ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΑΝΟΙΚΤΑ ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ

Φυσική Στερεάς Κατάστασης

Κρυσταλλική δομή

Διδάσκων: Καθηγητής Γεώργιος Α. Ευαγγελάκης

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Άδειες Χρήσης

Κρυσταλλική δομή

A. Πλέγμα, Βάση, μοναδιαία κυψελίδα.

B. Συνήθεις Κρυσταλλικές Δομές.

C. Δείκτες Miller για κρυσταλλικές διευθύνσεις και κρυσταλλικά επίπεδα.

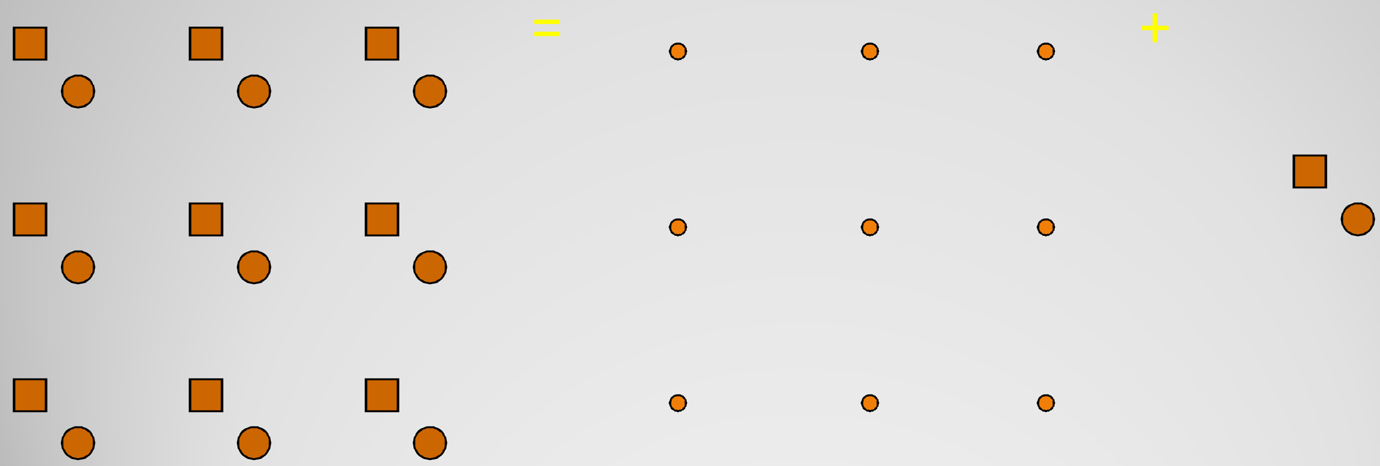
D. Το αντίστροφο πλέγμα.

Α. Πλέγμα, Βάση, μοναδιαία κυψελίδα

Ένα ιδανικό κρυσταλλικό στερεό είναι μία επ'άπειρο επανάληψη μιας δομικής μονάδας στο χώρο. Αυτή η δομική μονάδα μπορεί να είναι ένα άτομο ή μια ομάδα ατόμων.

<u>Κεντρική ιδέα</u>:

Κρυσταλλική δομή = πλέγμα + βάση



<u>πλέγμα</u>: μία περιοδική διάταξη σημείων στο χώρο. Κάθε σημείο του πλέγματος έχει <u>πανομοιότυπο</u> γειτονικό περιβάλλον.

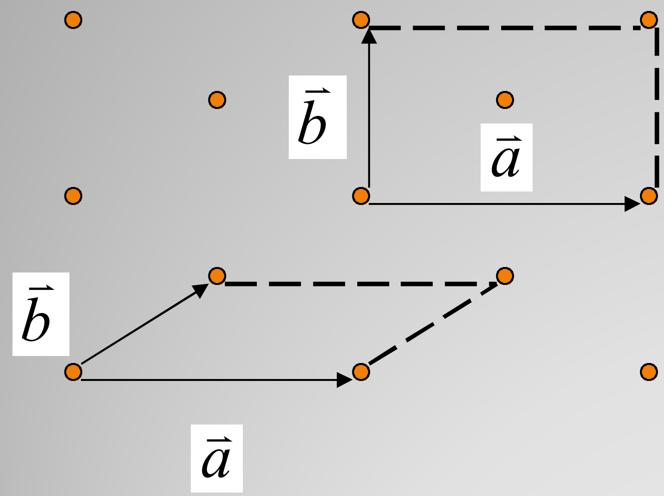
<u>βάση</u>: το άτομο ή η ομάδα ατόμων που «*προσκολλάται*» σε κάθε πλεγματικό σημείο προκειμένου να δημιουργηθεί η κρυσταλλική δομή.

Η μεταθετική συμμετρία ενός πλέγματος δίδεται από τα **<u>διανύσματα βάσης</u>** $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ Συνήθως αυτά επιλέγονται έτσι ώστε είτε :

1. Να είναι τα μικρότερα δυνατά κατά μέτρο, ή
2. Να αντιστοιχούν σε μία υψηλής συμμετρίας μοναδιαία κυψελίδα.

Παράδειγμα : ένα 2-D πλέγμα

Δύο διαφορετικά διανύσματα βάσης μιας <u>μοναδιαίας κυψελίδας</u>:



<u>**Μοναδιαία** κυψελίδα</u>: μεγαλύτερη από τη <u>θεμελιώδη</u> κυψελίδα. Επιλέγεται μέσω της υψηλής συμμετρίας της μοναδιαίας.

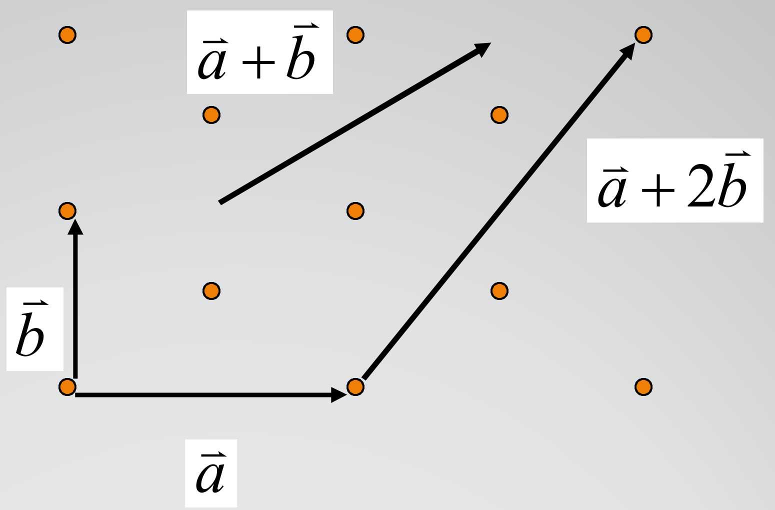
<u>**Θεμελιώδης** κυψελίδα</u>: έχει τον **ελάχιστο** όγκο και περιέχει ΜΟΝΟ **ένα** πλεγματικό σημείο.

Ένα <u>μεταθετικό διάνυσμα</u> συνδέει δύο πλεγματικά σημεία που έχουν την ίδια συμμετρία :

$$\vec{r} = n_1\vec{a} + n_2\,\vec{b} + n_3\vec{c}$$

$n_1\ n_2\ n_3$ ακέραιοι

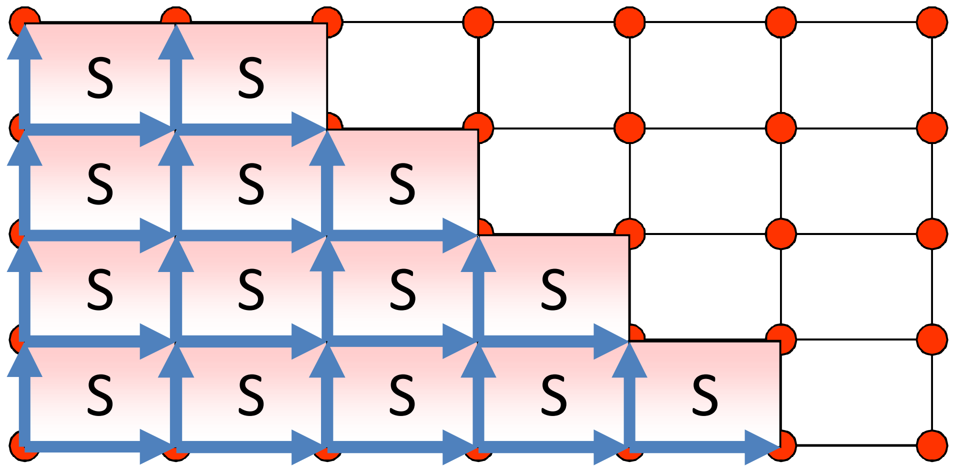
Στο 2-D πλέγμα:

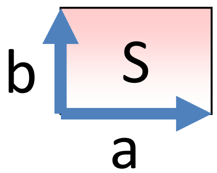


Μοναδιαία κυψελίδα σε 2D

- Το μικρότερο δομικό συστατικό ενός κρυστάλλου (αποτελούμενο από ομάδα ατόμων ή μορίων)που όταν τοποθετηθούν μαζί μπορούν με απλές επαναληπτικές μεταθέσεις να αναπαράγουν όλο το κρύσταλλο.

