



Άσκηση 1. Η ενέργεια σχηματισμού ενός κενού στον κρυσταλλικό χαλκό είναι 0,9eV. Να βρείτε τη συγκέντρωση των κενών στο fcc πλέγμα του στους 800°C (η ατομική ακτίνα του χαλκού είναι 0,1276nm).

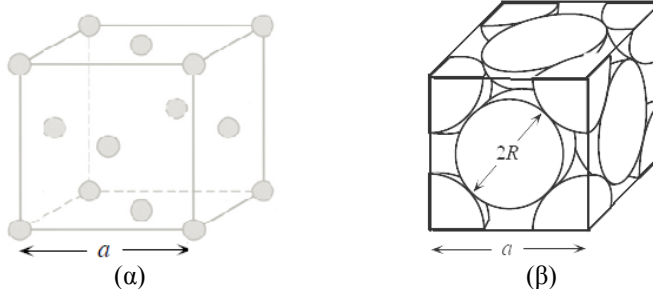
Λύση

Η συγκέντρωση των κενών δηλαδή ο αριθμός κενών στη μονάδα όγκου, n_v δίνεται από τη σχέση:

$$n_v = N \cdot \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right)$$

όπου N είναι η πλεγματοκή πυκνότητα της κυψελίδας, E_v η ενέργεια σχηματισμού του κενού, k η σταθερά του Boltzmann $k=1,38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}=8,614 \times 10^{-5} \text{ eVK}^{-1}$ και T η απόλυτη θερμοκρασία (σε K). Η σταθερά a του πλέγματος fcc συνδέεται με την ατομική ακτίνα r με τη σχέση:

$$(4r)^2 = 2a^2 \Rightarrow a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$



Σχήμα 1. α) Μοναδιαία κυψελίδα (μικρές σφαίρες για ευκρίνεια), β) έχει σχεδιαστεί μόνο το μέρος των ατόμων που ανήκει στην κυψελίδα fcc του κρυσταλλικού χαλκού.

Στα μέταλλα τα πλεγματοκά σημεία συμπίπτουν με τα άτομα, δηλαδή η πλεγματοκή πυκνότητα N ισούται με την ατομική πυκνότητα ρ_A :

$$N = \rho_A = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{0,047^3} = 85,106 \text{ άτομα / nm}^3 = 85,106 \times 10^{27} \text{ πλεγματοκές θέσεις/m}^3$$

$$T = 800^\circ\text{C} + 273 = 1073\text{K}$$

$$n_v = N \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right) = 85,106 \text{ nm}^{-3} \cdot \exp\left(-\frac{0,9\text{eV}}{(8,614 \times 10^{-5} \text{ eV/K}) \times (1073\text{K})}\right) =$$

$$5,02 \times 10^{-3} \text{ κενές θέσεις/nm}^3 = 5,02 \times 10^{24} \text{ κενές θέσεις/m}^3$$

$$\frac{n_v}{N} = \frac{5,02 \times 10^{24}}{85,106 \times 10^{27}} = 5,9 \times 10^{-5}$$

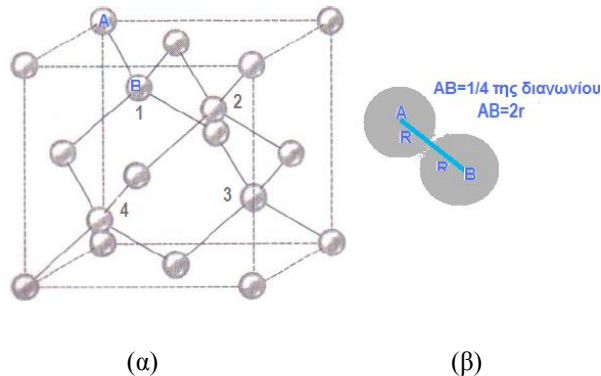
Δηλαδή περίπου 6 πλεγματοκές θέσεις στις 100.000 είναι κενές

Άσκηση 2. Η ενέργεια σχηματισμού ενός κενού, (δηλαδή για την απομάκρυνση ενός ατόμου) στον ημιαγωγό πυριτίου είναι 2,4 eV = $3,845 \times 10^{-19} \text{ J}$. Να βρείτε τη συγκέντρωση των κενών στο πλέγμα του πυριτίου, στους 1200°C (η ατομική ακτίνα του πυριτίου είναι 0,117nm).

