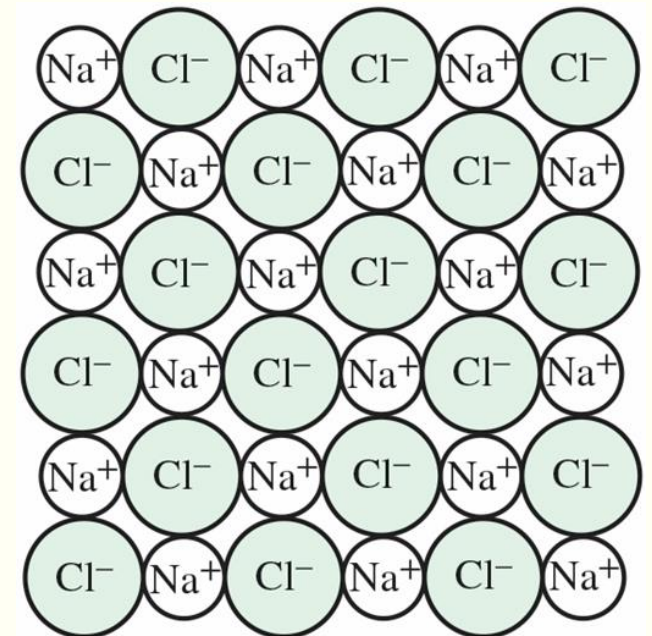


Η ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Ένα υλικό χαρακτηρίζεται ως **κρυσταλλικό** όταν τα άτομά του συνδέονται με τρόπο ώστε να σχηματίζουν μια **περιοδική διάταξη** (Εικ.: κρύσταλλος *NaCl*)

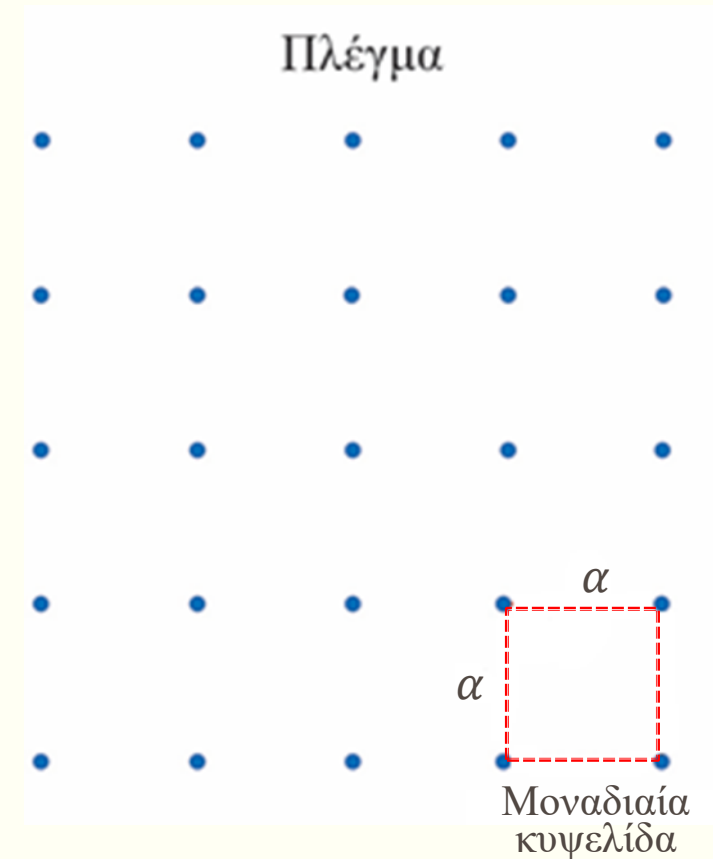
Η περιοδική διάταξη των ατόμων είναι **εκτεταμένη**, δηλαδή, συνιστά μια **τάξη μεγάλης εμβέλειας** (long range order)

- Τύποι Κρυστάλλων
- Κρυσταλλικές Διευθύνσεις και Επίπεδα
- Αλλοτροπία και άνθρακας



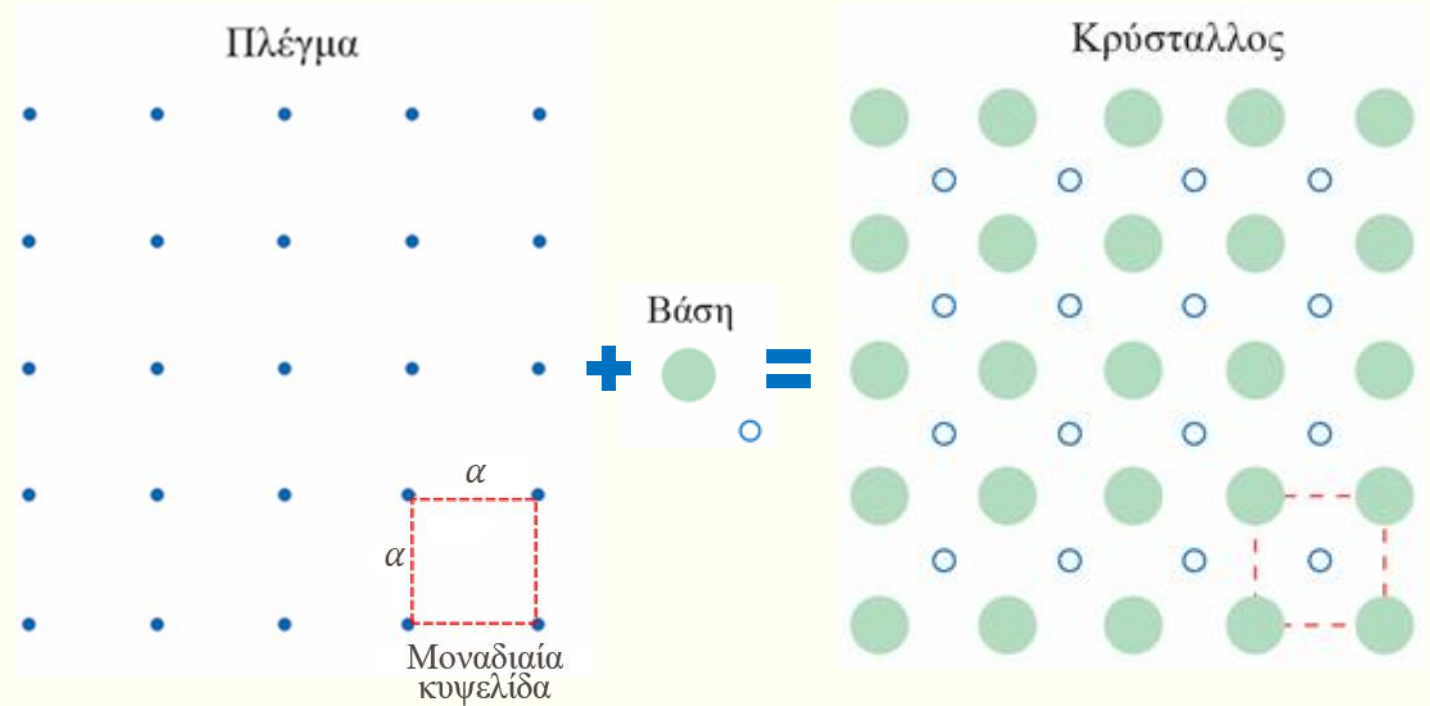
Τα βασικά στοιχεία της κρυσταλλικής δομής

- **Χωρικό πλέγμα (space lattice)** ή, απλώς, **πλέγμα** = Μια άπειρη περιοδική διάταξη γεωμετρικών σημείων στο χώρο
- **Μοναδιαία κυψελίδα (unit cell)** = η βασική μικροοντότητα της κρυσταλλικής δομής.
 - Φέρει στο ακέραιο τις ιδιότητες του κρυστάλλου.
- **Παράμετρος πλέγματος (lattice parameter) α** = το μήκος πλευράς της μοναδιαίας κυψελίδας



Τα βασικά στοιχεία της κρυσταλλικής δομής (συνέχεια)

- **Βάση (basis)** = μια πανομοιότυπη ομάδα ατόμων
Π.χ., 1 άτομο Cl και 1 άτομο Na
- **Κρυσταλλική δομή (crystal structure)** ή, απλά, **κρύσταλλος** προκύπτει από το πλέγμα αν τοποθετήσουμε σε κάθε σημείο του πλέγματος μια πανομοιότυπη ομάδα ατόμων

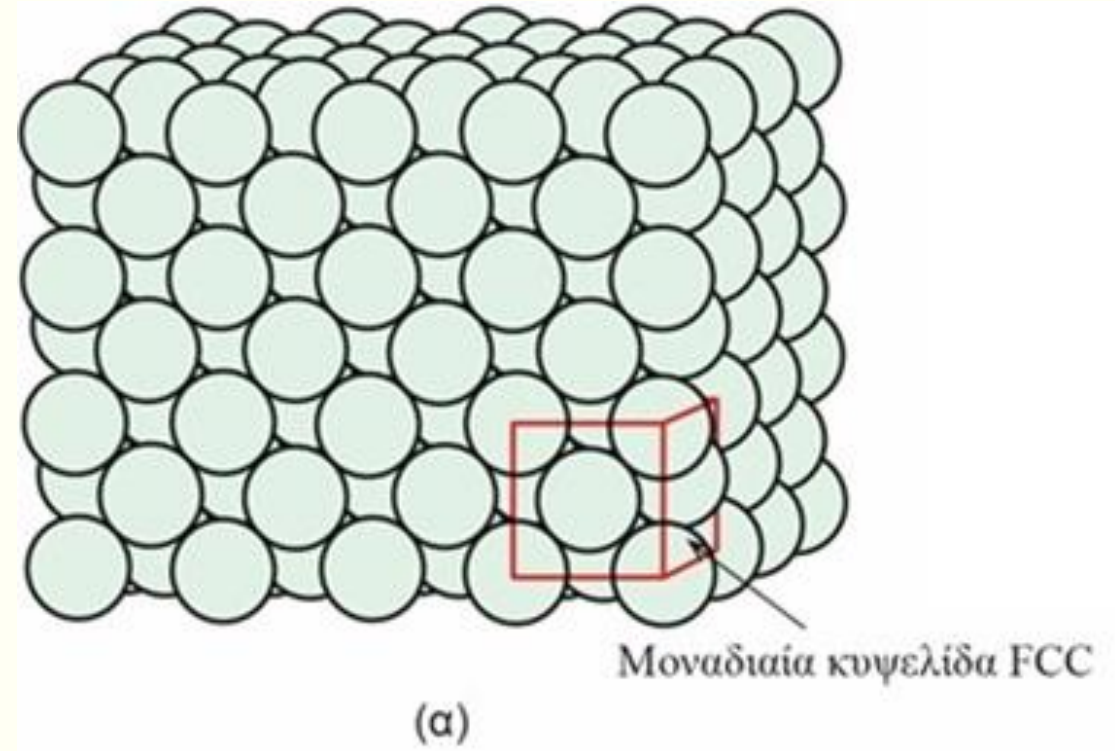


$$\text{Κρύσταλλος} = \text{Πλέγμα} + \text{Βάση}$$

Τύποι Κρυσταλλικών Δομών: Εδροκεντρωμένη Κυβική

Εδροκεντρωμένη Κυβική Δομή (Face-Centered Cubic, FCC):

- Η μ.κ. είναι κύβος, *εικ. (α)*
- Άτομα στις κορυφές και στο κέντρο κάθε έδρας του κύβου (... εδρο-κεντρωμένο ...)
- Είναι κρυσταλλική δομή **πυκνής διάταξης** (close-packed crystal structure): τα άτομα διατάσσονται όσο το δυνατόν πλησιέστερα μεταξύ τους.