2D-κρύσταλλος

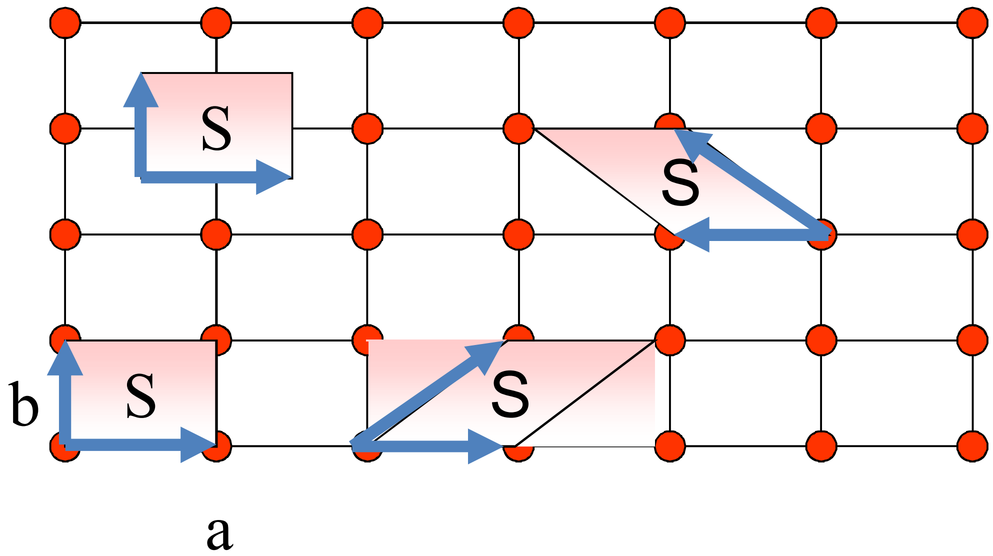




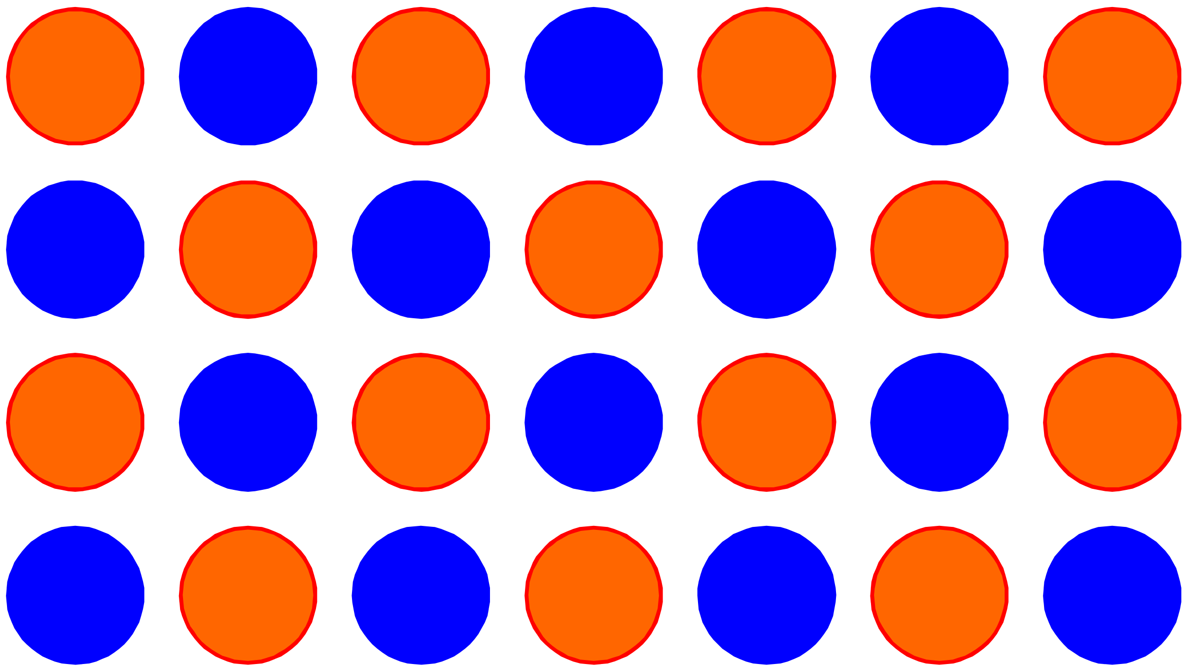
Μοναδιαία κυψελίδα

Μοναδιαία κυψελίδα σε 2D

Η επιλογή της μοναδιαίας δεν είναι μοναδική

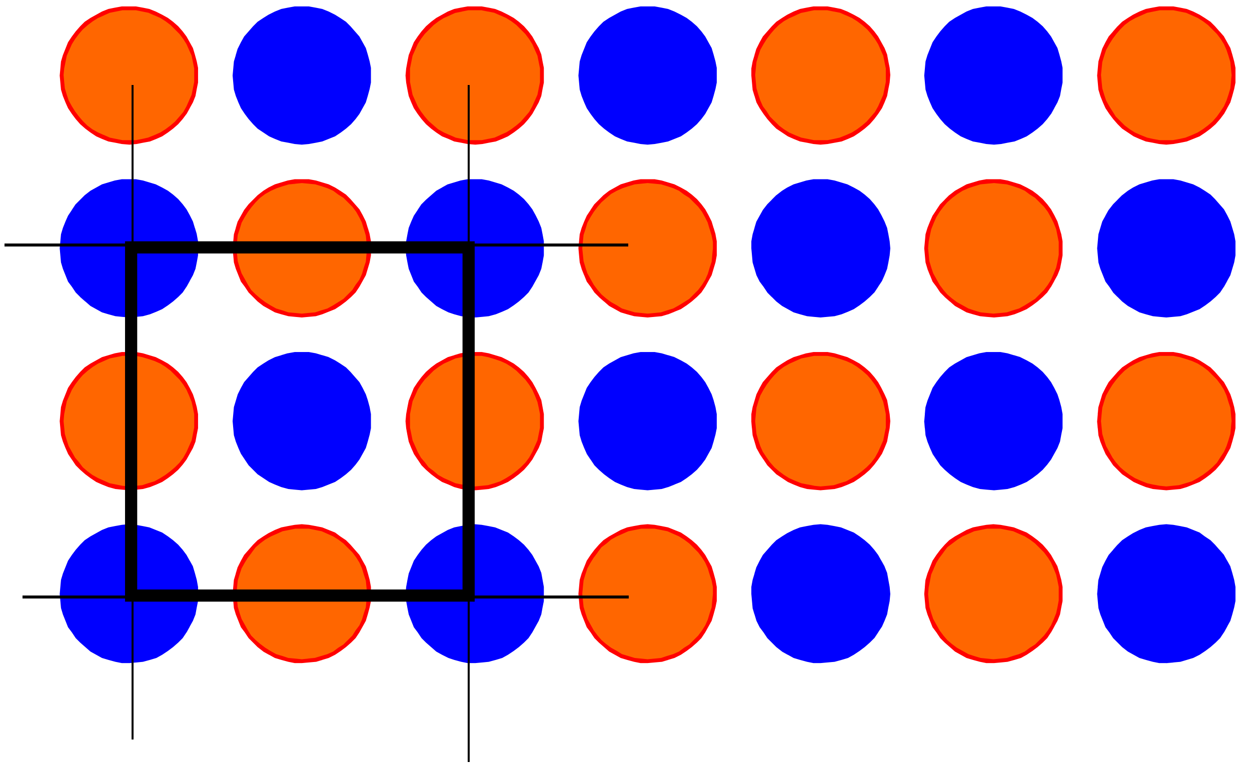


2D κυψελίδα παράδειγμα- (NaCl)

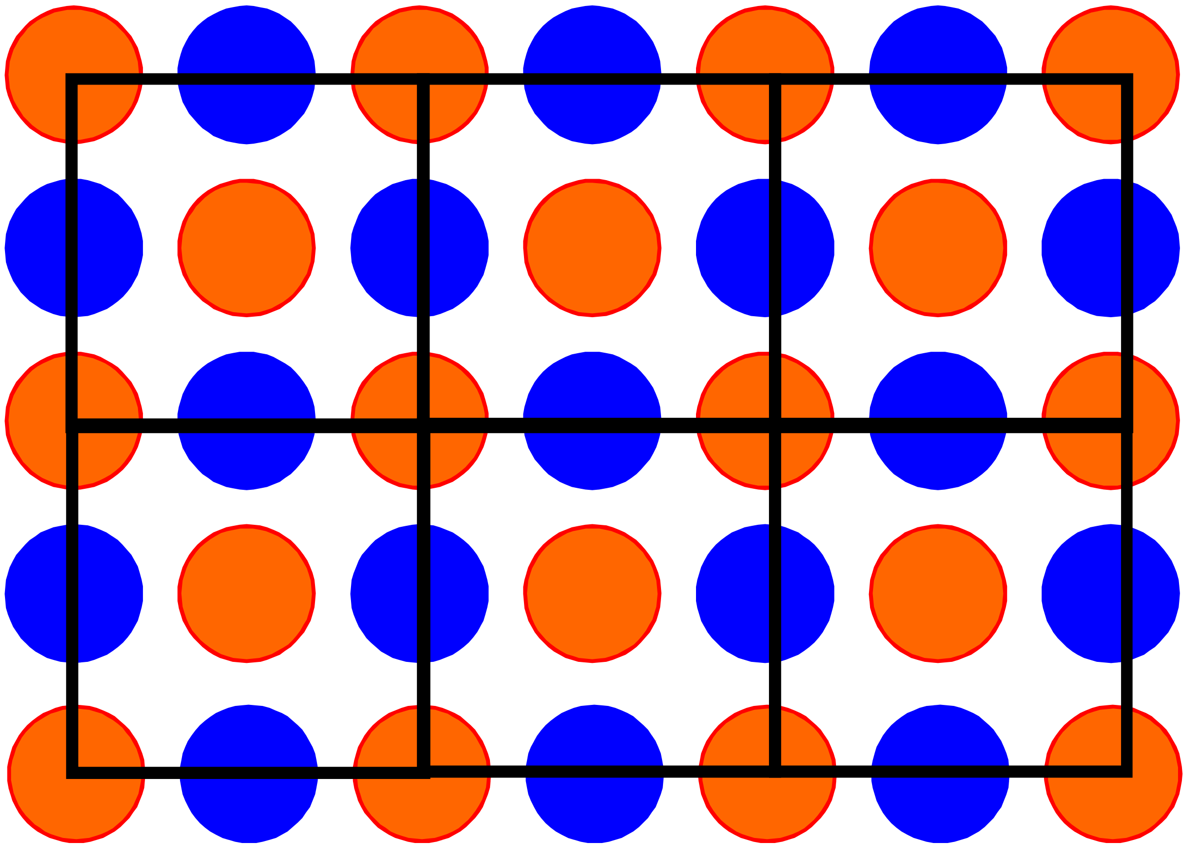


Ορίζουμε πλεγματικά σημεία. Είναι σημεία με ταυτόσημα περιβάλλον.

