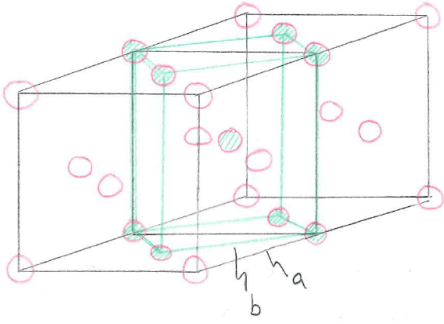


S4 Rita två fcc-celler in till varandra



De gröna punkterna utgör en
rymdcentrerad tetragonal cell

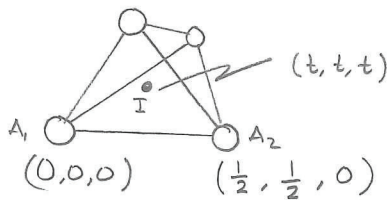
Sambandet mellan b och a blir:



$$b^2 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 \Rightarrow b^2 = \frac{a^2}{2} \Rightarrow a = \sqrt{2} b$$

► Tetraeder omgivning

För att få största möjliga utrymme behöver interstitialen ligga i mitten av tetraedern. Tetraederns mittpunkt ligger på rymddiagonalen, med position (t, t, t) .



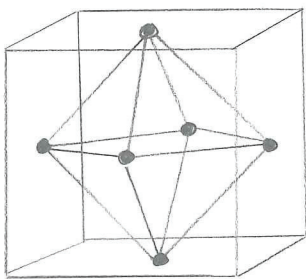
Avstånd A_1-I är $|(t, t, t)|$

Avstånd A_2-I är $|(t-\frac{1}{2}, t-\frac{1}{2}, t)|$

$$|(t, t, t)| = |(t-\frac{1}{2}, t-\frac{1}{2}, t)| \quad (\text{Samma avstånd till alla atomer})$$

$$\Rightarrow \sqrt{t^2+t^2+t^2} = \sqrt{(t-\frac{1}{2})^2+(t-\frac{1}{2})^2+t^2} \Rightarrow 3t^2 = 3t^2 - 2t + \frac{2}{4} \Rightarrow t = \frac{1}{4}$$

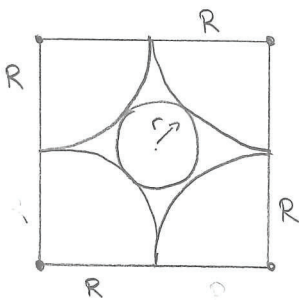
► Oktaedrisk omgivning



Den interstitiella platsen ligger i centrum av oktaedern (och centrum av cellen).

⇒ Oktaederns mittpunkt ligger mitt i enhetskuben.

Beräkning av interstitialens radie:

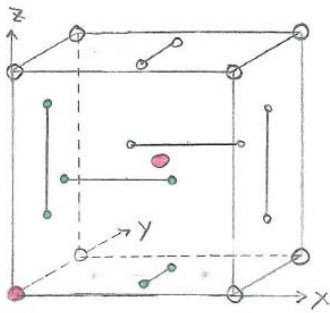


$$R+r+R = \sqrt{(2R)^2+(2R)^2} = 2\sqrt{2} R$$

$$\Rightarrow 2(R+r) = 2\sqrt{2} R$$

$$\Rightarrow \underline{r = (\sqrt{2}-1) R}$$

S6



För att inte definiera samma atom två gånger
väljs V enbart på en av två motstående sidor (\odot)
Si väljs i origo och i mitten (\bullet)

► Gitter: Kubiskt gitter med kantlängd a

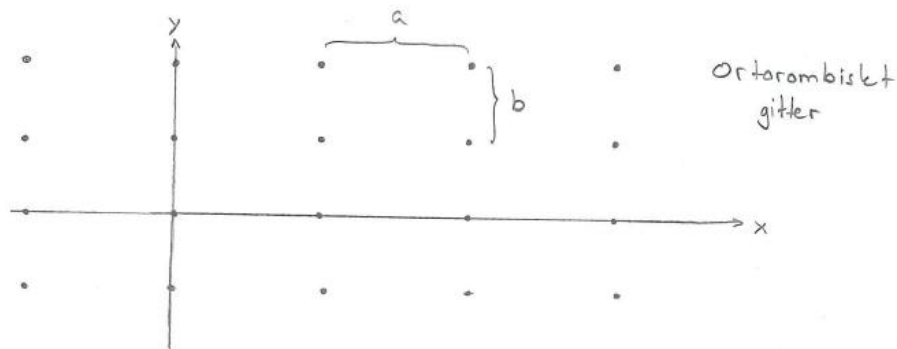
► Bas: Si: $(0,0,0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

