

ELEC-C3210

Materiaalien ominaisuudet

Harjoitus 1

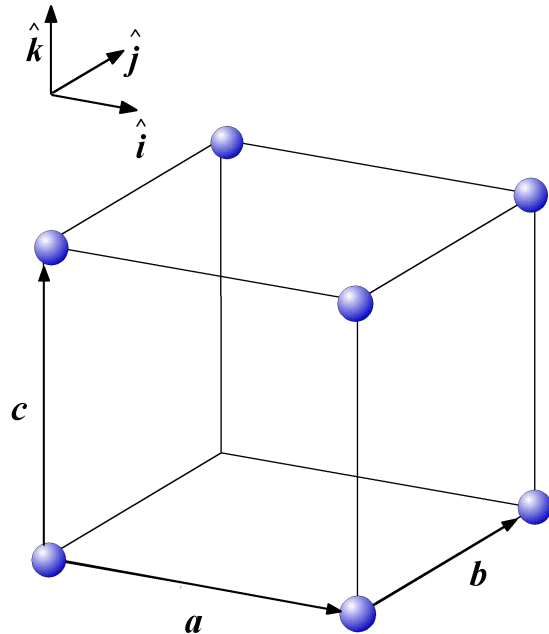
Markku Sopanen

Yleisvihje: näissä pakkaussuhdetehtävissä oleellista on löytää oikea geometria, eli missä pallot koskettavat toisiaan ja käyttää sitä tilavuuksien laskennassa.

Sitten miettikää, kuinka suuri osa palloista on konventionaalisen kopin sisällä.

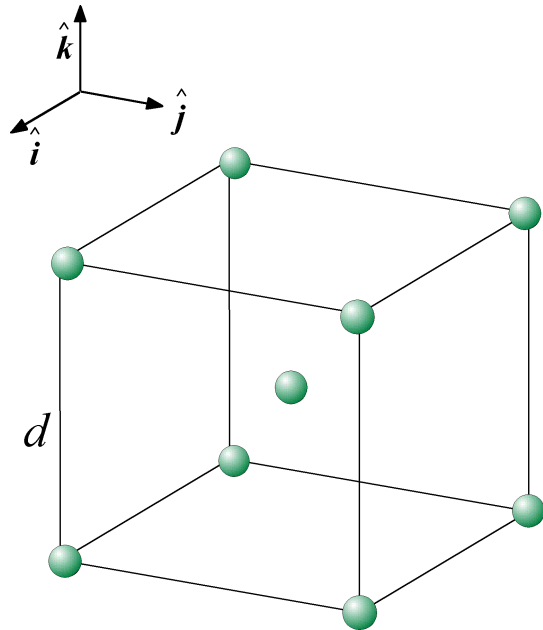
Konventionaalisen kopin tilavuus on aina d^3 .

SC



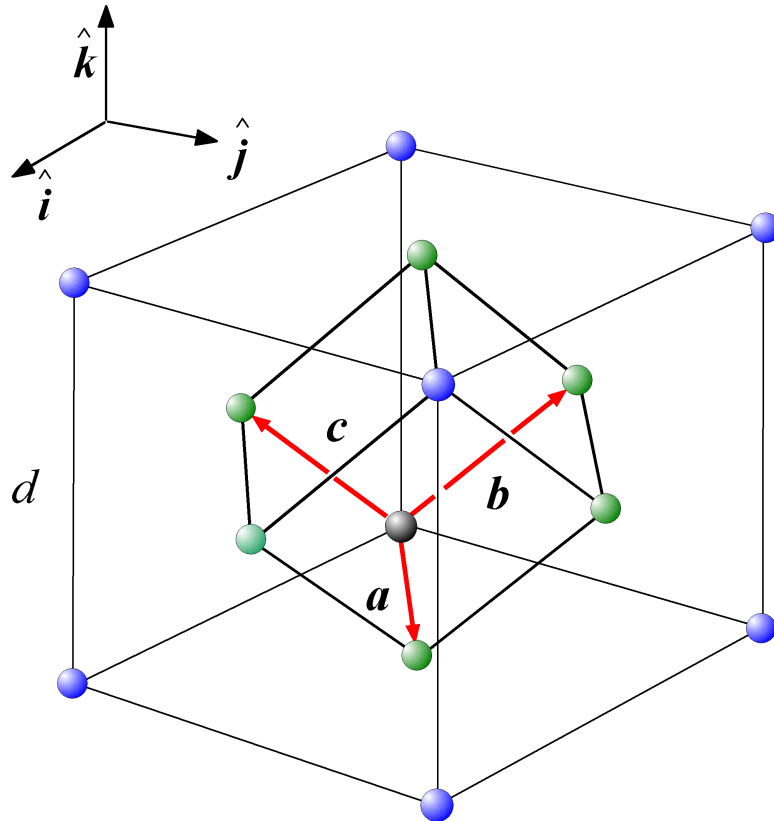
Vihje: Pallot koskettavat toisiaan särmien keskipisteissä.

BCC



Vihje: pallot koskettavat toisiaan koko kuution lävistäjällä.

