

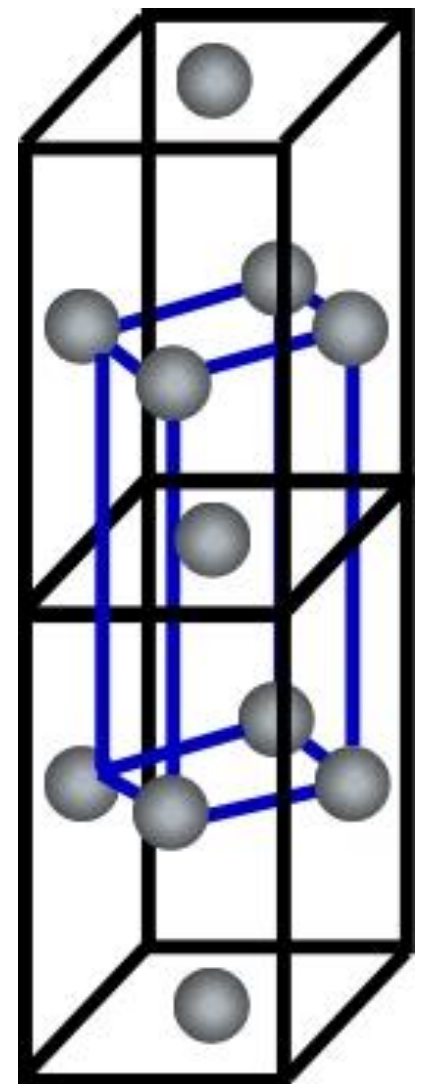
מבוא לתומרים למורים

תרגיל 3 פיתרון

1. הסבר מדוע קיימים שלושה סריגים קוביים: SC - קובי פשוט, FCC - קובי ממורכז פאה ו BCC - קובי ממורכז גוף, וקיימים רק שני סריגים טטראגונליים: ST - טטראגונלי פשוט ו BCT - טטראגונלי ממורכז גוף, ולא קיים FCT - טטראגונלי ממורכז פאה.

הדרכה: הראה ש BCT ו FCT (טטראגונלי ממורכז פאה) הם אותו סריג.

ניתן לראות בציור המצורף כי אם נחבר את אמצעי הפאות נקבל תא יחידה חדש של מבנה BCT. כיוון שגם בתא יחידה זה אין הגבלה על יחס בין צלעות התיבה המשמעות היא ש FCT ו BCT הם אותו מבנה. גם במבנה FCC ניתן להגדיר תא יחידה BCT אבל במקרה זה יחס הצלעות חייב להיות ספציפי: $c/a = \sqrt{2}$. בעיקרון ניתן לקרוא ל FCC, BCT עם יחס $c/a = \sqrt{2}$ אבל אז אין דגש לסימטריה הקובית של מבנה זה.



2. טונגסטן (W) הינה מתכת בעלת מבנה BCC. חשבו את הצפיפות התיאורטית של טונגסטן אם נתון:

$$r_W = 0.137 \text{ nm}, M_w W = 183.84 \text{ g/mole}$$

הצפיפות התיאורטית שווה: $\rho = \frac{n \cdot M_w}{V_c \cdot N_a}$ כאשר n הוא מספר האטומים בתא יחידה, V_c נפח תא יחידה ו N_a מספר

אבוגדרו. בקובייה $V_c = a^3$ וב BCC $a = 4r/\sqrt{3}$:

$$a=0.137 \times 10^{-7} \text{ cm} \times 4 / \sqrt[3]{3} = 3.164 \times 10^{-8} \text{ cm}; V_c = (3.164 \times 10^{-8})^3 = 3.167 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

BCC מספר האטומים בתא יחידה הוא 2 ולכן:

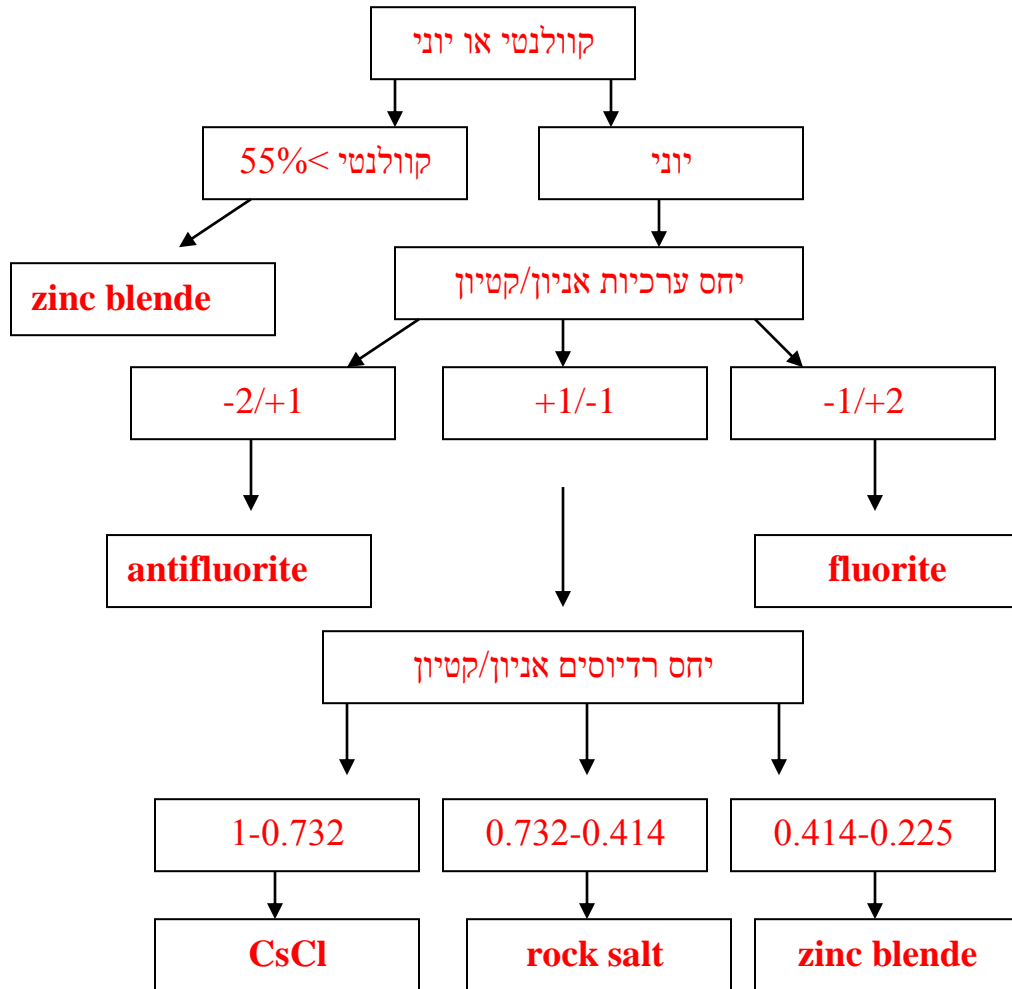
$$\rho = 2 \times 183.84 \text{ g/mole} / (3.167 \times 10^{-23} \text{ cm}^3 \times 6.022 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1}) = 19.28 \text{ g/cm}^3$$

3.

א. קבעו מהו המבנה הגבישי של NiO מבין המבנים הבאים: rock salt CsCl ; zinc blende; antifluorite; fluorite

נתון: $r_{\text{Ni}}=0.069\text{nm}$; $r_{\text{O}}=0.140\text{nm}$; $M_{\text{wNi}}=58.693\text{g/mole}$; $M_{\text{wO}}=16\text{g/mole}$;
electronegativity: O=3.5, Ni=1.8

כדי לקבוע את המבנה הגבישי נשתמש בתרשים הזרימה הבא:



במקרה של NiO האחוז הקוולנטי הוא:

$$\% \text{ covalent} = \exp[-(3.5-1.8)^2 \times 0.25] = 0.4855$$

החומר ברובו יוני

יחס הערכיות הוא +2/-2 או +1/-1

יחס הרדיוסים:

$$r_{\text{Ni}}/r_{\text{O}} = 0.069\text{nm}/0.140\text{nm} = 0.493$$

המבנה הוא rock salt (NaCl)

ב. בהנחה שבכיוון הצפוף ביותר במבנה שקבעתם האניונים נוגעים בקטיונים, קבעו את:

פרמטר הסריג

הצפיפות התיאורטית

מקדם האריזה PF

במבנה rock salt הכיוון הצפוף ביותר הוא לאורך הצלע לכן פרמטר הסריג שווה:

$$a = 2x_{Ni} + 2x_{O} = 2 \times 0.140 \text{ nm} + 2 \times 0.069 = 0.418 \text{ nm}$$

$$\rho = \frac{\sum_i n_i M_{w_i}}{a^3 \cdot N_a} \quad \text{הצפיפות התיאורטית שווה:}$$

$$\rho = (4 \times 58.693 \text{ g/mole} + 4 \times 16 \text{ g/mole}) / [(4.18 \times 10^{-8})^3 \text{ cm}^3 \times 6.022 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1}] = 6.79 \text{ g/cm}^3$$

$$PF = \frac{\sum_i n_i \frac{4}{3} \pi r_i^3}{a^3} \quad \text{מקדם האריזה שווה:}$$

$$PF = \{4 \times \frac{4}{3} \pi [(0.69 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 + (1.4 \times 10^{-8} \text{ cm})^3] / [(4.18 \times 10^{-8})^3 \text{ cm}^3] = 0.705$$