

Megoldás a Bolyai Kollégium Levelezős Versenye II. forduló/VII. feladatához

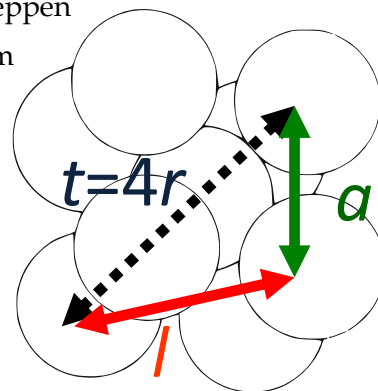
- a.) A tércentrált (*bcc*) esetben a betöltött térfogat a következőképpen adható meg annak tudatában, hogy a cellához $1 + 8 \cdot \frac{1}{8}$ atom tartozik:

$$V_{\text{betöltött}} = \frac{4}{3} \cdot r^3 \cdot \pi \cdot 2$$

$$V_{\text{cella}} = \left(\frac{4 \cdot r}{\sqrt{3}} \right)^3$$

A betöltési arány tehát

$$\frac{V_{\text{betöltött}}}{V_{\text{cella}}} = \frac{\frac{8}{3} \cdot r^3 \cdot \pi}{\frac{64}{3\sqrt{3}} \cdot r^3} = 0,68 \rightarrow \mathbf{68\%}$$



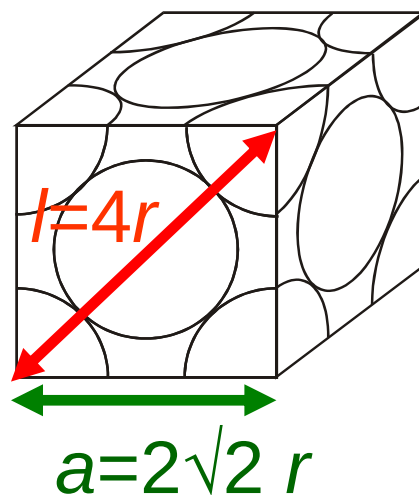
- b.) A lapcentrált (*fcc*) esetben a betöltött térfogat a következőképpen adható meg annak tudatában, hogy a cellához összesen $6 \cdot \frac{1}{2} + 8 \cdot \frac{1}{8}$ atom tartozik:

$$V_{\text{betöltött}} = \frac{4}{3} \cdot r^3 \cdot \pi \cdot 4$$

$$V_{\text{cella}} = \left(\frac{4 \cdot r}{\sqrt{2}} \right)^3$$

A betöltési arány tehát

$$\frac{V_{\text{betöltött}}}{V_{\text{cella}}} = \frac{\frac{16}{3} \cdot r^3 \cdot \pi}{\frac{64}{2\sqrt{2}} \cdot r^3} = 0,74 \rightarrow \mathbf{74\%}$$



- c.) A CsCl 8-as koordinációban kristályosodik. Ennek következménye, hogy az azonos méretű ionok az elemi cella testátlóján kerülnek egymáshoz a legközelebb. Felhasználva, hogy mindkét ion sugara 170 pm, elmondhatjuk, hogy az elemi cella testátlójának hossza 680 pm lesz.

$$\text{testátló} = 680 \text{ pm} = 6,8 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

A testátló hosszából köbös elrendezés esetén igen könnyen kiszámíthatjuk az elemi cella élhosszúságát.

$$a = \frac{\text{testátló}}{\sqrt{3}} = 392,6 \text{ pm} = 3,926 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Ebből a cella térfogata is igen könnyen meghatározható:

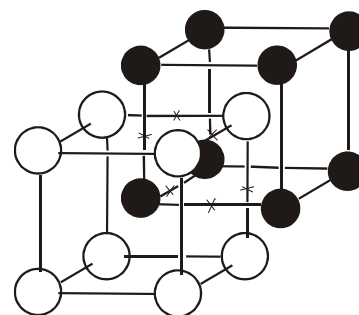
$$V = a^3 = 6,0512 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