Λύση

Η κυψελίδα (κύβος) του πλέγματος του πυριτίου έχει πλεγματοκά σημεία (ή άτομα) στις κορυφές και στα κέντρα των πλευρών του κύβου όπως ένα fcc πλέγμα. Επιπλέον έχει τέσσερα εσωτερικά πλεγματοκά σημεία (ή άτομα) που βρίσκονται στις διαγώνιες του κύβου στις θέσεις με συντεταγμένες 1/4, 1/4, 1/4 (δηλ. τα άτομα με αριθμό 1,2,3,4). Συνεπώς περιέχει:

$$8 \frac{1}{8} + 6 \frac{1}{2} + 4 = 8 \text{ άτομα}$$



Σχήμα 2. α) Κυψελίδα του κρυσταλλικού πυριτίου και β) αναπαράσταση των ατόμων A και B ως σφαίρες που εφάπτονται κατά μήκος της διαγωνίου του κύβου.

Η απόσταση AB μεταξύ των κέντρων των ατόμων A και B, που είναι το 1/4 της διαγωνίου του κύβου, είναι $2r$. Η διαγώνιος του κύβου ισούται με $\sqrt{3} \cdot a$, συνεπώς έχουμε:

$$\frac{1}{4} \sqrt{3} \cdot a = 2r \Rightarrow a = \frac{8r}{\sqrt{3}}$$

$$a = \frac{8,0,117}{\sqrt{3}} = 0,5404 \text{ nm} = 0,5404 \times 10^{-9} \text{ m} \Rightarrow V = a^3 = 1,578 \times 10^{-28} \text{ m}^3$$

$$N_v = \frac{8}{V} = \frac{8}{a^3} = \frac{8}{1,578 \times 10^{-28} \text{ m}^3} = 5,07 \times 10^{28} \text{ άτομα/m}^3$$

$$T = 1200^\circ\text{C} + 273 = 1473 \text{ K}$$

$$E_v = (2,4 \text{ eV}) \cdot (1,602 \times 10^{-19} \text{ J/eV}) = 3,845 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$N = N_v \exp(-E/kT) = 5,07 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \exp \left[-\frac{3,845 \times 10^{-19} \text{ J}}{(1,381 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}) \times (1473 \text{ K})} \right]$$

$$= 3,13 \times 10^{20} \text{ κενά/m}^3$$

$$\frac{n_v}{N} = \frac{3,13 \times 10^{20}}{5,07 \times 10^{28}} = 6,2 \times 10^{-9}$$

Δηλαδή περίπου 6 πλεγματικές θέσεις στις 1.000.000.000 είναι κενές

Άσκηση 3. Ο ορείχαλκος είναι κράμα χαλκού και κασσιτέρου, στο οποίο το 3% (ή λιγότερο) των ατόμων του χαλκού έχουν αντικατασταθεί από άτομα κασσιτέρου (σε θέσεις αντικατάστασης στο πλέγμα του χαλκού αφού ατομική ακτίνα του κασσιτέρου είναι 0,151nm, μεγαλύτερη από του χαλκού 0,1278nm). Η ακτίνα του χαλκού στο κράμα είναι 0,1285nm, ενώ το πλέγμα του παραμένει fcc. Να βρεθεί η πυκνότητα του κράματος και να συγκριθεί με την πυκνότητα του καθαρού χαλκού (καθαρός χαλκός: ακτίνα=0,1278nm, ατομικό βάρος=63,5).

Λύση

Καθαρός χαλκός:



$$a = \frac{4 \times 0,1278}{\sqrt{2}} = 0,361 \text{ nm}$$

$$\rho = \frac{4(63,5)}{(0,361)^3 \times 10^{-24} \times 0,602 \times 10^{24}} = 8,97 \text{ g/cm}^3$$

Κράμα χαλκού: Η μέση ατομική ακτίνα του χαλκού στο κράμα υπολογίζεται από τη σχέση:

$$0,97(0,1278 \text{ nm}) + 0,03(0,151 \text{ nm}) = 0,1285 \text{ nm}$$

$$a = \frac{4(0,1285)}{\sqrt{2}} = 0,3634 \text{ nm}$$

$$\rho = \frac{4(63,5)}{(0,3634)^3 \times 10^{-24} \times 0,602 \times 10^{24}} = 8,79 \text{ g/cm}^3$$

Παρατηρούμε ότι η κυψελίδα αυξάνει σε όγκο και η πυκνότητα μειώνεται κατά 2%.