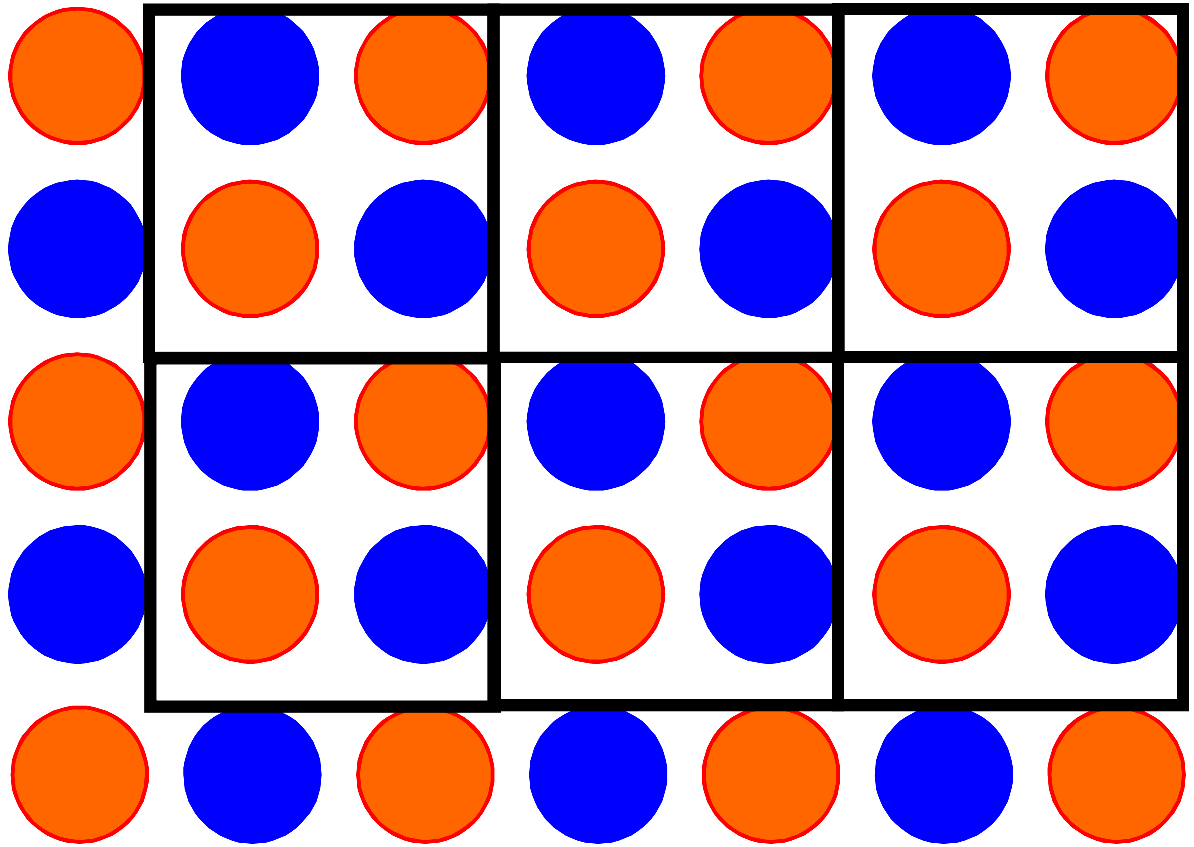
Η επιλογή της αρχής είναι αυθαίρετη- τα πλεγματικά σημεία δεν είναι αναγκαστικά στα άτομα, αλλά το μέγεθος της μοναδιαίας πρέπει να είναι το ίδιο.



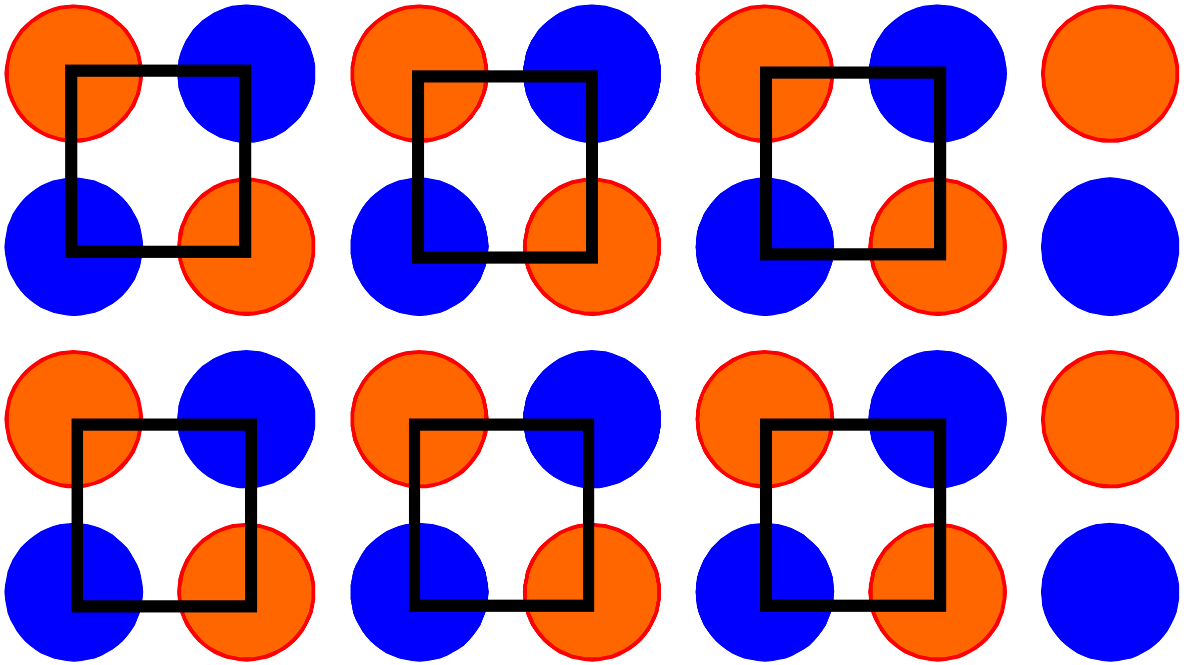
Και αυτή είναι μοναδιαία -
δεν έχει σημασία αν αρχίζουμε από Na ή Cl



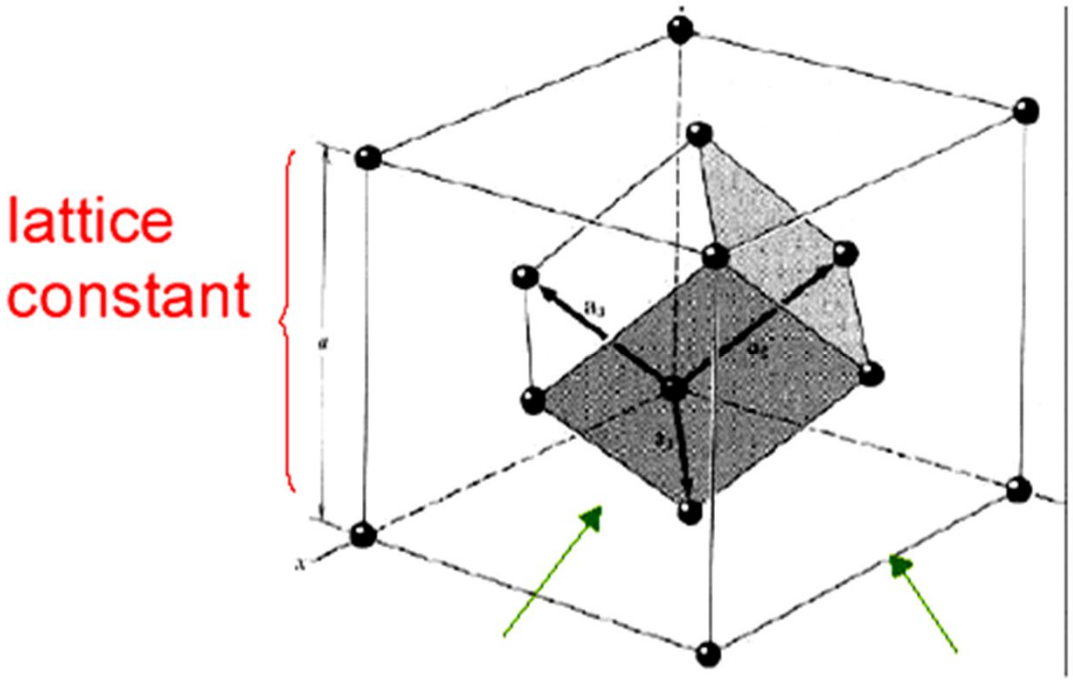
-Ή ακόμα και όχι από κάποιο άτομο



Αυτή <u>ΔΕΝ είναι μοναδιαία!</u> Δεν επιτρέπεται να υπάρχει κενός χώρος



Θεμελιώδης και μοναδιαία κυψελίδα του έδρο-κεντρωμένου κυβικού (FCC)



Διανύσματα βάσης

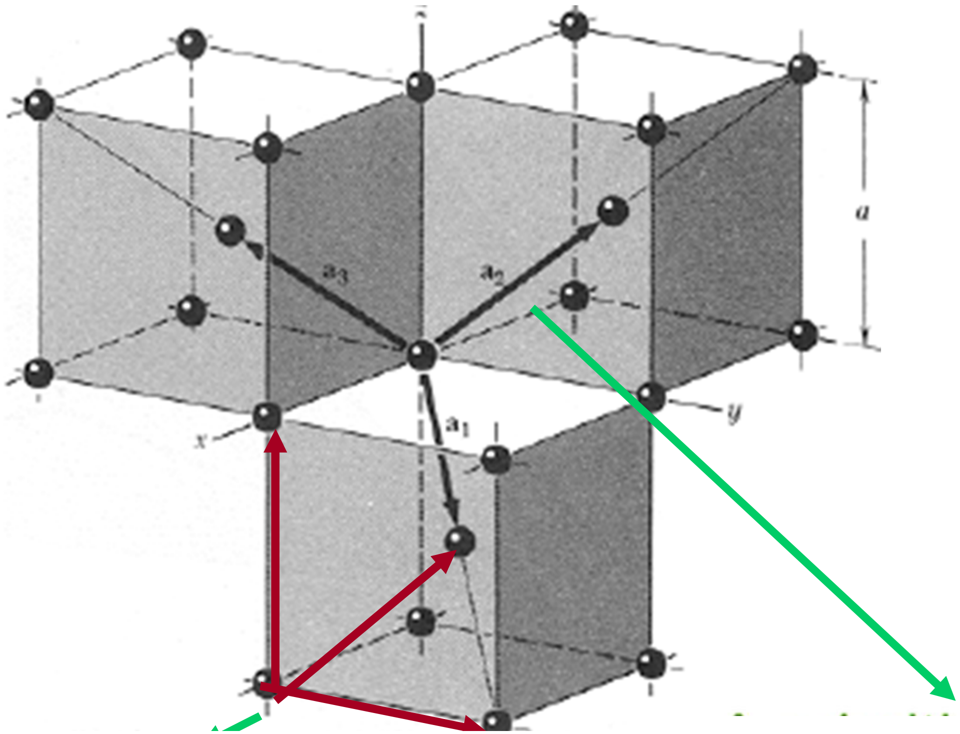
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}),$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}),$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x}).$$