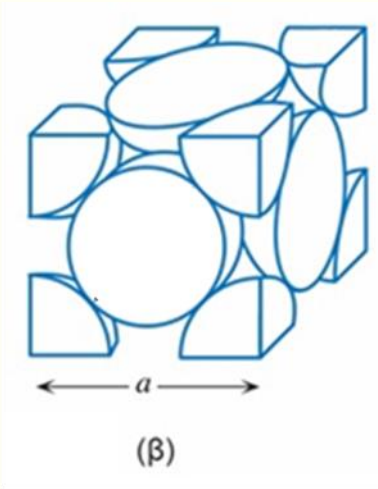


- Είναι η δομή πολλών μετάλλων (*Cu, Ag, Al, Ca, γ - Fe ($> 912^{\circ}\text{C}$), Ni, Pd, Pt, Rh*)

Παράδειγμα υλικού δομής FCC: Ο χαλκός

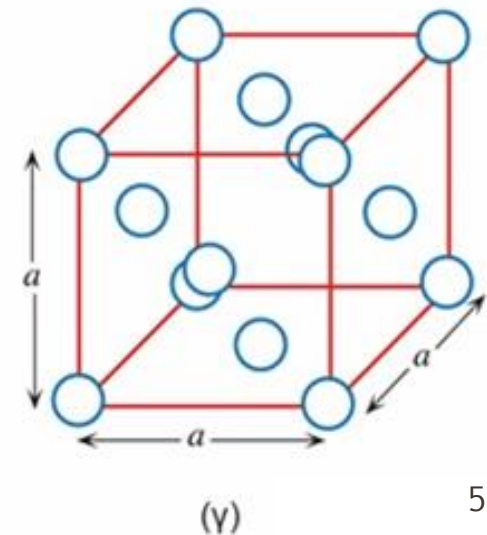
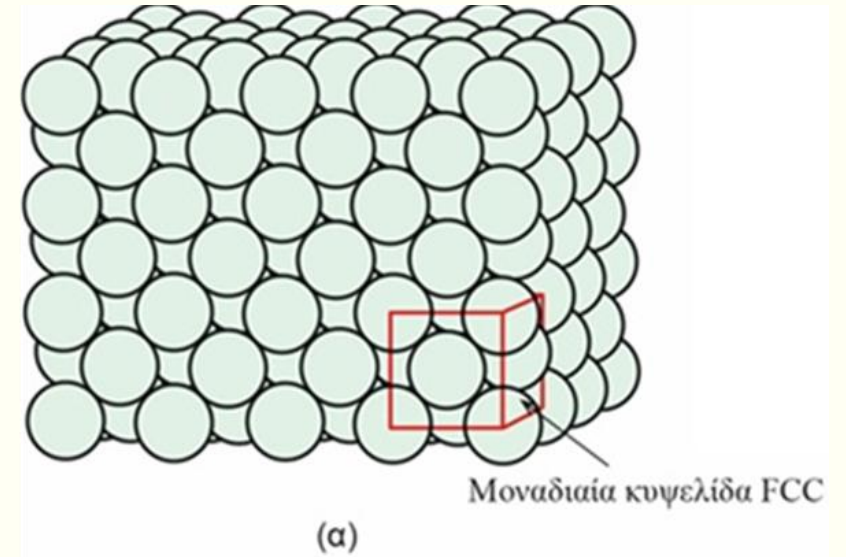
- Στον κρύσταλλο χαλκού, κάθε σημείο καταλαμβάνεται από ένα άτομο Cu , Εικ. (α).

(Βάση = 1 άτομο Cu)



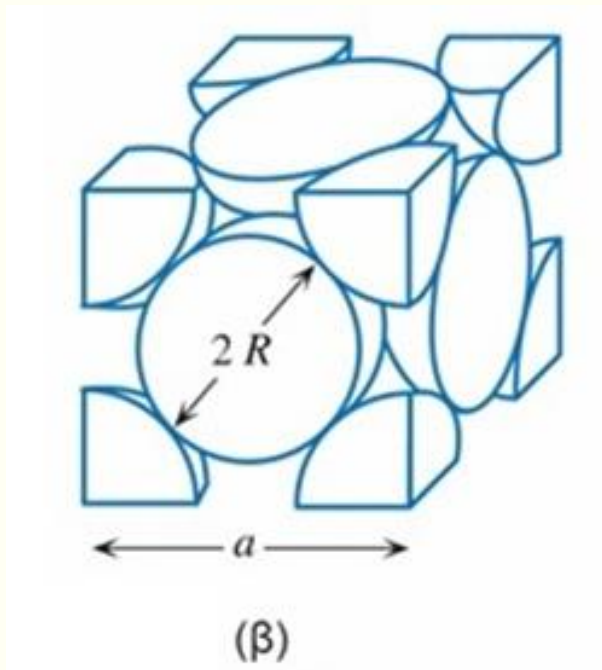
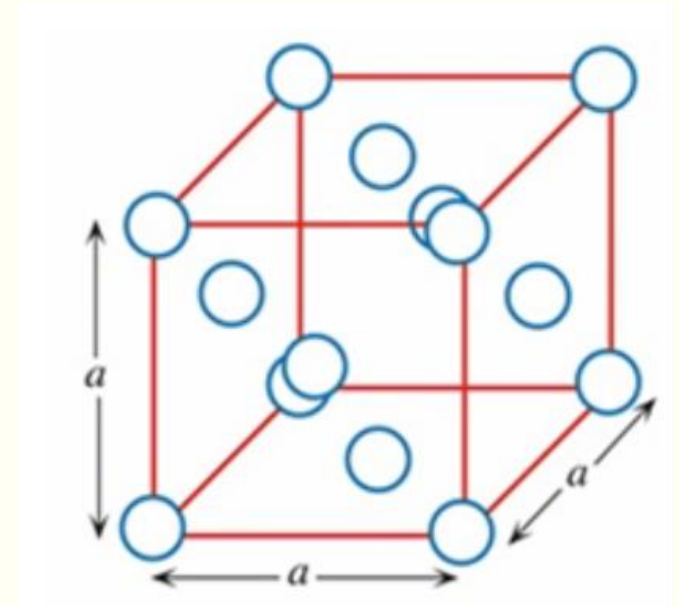
- Η μοναδιαία κυψελίδα στο κρύσταλλο Cu είναι κυβική και έχει άτομα Cu στις κορυφές του κύβου και ένα άτομο Cu στο κέντρο κάθε έδρας, Εικ. (β).

- Εικ. (γ), αναπαράσταση της μοναδιαίας κυψελίδας FCC με σφαίρες σε σμίκρυνση (μεγαλύτερη σαφήνεια).



- Αριθμός ατόμων / μοναδιαία κυψελίδα Cu

$$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$



- Υποθέτοντας ότι τα άτομα Cu είναι εφαιπόμενες σφαίρες ακτίνας R , εικ (β), η παράμετρος πλέγματος είναι:

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

- για $R = 0.128 \text{ nm} \Rightarrow a = 0.362 \text{ nm}$

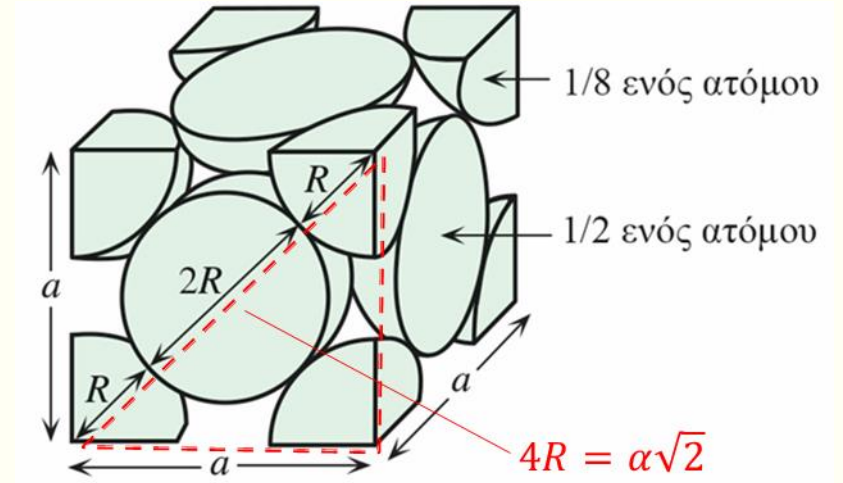
ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1.16

Στη μοναδιαία κυψελίδα δομής FCC του κρυστάλλου του *Cu*, υπολογίστε

(α) τον **αριθμό ατομικής πλήρωσης** (atomic packing factor, APF)

APF = (Συνολικός όγκος ατόμων στη μοναδιαία κυψελίδα) / (Όγκος μοναδιαίας κυψελίδας)

(β) την **ατομική συγκέντρωση** (atomic concentration, αριθμός ατόμων ανά μονάδα όγκου) του *Cu* και την **πυκνότητα** του κρυστάλλου ($M_{Cu} = 63.55 \text{ g/mol}$ και $R = 0.128 \text{ nm}$)



ΑΠΑΝΤΗΣΗ

(α) Εφόσον έχουμε 4 άτομα *Cu* ανά κυψελίδα

$$APF = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74 \text{ (74\%)}$$

(β) Η ατομική συγκέντρωση είναι, $n_{at} = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(0.362 \text{ nm})^3} = 8.43 \times 10^{22} \text{ atoms/cm}^3$

και η πυκνότητα, $\rho = n_{at} \left(\frac{M_{at}}{N_{at}}\right) = (8.43 \times 10^{22} \text{ atoms/cm}^3) \left(\frac{63.55 \text{ g/mol}}{6.022 \times 10^{23} \text{ atoms/mol}}\right) = 8.9 \text{ g/cm}^3$

Τύποι Κρυσταλλικών Δομών: Χωροκεντρωμένη Κυβική

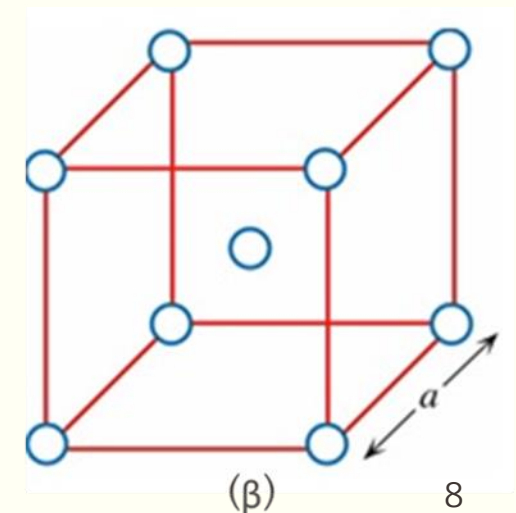
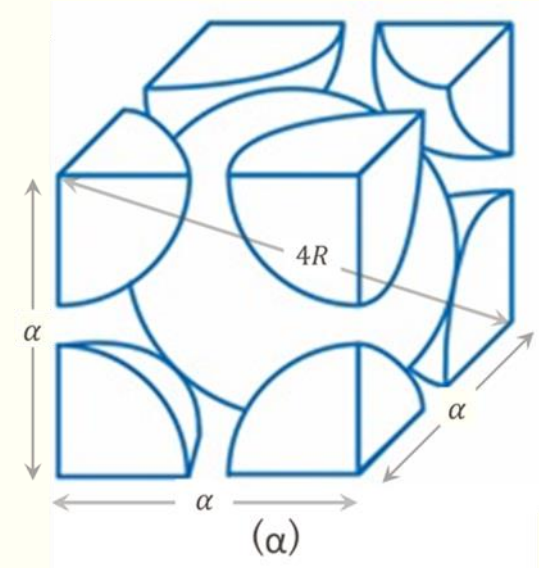
- Χωροκεντρωμένη Κυβική Κρυσταλλική Δομή (Body-Centered Cubic, BCC)

Παραδείγματα: Πολλά μέταλλα ($\alpha - Fe, Cr, Mo, W$)

- Η μοναδιαία κυψελίδα στο κρύσταλλο $\alpha - Fe$ είναι κυβική και έχει άτομα Fe στις κορυφές της και ένα άτομο Fe στο κέντρο κάθε έδρας, εικ. (α)
- Αριθμός ατόμων/μοναδιαία κυψελίδα BCC

$$8 \times \frac{1}{8} + 1 \times 1 = 2$$

- Υποθέτοντας ότι τα άτομα Fe είναι σφαίρες εφαπτόμενες, έχουμε: $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$
- Εικ. (β), αναπαράσταση της μοναδιαίας κυψελίδας BCC με σφαίρες σε σμίκρυνση (μεγαλύτερη σαφήνεια).

