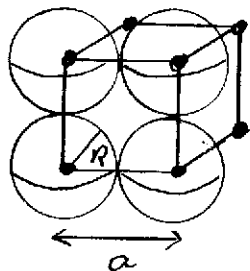


Givet: Betrakta atomerna som hårda sfärer med radie R .

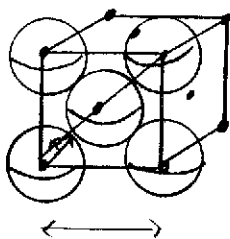
Sökt: Bestäm R från kristallstrukturen (fcc eller bcc) och gitterkonstanten a . Vilken struktur är mest tätpackad?

Lösning

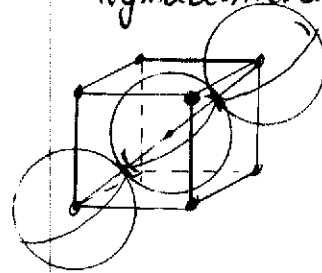
Enkelt (sc)



Ytcentrerat (fcc)



Rymdcentrerat (bcc)



a/ sc: $2R = a \Rightarrow R = a/2$

fcc: $4R = \sqrt{a^2 + a^2} = \sqrt{2}a \Rightarrow R = \frac{a}{2\sqrt{2}}$

bcc: $4R = \sqrt{a^2 + a^2 + a^2} = \sqrt{3}a \Rightarrow R = \frac{\sqrt{3}a}{4}$

b/ Enhetscellens volym: $V_{\text{cell}} = a^3$

Atomens (sfärens) volym: $\frac{4\pi R^3}{3} = V_{\text{sfär}}$

sc: $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ atomer/cell

$\Rightarrow n = \frac{1 \cdot V_{\text{sfär}}}{V_{\text{cell}}} = \frac{4\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{3a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 52,3\%$ (packningsgrad)

fcc: $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ atomer/cell

$\Rightarrow n = \frac{4 \cdot V_{\text{sfär}}}{V_{\text{cell}}} = \frac{16\pi \left(\frac{a}{2\sqrt{2}}\right)^3}{3a^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 74,0\%$

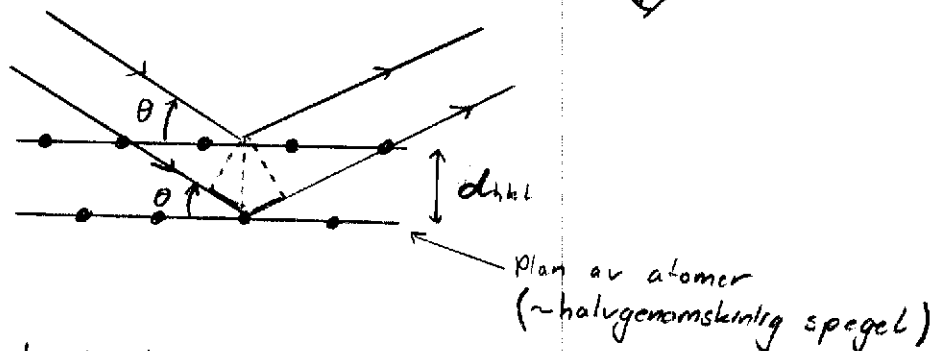
bcc: $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$ atomer/cell

$\Rightarrow n = \frac{2 \cdot V_{\text{sfär}}}{V_{\text{cell}}} = \frac{8\pi \left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3}{3a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 68,0\%$

Bestäm med hjälp av röntgendiffraktionsdata aluminiums kristallstruktur

Lösning

Diffraction

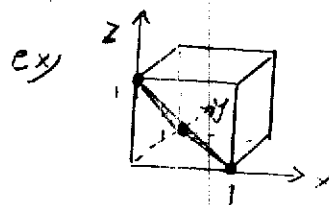


Villkor för konstruktiv interferens:

$$2 d_{hkl} \sin \theta = n \lambda \quad (\text{Braggs lag})$$

där $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

(avstånd mellan närbelägna plan i planskaran med Millerindex hkl)



✓ Skärningspunkter 1, 1, 1

3 Inverkar $\Rightarrow (111)$

$\therefore (hkl) = (111)$

Antag endast första ordningens interferens ($n=1$).

Notera att $d \sim 1 \text{ \AA} \Rightarrow \lambda \sim \text{Å} \quad \therefore$ Använd röntgenstrålning (här Cu K_α -strålning)

Gör en tabell med kända data

θ	d_{hkl}	$\frac{(d_{hkl})_0}{d_{hkl}} = \frac{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}{(\sqrt{h^2+k^2+l^2})_0}$	$h^2+k^2+l^2$	hkl
$19,48^\circ$	$2,31 = (d_{hkl})_0$	1	3	111
$22,64^\circ$	2,00	1,15	4	200
$33,00^\circ$	1,41	1,63	8	220
$39,68^\circ$	1,206	1,91	11	311

Den sk struktur faktorn ger villkoret att

bcc: $h+k+l$ måste vara ett jämnt tal för att konstruktiv interferens skall kunna ske.

fcc: h, k, l alla udda eller alla jämna,

$\therefore$ Al har fcc-struktur

$$a = d_{hkl} \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = 2,31 \cdot \sqrt{3} \text{ Å} = \underline{\underline{4,0 \text{ Å}}}$$