V: $(\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{2})$, $(\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{2})$

$(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0)$

$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4})$

S 7



Ett plan med Millerindex (hk) skär koordinataxlarna i $x = \frac{a}{h}$, $y = \frac{b}{k}$

Ytan av den triangel som bildas av punkterna: $\begin{cases} (0,0) \\ (\frac{a}{h}, 0) \\ (0, \frac{b}{k}) \end{cases}$ blir

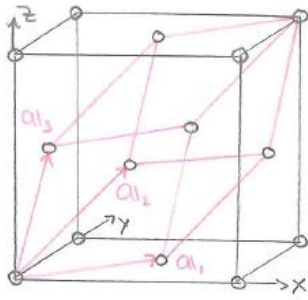
$$\frac{1}{2} \cdot \frac{a}{h} \cdot \frac{b}{k}$$

Detta kan skrivas om som $\frac{1}{2} \cdot d_{hk} \cdot \sqrt{\left(\frac{a}{h}\right)^2 + \left(\frac{b}{k}\right)^2} = \frac{1}{2} \frac{a}{h} \cdot \frac{b}{k}$

$$\Rightarrow d_{hk} = \frac{\frac{ab}{hk}}{\sqrt{\left(\frac{a}{h}\right)^2 + \left(\frac{b}{k}\right)^2}} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{h}{a}\right)^2}}$$

För kvadratisk gitter är $a=b \Rightarrow d_{hk} = \frac{a}{\sqrt{k^2 + h^2}}$

S 8



I figuren visas den konventionella enhetscellen med den primitiva cellen markerad med röd färg.

Vi är bara intresserade av ett volymförhållande sätts enhetscellens bredd till 1.

De primitiva vektorerna är:

$$a_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$$

$$a_2 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$$

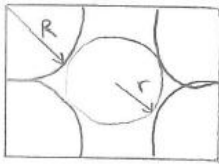
$$a_3 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

Den primitiva cellens volym blir:

$$V = |a_1 \cdot (a_2 \times a_3)| = \left| \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 1/2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} \right| = \left| \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1/4 \\ -1/4 \\ +1/4 \end{bmatrix} \right| = \left| -\frac{1}{8} - \frac{1}{8} \right| = \frac{1}{4}$$

S12 Jonerna i NaCl omges av 6 st joner av motsatt laddning, oktaederform
 Jonerna i CsCl omges av 8 joner av motsatt laddning, kubisk form

CsCl-struktur

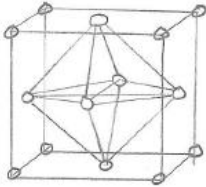


$$R + r + r + R = \sqrt{3} a = \sqrt{3} \cdot 2R$$

$$\Rightarrow 2R + 2r = \sqrt{3} \cdot 2R \Rightarrow r = R(\sqrt{3} - 1) \Rightarrow \boxed{\frac{r}{R} = \sqrt{3} - 1 \approx 0,732}$$

Om $\frac{r}{R} > 0,732$ kommer atomer av lika laddning ej tangera varandra.

NaCl-struktur



$$\text{Ytdiagonal: } R + 2R + R = \sqrt{2} a$$

$$\text{Vertikalt genom centrum: } R + r + r + R = a$$

$$\Rightarrow 4R = 2\sqrt{2}R + 2\sqrt{2}r \Rightarrow \sqrt{2}r = R(2 - \sqrt{2}) \Rightarrow \boxed{\frac{r}{R} = \sqrt{2} - 1 \approx 0,414}$$

För CsCl är $\frac{r}{R} = \frac{1,8}{1,8} = 1 > 0,732 \Rightarrow$ CsCl-strukturen OK

För NaCl är $\frac{r}{R} = \frac{0,95}{1,8} = 0,527 > 0,414 \Rightarrow$ NaCl-strukturen OK

För CsCl är båda fallen OK, men CsCl-strukturen har högre koordinationsstal (= #n.g.) vilket är fördelaktigt.