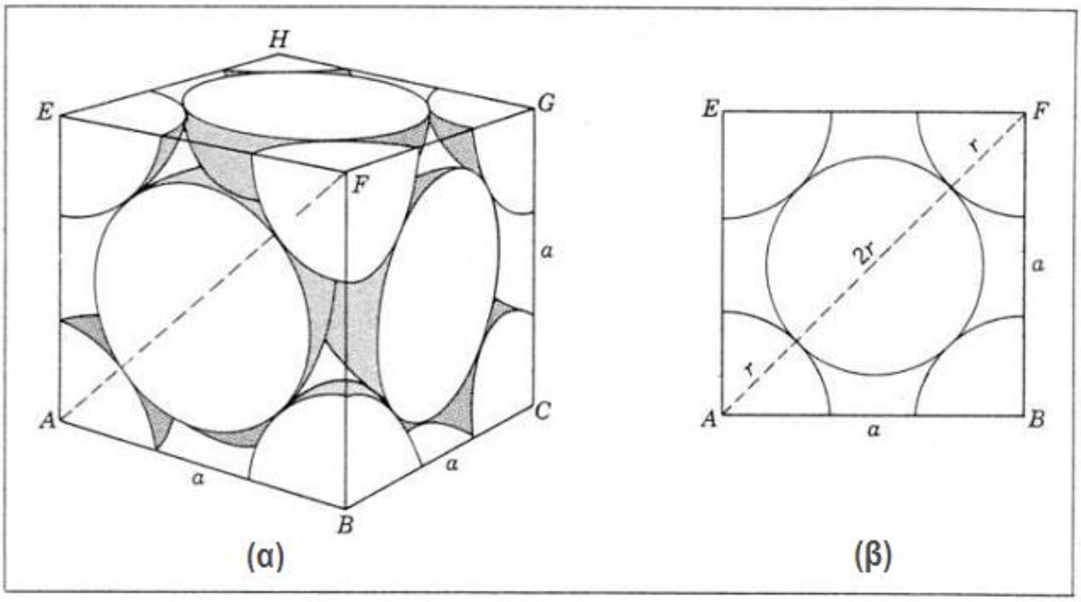
Άσκηση 1

Να υπολογίσετε α) τον αριθμό ατόμων που ανήκουν στη μοναδιαία κυψελίδα, την πλεγματική σταθερά, τον ατομικό παράγοντα πληρότητας και β) την ατομική πυκνότητα καθώς και την πυκνότητα μάζας, για το αλουμίνιο το οποίο έχει εδροκεντρωμένη κυβική δομή FCC. Δίνονται: ατομική ακτίνα αλουμινίου r_{Al}=0,1431nm (1nm=10^{-9}m), ατομικό βάρος AB_{Al}=26,97, αριθμός Avogadro N_A=6,023*10^{23} άτομα/mol. (Υποθέτουμε ότι τα άτομα είναι ασυμπίεστες σφαίρες που εφάπτονται).

ΛΥΣΗ

Σε μία δομή FCC έχουμε τη διάταξη των ατόμων που φαίνεται στο σχήμα 1.α (έχει σχεδιαστεί μόνο το μέρος των ατόμων που ανήκει στην FCC κυψελίδα)



Σχήμα 1: α) Απεικόνιση fcc δομής (έχει σχεδιαστεί μόνο το μέρος που ανήκει στην κυψελίδα) β) Πλάγια όψη της έδρας ABFE.

Συνολικά άτομα ανά μοναδιαία κυψελίδα (σχήμα 1a): 8 άτομα βρίσκονται στις κορυφές της μοναδιαίας κυψελίδας και 6 άτομα στα κέντρα των εδρών. Καθένα από τα 8 άτομα ανήκει σε 8 κυψελίδες (3 γειτνιάζουν με το επίπεδο που ορίζεται από την κυψελίδα μας, ενώ άλλες 4 υπάρχουν στο ημιεπίπεδο που βρίσκεται πάνω από την κυψελίδα), επομένως κάθε άτομο ανήκει κατά το 1/8 αυτού στην κυψελίδα. Για τα 6 άτομα που βρίσκονται στο κέντρο των εδρών, καθένα από αυτά μοιράζεται σε 2 κυψελίδες, οπότε ανήκει κατά 1/2 στην κυψελίδα. Τα *συνολικά άτομα ανά μοναδιαία κυψελίδα,* είναι:

$$8\times {}^{1}\!/_{8}+6\times {}^{1}\!/_{2}=4$$

Πλεγματική σταθερά α (ακμή κύβου): Στην κυψελίδα FCC τα άτομα εφάπτονται κατά μήκος της διαγώνιου κάθε έδρας, το μήκος της οποίας είναι $r + 2r + r = 4r$. Η κυψελίδα είναι κύβος με μήκος ακμής α που σχετίζεται με την ατομική ακτίνα r όπως φαίνεται στο σχήμα 1β. Από το Πυθαγόρειο θεώρημα προκύπτει

$$(r+2r+r)^2=a^2+a^2\Rightarrow(4r)^2=2a^2\Rightarrow$$

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} \tag{1.1}$$

Με αντικατάσταση προκύπτει $a = \dfrac{4 \times 0,1431}{\sqrt{2}}$ =0,4047nm

Ο όγκος της κυψελίδας είναι α^3 διότι έχουμε κύβο, λαμβάνοντας υπόψη και τη σχέση 1.1 προκύπτει τελικά η σχέση 1.2

$$V_c = \alpha^3 = \frac{32r^3}{\sqrt{2}} \tag{1.2}$$

Ο παράγοντας ατομικής πληρότητας APF μιας δομής FCC είναι:

$$APF = \frac{\text{όγκος των ατόμων στη μοναδιαία κυψελίδα}}{\text{όγκος της μοναδιαίας κυψελίδας}} \tag{1.3}$$

Ο όγκος των ατόμων σε μία μοναδιαία κυψελίδα βρίσκεται εύκολα αν σκεφτούμε πως αυτή περιέχει 4 άτομα (σφαίρες), δηλαδή $4x\frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{16}{3}\pi r^3$

Οπότε $$APF = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{16}{3}\pi r^3}{\frac{32r^3}{\sqrt{2}}} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0,74 \tag{1.4}$$

Παρατηρούμε πως ο APF παραμένει σταθερός για οποιοδήποτε μέταλλο με δομή FCC.

Για να βρούμε την ατομική πυκνότητα παίρνουμε το λόγο του αριθμού των ατόμων που περιέχει η κυψελίδα προς τον όγκος της:

$$\rho_A = \frac{n}{V_c} \tag{1.5}$$

Η κυψελίδα περιέχει 4 άτομα αλουμινίου, οπότε προκύπτει:

$$\rho_A = \frac{4 \text{ άτομα}}{(0,4047\text{x}10^{-9}\text{m})^3} = 60,33\text{x}10^{27} \text{άτομα/m}^3$$

Η πυκνότητα μάζας δίνεται από τη σχέση

$$\rho = \frac{n\, AB_{Al}}{V_c .\, N_A} \tag{1.6}$$

Έχουμε ήδη βρει την ατομική πυκνότητα οπότε για να βρούμε την πυκνότητα μάζας αρκεί να πολλαπλασιάσουμε την ατομική πυκνότητας ρ_A με το βάρος του ατόμου του αλουμινίου, $AB_/ N_A$. Γνωρίζουμε ότι 1 mol ζυγίζει $26,97\text{x}10^{-3}$ kg καθώς AB=26,97, ενώ από τον αριθμό του Avogadro N_A γνωρίζουμε πως 1mol περιέχει $6,023\text{x}10^{23}$ άτομα. Έτσι:

$$\rho = \frac{n}{V_C}\frac{\mathrm{AB}_{Al}}{N_A} = \rho_A \frac{\mathrm{AB}_{Al}}{N_A} = \frac{26,97x10^{-3}\, kg/mol}{6,023x10^{23}\, άτομα/mol} x60,33x10^{27}\, άτομα/m^3$$