Άσκηση 4

Ράβδος σιδήρου επινικελώνεται και θερμαίνεται στους 900°C ώστε να υπάρχει συγκέντρωση 30% ατόμων Ni σε απόσταση 0,01cm κάτω από την επιφάνεια και 20% ατόμων Ni σε απόσταση 0,02cm. Ποια είναι η ροή ατόμων Ni στο τετραγωνικό εκατοστό ανά δευτερόλεπτο εξαιτίας της διάχυσης; Ο συντελεστής διάχυσης στους 900°C είναι $D = 2 \times 10^{-13} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. Ο Fe στους 900°C έχει πλέγμα fcc με $a = 0,359 \text{ nm}$.

Λύση

$$\text{Πρώτος νόμος του Fick : } J = -D \frac{\Delta c}{\Delta x}$$

όπου J είναι η ροή (άτομα/ $\text{m}^2 \text{ s}$), D ο συντελεστής διάχυσης (m^2/s), $\frac{\Delta c}{\Delta x}$ η βαθμίδα συγκέντρωσης ($\frac{\text{άτομα}/\text{m}^3}{\text{m}}$), c η συγκέντρωση ατόμων Ni (άτομα/ m^3) και x η απόσταση (m).

Για να υπολογίσουμε τις συγκεντρώσεις c_1 , c_2 των ατόμων Ni στη ράβδο σιδήρου σε απόσταση αντίστοιχα $x = 0,01 \text{ cm}$ και $x = 0,02 \text{ cm}$, θα πρέπει να βρούμε το ποσοστό ατόμων Ni που αναλογεί σε μία μοναδιαία κυψελίδα fcc σιδήρου γνωρίζοντας ότι υπάρχουν 4 άτομα σιδήρου, και διαιρώντας με το όγκο της θα βρούμε τις c_1 , c_2 :

$$c_1 = \frac{(\text{άτομα Ni/κυψελίδα})}{\text{όγκος κυψελίδας σε cm}^3} = \frac{4 \times 0,3}{(3,59 \times 10^{-8})^3} = 2,59 \times 10^{22} \text{ άτομα Ni/cm}^3$$

$$c_2 = \frac{4 \times 0,2}{(3,59 \times 10^{-8})^3} = 1,73 \times 10^{22} \text{ άτομα Ni/cm}^3$$

οπότε η ροή ατόμων Ni είναι :

$$J = -D \frac{\Delta c}{\Delta x} = -2 \times 10^{-13} \times \frac{(1,73 - 2,59) \times 10^{22}}{0,02 - 0,01} = 0,17 \times 10^{12} \text{ άτομα Ni/cm}^2 \text{ s}$$



Άσκηση 5

Στην επιφάνεια δείγματος σιδήρου υπάρχει ένα άτομο άνθρακα ανά 10 μοναδιαίες κυψελίδες. Ένα mm κάτω από την επιφάνεια υπάρχει ένα άτομο άνθρακα ανά 30 μοναδιαίες κυψελίδες. Ποια είναι η ροή ατόμων άνθρακα /cm².s εξαιτίας της διάχυσης; Ο συντελεστής διάχυσης είναι $D=10^{-7}\text{cm}^2\text{s}^{-1}$ και ο Fe έχει πλέγμα f.c.c με $a=3.65 \text{ \AA}$.