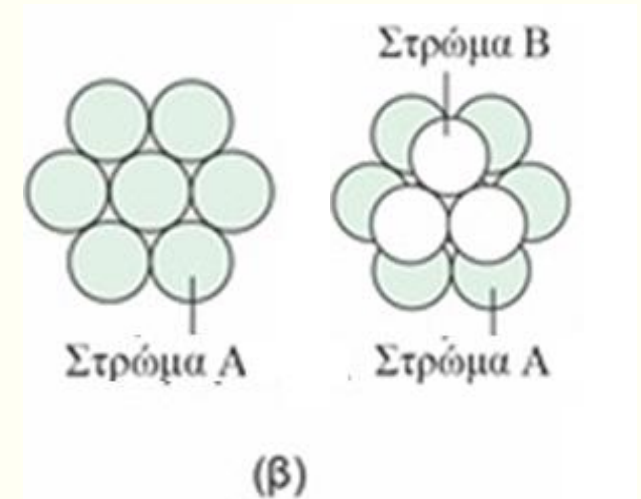
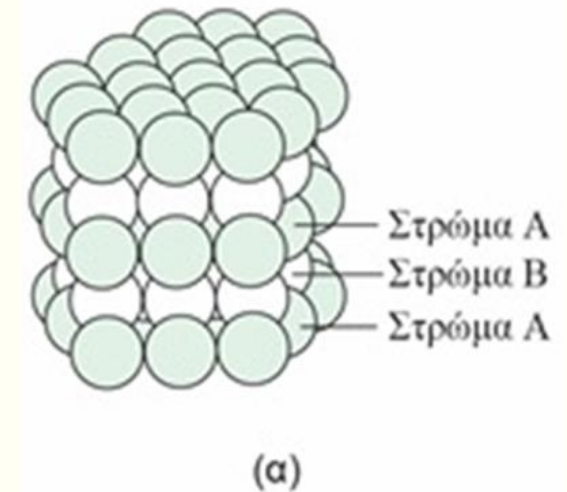


Τύποι Κρυσταλλικών Δομών: Εξαγωνική Πυκνής Διάταξης

- Εξαγωνική Κρυσταλλική Δομή Πυκνής Διάταξης (Hexagonal Close-Packed, HCP)

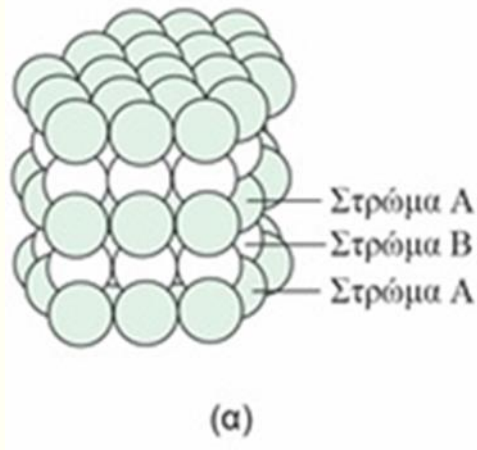
Παραδείγματα: Πολλά μέταλλα (Zn, Co, Mg, Ti)

- Στην κρυσταλλική δομή HCP του Zn , τα άτομα Zn διατάσσονται στο κέντρο και τις κορυφές εξαγώνου ώστε να είναι όσο το δυνατόν πλησιέστερα μεταξύ τους [Στρώμα A στην εικ. (β)]
- Πάνω στα κενά του Στρώματος A διατάσσεται όμοιο Στρώμα B, εικ. (β)
- Ο κρύσταλλος Zn αποτελείται από αλληλουχία διαστρωμάτωσης στο μοτίβο ABAB..., εικ. (α)

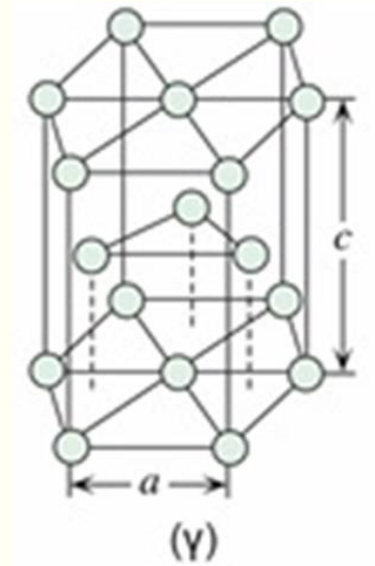


- Εικ (γ): Η μοναδιαία κυψελίδα HCP του Zn (αναπαράσταση με σφαίρες σε σμίκρυνση)
- Αριθμός ατόμων/μοναδιαία κυψελίδα HCP

$$12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$$

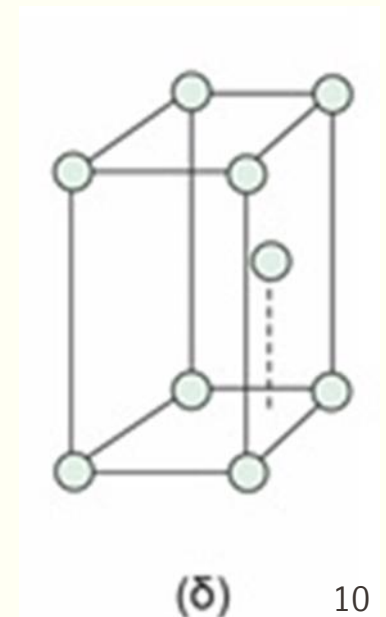


- Υποθέτοντας ότι τα άτομα Zn είναι σφαίρες εφαπτόμενες, εικ (α), έχουμε: $a = 2R$ και $c = 1.633a$



- Εικ (δ): Η μικρότερη δυνατή μοναδιαία κυψελίδα της δομής HCP (αναπαράσταση με σφαίρες σε σμίκρυνση)
- Αριθμός ατόμων/μοναδιαία κυψελίδα HCP εικ. (δ)

$$8 \times \frac{1}{8} + 1 \times 1 = 2$$



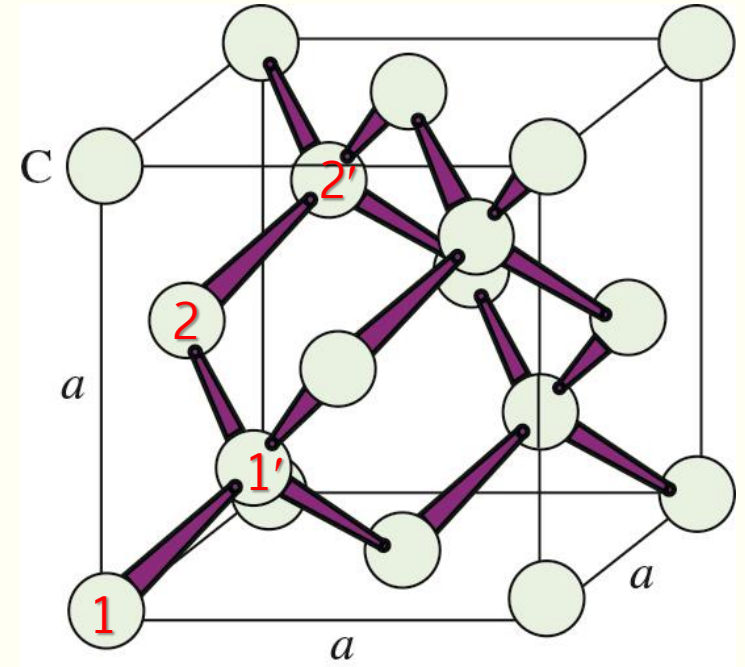
Τύποι Κρυσταλλικών Δομών: Δομή Διαμαντιού

Παραδείγματα: Ομοιοπολικά στερεά (Diamond, Si , Ge , $\alpha - Sn$)

- Η μοναδιαία κυψελίδα του διαμαντιού είναι κυβική και έχει 8 άτομα C

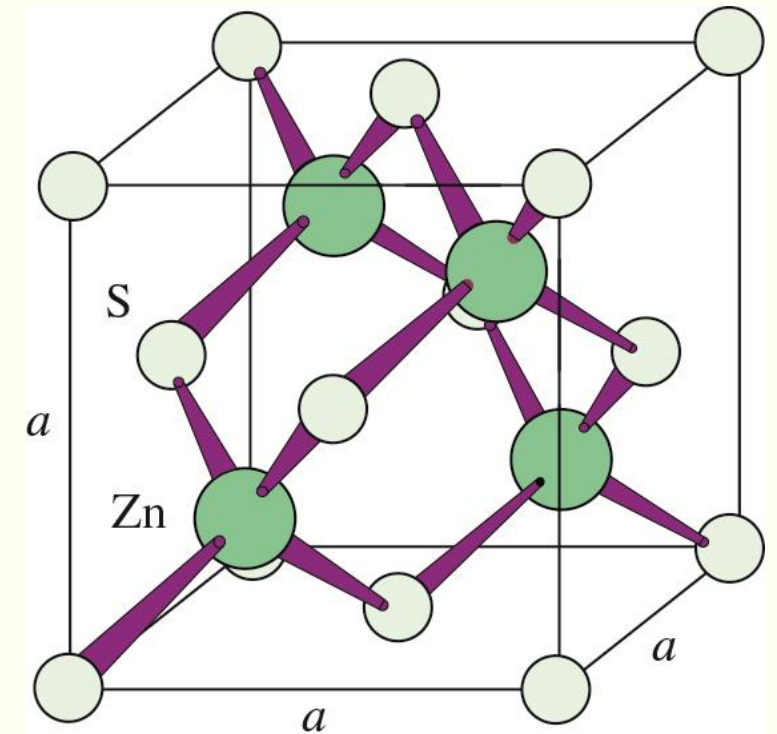
$$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} + 4 = 8$$

- Μπορεί να θεωρηθεί ότι έχει τη δομή FCC πλέγματος και κάθε σημείο του πλέγματος έχει σαν βάση δύο άτομα C
 - Ένα άτομο C σε πλεγματοκό σημείο (π.χ. σημείο **1** ή **2**)
 - και το δεύτερο μετατοπισμένο $a/4$ κατά μήκος των ακμών (π.χ. σημείο **1'** ή **2'**).



Τύποι Κρυσταλλικών Δομών: Δομή Θειούχου Ψευδαργύρου

- Κρυσταλλική Δομή Θειούχου Ψευδαργύρου (zinc blende)
- Μοναδιαία κυψελίδα κυβική, κρυσταλλική δομή όμοια με διαμαντιού
- Αποτελείται από τη δομή ενός FCC πλέγματος και μιας βάσης δύο ατόμων, Zn και S (ή Ga και As , κ.ά.)