FCC



Vihje: pallot koskettavat toisiaan tahkon lävistäjällä.

BCC:

Alkeisvektorit:

$$\mathbf{a} = \frac{d}{2}(\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} - \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{b} = \frac{d}{2}(-\hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$$

$$\mathbf{c} = \frac{d}{2}(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{j}} + \hat{\mathbf{k}})$$

Tilavuus:

$$V = |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}|$$

Vihje 1: laske ensin vektoritulo $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$ 3 x 3-determinantin avulla. Ensimmäiselle riville tulee yksikkövektorit, toiselle \mathbf{b} :n komponentit ja kolmannelle \mathbf{c} :n komponentit.

Vihje 2: pistetulossa kerro \mathbf{a} :n ja $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$:n x-komponentit, tee samoin y- ja z-komponenteille ja summaa nämä kolme lukua keskenään.

FCC:

$$\mathbf{a} = \frac{1}{2}d(\mathbf{i} + \mathbf{j})$$

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2}d(\mathbf{j} + \mathbf{k})$$

$$\mathbf{c} = \frac{1}{2}d(\mathbf{k} + \mathbf{i})$$

Tilavuus:

$$V = |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}|$$

Vihje 1: laske ensin vektoritulo $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$ 3 x 3-determinantin avulla. Ensimmäiselle riville tulee yksikkövektorit, toiselle \mathbf{b} :n komponentit ja kolmannelle \mathbf{c} :n komponentit.

Vihje 2: pistetulossa kerro \mathbf{a} :n ja $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$:n x-komponentit, tee samoin y- ja z-komponenteille ja summaa nämä kolme lukua keskenään.

Vihje: käytännössä tässä kysytään kuinka monta atomia konventionaalisessa kopissa on kussakin tapuksessa, tämä riittää vastaukseksi.

a)

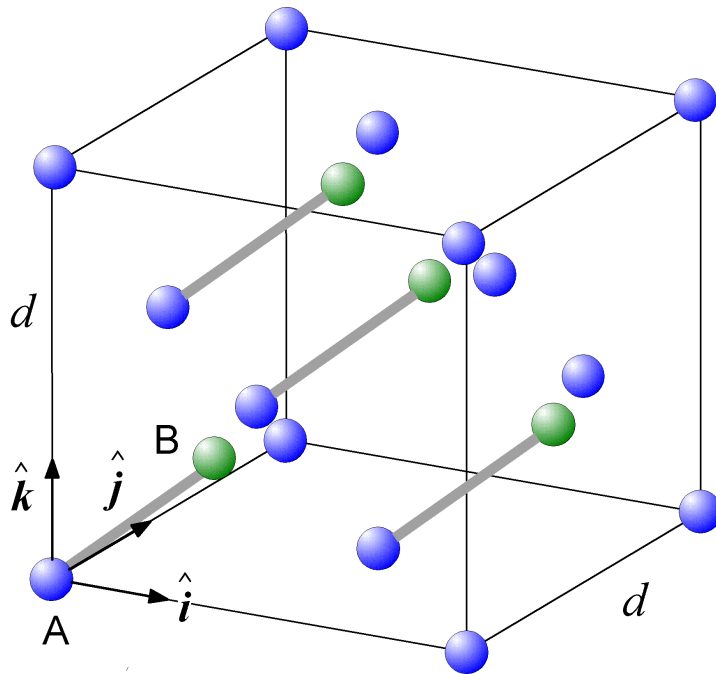
$$n = \rho / M$$

b) FCC-kopin nurkkapisteessä sijaitsevan atomin lähin naapuri on pintakeskuksessa sijaitseva atomi.

c) Nurkkapisteessä koskettavat toisiaan 8 yksikkökoppia. Jokaisessa niistä on kolme lähintä sivutahon keskipistettä, mutta jokainen niistä on yhteinen kahden kopin kanssa.

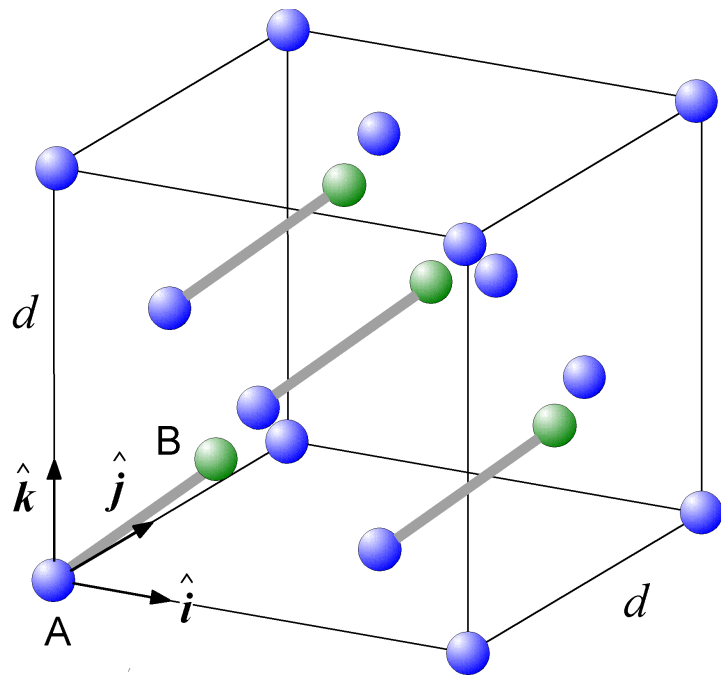
d) Kuinka monta atomia konventionaalisessa kopissa?

e) Konventionaalisen yksikkökopin tahkolla (100) on neljä atomia nurkissa ja yksi keskellä. Keskiatomi kuuluu kokonaan tähän pinta-alaan, nurkka-atomeista vain neljäsosa tähän tahkoon.



