

MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

Računske vežbe

1. KRISTALNO ČVRSTO STANJE

TEORIJSKI PREGLED

Kristalno čvrsto stanje je čvrsto stanje u kome su joni, atomi, molekuli ili grupe molekula pravilno i sa određenom simetrijom raspoređuju u trodimenzionalnom prostoru. Periodičnost ili uređenost drugog reda je jedno od najznačajnijih svojstava kristalnog stanja. **Kristalna rešetka** se definiše osnovnim vektorima translacije \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} i uglovima koje međusobno zaklapaju ovi vektori. Na osnovu intenziteta ovih vektora i uglova razlikujemo **sedam kristalnih sistema**. U okviru kristalnih sistema postoji više tipova kristalnih rešetki sa različitom prostornom simetrijom, tako da se izdvaja ukupno **četрнаest Braveovih kristalnih rešetki**.

<i>Kristalni sistem</i>	<i>Intezitet osnovnih vektora translacije</i>	<i>Uglovi između vektora translacije</i>	<i>Broj Braveovih rešetki</i>
Kubni	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	3
Tetragonalni	$a=b\neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	2
Ortorombični	$a\neq b\neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	4
Monoklinični	$a\neq b\neq c$	$\alpha=\gamma=\pi/2\neq\beta$	2
Romboedarski	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma\neq\pi/2$	1
Triklinični	$a\neq b\neq c$	$\alpha\neq\beta\neq\gamma$	1
Heksagonalni	$a=b\neq c$	$\alpha=\beta=\pi/2, \gamma=2\pi/3$	1

Najčešći tip kristalnih sistema je kubni kod koga je: $a=b=c$ i $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ (α, β, γ - uglovi između vektora $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$). U okviru ovog sistema postoje tri tipa Braveovih rešetki:

- prosta kubna rešetka – **PK**,
- površinski centrirana kubna rešetka – **PCK**,
- zapreminski centrirana kubna rešetka – **ZCK**.

Na osnovu položaja izgradjivača u kristalnoj rešetki i njihovih radijusa izračunavaju se parametri kristalne strukture. Konstanta rešetke označava se sa a . Stepenn pripadnosti n_i predstavlja broj izgradjivača po elementarnoj ćeliji. Gustina kristala d se može izračunati na osnovu formule:

$$d = \frac{n_i \cdot M}{V \cdot N_A}$$

gde je: M - atomska odnosno molekulska masa izgradjivača (g/mol ili kg/kmol), V - zapremina elementarne ćelije (za kubni sistem $V = a^3$), N_A - Avogadrov broj ($6.02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ tj. $6.02 \cdot 10^{26} \text{ kmol}^{-1}$).

Broj elementarnih ćelija u jedinici zapremine kristala računa se na osnovu formule:

$$n = \frac{1}{V}.$$

MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU**Računske vežbe**

Koncentracija atoma je broj atoma u jedinici zapremine i računa se kao:

$$n_v = \frac{n_i}{V}.$$

Molarna zapremina predstavlja odnos molekulske mase i gustine:

$$V_{mol} = \frac{M}{d} = \frac{M}{\frac{n_i \cdot M}{V \cdot N_A}} = \frac{V \cdot N_A}{n_i} \left[\frac{m^3}{kmol} \right]$$

Koeficijent popunjenosti je:

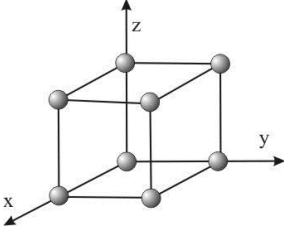
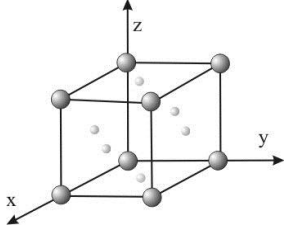
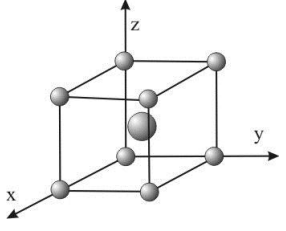
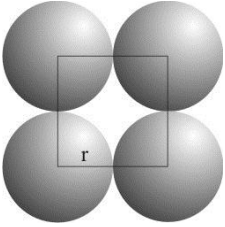
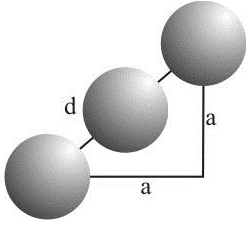
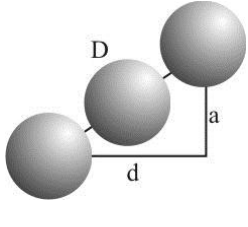
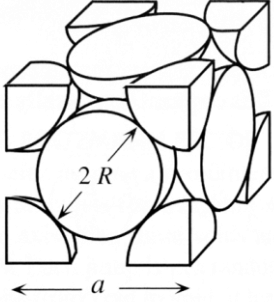
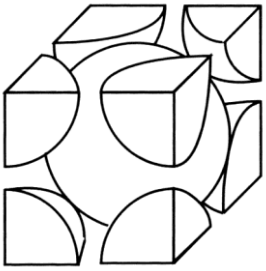
$$q = \frac{n_i \cdot V_i}{V}$$