Τύποι Κρυσταλλικών Δομών: Δομή Θειούχου Ψευδαργύρου

Παραδείγματα: Πολλά σημαντικά ομοιοπολικά και ιοντικά στερεά (ZnS, AlAs, GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb, ZnTe)

- **ZnS** – Χρήσεις: χρωστική ουσία (pigment) για χρώματα, πλαστικά και καουτσούκ (rubber)
- **AlAs** - Οπτοηλεκτρονικές διατάξεις, Ηλιακές κυψέλες, Κβαντικές διατάξεις φρεατίων (Quantum well devices), Τρανζίστορ υψηλής κινητικότητας ηλεκτρονίων (High-electron-mobility transistors)
- **GaAs** – σημαντικός ημιαγωγός, χρησιμοποιείται για την κατασκευή συσκευών όπως δίοδοι εκπομπής υπερύθρου (infrared emitting diodes), δίοδοι λέιζερ (laser diodes), ολοκληρωμένα κυκλώματα σε συχνότητες μικροκυμάτων (integrated circuits at microwave frequencies) και φωτοβολταϊκά κύτταρα
- **GaP** - κατασκευή χαμηλού κόστους LED κόκκινου, πορτοκαλί και πράσινου φωτός 13

Τύποι Κρυσταλλικών Δομών: Δομή Θειούχου Ψευδαργύρου

Παραδείγματα: Πολλά σημαντικά ομοιοπολικά και ιοντικά στερεά

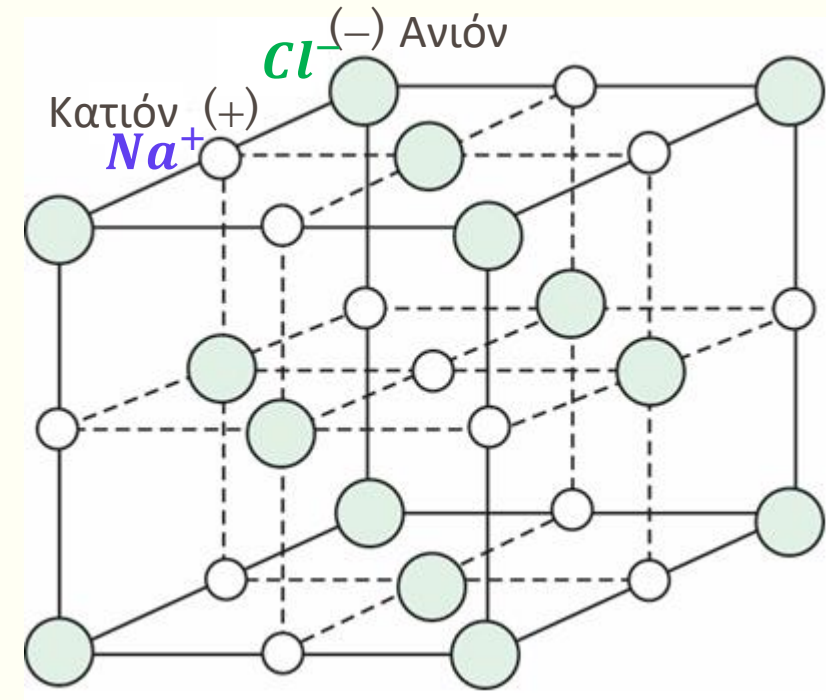
- **GaSb** - υπόστρωμα για κατασκευή λέιζερ και ανιχνευτών στο μέσο υπέρυθρο (mid infrared 2–5 μm) και θερμοφωτοβολταϊκές (TPV) συσκευές.
- **InAs** - κατασκευή ανιχνευτών και αισθητήρων υπέρυθρου (IR 1-100 μm)

Τύποι Κρυσταλλικών Δομές: Δομή $NaCl$

- Στα ιοντικά στερεά, κατιόντα και ανιόντα συνδέονται με μη-κατευθυντικούς δεσμούς)
- Όταν κατιόντα και ανιόντα έχουν μεγάλη διαφορά στο μέγεθος η μοναδιαία κυψελίδα έχει δομή $NaCl$ (χλωριούχου νατρίου).
- Εικ.: Μοναδιαία κυψελίδα κρυστάλλου $NaCl$ (ορυκτό αλάτι) σε απεικόνιση σφαιρών σε σμίκρυνση.

Παραδείγματα υλικών με δομή $NaCl$: Πολλά σημαντικά ιοντικά στερεά, όπως $NaCl$, $AgCl$, LiF , MgO , CaO .

- Αριθμός κατιόντων/μοναδιαία κυψελίδα $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$
- Αριθμός ανιόντων/μοναδιαία κυψελίδα $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$

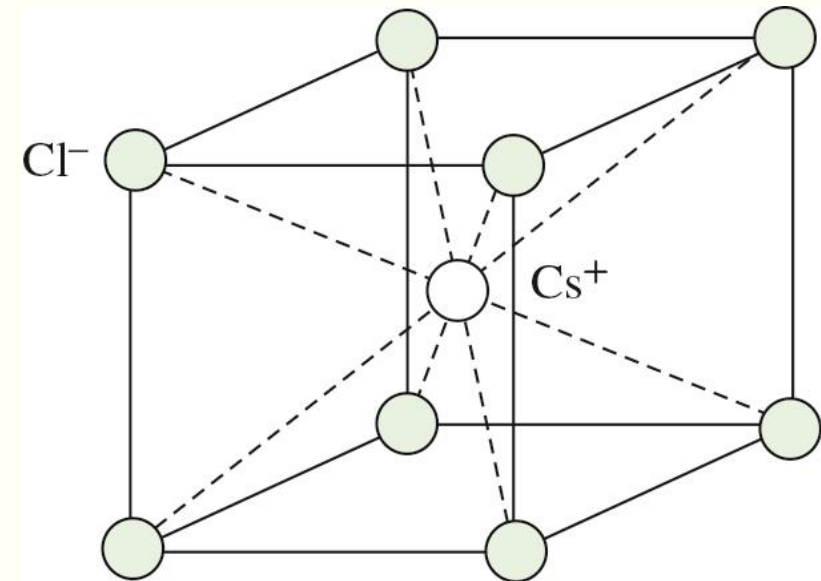


Τύποι Κρυσταλλικών Δομές: Δομή $CsCl$

- Όταν κατιόντα και ανιόντα έχουν ίδιο φορτίο και περίπου ίδιο μέγεθος η μοναδιαία κυψελίδα έχει δομή $CsCl$ (χλωριούχου καισίου)

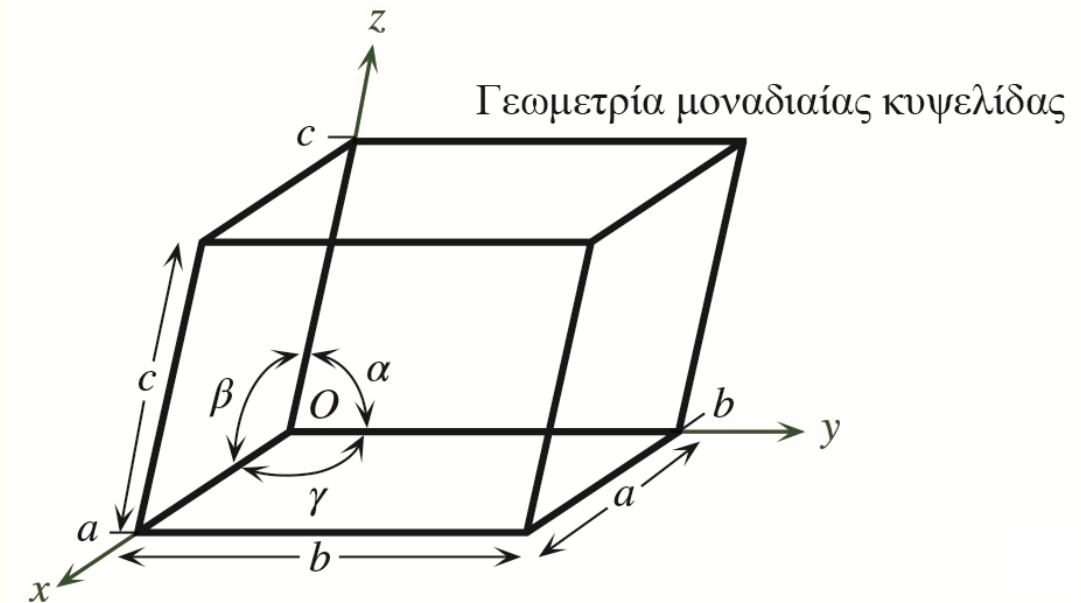
Παραδείγματα: Ιοντικά στερεά, όπως $CsCl$, $CsBr$, CsI , $TlCl$, $TlBr$, TlI

- Εικ.: Μοναδιαία κυψελίδα κρυστάλλου $CsCl$ σε απεικόνιση σφαιρών σε σμίκρυνση.
- Αριθμός κατιόντων/μοναδιαία κυψελίδα $1 \times 1 = 1$
- Αριθμός ανιόντων/μοναδιαία κυψελίδα $8 \times \frac{1}{8} = 1$



Κρυσταλλικές Διευθύνσεις & Επίπεδα – Παράμετροι Πλέγματος

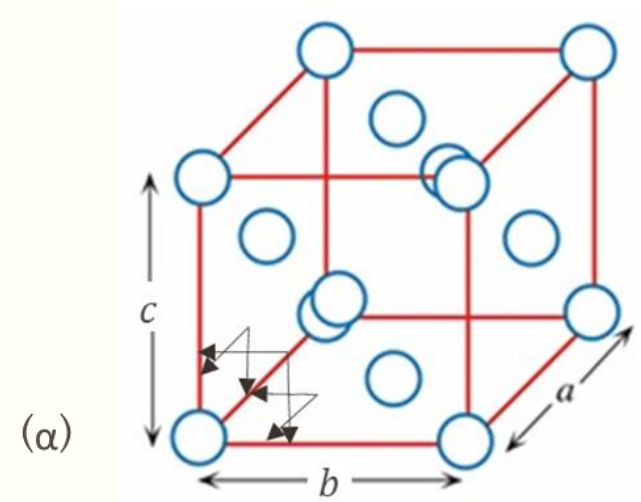
- Για την περιγραφή της γεωμετρίας μιας μοναδιαίας κυψελίδας χρησιμοποιείται ένα παραλληλεπίπεδο
- Οι πλευρές (ακμές) a, b, c και οι γωνίες α, β, γ ονομάζονται **παράμετροι πλέγματος** (lattice parameters)
- Οι άξονες x, y, z είναι παράλληλοι στις πλευρές του παραλληλεπιπέδου
- Αρχή των αξόνων θεωρείται η κάτω αριστερή κορυφή του παραλληλεπιπέδου (σημείο O).