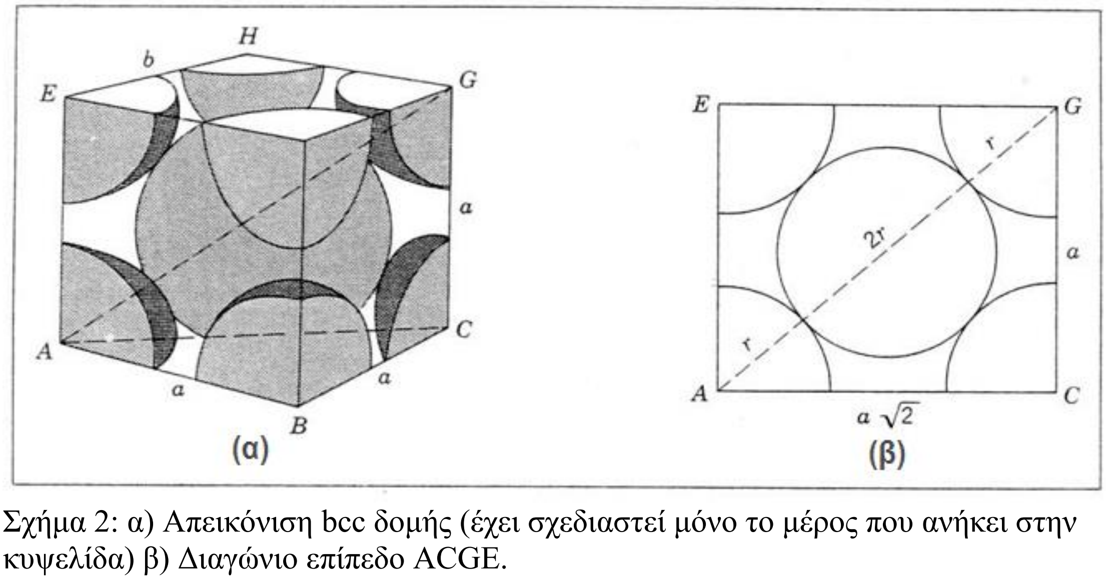
$\rho = 2,70x10^3 kg / m^3$

Άσκηση 2 (οι δύο αλλοτροπικές μορφές σιδήρου)
Αλλοτροπία: κάποιες ουσίες έχουν περισσότερες από μία κρυσταλλικές δομές ανάλογα με τις συνθήκες θερμοκρασίας ή πίεσης).
Ο σίδηρος καθώς θερμαίνεται αλλάζει κρυσταλλική δομή από BCC σε FCC στους 912^{o}C. Οι ακτίνες των ατόμων του σιδήρου στη δομή BCC είναι r_B=0,126nm και στην FCC είναι r_F=0,129nm (1nm=10^{-9}m). Να υπολογιστεί το ποσοστό μεταβολής του όγκου. Έχουμε συστολή ή διαστολή όγκου κατά τη μεταβολή της δομής από BCC σε FCC;
ΛΥΣΗ

Για να υπολογίσουμε τη μεταβολή του όγκου του κρυστάλλου όταν μεταβάλλεται η δομή του θα πρέπει να αναφερόμαστε στον ίδιο αριθμό ατόμων. Η δομή FCC έχει 4 άτομα/κυψελίδα ενώ η δομή BCC έχει 2 άτομα/κυψελίδα[1], επομένως θα πρέπει να πάρουμε 2 φορές τον όγκο της κυψελίδας BCC και 1 φορά τον όγκο της FCC.
Για την FCC κυψελίδα υπολογίζουμε από τη σχέση 1.1 τον όγκο της:

$$V_c^{FCC} = \alpha^3 = \left(\frac{4\times 0,129}{\sqrt{2}}\right)^3 = 48,57\times 10^{-3} nm^3$$

Για να βρούμε τον όγκο της BCC κυψελίδας πρέπει να βρούμε τη σχέση της πλεγματικής σταθερής α (ακμή κύβου) με την ατομική ακτίνα r. Στο σχήμα 2α απεικονίζεται η μοναδιαία κυψελίδα, είναι κύβος με μήκος ακμής α, τα άτομα εφάπτονται κατά μήκος των διαγωνίων του κύβου (πχ AG), το μήκος της οποίας είναι $r + 2r + r = 4r$.



Σχήμα 2: α) Απεικόνιση bcc δομής (έχει σχεδιαστεί μόνο το μέρος που ανήκει στην κυψελίδα) β) Διαγώνιο επίπεδο ACGE.

[1] 1 άτομο βρίσκεται στο κέντρο του κύβου, ενώ κάθε άτομο στην κορυφή του μοιράζεται με 8 κυψελίδες οπότε ανήκει κατά 1/8. Άρα 1+1/8*8=2 άτομα ανά κυψελίδα