gde je V_i zapremina jednog izgradjivača, n_i stepen pripadnosti, V zapremina svih atoma u elementarnoj ćeliji.

Karakteristika kristalne rešetke je koordinacioni broj Z_k koji predstavlja broj najbližih suseda na podjednakom rastojanju od referentnog izgradjivača u kristalnoj rešetki. Za PK rešetku je $Z_k=6$, za PCK je $Z_k=12$, dok je za ZDC vrednost $Z_k=8$.

MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

Računske vežbe

PK	PCK	ZCK
		
		
$a = 2r$ $V = a^3 = 8r^3$ $V_i = \frac{4}{3}r^3\pi$	$4r = a \cdot \sqrt{2}$ $a = 2r\sqrt{2}$ $V = a^3 = 16r^3\sqrt{2}$	$4r = a\sqrt{3}$ $a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$ $V = a^3 = \frac{64r^3\sqrt{3}}{9}$
$n_i = 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$	$n_i = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ 	$n_i = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$ 
$q = \frac{n_i \cdot V_i}{V} = \frac{\pi}{6}$	$q = \frac{n_i \cdot V_i}{V} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6}$	$q = \frac{n_i \cdot V_i}{V} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8}$

MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU**Računske vežbe**

ZADATAK 1. Na 20°C gvožđe (Fe) kristališe u ZCK sistemu. Radijus jona iznosi $r=0.1238$ nm. Izračunati:

- broj jona po elementarnoj ćeliji
- konstantu rešetke
- zapreminu elementarne ćelije
- gustinu gvožđa.

Atomska masa gvožđa je $A_{\text{Fe}} = 55.9$ g/mol.

Rešenje:

$$\text{a) } n_i = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$$

- b) U ZCK sistemu joni se dodiruju po prostornoj dijagonali:

$$4r = D$$

$$4r = a\sqrt{3}$$

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{4 \cdot 0.1238 \cdot 10^{-9} \text{ m}}{\sqrt{3}}$$

$$a = 2.86 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$\text{c) } V = a^3 \Rightarrow V = (2.86 \cdot 10^{-10})^3 = 23.4 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3$$

$$\text{d) } d = \frac{n_i M}{V N_A} \Rightarrow d = \frac{2 \cdot 55.9 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}}{23.4 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3 \cdot 6.02 \cdot 10^{26} (\text{kmol})^{-1}} = 7.95 \cdot 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU**Računske vežbe**

ZADATAK 2. Kristal Al čija je atomska masa $M=26.98$, a gustina $d=2.7 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ karakteriše PCK tip rešetke.

- Izračunati konstantu kristalne rešetke.
- Odrediti radijus jona Al.
- Odrediti koeficijent popunjenosti.

Rešenje:

$$a) \quad d = \frac{n_i M}{a^3 N_A} \Rightarrow a = \sqrt[3]{\frac{n_i M}{d N_A}}, n_i = 4(\text{PCK})$$

$$a = 4.049 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

b)

$$4r = a\sqrt{2} \Rightarrow r = \frac{a\sqrt{2}}{4} = 1.42 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$c) \quad q = \frac{n_i \cdot V_i}{V}$$

$$V_i = \frac{4}{3} r^3 \pi = \frac{4}{3} (1.42 \cdot 10^{-10})^3 \cdot 3.14 = 1.199 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

$$V = a^3 = (4.05 \cdot 10^{-10})^3 = 6.64 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

$$q = \frac{n_i \cdot V_i}{V} = \frac{4 \cdot 1.199 \cdot 10^{-29}}{6.64 \cdot 10^{-29}} = 0.722$$