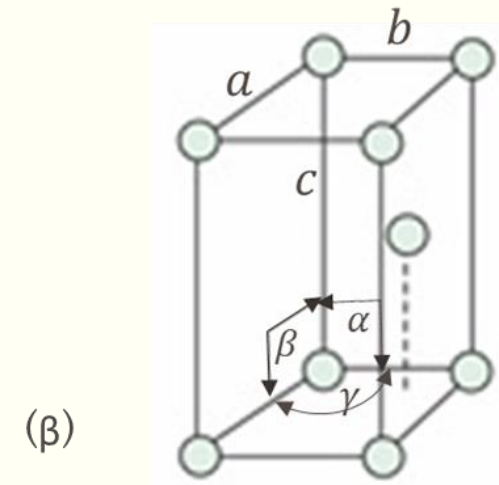
Συνέχεια ♦

Παραδείγματα Παραμέτρων Πλέγματος

1. Για τις κυβικές μοναδιαίες κυψελίδες των Cu και Fe είναι: $a = b = c$ και $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, εικ. (α)



2. Για την εξαγωνική μοναδιαία κυψελίδα του Zn : $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$ και $\gamma = 120^\circ$, εικ. (β)



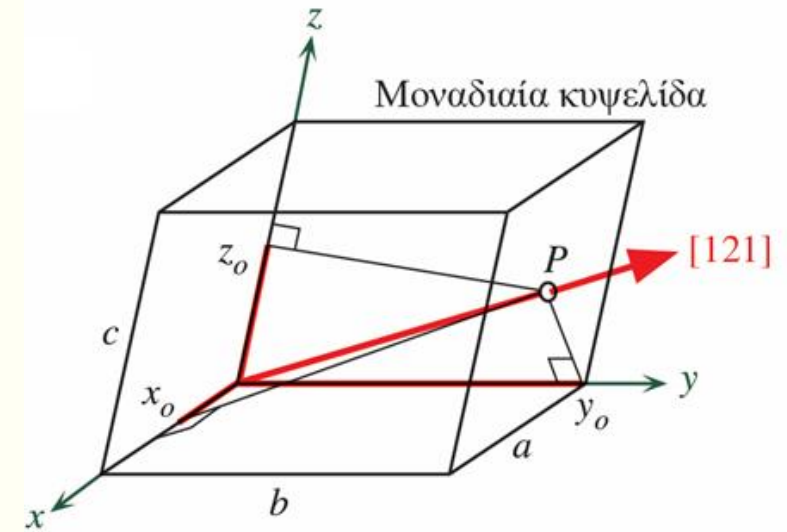
Κρυσταλλικές Διευθύνσεις

- Πολλές ιδιότητες σε ένα κρυσταλλικό υλικό (π.χ., μέτρο ελαστικότητας, ειδική αντίσταση, μαγνητική επιδεκτικότητα, κ.ά.) εξαρτώνται από τη διεύθυνση μέσα στον κρύσταλλο

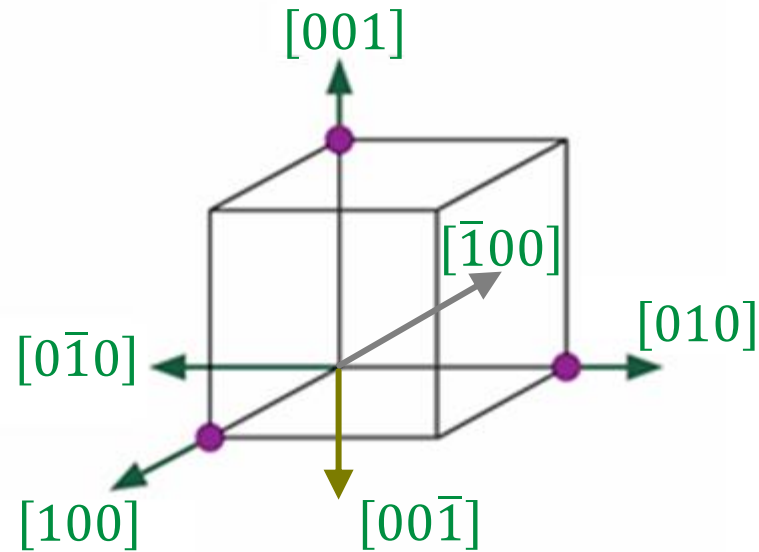
ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ προσδιορισμού μιας κρυσταλλικής διεύθυνσης

- Επιλέγουμε ένα σημείο του διανύσματος που συναντά μια επιφάνεια του κρυστάλλου (σημείο P στην εικ.)
- Οι συντεταγμένες x_o, y_o, z_o του σημείου P είναι $\frac{1}{2}a, b, \frac{1}{2}c$
- Πολλαπλασιάζουμε τους τρεις αριθμούς $(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ ώστε να λάβουμε τους μικρότερους ακέραιους $(1, 2, 1)$, που συμβολίζουμε u, v, w .
- Εκφράζουμε τη διεύθυνση του διανύσματος με τους αριθμούς σε αγκύλες,

$$[u, v, w] = [121]$$



Οι διευθύνσεις στο κυβικό κρυσταλλικό σύστημα



- Αν κάποιος από τους ακέραιους u, v, w είναι αρνητικός, σημειώνεται θέτοντας μια **παύλα από πάνω** του

Π.χ., $[0\bar{1}0]$

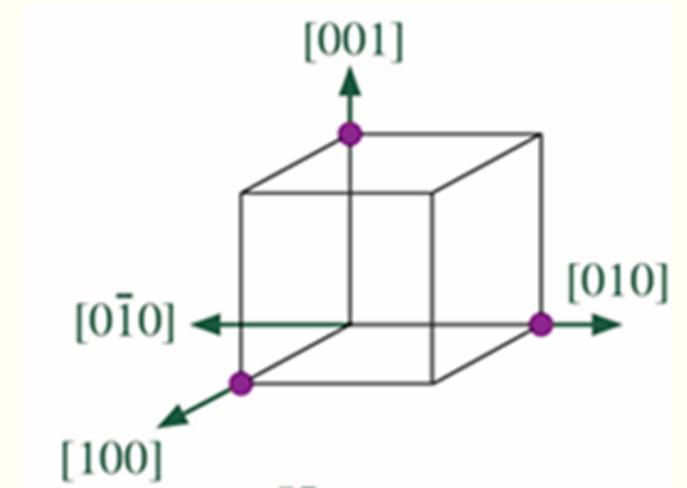
- Ορισμένες διευθύνσεις στον κρύσταλλο είναι **ισοδύναμες**

Π.χ., οι διευθύνσεις $[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]$

- Οι μακροσκοπικές ιδιότητες ενός κρυστάλλου κατά μήκος των ισοδύναμων διευθύνσεων έχουν την ίδια τιμή (**ισοτροπία**)

Π.χ., η αγωγιμότητα του Cu για ηλεκτρικό ρεύμα κατά μήκος των κρυσταλλικών διευθύνσεων $[100], [010], [001]$ είναι ίδια ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$)

- **Οικογένεια διευθύνσεων** (family of directions) = ομάδα ισοδύναμων διευθύνσεων κρυστάλλου.
- Συμβολίζεται χρησιμοποιώντας μια από τις διευθύνσεις της οικογένειας μέσα σε $\langle \rangle$



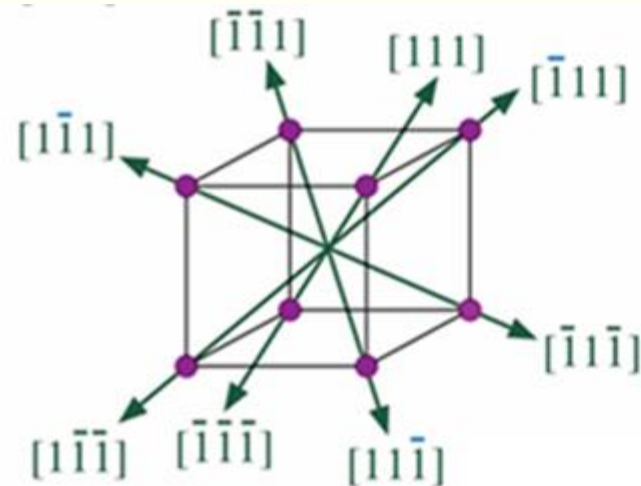
Η οικογένεια διευθύνσεων $\langle 100 \rangle$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1:

Η οικογένεια $[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]$ συμβολίζεται $\langle 100 \rangle$ ή $\langle 010 \rangle$, κ.λπ.

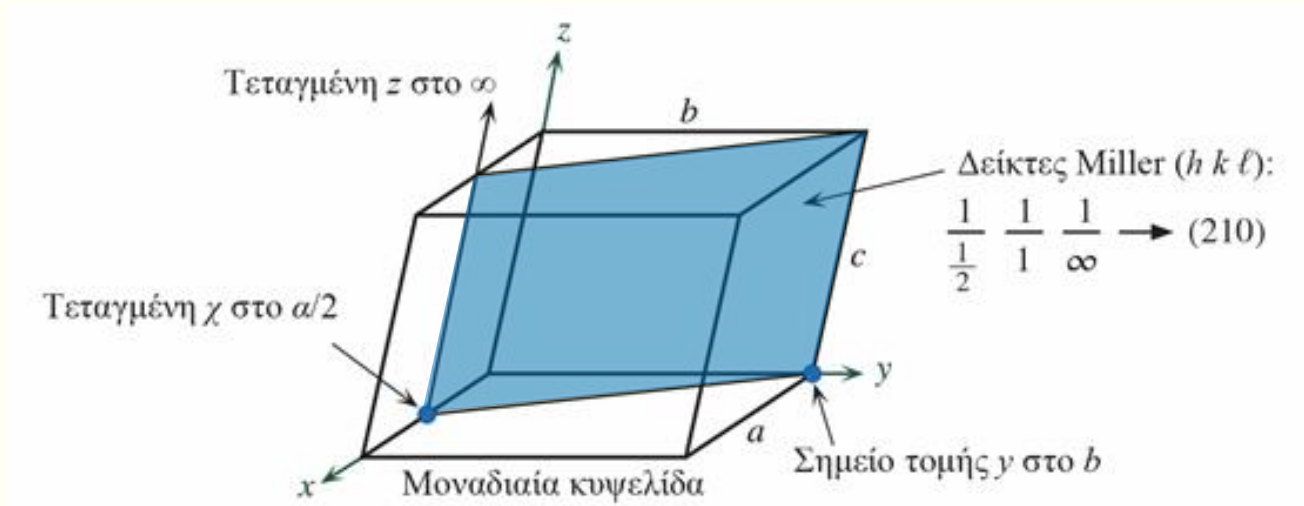
ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2:

Η οικογένεια διευθύνσεων $\langle 111 \rangle$



Η οικογένεια διευθύνσεων $\langle 111 \rangle$

Κρυσταλλικά Επίπεδα



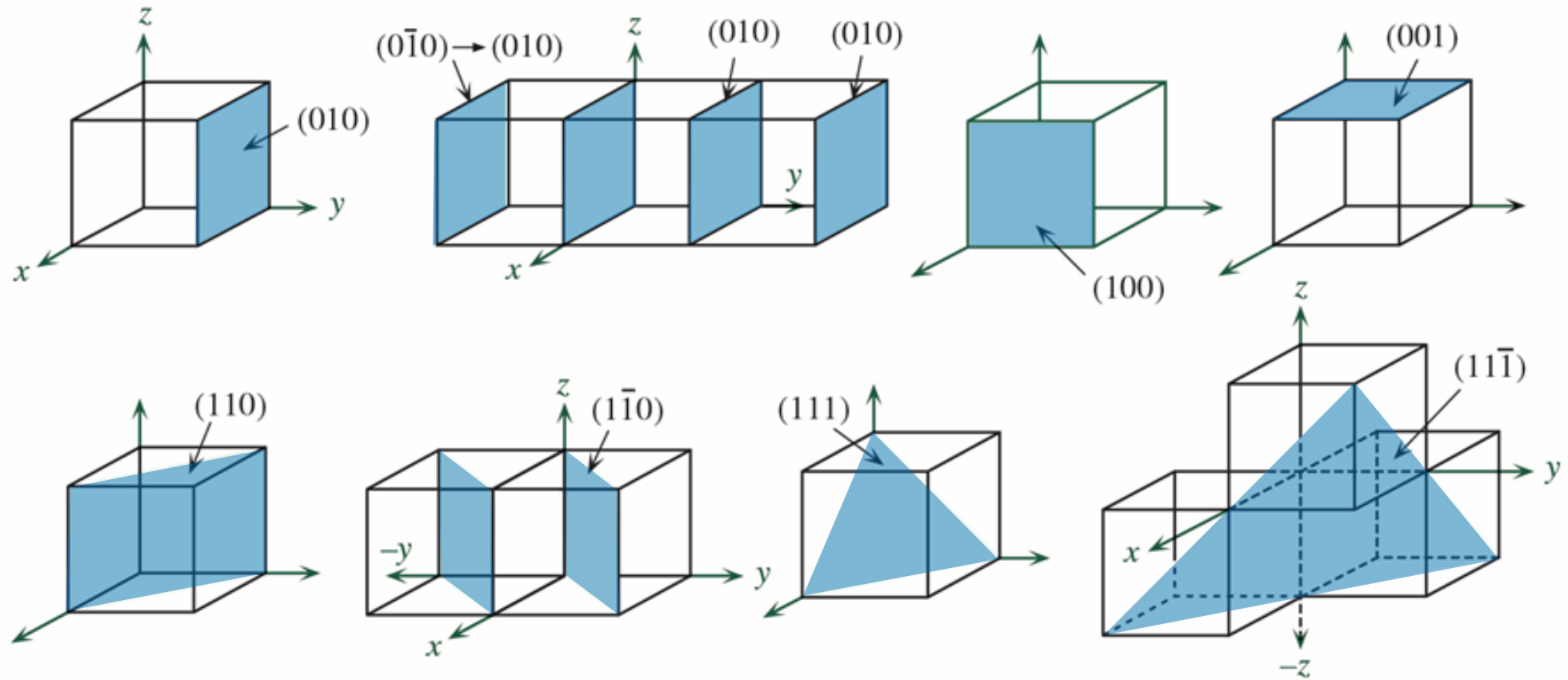
- Προσδιορισμός (ονομασία) ενός επιπέδου στον κρύσταλλο με τους δείκτες **Miller** (Miller indices of a plane)
- Βρίσκουμε τα σημεία τομής x_0, y_0, z_0 του επιπέδου με τους άξονες x, y, z
- Αναγράφουμε τους δείκτες Miller, h, k, l , σαν τα αντίστροφα των σημείων τομής

$$h = \frac{1}{x_0}, k = \frac{1}{y_0}, l = \frac{1}{z_0}$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

Εικ., δείκτες Miller επιπέδου
 $(hkl) = (210)$

Διάφορα κρυσταλλικά επίπεδα στο κυβικό πλέγμα



ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1.17

(α) Βρείτε τους δείκτες Miller του επιπέδου στον κρύσταλλο FCC της εικόνας

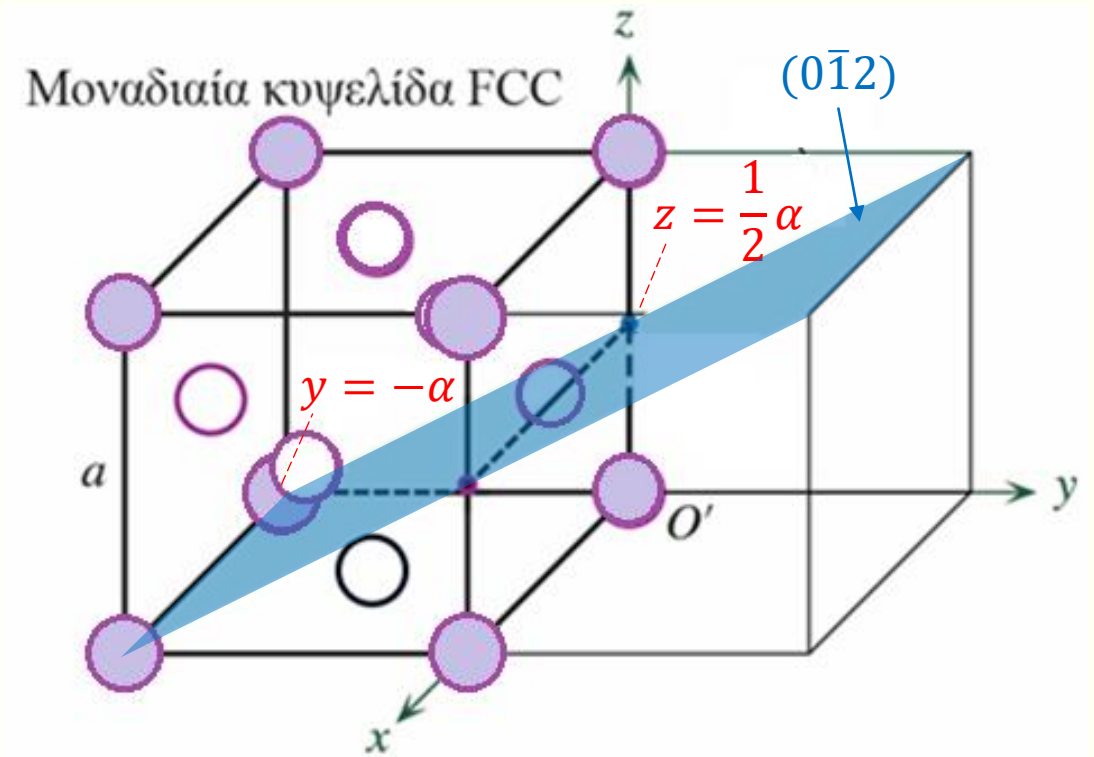
ΑΠΑΝΤΗΣΗ

(α) Το επίπεδο διέρχεται από μια ακμή (τη x) και το μέσο της απέναντι έδρας της μοναδιαίας κυψελίδας του πλέγματος FCC.

Θεωρώντας αρχή των αξόνων x, y, z το σημείο O' , το επίπεδο τέμνει τους άξονες στα σημεία $\infty, -a, \frac{1}{2}a$

Επομένως, οι δείκτες Miller του επιπέδου είναι

$$(hkl) = \left(\frac{1}{\infty} \frac{1}{-1} \frac{1}{\frac{1}{2}} \right) = (0\bar{1}2)$$



Συνέχεια ♦

ΑΠΑΝΤΗΣΗ (συνέχεια)

(β) Υπολογίστε την επίπεδη συγκέντρωση ατόμων για τα επίπεδα (100) και (110)

ΑΠΑΝΤΗΣΗ

Το **επίπεδο (100)**, **εικ. (β)**, αντιστοιχεί σε μια έδρα του κύβου

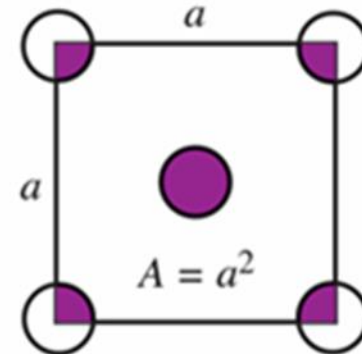
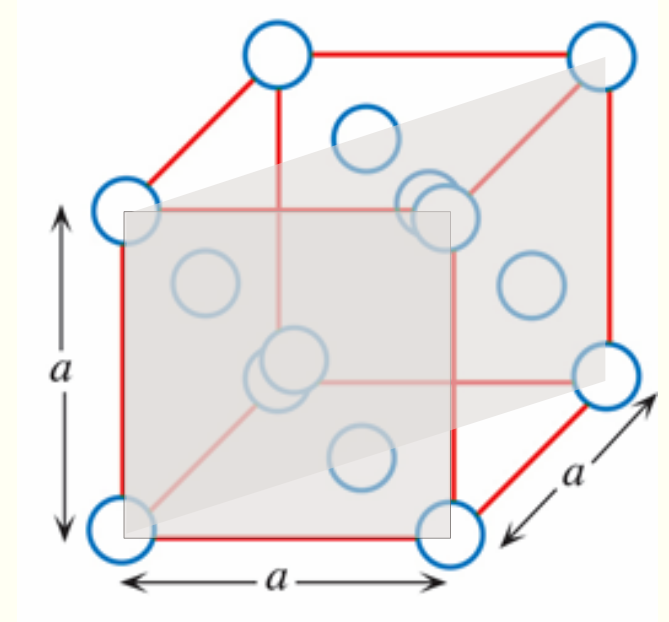
- έχει επιφάνεια $A = a^2$
- περιλαμβάνει $4 \times \frac{1}{4} + 1 \times 1 = 2$ άτομα

Η επιπεδική συγκέντρωση ατόμων είναι $n_{100} = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{(0.362 \text{ nm})^2} = 15.3 \text{ atoms/nm}^2$

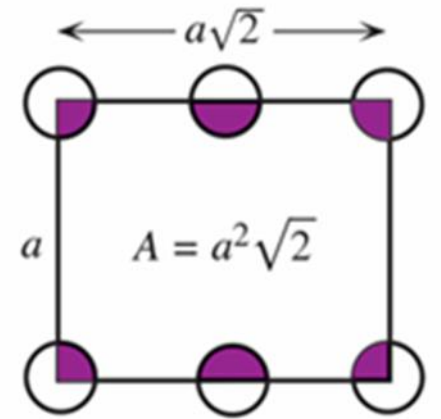
Το **επίπεδο (110)**, **εικ. (γ)**,

- έχει επιφάνεια $A = (a)(a\sqrt{2}) = a^2\sqrt{2}$
- περιλαμβάνει $4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2} = 2$ άτομα

Είναι $n_{110} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}} = \frac{2}{(0.362)^2\sqrt{2} \text{ nm}} = 10.8 \text{ atoms/nm}^2$



(β) επίπεδο (100)



(γ) επίπεδο (110)

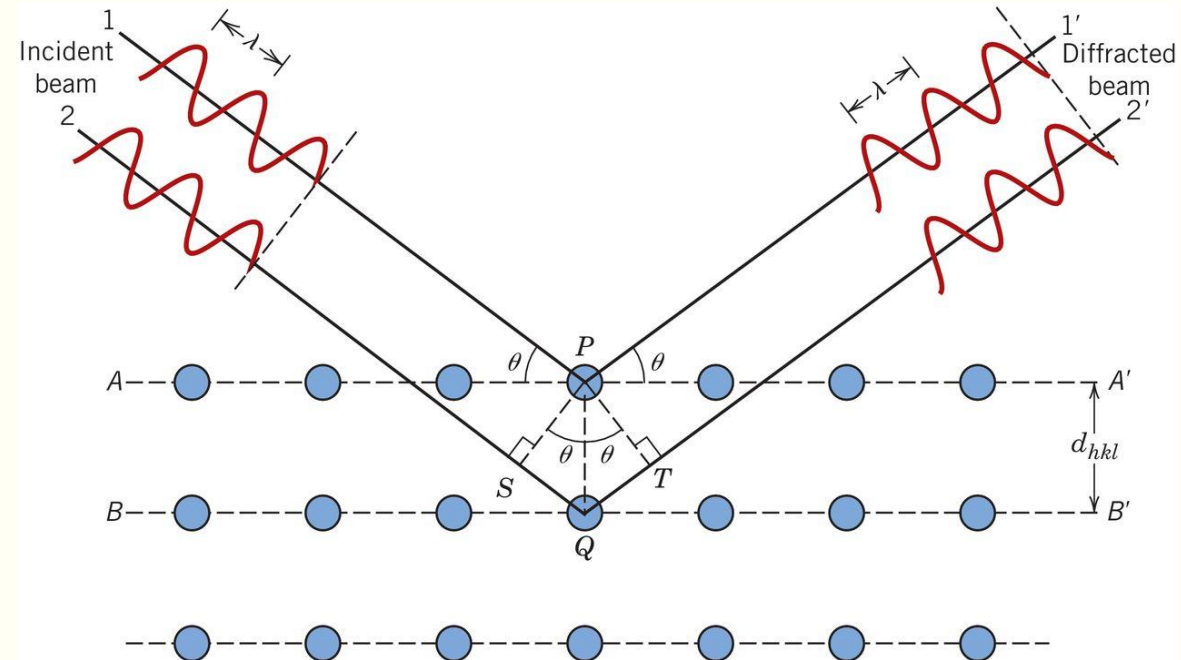
Περίθλαση ακτίνων X και ο νόμος του Bragg

