

O tym jak można układać kule czyli o strukturze najgęstszej upakowania

Dr Andrzej HENNEL

Wyobraźmy sobie, że polecono nam napelnąć pudło jednakowymi kulkami w taki sposób, aby zmieściło się ich jak najwięcej. Będziemy oczywiście starannie układali kolejne warstwy. Po położeniu pierwszej warstwy nie ma żadnych wątpliwości jak układać drugą, natomiast uważny obserwator stwierdzi, że przy układaniu trzeciej warstwy musi dokonać wyboru. Można kłaść kule trzeciej warstwy dokładnie nad kulami pierwszej, a następnie czwartą warstwę nad drugą itd. Takie ułożenie kul nazwiemy *ABAB...* Istnieje jednak druga możliwość – można ułożyć trzecią warstwę w ten sposób, że dopiero kule czwartej warstwy leżą dokładnie nad kulami pierwszej warstwy. Dalej trzeba kłaść piątą warstwę nad drugą, szóstą nad trzecią itd. Powstała w ten sposób strukturę nazwiemy *ABCABC...*

Można oczywiście mieszać obydwie metody układając np. *ABABCABABC...*, jednakże dysponując pudełkiem i kulkami Czytelnik może sam się przekonać, że żadnych innych istotnie różnych sposobów układania kul już nie ma.

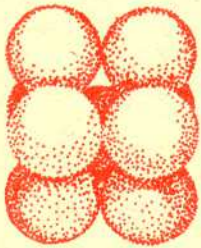
Otrzymane z naszych rozważań dwie struktury przestrzenne (*ABAB...* i *ABCABC...*) nazywane są w krystalografii *strukturami najgęstszej upakowania* i, jak nietrudno się domyślić, zostały wykorzystane przez Naturę w budowie kryształów.

Spróbujmy teraz znaleźć tzw. komórki elementarne tych dwóch sieci krystalicznych, tzn. elementarne cegiełki kilkuatomowe, z których można zbudować daną sieć.

Rozważmy najpierw strukturę *ABCABC...* i wybierzmy:

- 1) dowolną kulę z warstwy *A*;
- 2) sześć kul tworzących trójkąt równoboczny z następnej warstwy (*B*), przy czym środek ciężkości trójkąta znajduje się nad kulą z poprzedniej warstwy;
- 3) sześć kul tworzących taki sam jak poprzednio trójkąt z kolejnej warstwy (*C*), obrócony o 180° wokół osi prostopadłej do płaszczyzny trójkąta przechodzącej przez jego środek ciężkości;
- 4) jedną kulę z czwartej warstwy (*A*) ponad środkiem ciężkości trójkąta.

Otrzymana w ten sposób komórka elementarna przedstawiona jest na rys. 1. Jest to po prostu sześciąt, który o wiele łatwiej można sobie wyobrazić jako trzy warstwy – pięć kul ułożonych w kształcie krzyża, na nich cztery i na nich znów pięć (rys. 2). Sieć krystaliczna zbudowana z takich komórek elementarnych nazywa się siecią regularną powierzchniowo centrowaną, w strukturze tej krystalizują metale szlachetne: miedź, srebro i złoto.



Rys. 5

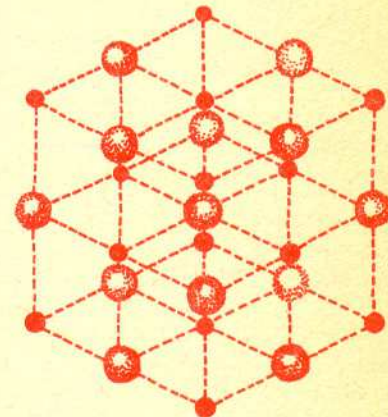
Zjawisko to można obserwować przy stygnięciu np. drutu żelaznego. W temperaturze krytycznej stygnący drut nagle nieco się wydłuża (Czytelnikowi proponujemy oszacowanie tego wydłużenia). Interesujące jest to, że zmianę upakowania atomów żelaza towarzyszy wyzwolenie pewnej ilości energii, co powoduje ponowne rozżarzenie drutu.



Rys. 1



Rys. 2



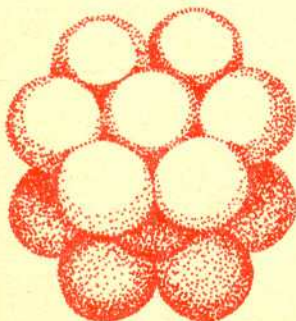
Rys. 3

Z kolei ogólnie znane kryształy soli kuchennej (NaCl) zbudowane są z dwóch identycznych sieci regularnych powierzchniowo centrowanych przesuniętych względem siebie o $1/2$ głównej przekątnej sześcianu tworzącego komórkę elementarną (rys. 3).

Przejdźmy teraz do struktury *ABAB...* Jej komórką elementarną jest graniastopup sześciokątny zbudowany z siedmiu kul tworzących sześciokąt foremny z warstwy *A*, trzech kul z następnej warstwy (*B*) i siedmiu kul z trzeciej warstwy (*A*), co przedstawia rys. 4.

Jest to tzw. sieć heksagonalna gęsto upakowana. W strukturze tej krystalizują metale dwuwartościowe, takie jak beryl, magnez, cynk.

Na zakończenie proponujemy Czytelnikowi zadanie z geometrii, należy mianowicie obliczyć, jaką część przestrzeni wypełniają stykające się jednakowe kule ułożone według schematów *ABAB...* i *ABCABC...*



Rys. 4