Λύση

Θα υπολογίσουμε τις συγκεντρώσεις c_1 , c_2 των ατόμων άνθρακα για $x=0\text{mm}$ (που αντιστοιχεί στην επιφάνεια) και $x=1\text{mm}$ ως εξής: Στις 10 μοναδιαίες κυψελίδες σιδήρου που αντιστοιχούν σε 40 άτομα αφού μία κυψελίδα έχει 4 άτομα, υπάρχει ένα άτομο άνθρακα, σε μία κυψελίδα του σιδήρου έχουμε ποσοστό ατόμων άνθρακα $4/40=1/10$ και διαιρώντας με το όγκο της θα βρούμε την c_1 . Παρόμοια βρίσκουμε τη c_2 :

$$c_1 = \frac{1}{10 \times (3,65 \times 10^{-8})^3} = 21 \times 10^{20} \text{ άτομα άνθρακα/cm}^3$$

$$c_2 = \frac{1}{30 \times (3,65 \times 10^{-8})^3} = 7 \times 10^{20} \text{ άτομα άνθρακα/cm}^3$$

$$J = -D \frac{dc}{dx} = -10^{-7} \cdot \frac{(7-21) \times 10^{20}}{0,1} = 0,14 \times 10^{16} \text{ άτομα άνθρακα/cm}^2\text{s}$$

Άσκησης για λύση

1. Στον κρύσταλλο γερμανίου (ημιαγωγός για $T \gg 0\text{K}$) η συγκέντρωση των κενών στο πλέγμα του μειώνεται κατά 6 τάξεις όταν η θερμοκρασία μειώνεται από τους 600°C στους 300°C . Να υπολογίσετε την ενέργεια σχηματισμού ενός κενού.

2. Η ενέργεια σχηματισμού ενός κενού στον πολυκρυσταλλικό άργυρο Ag είναι 1,1eV. Να υπολογίσετε τον αντίστοιχο αριθμό κενών ανά κυβικό μέτρο στις θερμοκρασίες 600°C και 300°C καθώς και το κλάσμα των πλεγματικών θέσεων που είναι κενές στη θερμοκρασία τήξης 960°C ($AB=107,9\text{gr}$, πυκνότητα $\rho=10.500 \text{ kg/m}^3$).

3. Από μετρήσεις περίθλασης Bragg προέκυψε ότι η σταθερά πλέγματος του αλουμινίου είναι $a=0,4049\text{nm}$. Το αλουμίνιο ψύχεται από τους 650°C στη θερμοκρασία δωματίου. Στην περίπτωση αυτή βρέθηκε ότι η πυκνότητα του αλουμινίου είναι $2,698\text{g/cm}^3$. Να βρεθεί η μεταβολή της πυκνότητας και το ποσοστό των κενών πλεγματικών θέσεων στο πλέγμα του εξαιτίας της απότομης ψύξης (δίνεται ατομικό βάρος αλουμινίου $AB_{\text{Al}}=26,98$).

4. Ο σίδηρος σε υψηλές θερμοκρασίες μπορεί να συμπεριλάβει στο πλέγμα του σε ενδόθετες θέσεις ένα ποσοστό από άλλο στοιχείο. Να βρεθεί η ακτίνα του μεγαλύτερου ατόμου που μπορεί να είναι ενδόθετο στο πλέγμα του ατόμου (ακτίνα σιδήρου $=0,129\text{nm}$).



5.Ο συντελεστής διάχυσης του βορίου (B) στο μονοκρυσταλλικό πυρίτιο βρέθηκε από πειράματα ότι είναι $1,5 \times 10^{-18} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ στους 1000°C και $1,1 \times 10^{-16} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ στους 1200°C . Να υπολογίσετε την ενέργεια ενεργοποίησης E για τη διάχυση του B και τον παράγοντα συχνότητας D_0 . Αν θεωρήσουμε ότι η απόσταση που διαχέονται τα άτομα B σε χρόνο t (σε sec) είναι $\sqrt{2Dt}$, να βρείτε την απόσταση για 1 ώρα στους 1000°C . Στην περίπτωση που τα άτομα B διαχέονται στο πολυκρυσταλλικό πυρίτιο στους 1000°C , έχουμε ότι $E=2,5\text{eV}$ και $D_0=1,6 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. Να βρείτε πόσες φορές μεγαλύτερη είναι η απόσταση όταν αυτά διαχέονται στο πολυκρυσταλλικό πυρίτιο σε σχέση με το μονοκρυσταλλικό πυρίτιο.

$$k=8.614 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$$