- Θεωρούμε δύο παράλληλα επίπεδα ατόμων A-A' και B-B' με (τους ίδιους) δείκτες Miller h, k και l που χωρίζονται από απόσταση d_{hkl} .
- Έστω 1 και 2 δύο ακτίνες μιας παράλληλης μονοχρωματικής και σύμφωνης δέσμης ακτίνων X, μήκους κύματος λ , που προσπίπτει υπό γωνία θ .
- Ενισχυτική συμβολή των σκεδαζόμενων από τα άτομα P και Q ακτίνων 1' και 2' σε γωνία θ συμβαίνει όταν η διαφορά μεταξύ των διαδρομών 1-P-1' και 2-Q-2', δηλαδή το μήκος $SQ + QT$, είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος λ

$$n\lambda = SQ + QT$$

- Αντικαθιστώντας, $SQ = QT = d_{hkl} \sin \theta$, έχουμε το **νόμο του Bragg**

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

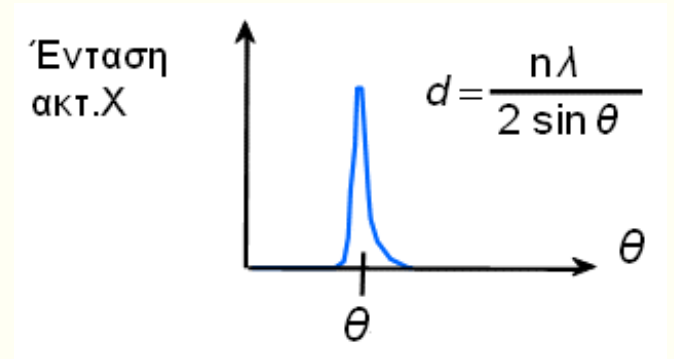


Επιστήμη & Τεχνολογία Υλικών, 9η Έκδοση, William D. Callister, Jr. · David G. Rethwisch

Περίθλαση ακτίνων X και ο νόμος του Bragg (συνέχεια)

- Η μέτρηση της γωνίας σκέδασης, θ , των ακτίνων-X επιτρέπει τον υπολογισμό της απόστασης d μεταξύ των ατομικών επιπέδων.

$$d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta}$$



- Η απόσταση d_{hkl} μεταξύ γειτονικών παράλληλων κρυσταλλογραφικών επιπέδων εξαρτάται από τους δείκτες Miller h, k, l και τις παραμέτρους του πλέγματος

Παράδειγμα

Στην περίπτωση κυβικών κρυστάλλων, ισχύει

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

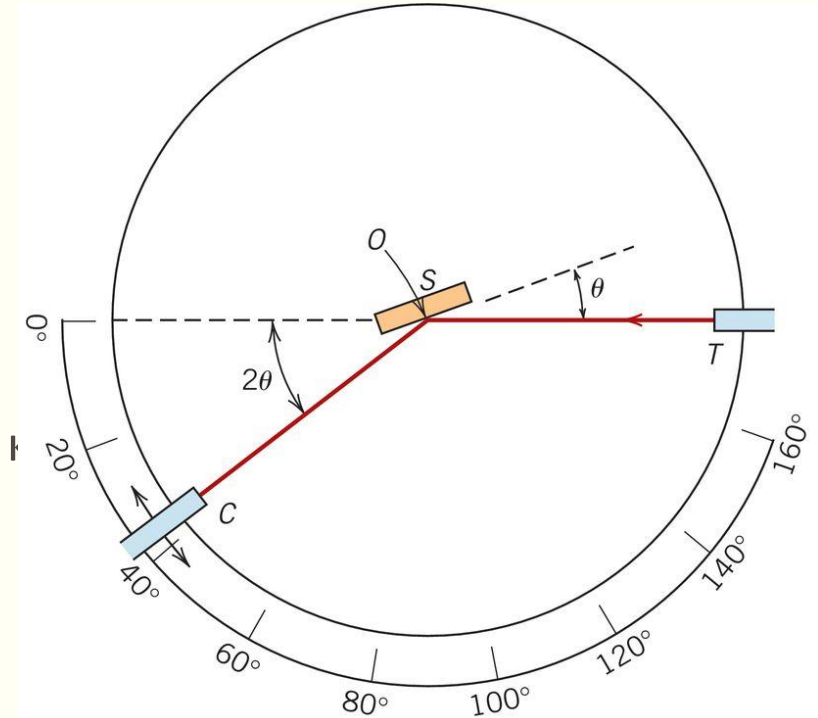
a το μήκος πλευράς της μοναδιαίας κυβικής κυψελίδας.

Περίθλαση ακτίνων X και ο νόμος του Bragg (συνέχεια)

Σχηματικό διάγραμμα περιθλασίμετρου ακτίνων X.

- T = η πηγή ακτίνων X
- S = το δείγμα (από το κρυσταλλικό υλικό)
- C = ο ανιχνευτής των σκεδαζόμενων ακτίνων X
- O = ο άξονας γύρω από τον οποίο περιστρέφονται πηγή και ανιχνευτής

Γωνία περίθλασης ονομάζεται η γωνία 2θ



Επιστήμη & Τεχνολογία Υλικών, 9η Έκδοση,
William D. Callister, Jr. · David G. Rethwisch

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1.18 Υπολογισμός απόστασης κρυσταλλογραφικών επιπέδων και γωνίας περίθλασης

Για σίδηρο BCC, υπολογίστε (α) την απόσταση επιπέδων και (β) τη γωνία περίθλασης για το σύνολο των επιπέδων (220). Η παράμετρος πλέγματος για το Fe είναι 0.2866 nm. Υποθέστε ότι χρησιμοποιείται μονοχρωματική ακτινοβολία μήκους κύματος 0.1790 nm και η τάξη ανάκλασης είναι 1.

ΑΠΑΝΤΗΣΗ

(α) Η απόσταση των επιπέδων (220), με $a = 0.2866$ nm, υπολογίζεται

$$d_{220} = \frac{a}{\sqrt{2^2 + 2^2 + 0^2}} = 0.1012 \text{ nm}$$

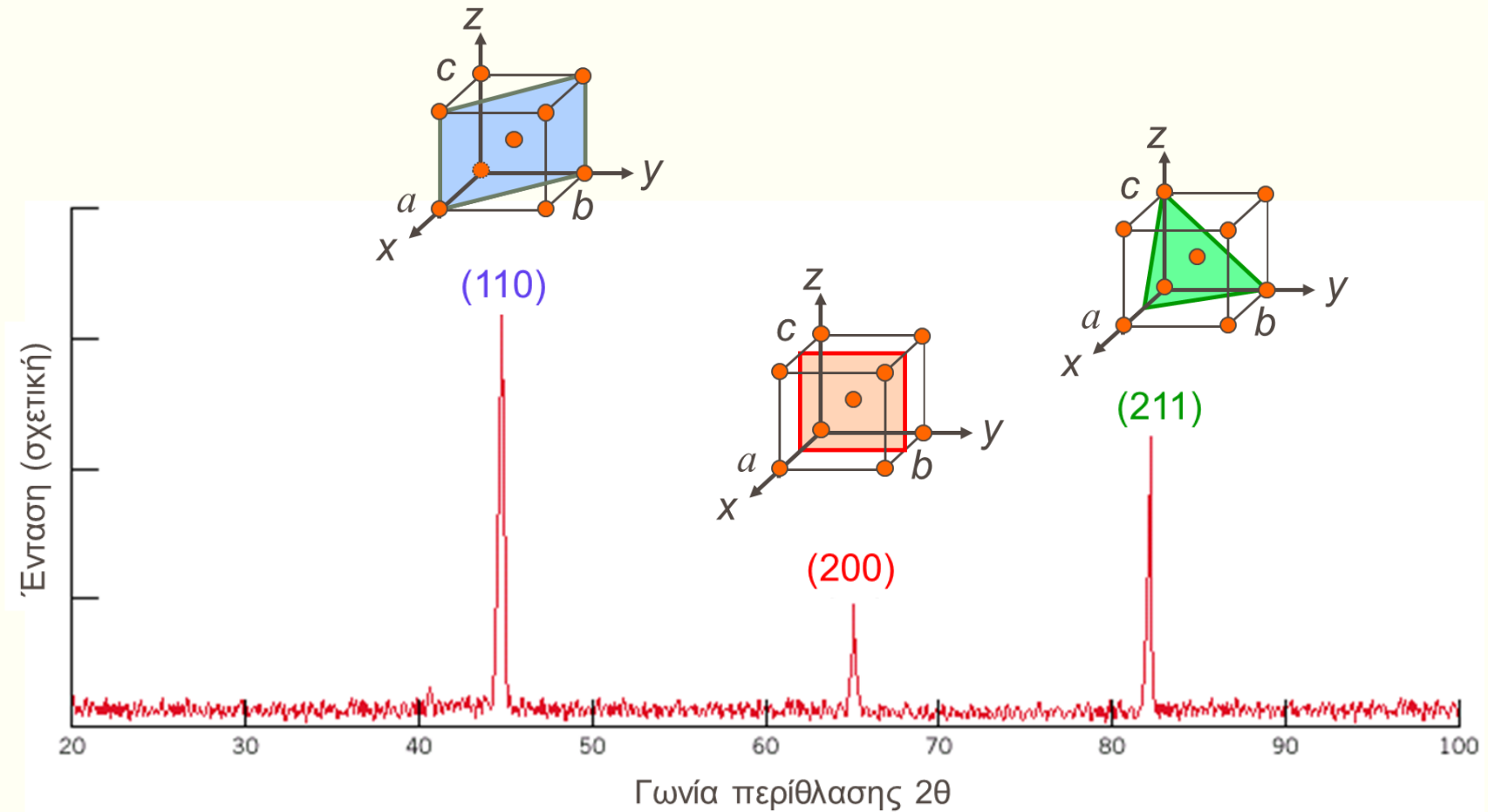
(β) Η τιμή της γωνίας περίθλασης ακτίνων-Χ με $\lambda = 0.1790$ nm, υπολογίζεται από το νόμο του Bragg θέτοντας $n = 1$.