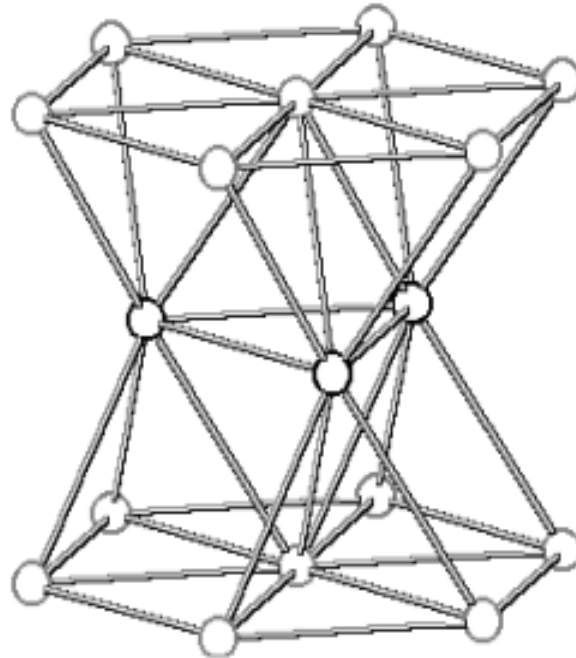
Vihje: Pallot ovat kosketuksissa kuution lävistäjällä.

Lähinaapurietäisyys, joka on toisaalta avaruustälvistäjän neljäsosa, on kaksi kertaa pallon säde.

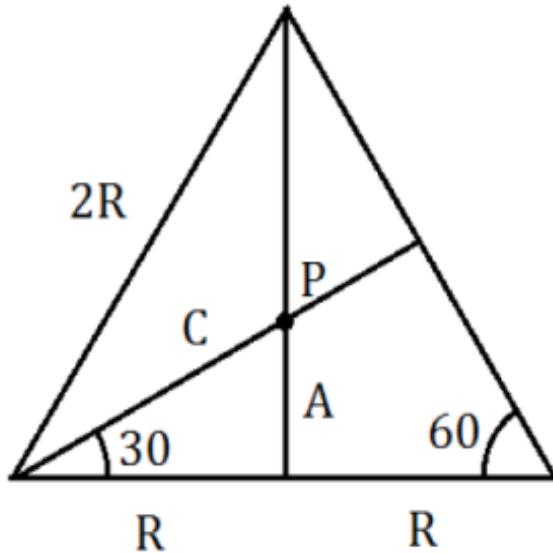


Vihje: Kuution kulmassa olevalla atomilla on neljä lähinaapuria, jotka sijaitsevat eri naapurikoppien keskihalkaisijoilla.

Laske kahden näihin osoittavien vektorien välinen kulma.



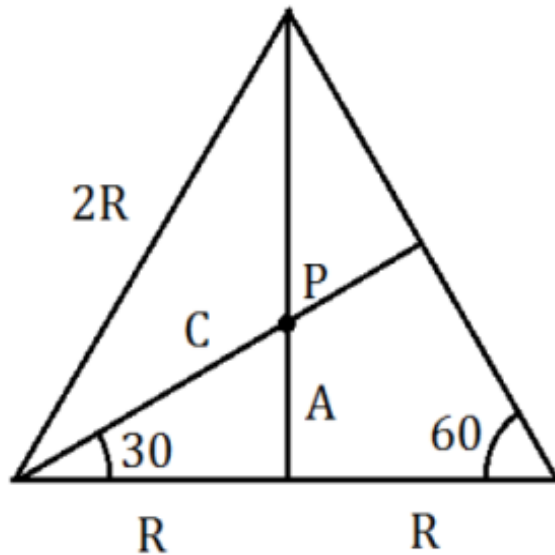
Tarkastellaan yhtä pohjakerroksen tetraedriä.



Vihje 1: ratkaise tästä geometriasta ensin C ja siitä sitten A R :n ja kulmien avulla.

Vihje 2: laske sen jälkeen tetraedrin korkeus h .

Tarkastellaan yhtä pohjakerroksen tetraedriä.



Vihje 3: Ratkaistaan "tiimalasin" pohjan rajoittama tilavuus eli pohjan pinta-ala kertaa "tiimalasin" korkeus. Pohja koostuu kuudesta tasasivuisesta kolmiosta.

Vihje 4: Lasketaan rakenteen sisälle jäävien atomien lukumäärä ja siitä täyttösuhde.