Diamond Cubic

a0 = 543 nm

ρ = 2.3290 g.cm-3

A = 28.0855 g.mol-1

ابتدا حجم هر سلول واحد را محاسبه می کنیم:

vcell = a03 = (543\*10-12 m)3 = 1.60103007\*10-28 m3

بر اساس رابطه چگالی جرم را بدست می آوریم:

mcell = ρ.vcell🡪 mcell = (2.3290\*106 g.m-3)\*(1.60103007\*10-28 m3) = 3.72879903303\*10-22g

از ارتباط جرم و ساختار بلوری می توانیم تعداد اتمها در هر سلول را حساب کنیم:

mcell = apc\*A\*(NA)-1 🡪 apc = m\*NA\*A-1

و در انتها تعداد اتمها در هر سلول بدست می آید:

apc = (3.72879903303\*10-22g)\*(6.022\*1023)\*( 28.0855 g.mol-1)-1 ≈ 8

Si

BCC

ρ = 5.96 g.cm-3

A = 50.9415 g.mol-1

apc = 4

جرم هر سلول واحد را حساب می کنیم:

mcell = apc\*A\*(NA)-1 🡪 mcell = (4)\*(50.9415g.mol-1)\*(6.022\*1023)-1 = 16.9184\*10-23 g

با دانستن چگالی ماده و جرم سلول محاسبه حجم سلول آن آسان است:

vcell = mcell.ρ-1🡪 vcell= (16.9184\*10-23 g)\*(5.96\*106 g.m-3)-1 = 2.83865\*10-29 m3= 28.3865\*10-30 m3

از حجم سلول واحد میتوانیم پارامتر شبکه را بدست آوریم:

vcell = a03 🡪 a0 = vcell = = 3.0504\*10-10 m

با اطلاع از ساختار بلوری محاسبه شعاع اتمی از پارامتر شبکه آخرین گام است:

BCC 🡪 r = a0 = \*3.0504\*10-10 m = 1.3208\*10-10 m ≈ 132 pm

V

1

بلورشناسی**|** تمرین تحویلی رضا خاوری خراسانی (9212451247) 27/11/1392

**تعداد اتم ها در هرسلول واحد (apc)؟**

**شعاع اتمی (r)؟**