Η διαγώνιος AG του κύβου σχετίζεται με την πλεγματική σταθερά α (βλέπε σχήμα 2β) μέσω της προβολής της μήκους $a\sqrt{2}$ (που προκύπτει από την εφαρμογή του Πυθαγόρειου θεωρήματος με κάθετες τις ακμές του κύβου α, στο τρίγωνο ABC του σχήματος 2α). Εφαρμόζουμε το Πυθαγόρειο θεώρημα (σχήμα 2β) με κάθετες τη μία ακμή α του κύβου, την προβολή της διαγώνιου του κύβου ($a\sqrt{2}$) και υποτείνουσα τη διαγώνιο του κύβου που περιέχει 2 άτομα (4r) δηλαδή :

$$(r+2r+r)^2=(a\sqrt{2})^2+\alpha^2 \Rightarrow 3\alpha^2=(4r)^2 \Rightarrow$$

$$a=\frac{4\mathrm{r}}{\sqrt{3}} \tag{1.7}$$

Ο όγκος της κυψελίδας BCC είναι: $V_c^{BCC}=\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3$ (1.8)

και για το σίδηρο: $V_c^{BCC}=\left[\frac{4x0{,}126}{\sqrt{3}}\right]^3=24{,}64\times10^{-3}\mathrm{nm}^3$ και ο διπλάσιος όγκος $2V_c^{BCC}$ είναι $49{,}28\mathrm{x}10^{-3}\mathrm{nm}^3$. Το ποσοστό μεταβολής του όγκου για το σίδηρο είναι:

$$\frac{48{,}57-49{,}28}{49{,}28}x100\%=-1{,}44\%$$

Η μεταβολή του όγκου είναι 1,4% και μάλιστα έχουμε συστολή κατά την ψύξη του σιδήρου όπως δηλώνει το αρνητικό πρόσημο.

Άσκηση 3

Να υπολογιστούν για την ενδοκεντρωμένη κυβική δομή (BCC) και την εδροκεντρωμένη (FCC) τα εξής: α) Ο όγκος της μοναδιαίας κυψελίδας σε συνάρτηση με τη διάμετρο D των ατόμων, β) Η πυκνότητα της ύλης στα πλέγματα αυτά με τη μορφή ρ=άτομα/D^3 και γ) Ποιό συμπέρασμα προκύπτει από τη σύγκριση των όγκων των κυψελίδων και των ατομικών πυκνοτήτων; (Υποθέτουμε ότι τα άτομα είναι ασυμπίεστες σφαίρες που εφάπτονται)

ΛΥΣΗ

<u>Για τη δομή BCC:</u> Από τη σχέση 1.7 και για r=$D/2$ $\Rightarrow$ α=2D/$\sqrt{3}$, οπότε ο όγκος της κυψελίδας είναι: $V_c^{BCC}=\left(\frac{2D}{\sqrt{3}}\right)^3$ =1,54 D^3

Η ατομική πυκνότητά της (υπάρχουν 2 άτομα στην κυψελίδα BCC) θα είναι :

$$\rho_A^{BCC}=\frac{n}{V_c}=\frac{2}{\left(2D/\sqrt{3}\right)^3}=1{,}3\ \text{άτομα}/D^3$$

<u>Για τη δομή FCC:</u> Από τη σχέση 1.2 για r=D/2 , $a=\sqrt{2}D$, προκύπτει:

$$V_c=2\sqrt{2}D^3=2{,}83D^3$$

Υπάρχουν 4 άτομα στην κυψελίδα FCC, οπότε η ατομική πυκνότητά της είναι:

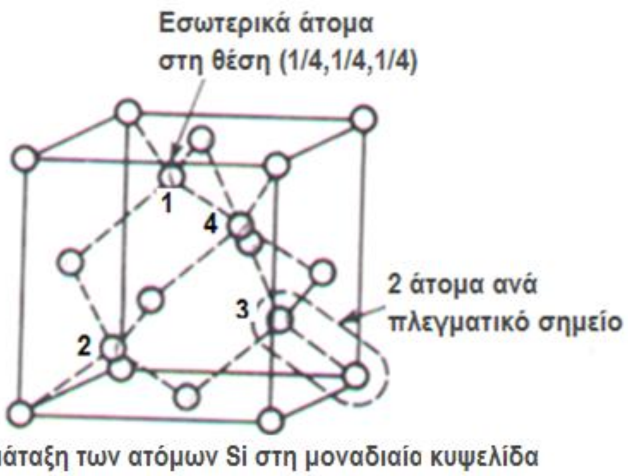
$$\rho_A{}^{FCC} = \frac{4}{2\sqrt{2}D^3} = \frac{2}{\sqrt{2}D^3} = 1{,}41\text{άτομα}/D^3$$

Η εδροκεντρωμένη (ή ολοεδρικά) κεντρωμένη κυβική δομή FCC είναι μεγαλύτερη σε όγκο από την ενδοκεντρωμένη BCC και για ίδιους όγκους πιο πυκνή είναι η FCC.