Θεμελιώδης κυψελίδα Μία μοναδιαία κυψελίδα

Θεμελιώδης και μοναδιαία κυψελίδα του χώρο-κεντρωμένου κυβικού BCC



Διανύσματα βάσης:

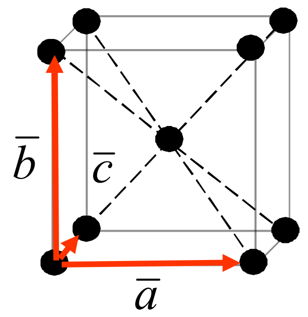
$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

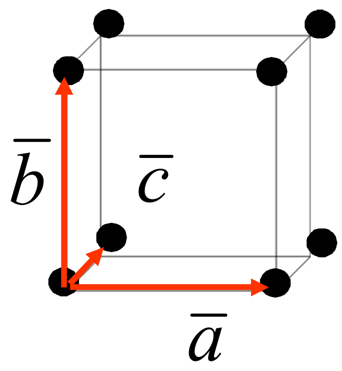
Μία μοναδιαία κυψελί Θεμελιώδης κυψελίδα

Θεμελιώδεις και μοναδιαίες κυψελίδες



(bcc): μοναδιαία [1]θεμελιώδη

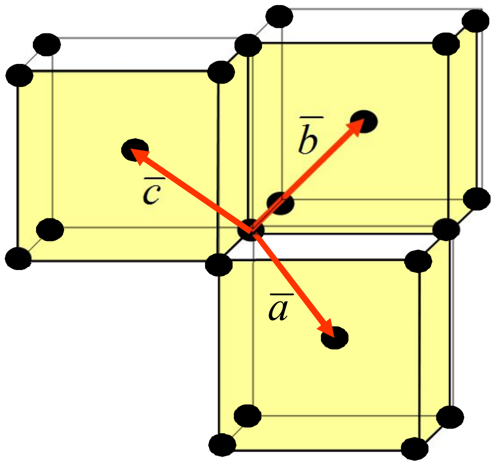
Συντεταγμένες πλεγματικών σημείων στη μοναδιαία:
000,100, 010, 001, 110,101, 011, 111, ½ ½ ½.



(sc):
θεμελιώδη=μοναδιαία

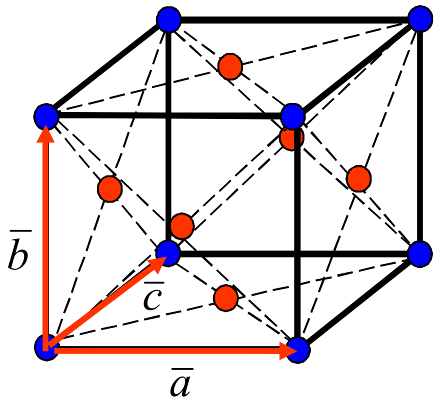
Συντεταγμένες πλεγματικών σημείων:
000, 100, 010, 001, 110,101, 011, 111.

Θεμελιώδης και μοναδιαία



(bcc):
Θεμελιώδης (ρομβόεδρο) ^{1}μοναδιαία.

Κανονικοποιημένες συντεταγμένες:
000, 100, 101, 110, 110,101,
011, 211, 200.

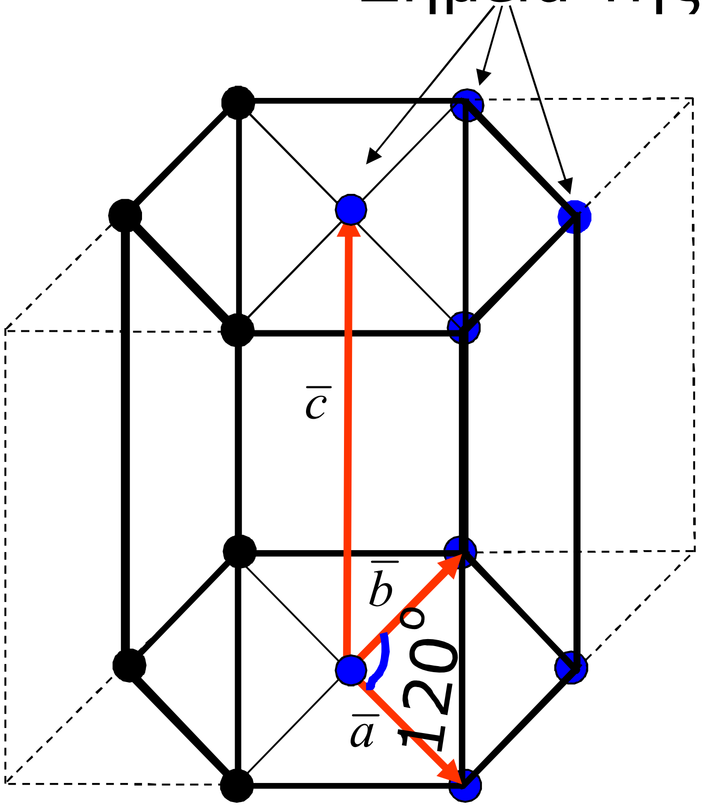


(fcc):
Μοναδιαία ^{1} Θεμελιώδης

Συντεταγμένες :
000,100, 010, 001, 110,101,
011,111, ½ ½ 0, ½ 0 ½, 0 ½
½ ,½1 ½ , 1 ½ ½ , ½ ½ 1.

hcp

Σημεία της θεμελιώδους κυψελίδας



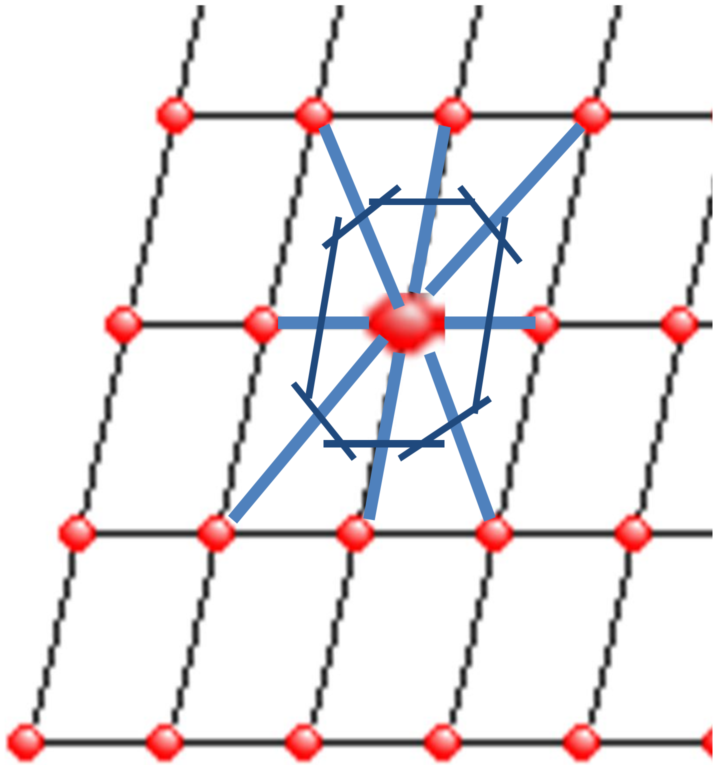
(hcp): μοναδιαία=θεμελιώδης.

συντεταγμένες :
100, 010, 110, 101,011,
111,000, 001.

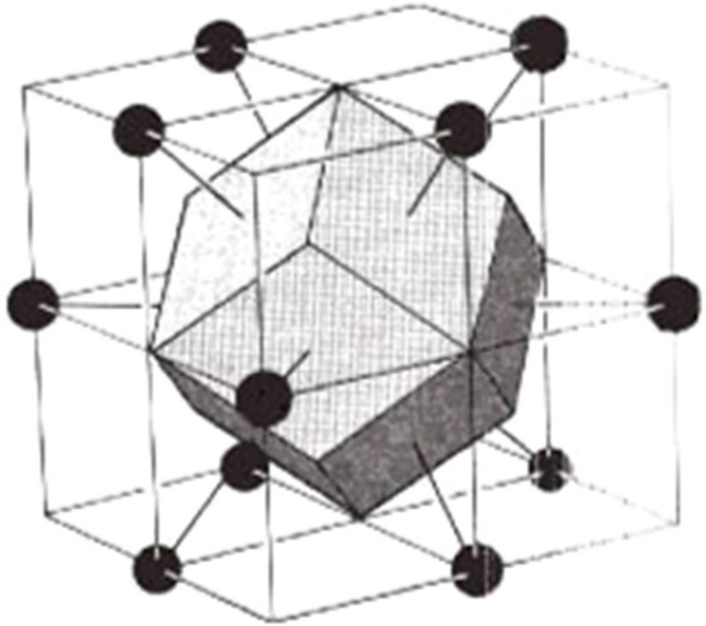
Wigner-Seitz

1. Διαλέγουμε ένα πλεγματικό σημείο.
2. Ενώνουμε με γραμμές αυτό το σημείο με τα γειτονικά του.
3. Φέρνουμε μεσοκαθέτους.