Egy cellában az ábrán látható elrendezés szerint

$8 \cdot \frac{1}{8}$ db kation és 1 db anion található

A Cs atomtömege: $A_r(\text{Cs}) = 132,9$

A Cl relatív atomtömege: $A_r(\text{Cl}) = 35,5$



A CsCl moláris tömege ez alapján: $M_{\text{CsCl}} = 168,4 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$

Egy elemi cellában 1 darab CsCl található, melynek tömegét a moláris tömeg Avogadro-számmal való leosztásával kaphatjuk.

$$m_{\text{cella}} = \frac{168,4 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{6,022 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{mol}}} = 2,7964 \cdot 10^{-22} \text{ g}$$

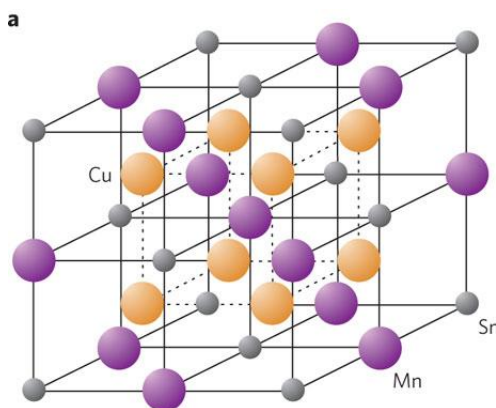
A CsCl kristályok sűrűsége a fenti adatok alapján a következőképpen számítható:

$$\rho_{\text{CsCl}} = \frac{m_{\text{CsCl}}}{V} = \frac{2,7964 \cdot 10^{-22} \text{ g}}{6,0512 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3} = 4621232 \frac{\text{g}}{\text{m}^3} = 4,62 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

A kapott érték meglepően jól reprezentálja a valóságot. A CsCl-kristályok sűrűsége (irodalmi érték alapján):

$$\rho_{\text{CsCl}} = 3,99 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

- d.) Az ábrán látható cellák összetétele megállapítható, ha figyelembe vesszük, hogy a rajzolt atomok közül melyek helyezkednek el a cellák lapjain, a cellák közepén, illetve a cellák csúcsaiban.



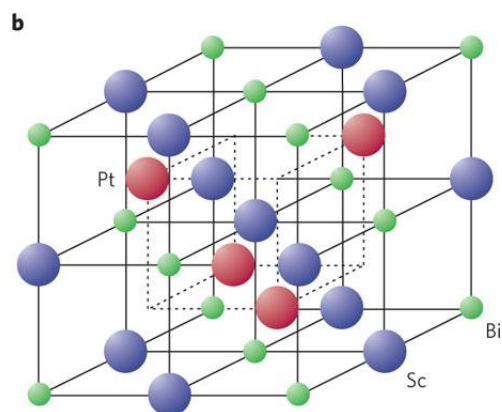
Az a. esetben a cellához tartozó atomok számát a következőképpen adhatjuk meg:

$$\text{Cu: } 8 \cdot 1 = 8 \text{ db}$$

$$\text{Mn: } 1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4 \text{ db}$$

$$\text{Sn: } 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4 \text{ db}$$

Az ötvözet tapasztalati képlete:



A b. esetben a cellához tartozó atomok számát a következőképpen adhatjuk meg:

$$\text{Sc: } 1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4 \text{ db}$$

$$\text{Bi: } 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4 \text{ db}$$

$$\text{Pt: } 4 \cdot 1 = 4 \text{ db}$$

Az ötvözet tapasztalati képlete:



- e.) A fenti ötvözeteket Heusler-ötvözeteknek nevezik. Az alábbi felsorolás a teljesség igénye nélkül tartalmaz néhány példát:

Cu_2MnAl , Cu_2MnIn , Cu_2MnSn , Ni_2MnAl , Ni_2MnIn , Co_2MnGa , Co_2MnGe , Pd_2MnIn , Pd_2MnSn