Άσκηση 4 (Ημιαγωγός πυριτίου, Si)

Να υπολογίσετε α) τον αριθμό ατόμων που ανήκουν στη μοναδιαία κυψελίδα, την πλεγματική σταθερά α, τον ατομικό παράγοντα πληρότητας και β) την ατομική πυκνότητα καθώς και την πυκνότητα μάζας, για τον κρύσταλλο πυριτίου ο οποίος έχει την κυβική δομή του διαμαντιού (FCC πλέγμα με βάση 2 άτομα). Δίνονται: ατομική ακτίνα πυριτίου r_{Si}=0,117nm, ατομικό βάρος AB_{Si}=28,09, N_A=6,023*10^{23} άτομα/mol.

ΛΥΣΗ



Σχήμα 3: α) Απεικόνιση της μοναδιαίας κυψελίδας του κρυστάλλου Si.

Στη δομή του κρυστάλλου πυριτίου η διάταξη των ατόμων είναι: άτομα στις 8 γωνίες και στα κέντρα των 6 πλευρών του κύβου, όπως σε μία κυψελίδα FCC (8x1/8 + 6x½=4 άτομα) και επιπλέον υπάρχουν 4 εσωτερικά άτομα, στις 4 εσωτερικές διαγώνιες, με συντεταγμένες (1/4,1/4,1/4). Επομένως ο αριθμός ατόμων που ανήκουν στη μοναδιαία κυψελίδα είναι: 8x1/8 + 6x½ + 4 = 8 άτομα. Μπορεί επίσης να θεωρηθεί ως μία FCC κυψελίδα με βάση 2 ατόμων, άρα ο συνολικός αριθμός ατόμων είναι 4x2=8 άτομα.

Στη δομή αυτή, το χαρακτηριστικό όπως αναφέραμε είναι ότι σε κάθε διαγώνιο του κύβου υπάρχει ένα άτομο, με συντεταγμένες (1/4,1/4,1/4) μετρούμενες από την πλησιέστερη γωνία, σε επαφή με το άτομο στην γωνία αυτή. Επομένως αν l είναι το μήκος της εσωτερικής διαγωνίου η οποία είναι $\sqrt{3}\alpha$, όπου α η ακμή του κύβου, θα ισχύει:

$$\frac{l}{4} = 2r \quad \Rightarrow \quad \frac{\sqrt{3}\alpha}{4} = 2r \quad \Rightarrow a = \frac{8r}{\sqrt{3}} = 0{,}5404\text{nm} \tag{1.9}$$

$$APF = \frac{8\times\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{32}{3}\pi r^3}{(\frac{8}{\sqrt{3}})\ r^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} = 0,34$$

Δηλαδή, μόνο το 34% του συνολικού χώρου του κύβου καλύπτεται από άτομα, συνεπώς η δομή του πυριτίου είναι πολύ πιο αραιά από τη δομή FCC.

$$\rho_A = \frac{8\ \text{άτομα}}{(0{,}540\text{x}10^{-9}\text{m})^3} = \frac{4\ \text{άτομα}}{1{,}578\times10^{-28}\,m^3} = 5{,}07\text{x}10^{28}\text{άτομα/m}^3$$

$$\rho = 5{,}07\text{x}10^{28}\text{άτομα/m}^3\times\frac{28{,}09\text{g/mol}}{6{,}023\text{x}10^{23}\text{άτομα/mol}} = 2{,}36\times10^3\text{kg/m}^3$$

Συγκεντρωτικά στοιχεία για την πυκνότητα μιας δομής. Για να βρούμε πόσο πυκνή είναι μία δομή πρέπει να γνωρίζουμε το ποσοστό του όγκου της κυψελίδας που καταλαμβάνεται από άτομα, δηλαδή τον παράγοντα APF. Επίσης μπορούμε να το δούμε από τον αριθμό συναρμογής (ή αλλιώς σύνταξης), δηλαδή το πλήθος ατόμων που είναι πρώτοι γείτονες με ένα οποιοδήποτε άτομο. Στον παρακάτω πίνακα δίνονται συγκεντρωτικά ο APF και ο αριθμός συναρμογής για τις κυβικές δομές SC, BCC, FCC, Διαμάντι. Δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον αριθμό ατόμων που ανήκουν στην κυψελίδα, τότε η δομή διαμαντιού θα ήταν η πυκνότερη γιατί περιέχει 8 άτομα ανά κυψελίδα.