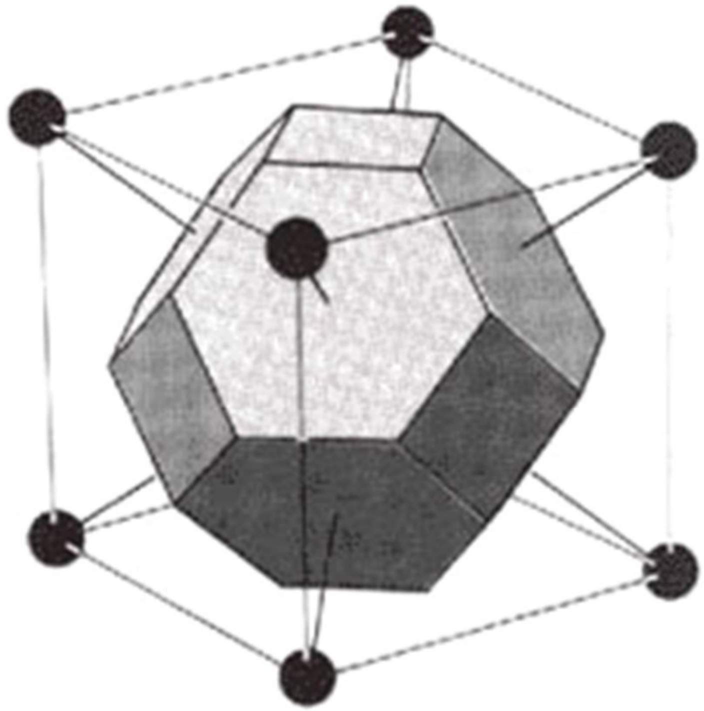
Ο όγκος που εσωκλείεται λέγεται Wigner-Seitz κυψελίδα.



Wigner-Seitz - 3D

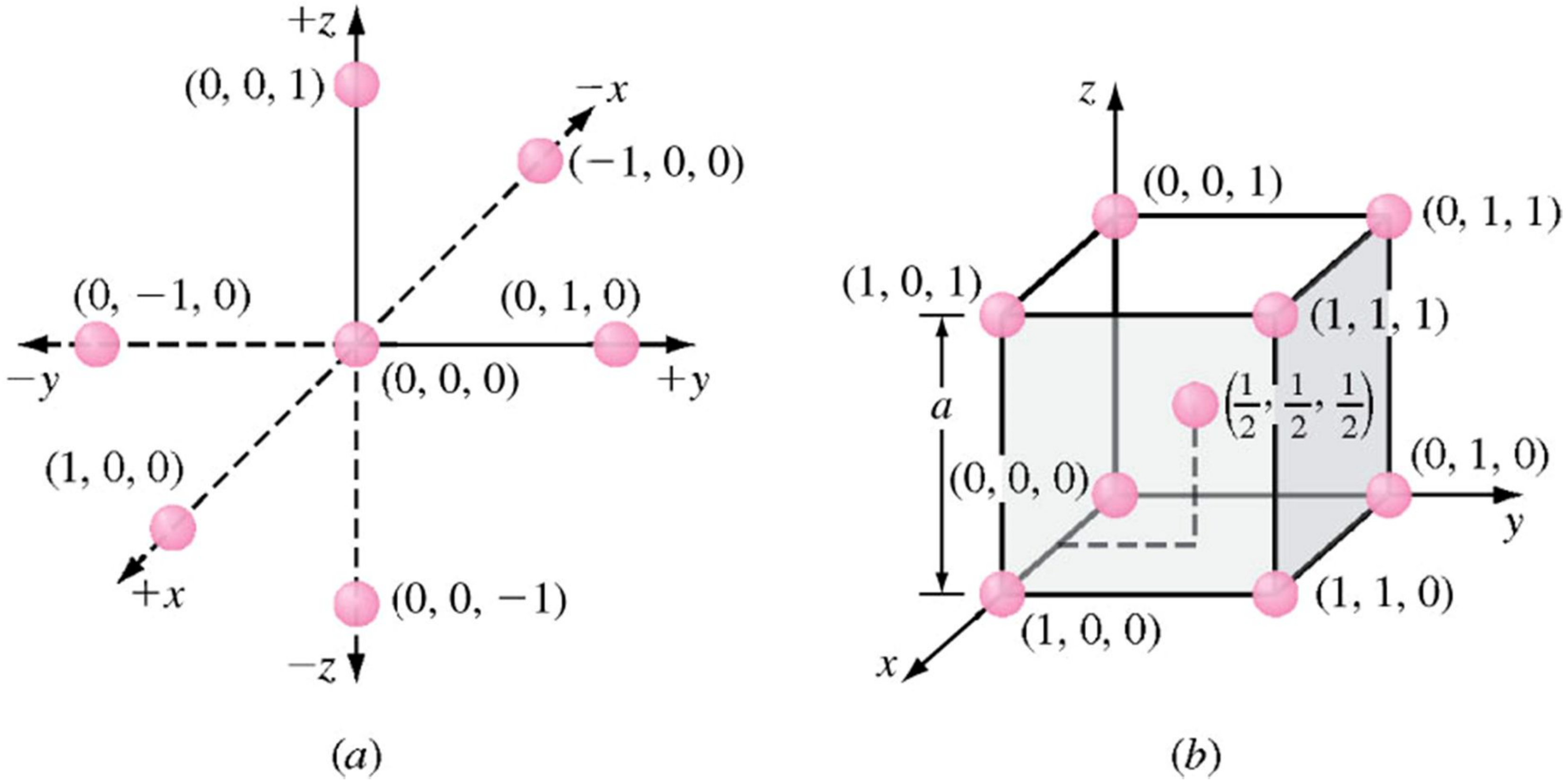


f.c.c Wigner-Seitz cell



b.c.c Wigner-Seitz cell

Πλεγματικές θέσεις μια κυβικής μοναδιαίας κυψελίδας

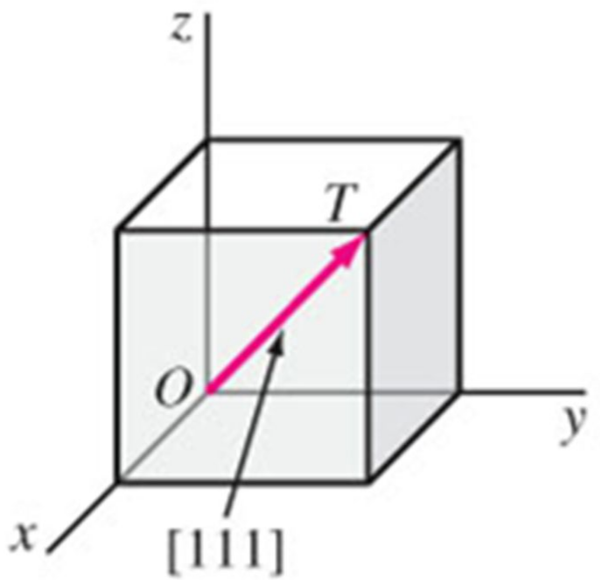


Κρυσταλλικές διευθύνσεις

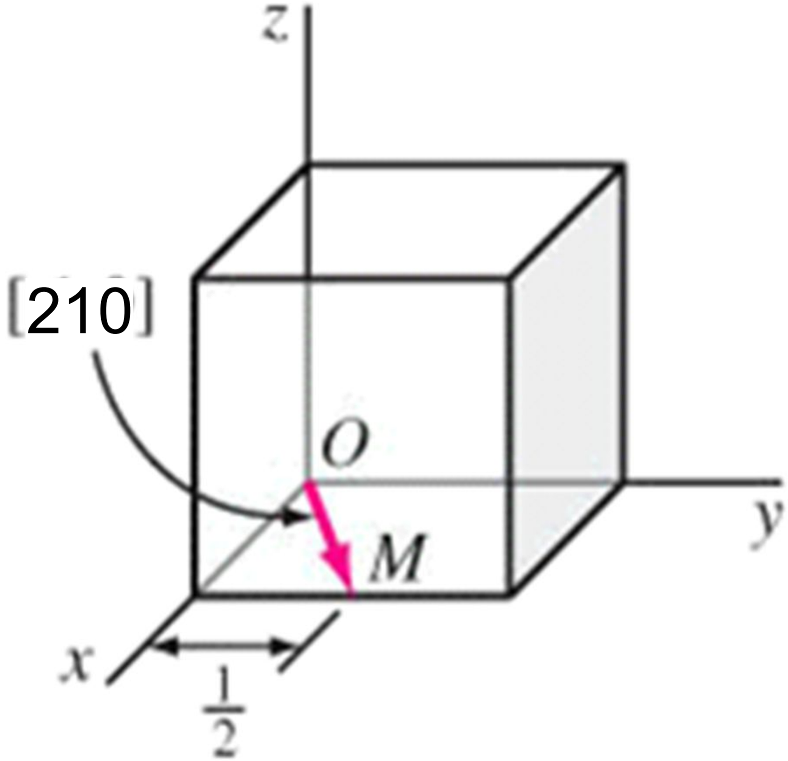
- **Διαλέγουμε αυθαίρετα ένα πλεγματικό σημείο σαν αρχή, Ο.**
- **Διαλέγουμε ένα διάνυσμα που ενώνει το Ο με κάποιο σημείο μιας γραμμής, π.χ. Τ. Ταυτό το διάνυσμα γράφεται**

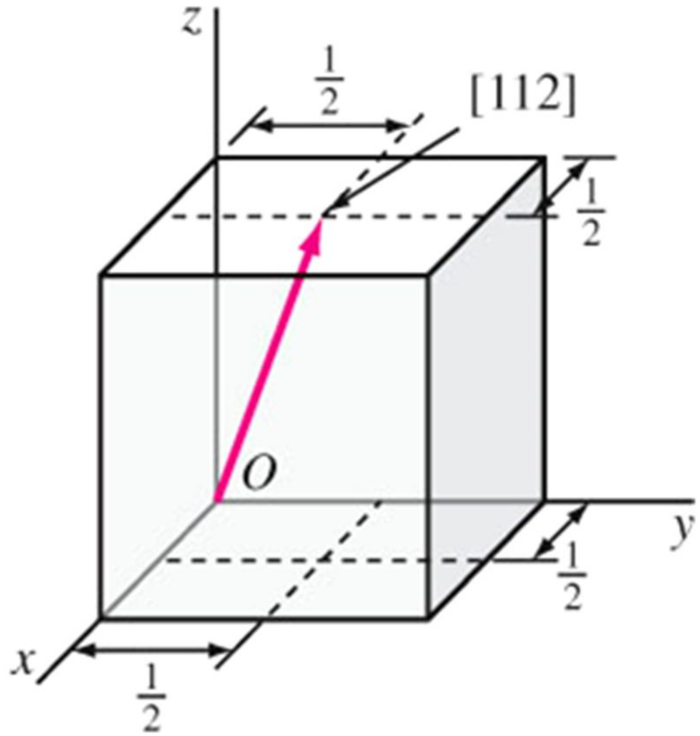
$$\mathbf{R = n_1\ a + n_2\ b + n_3 c}$$

