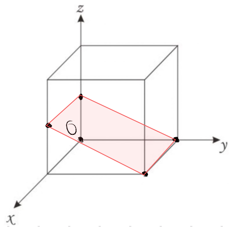


$(2\,\bar{1}\,1)$

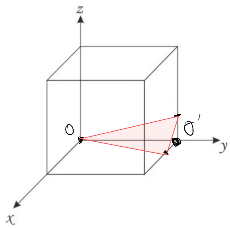
	A	B	C
Heltall	2	-1	1
Resiprok	2	-1	1
Krysser	½	-1	1



(0 1 2)	A	B	C
Heltall	0	1	2
Resiprok	0	1	2
Krysser	∞	1	1/2



$(3\,\bar{1}\,3)$	A	B	C
Heltall	3	-1	3
Resiprok	3	-1	3
Krysser	1/3	-1	1/3



7

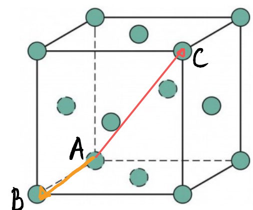
Utled lineær tetthet (LD) til retningene [100] og [111] i FCC som funksjon av atomradius, R.
Beregn lineær tetthet for disse retningene i kobber (Cu) hvis atomradius er 0,128 nm.

$$LD_{100} = \frac{2 \cdot \frac{1}{2} \text{ atom}}{2\sqrt{2}\,R} = \frac{1}{2\sqrt{2}\,R}$$

$$\Rightarrow LD_{100}^{Cu} = 2{,}76 \cdot 10^{9}\ m^{-1}$$

[1 0 0]

[1 1 1]



$a = 2\sqrt{2}R$, fra 3b

Begge retningene går gjennom 2 halve atom

Finner lengden av [1 1 1] ved pythagoras,

$$AC^2 = AB^2 + BC^2$$

$$AC^2 = \underbrace{(2\sqrt{2}R)^2 + (4R)^2}_{\text{fra } 3b} \Rightarrow AC = 2\sqrt{6}\,R$$

$$LD_{111} = \frac{2 \cdot \frac{1}{2} \text{ atom}}{2\sqrt{6}\,R} = \frac{1}{2\sqrt{6}\,R}$$

$$LD_{111}^{Cu} = 1{,}59 \cdot 10^{9}\ m^{-1}$$

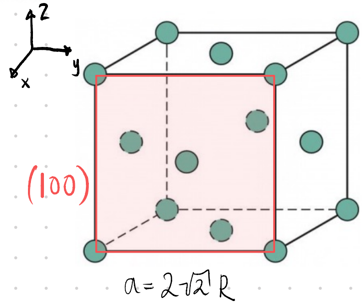
8

Utled plantetthet (PD) til planene (100) og (111) i FCC som funksjon av atomradius, R.

Beregn plantetthet for disse planene i aluminium (Al) hvis atomradius er 0,143 nm.

(100)	A	B	C
Heltall	1	0	0
Resiprok	1	0	0
Krysser	1	∞	∞

Antall atomer sentrert i planet: $4 \cdot \frac{1}{4} + 1 = 2$



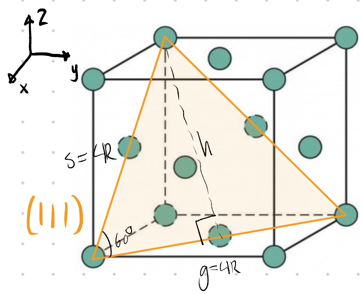
$$PD_{100} = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{4 \cdot 2R^2} = \frac{1}{4R^2}$$

$$PD_{100} = \frac{1}{4R^2}$$

$$PD_{100}^{Al} = 1{,}22 \cdot 10^{19}\ m^{-2}$$

(1 1 1)	A	B	C
Heltall	1	1	1
Resiprok	1	1	1
Krysser	1	1	1

Antall atomer sentrert i planet: $3 \cdot \frac{1}{6} + 3 \cdot \frac{1}{2} = 2$



(111) er en likesidet trekant med $s = 4R$ og vinkel $60° \Rightarrow A = \frac{1}{2} \cdot g \cdot h = \frac{1}{2} \cdot 4R \cdot 4R \cdot \sin 60°$

$$A = 4\sqrt{3}R^2$$

$$PD_{111} = \frac{2}{4\sqrt{3}R^2} = \frac{1}{2\sqrt{3}R^2}$$

$$PD_{111} = \frac{1}{2\sqrt{3}R^2}$$

$$PD_{111}^{Al} = 1{,}41 \cdot 10^{19}\ m^{-2}$$