Δομή	APF	Αριθμός συναρμογής	Αριθμός ατόμων ανά κυψελίδα
SC	$\frac{\pi}{6}\approx 52\%$	4	1
BCC	$\frac{\pi\sqrt{3}}{8}\approx 68\%$	6	2
FCC	$\frac{\pi\sqrt{2}}{6}\approx 74\%$	12	4
Εξαγωνικό μεγίστης πυκνότητας	$\frac{\pi\sqrt{2}}{6}\approx 74\%$	12	6
Diamond	$\frac{\pi\sqrt{3}}{16}\approx 34\%$	4	8

Ασκήσεις στην ατομική πυκνότητα επιπέδου (ή επιφανειακή ατομική πυκνότητα, εξαρτάται από τον προσανατολισμό του επιπέδου)

Άσκηση 5 (Ατομική πυκνότητα επιπέδων στο κυβικό σύστημα)

Να υπολογιστεί η ατομική πυκνότητα στο επίπεδο με δείκτες Miller (111) για την FCC δομή του αλουμινίου και για την BCC δομή του βολφραμίου. Δίνονται: r_{Al}=0,143nm, r_W=0,137nm.

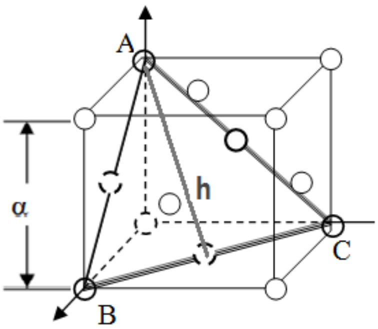
ΛΥΣΗ

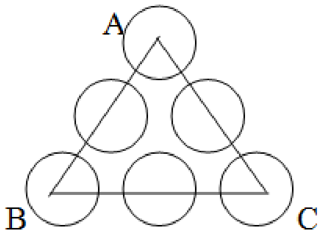
Η ατομική πυκνότητα επιπέδου n_s ορίζεται ως εξής:

$$\text{Ατομική πυκνότητα επιπέδου}=\frac{\text{ποσοστό ατόμων που περιέχονται στο επίπεδο}}{\text{εμβαδόν επιπέδου}} \qquad (1.10)$$

<u>Δομή FCC:</u> Για να υπολογίσουμε την n_s θα προσμετρήσουμε μόνο τα άτομα των οποίων τα κέντρα βρίσκονται πάνω στην επιφάνεια του επιπέδου. Για κάθε άτομο υπολογίζουμε το ποσοστό της ατομικής του διατομής (είναι ένας κύκλος σε 2 διαστάσεις) που περιέχεται στην επιφάνεια του επιπέδου. Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται το επίπεδο (111) για την FCC δομή που αντιστοιχεί στο τονισμένο ισόπλευρο τρίγωνο ABC, με πλευρές διαγώνιες εδρών (Οι κύκλοι αναπαριστούν άτομα που βρίσκονται στα κρυσταλλικά επίπεδα όπως θα φαινόταν μετά από τομή κατά μήκος των κέντρων των σφαιρών). Για λόγους ευκρίνειας απεικονίζεται το επίπεδο (111) στο σχήμα 4β, όπου δεν περιέχονται εξ ολοκλήρου τα 6 άτομα. Το ποσοστό ατόμων είναι:
(3 κύκλοι στις γωνίες A, B, C) x (1/6 κύκλου δηλ του ατόμου)+(3 κύκλοι στις διαγώνιες των πλευρών AB, BC, AC) x (1/2 κύκλου δηλ του ατόμου)= 2 άτομα

Το εμβαδόν του επίπεδου (111) αντιστοιχεί στο εμβαδόν του ισόπλευρου τριγώνου ABC $\frac{1}{2}BC\times h$, όπου BC=$\sqrt{2}$ α, με α=$\frac{4r}{\sqrt{2}}$ $\Rightarrow$ BC=$\frac{\sqrt{2}\times 4\times 0{,}143\text{nm}}{\sqrt{2}}$=0,572nm και το ύψος του τριγώνου $h^2=(\sqrt{2}\alpha)^2-(\frac{\sqrt{2}}{2}\alpha)^2=\frac{3}{2}\alpha^2$ δηλαδή $h=\sqrt{3/2}\,a$ =0,495nm. Επομένως το εμβαδόν του επίπεδου (111) είναι: $\frac{1}{2}BC\times h=0{,}142nm^2$.