- **Αγκύλες [...] δηλώνουν διεύθυνση**
- **$[n_1 n_2 n_3]$ είναι οι μικρότεροι ακέραιοι.**



παραδείγματα





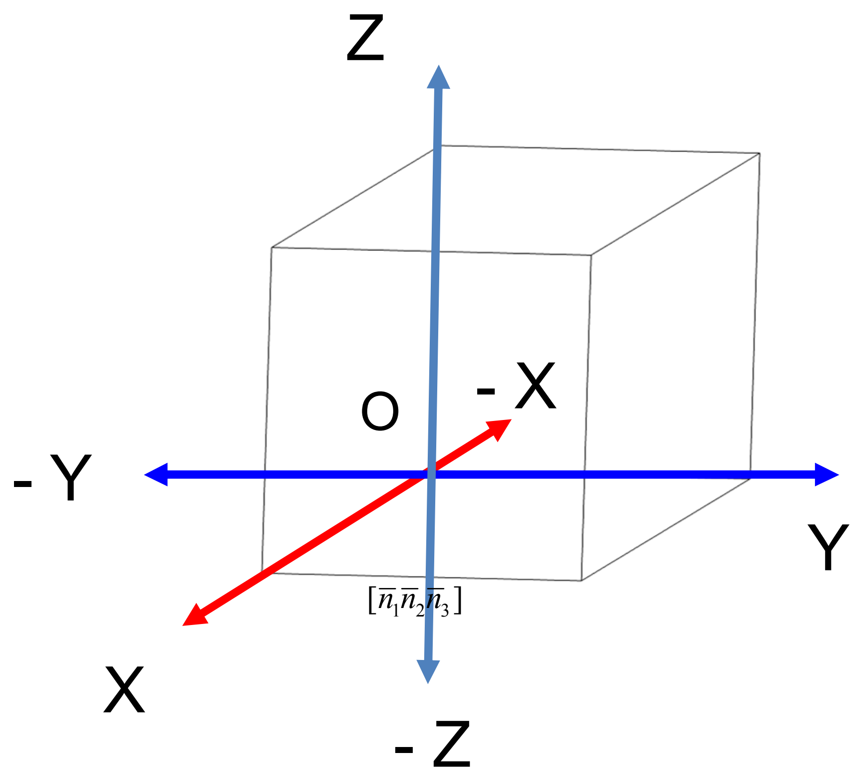
X = 1 , Y = ½ , Z = 0
[1 ½ 0] ⇒ [2 1 0]

X = ½ , Y = ½ , Z = 1
[½ ½ 1] ⇒ [1 1 2]

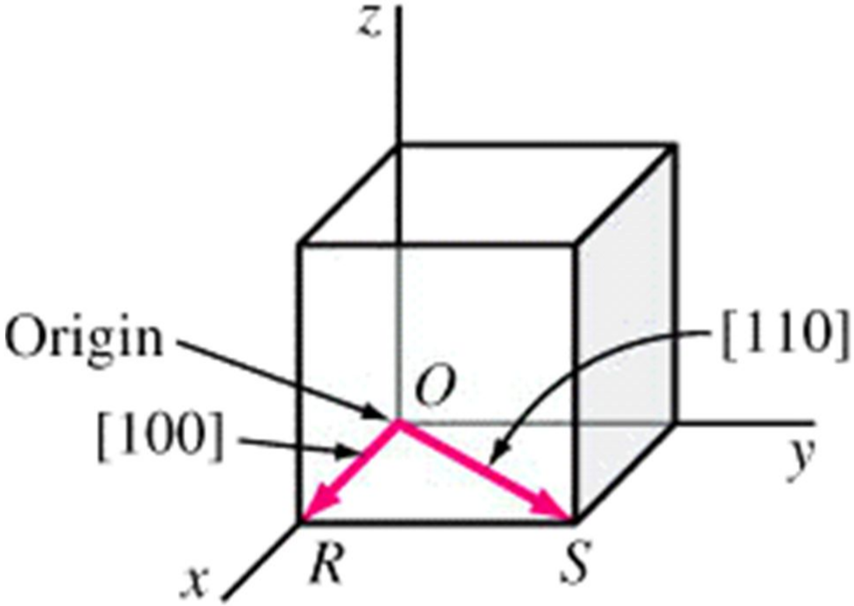
Αρνητικές διευθύνσεις

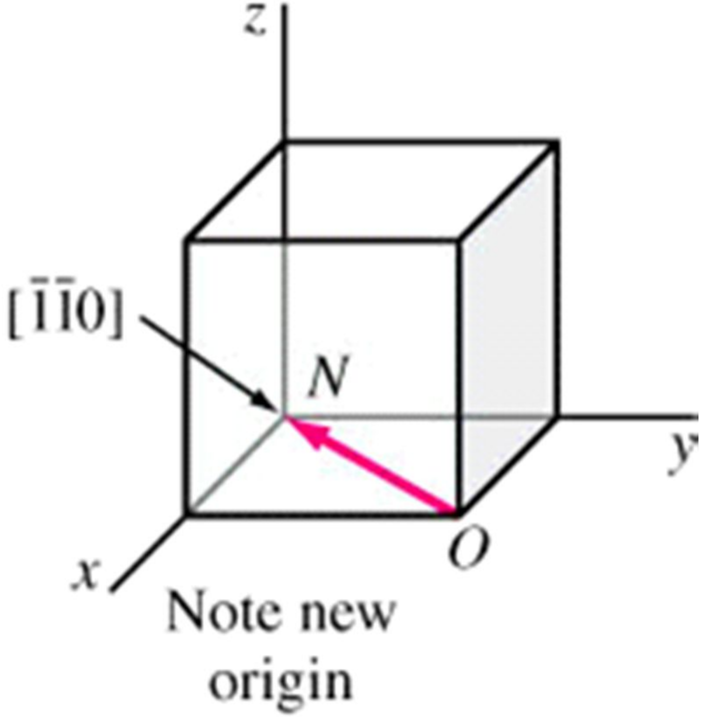
$[\overline{n}_1\overline{n}_2\overline{n}_3]$

- $R = n_1 a + n_2 b + n_3 c$



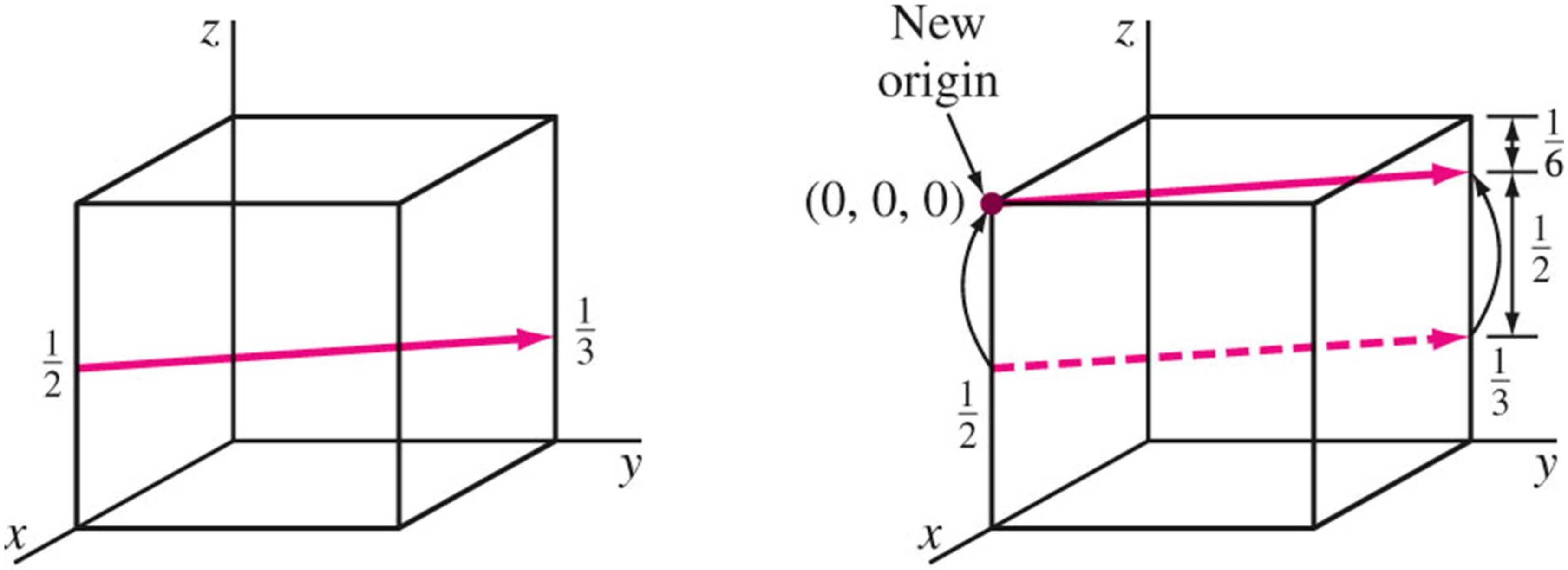
Παραδείγματα διευθύνσεων





X = 1 , Y = 0 , Z = 0 [1 0 0]

X = -1 , Y = -1 , Z = $\overline{0}$ [110]



(a) (b)

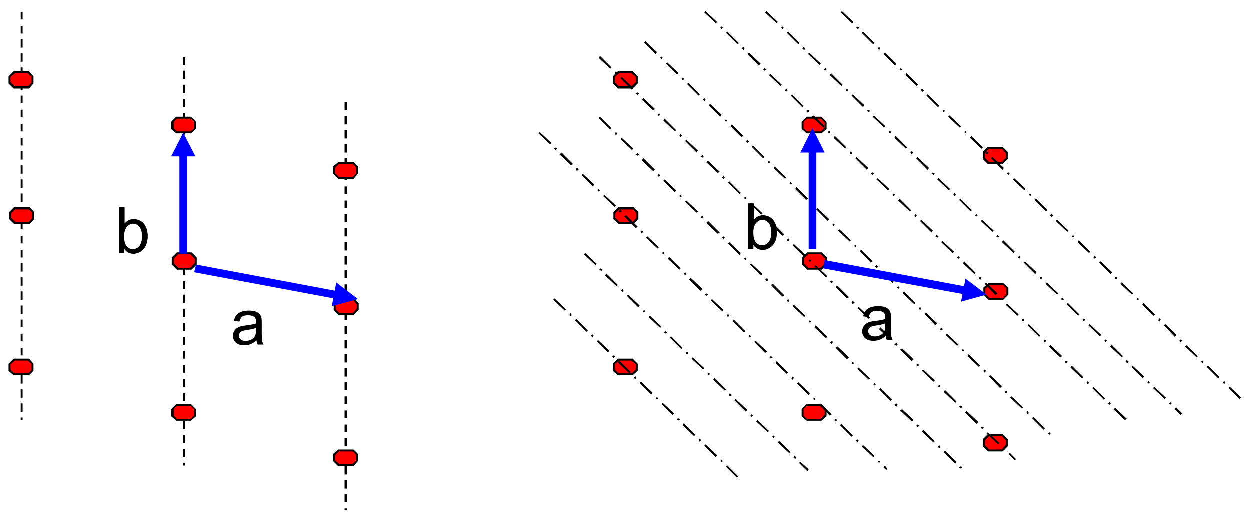
Μπορούμε να μετακινήσουμε το διάνυσμα στην αρχή.