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d_{220}} = \frac{0.1790}{(2)(0.1012)} = 0.884$$

$$\theta = \sin^{-1}(0.884) = 62.13^\circ$$

Η γωνία περίθλασης είναι $2\theta = (2)(62.13^\circ) = 124.26^\circ$

Φάσμα περίθλασης ακτινών X (X-ray diffraction pattern)



Φάσμα περίθλασης για πολυκρυσταλλικό α -σίδηρο (δομής BCC)

Αλλοτροπία

- **Πολυμορφισμός** (polymorphism) ή **αλλοτροπία** (allotropy): η ιδιότητα ορισμένων ουσιών να έχουν περισσότερες από μια κρυσταλλικές δομές

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

Ο σίδηρος Fe

- Για $\theta < 912^{\circ}\text{C}$, έχει δομή BCC, ονομάζεται $\alpha - Fe$
 - Για $912^{\circ}\text{C} < \theta < 1400^{\circ}\text{C}$, έχει δομή FCC, ονομάζεται $\gamma - Fe$
 - Για $\theta > 1400^{\circ}\text{C}$, έχει πάλι δομή BCC και ονομάζεται $\delta - Fe$
- Όλες οι αλλοτροπικές μορφές του Fe είναι μέταλλα
 - **Θερμοκρασία μετάβασης** (transition temperature) = η συγκεκριμένη θερμοκρασία στην οποία μια ουσία μετατρέπεται από μια αλλοτροπική μορφή σε άλλη. Για το σίδηρο είναι 912°C

Αλλοτροπία του άνθρακα

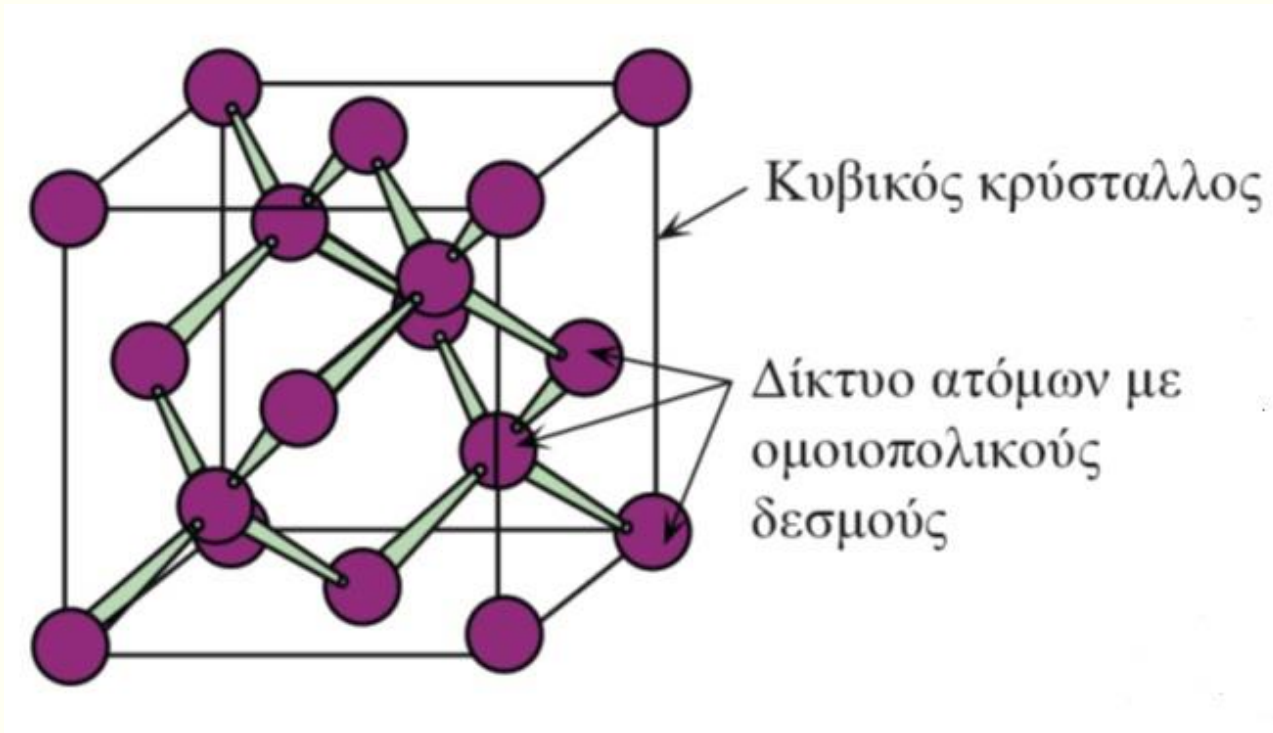
- Πολλές ουσίες έχουν αλλοτροπικές μορφές με πολύ διαφορετικές ιδιότητες
- Επιπλέον, για ορισμένες πολυμορφικές (= αλλοτροπικές) ουσίες η μετάβαση από τη μια αλλοτροπική μορφή στην άλλη δεν απαιτεί απλά αλλαγή θερμοκρασίας αλλά και εφαρμογή εξωτερικής πίεσης

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ

Ο άνθρακας C έχει τρεις σημαντικές κρυσταλλικές δομές

1. Γραφίτης: Σταθερός σε θερμοκρασία δωματίου, ηλεκτρικά αγωγίμος, πολύ μαλακός (λιπαντικές ιδιότητες)
2. Διαμάντι: Σταθερό σε υψηλές θερμοκρασίες ως 900°C , μονωτής, μέγιστη γνωστή σκληρότητα
3. Buckminsterfullerene (C_{60}): Σφαιρικής συμμετρίας μόρια 60 ατόμων C

Αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα - Διαμάντι



Covalently bonded network.
Diamond crystal structure.

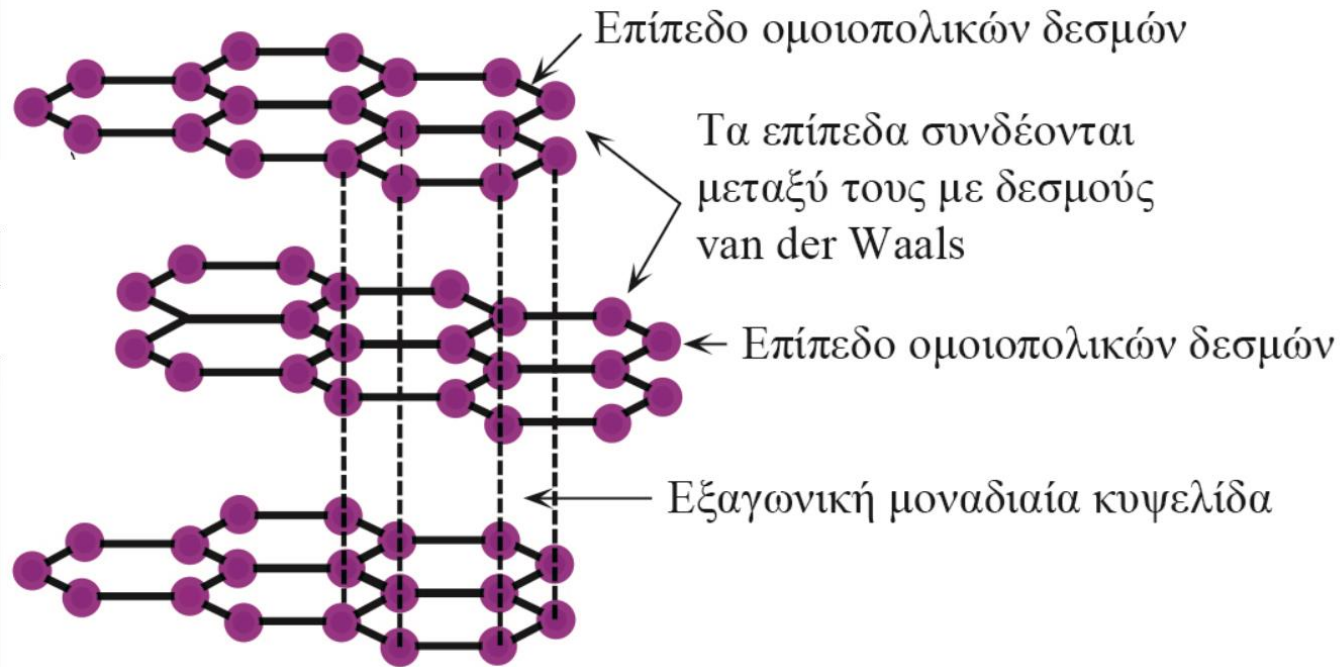
Very good electrical insulator. Excellent thermal conductor, about five times more than silver or copper.

The hardest material.
 $Y = 827 \text{ GPa}$
 $\rho = 3.25 \text{ g cm}^{-3}$

Cutting tool applications. Diamond anvils. Diamond film coated drills, blades, bearings, etc. Jewelry. Heat conductor for ICs. Possible thin-film semiconductor devices, as the charge carrier mobilities are large.

Συνέχεια ♦

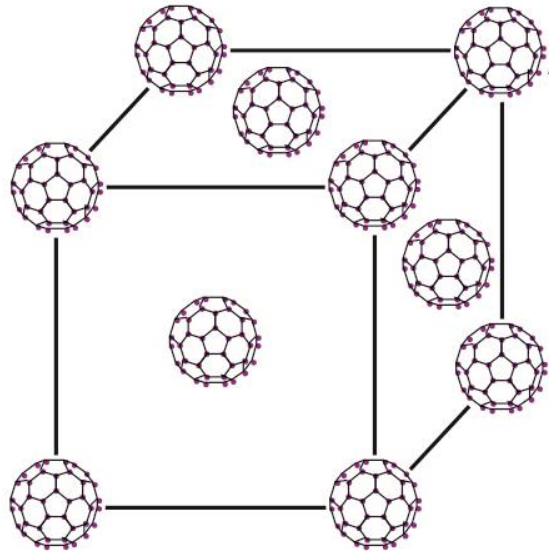
Αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα - Γραφίτης



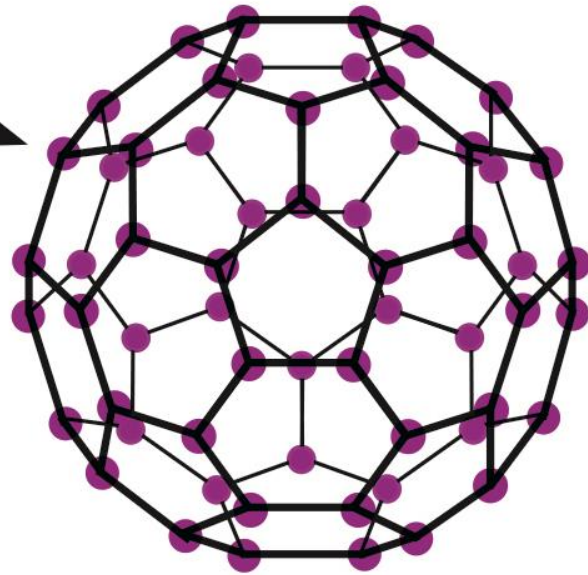
Structure	Covalent bonding within layers. Van der Waals bonding between layers. Hexagonal unit cell.
Electrical and thermal properties	Good electrical conductor. Thermal conductivity comparable to metals.
Mechanical properties	Lubricating agent. Machinable. Bulk graphite: $Y \approx 27 \text{ GPa}$ $\rho = 2.25 \text{ g cm}^{-3}$
Uses, potential uses	Metallurgical crucibles, welding electrodes, heating elements, electrical contacts, refractory applications.

Συνέχεια ♦

Αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα - Buckminsterfullerene:



Η μοναδιαία κυψελίδα FCC στον κρύσταλλο του μπακμινστερφυλερενίου. Σε κάθε σημείο του πλέγματος υπάρχει ένα μόριο C_{60} .



Το μόριο του μπακμινστερφυλερενίου (C_{60}), γνωστό και ως "μπακυμπάλα".

Covalently bonded C_{60} spheroidal molecules held in an FCC crystal structure by van der Waals bonding.

Semiconductor. Compounds with alkali metals (e.g., K_3C_{60}) exhibit superconductivity.

Mechanically soft.

$$Y \approx 18 \text{ GPa}$$

$$\rho = 1.65 \text{ g cm}^{-3}$$

Τέλος παρουσίασης