(α) (β)

Σχήμα 4: α) Απεικόνιση του επιπέδου (111) στη κυψελίδα FCC.

Με βάση τη σχέση 1.10, η ατομική πυκνότητα του επιπέδου (111) της δομής FCC του Αλουμινίου είναι:

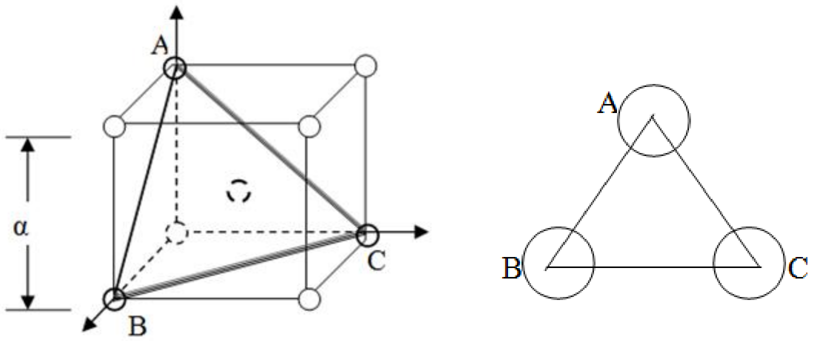
$$n_s = \frac{2\text{άτομα}}{0{,}142\text{nm}^2} = 14{,}1\text{άτομα/nm}^2$$

<u>Δομή BCC</u>: Με όμοιο τρόπο βρίσκουμε ότι το ποσοστό των ατόμων που περιέχονται εντός της επιφάνειας του επιπέδου (111) για τη δομή BCC που απεικονίζεται στο παρακάτω σχήμα είναι:
(3 κύκλοι στις γωνίες A, B, C) x (1/6 κύκλου δηλ του ατόμου)=1/2 ατόμου.

Γνωρίζοντας ότι $\alpha = \frac{4r}{\sqrt{3}}$ προκύπτει ότι το εμβαδόν του επιπέδου (111) για το Βολφράμιο

είναι: $0{,}0867\text{nm}^2$. Επομένως η ατομική πυκνότητα του επιπέδου (111) είναι:

$$n_s = \frac{0{,}5\text{άτομα}}{0{,}0867\text{nm}^2} = 5{,}77\text{άτομα/nm}^2 \quad \text{για τη BCC δομή Βολφραμίου}$$



Σχήμα 5: α) Απεικόνιση του επιπέδου (111) στη κυψελίδα BCC.

Άσκηση 6. Περίθλαση Bragg

Να υπολογίσετε τις γωνίες Bragg για να έχουμε περίθλαση από τα επίπεδα με δείκτες Miller (111), (200) και (220) στο FCC πλέγμα του οποίου η σταθερά πλέγματος είναι 0,04nm. Το μήκος κύματος της δέσμης ακτίνων Χ που χρησιμοποιούμε είναι λ=0,2nm.

ΛΥΣΗ
Για να έχουμε περιθλώμενες δέσμες πρώτης τάξης από τα παραπάνω επίπεδα για μήκος κύματος της δέσμης ακτίνων Χ, λ=0,2nm, πρέπει να ισχύει ο νόμος του Bragg:

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda, \quad (n=1) \qquad \text{Νόμος του Bragg}$$

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} \leq 1, \text{ όπου } d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \quad \Rightarrow \sin\theta = \frac{\lambda}{2}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}\right)^{-1}$$

όπου d_{hkl} είναι η απόσταση μεταξύ των παραλλήλων επιπέδων με δείκτες Miller (hkl). Οπότε έχουμε για:

$$d_{(111)} = \frac{a}{\sqrt{3}} = 0{,}2309\text{nm} \quad , \quad d_{(200)} = \frac{a}{2} = 0{,}20\text{nm} \quad , \quad d_{(220)} = \frac{a}{2\sqrt{2}} = 0{,}1414\text{nm}$$

$$\sin\theta = \frac{0{,}2}{2x0{,}2309} = 0{,}433 \Rightarrow \theta = 25{,}66^0$$

$$\sin\theta = \frac{0{,}2}{2x0{,}2} = 0{,}5 \Rightarrow \theta = 30^0$$

$$\sin\theta = \frac{0{,}2}{2x0{,}1414} = 0{,}707 \Rightarrow \theta = 45^0$$

Ασκήσεις για λύση

1. Το μολυβδαίνιο έχει κρυσταλλική δομή BCC και πυκνότητα μάζας $10{,}22\text{g/cm}^3$. Να υπολογίσετε την ατομική πυκνότητα και την ατομική ακτίνα του. Ατομική μάζα μολυβδαινίου 95,94g/mol.