X =-1 , Y = 1 , Z = -1/6

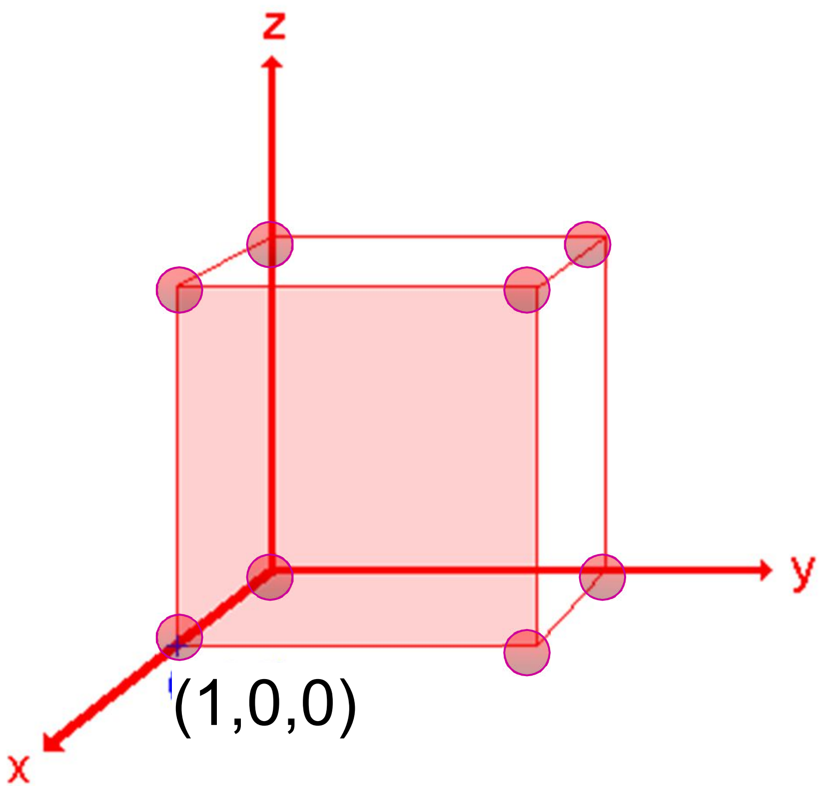
[-1 1 -1/6] ⇒ [6 6 1]

Κρυσταλλικά επίπεδα

Σύνολο επιπέδων
σε 2D πλέγμα.

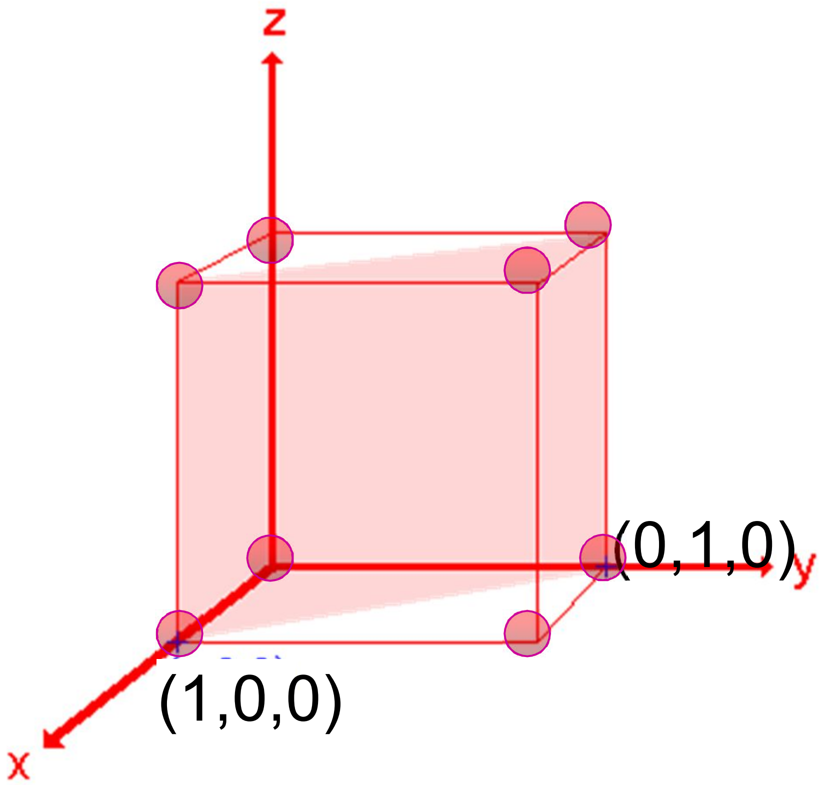


Δείκτες Miller



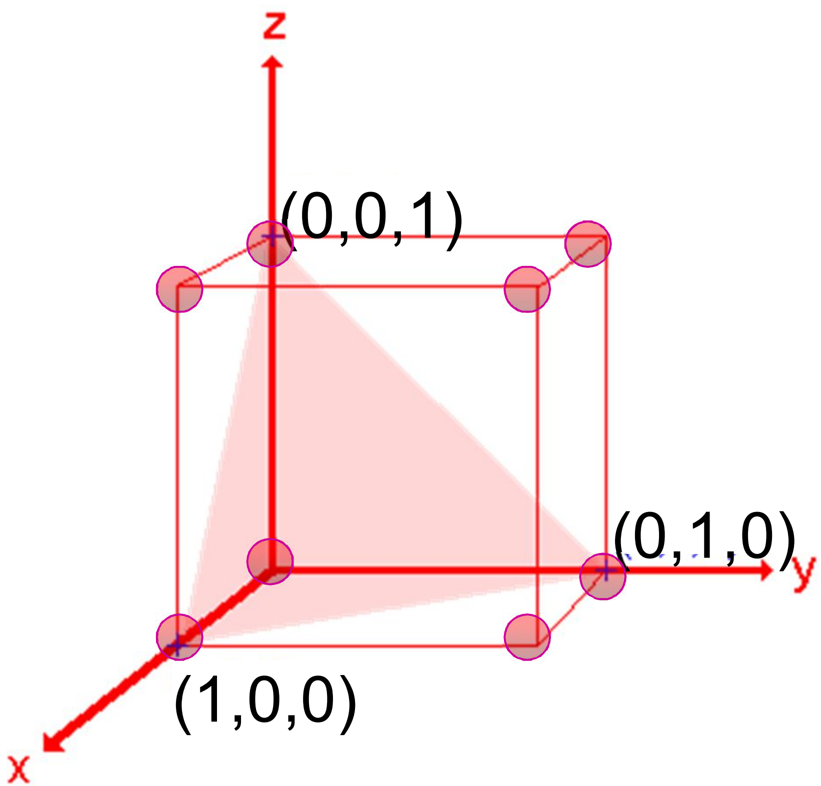
άξονας	X	Y	Z
Σημεία τομής	1	∞	∞
αντίστροφο	1/1	$1/\infty$	$1/\infty$
Μικρότερος λόγος	1	0	0
Δείκτες Miller (100)			

Παράδειγμα 2



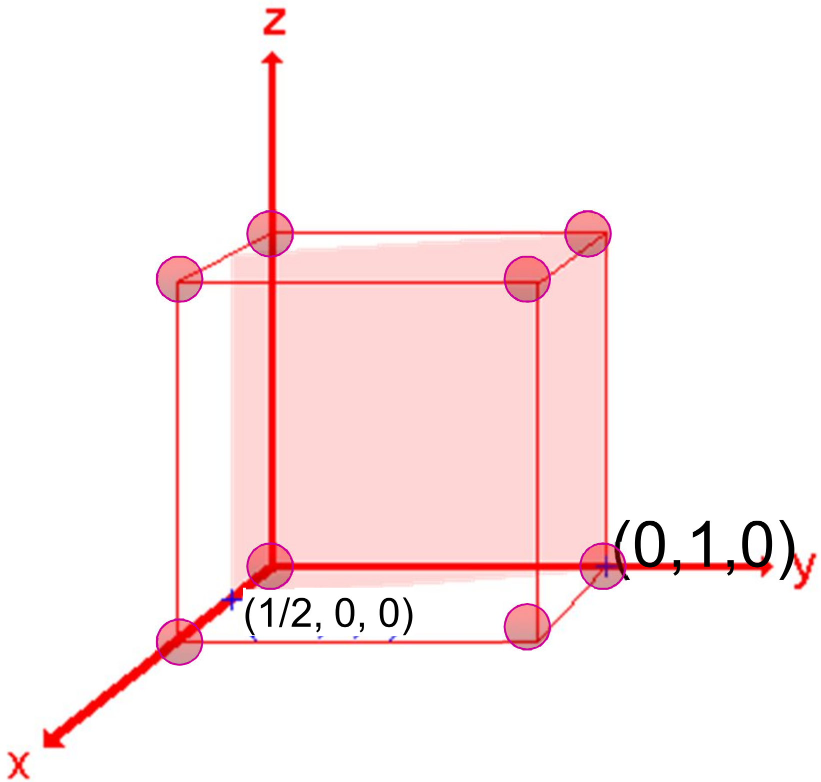
άξονες	X	Y	Z
Σημεία τομής	1	1	∞
αντίστροφα	1/1	1/ 1	1/ ∞
Μικρότερος λόγος	1	1	0
Δείκτες Miller (110)			