(Απάντηση:$\alpha=3{,}147.10^{-10}$m, $\rho_A=6{,}415.10^{28}\text{m}^{-3}$, $r=1{,}363.10^{-10}$m).

2. Ο χρυσός έχει κρυσταλλική δομή FCC, πυκνότητα μάζας $19{,}30\text{g/cm}^3$. Η ατομική μάζα του χρυσού είναι 196,97 g/mol. Να υπολογίσετε τη σταθερή πλέγματος α, την ατομική πυκνότητα και την ατομική ακτίνα του χρυσού.

(Απάντηση : $\alpha=4{,}077.10^{-10}$ m, $\rho_A=5{,}901.10^{28}\text{ m}^{-3}$, $r=1{,}442.10^{-10}$m)

3. Ένα δοκίμιο από καθαρό χρώμιο με πορώδες 10% έχει διαστάσεις 10cmx20cmx10cm. Το δοκίμιο έχει δομή fcc. Να βρεθεί πόσες κυψελίδες περιέχει και πόση είναι η μάζα του δοκιμίου. (Δίνονται: ατομική ακτίνα 0,1249nm και ατομική μάζα 51,996g/mol).

4. Να υπολογίσετε την πυκνότητα μάζας του στερεού ψευδαργύρου, Zn, ο οποίος έχει εξαγωνική κυψελίδα hcp με c=0,494nm, α=0,2665nm. Ατομική ακτίνα r=0,1332nm και AB=65,37.

5. Το τιτάνιο, Ti (αλλοτροπικό στοιχείο) για θερμοκρασίες μεγαλύτερες των 880^0C η δομή του αλλάζει από hcp σε bcc. Ποια θα είναι η μεταβολή όγκου όταν ψυχώμενο διέρχεται από τους 880^0C; Δίνονται: δομή hcp με c=0,4683nm, και α=0,2956nm, δομή bcc α=0,332nm .

6. Να υπολογίσετε για τον ημιαγωγού GaAs, ο οποίος έχει την κυβική δομή του διαμαντιού τα εξής: α) τον παράγοντα ατομικής πληρότητας APF και β) την ατομική πυκνότητα και την πυκνότητα μάζας. Δίνονται r_{Ga}=0,136nm, AB_{Ga}=69,723g/mol, r_{As}=0,139nm, AB_{As}=74,922g/mol.

7. Στην τεχνολογία ημιαγωγών, ένα εξάρτημα Si σε ένα VLSI τσιπ εκπροσωπεί μία από τις μικρότερες συσκευές ενώ ένα Laser GaAs εκπροσωπεί μία από τις μεγαλύτερες συσκευές. Θεωρείστε ένα εξάρτημα Si με διαστάσεις 5x2x1$\mu m^{3.}$ και ένα ημιαγωγικό Laser GaAs με διαστάσεις 200x10x5μm^3. Υπολογίστε τον αριθμό ατόμων σε κάθε εξάρτημα.

8. Να υπολογίσετε την πυκνότητα μάζας για το κρυσταλλικό στερεό Ne (Νέο) με δομή fcc (ατομική ακτίνα r = $2,99 \times 10^{-10}$ m**,** ατομική μάζα= 20,18 g/mol).

9.Το νικέλιο (Ni) κρυσταλλώνεται στην κυβική δομή fcc. Μελέτες περίθλασης ακτίνων-Χ δείχνουν ότι η ακμή της μοναδιαίας κυψελίδας είναι 352,4pm. Να υπολογίσετε: α) τον όγκο της μοναδιαίας κυψελίδας και την ακτίνα του ατόμου του Ni. β) την πυκνότητα μάζας (ΑΒ=58,71) .

10. Σκόνη φθοριούχου νατρίου αναλύθηκε με ακτίνες Χ μήκους κύματος 154pm. Παρατηρήθηκαν οι εξής γωνίες Bragg $19^o31'$, $41^o50'$ και $76^o25'$. Να υπολογίσετε την απόσταση μεταξύ των επιπέδων των ιόντων και να προσδιορίσετε το επίπεδο στο οποίο θα έχουμε περίθλαση για πλεγματική σταθερά α=463,42pm.

Αριθμός Avogadro N_A=6,023*1023 άτομα/mol