Παράδειγμα 3



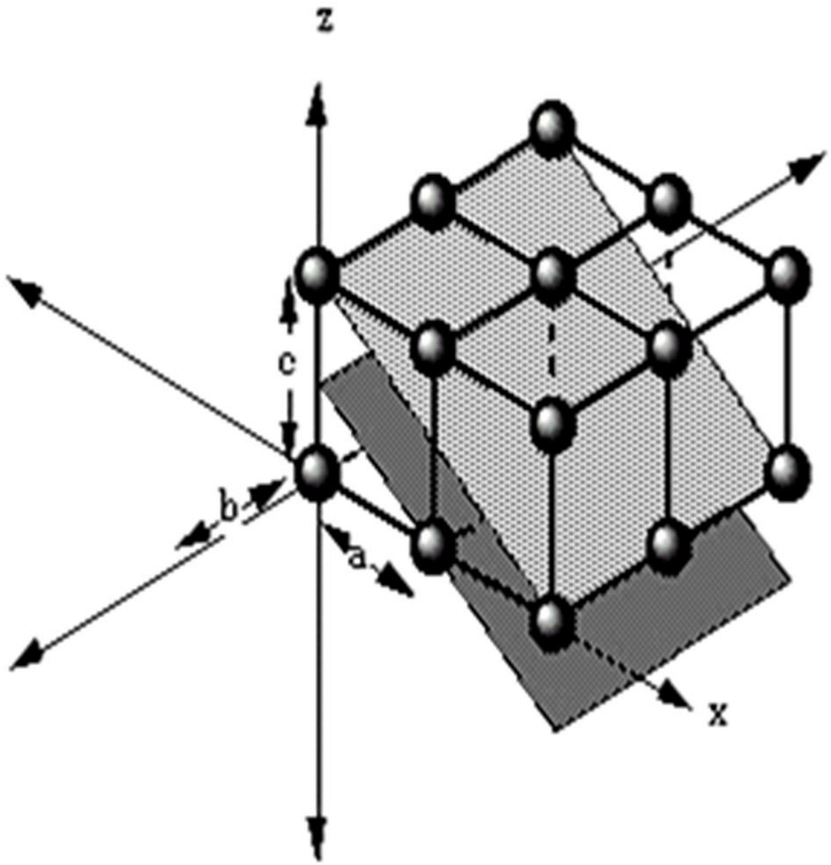
άξονες	X	Y	Z
Σημεία τομής	1	1	1
αντίστροφα	1/1	1/ 1	1/ 1
Μικρότερος λόγος	1	1	1
Δείκτες Miller (111)			

Παράδειγμα 4



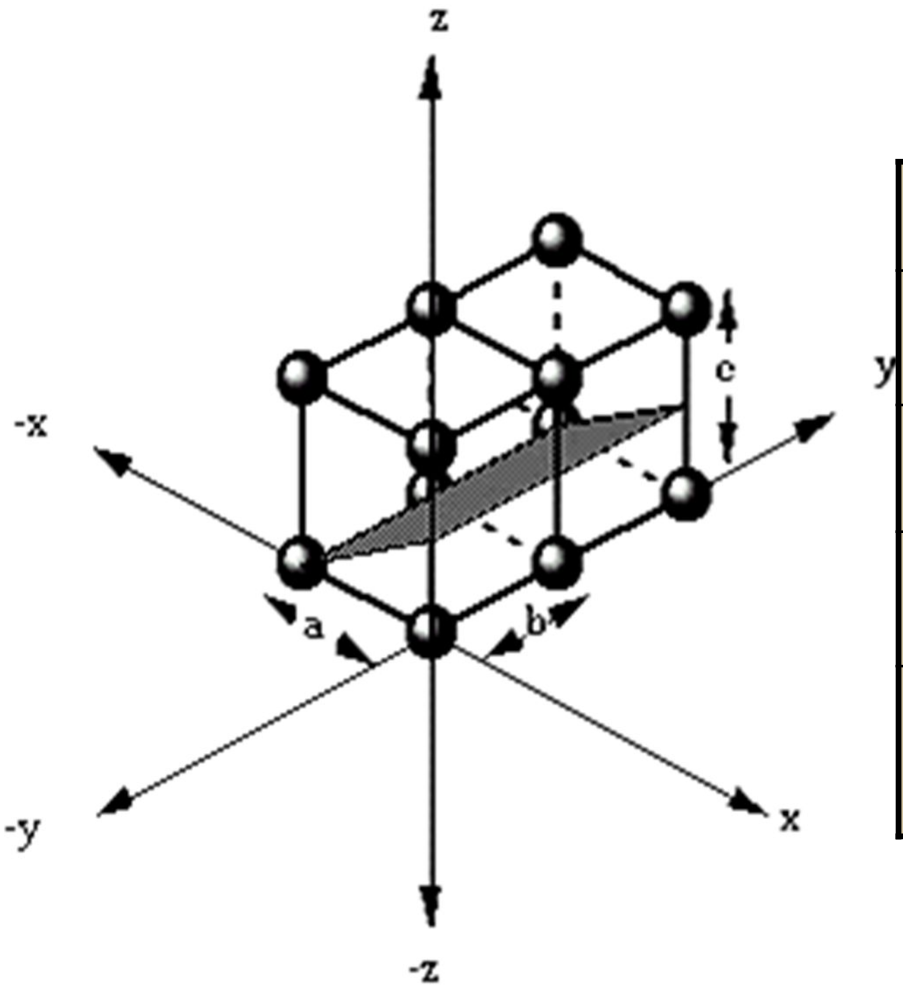
άξονες	x	y	z
Σημεία τομής	1/2	1	∞
αντίστροφα	1/(½)	1/ 1	1/ ∞
Μικρότερος λόγος	2	1	0
Δείτες Miller (210)			

Παράδειγμα 5



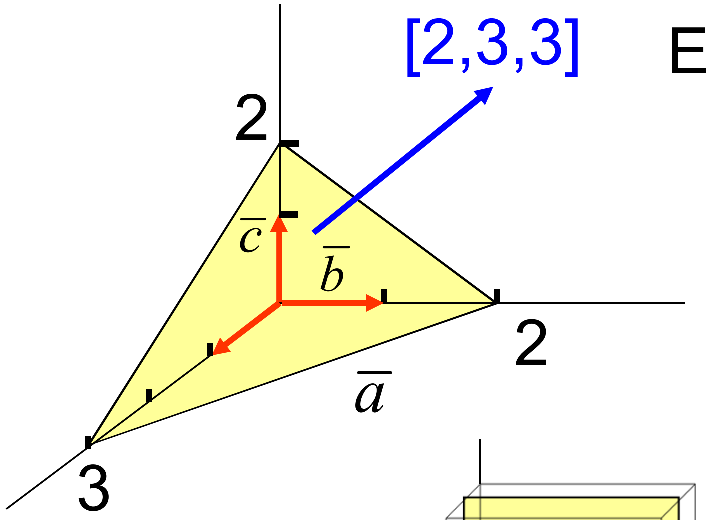
άξονες	a	b	c
Σημεία τομής	1	∞	½
αντίστροφα	1/1	1/ ∞	1/(½)
Μικρότερος λόγος	1	0	2
Δείκτες Miller (102)			

Παράδειγμα 6



άξονες	a	b	c
Σημεία τομής	-1	∞	½
αντίστροφα	1/-1	1/ ∞	1/(½)
Μικρότερος λόγος	-1	0	2
Δείκτες Miller $(\bar{1}02)$			

Δείκτες Miller

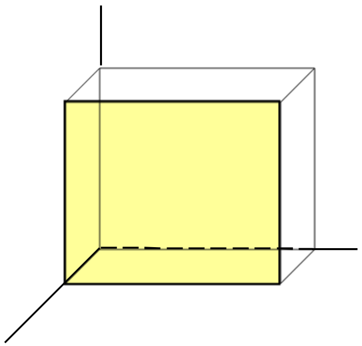


Επίπεδο τέμνοντας τους άξονες $3\overline{a}, 2\overline{b}, 2\overline{c}$

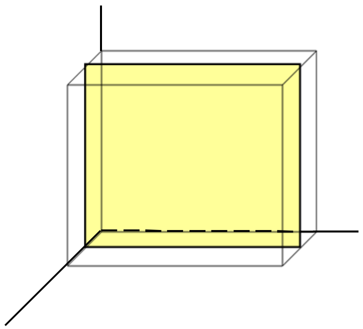
Αντίστροφοι αριθμοί: $\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Δείκτες επίπέδου(Miller): (2,3,3)

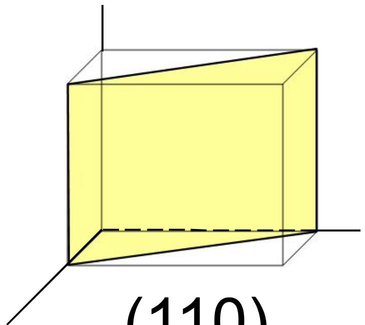
Δείκτες της διεύθυνσης: [2,3,3]



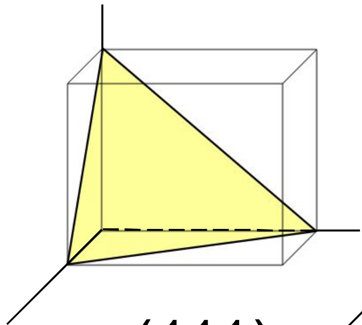
(100)



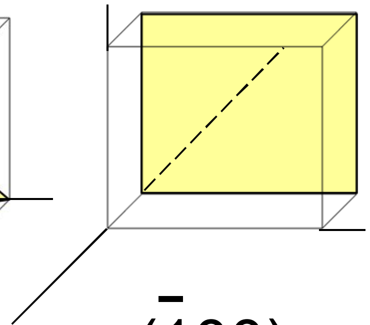
(200)



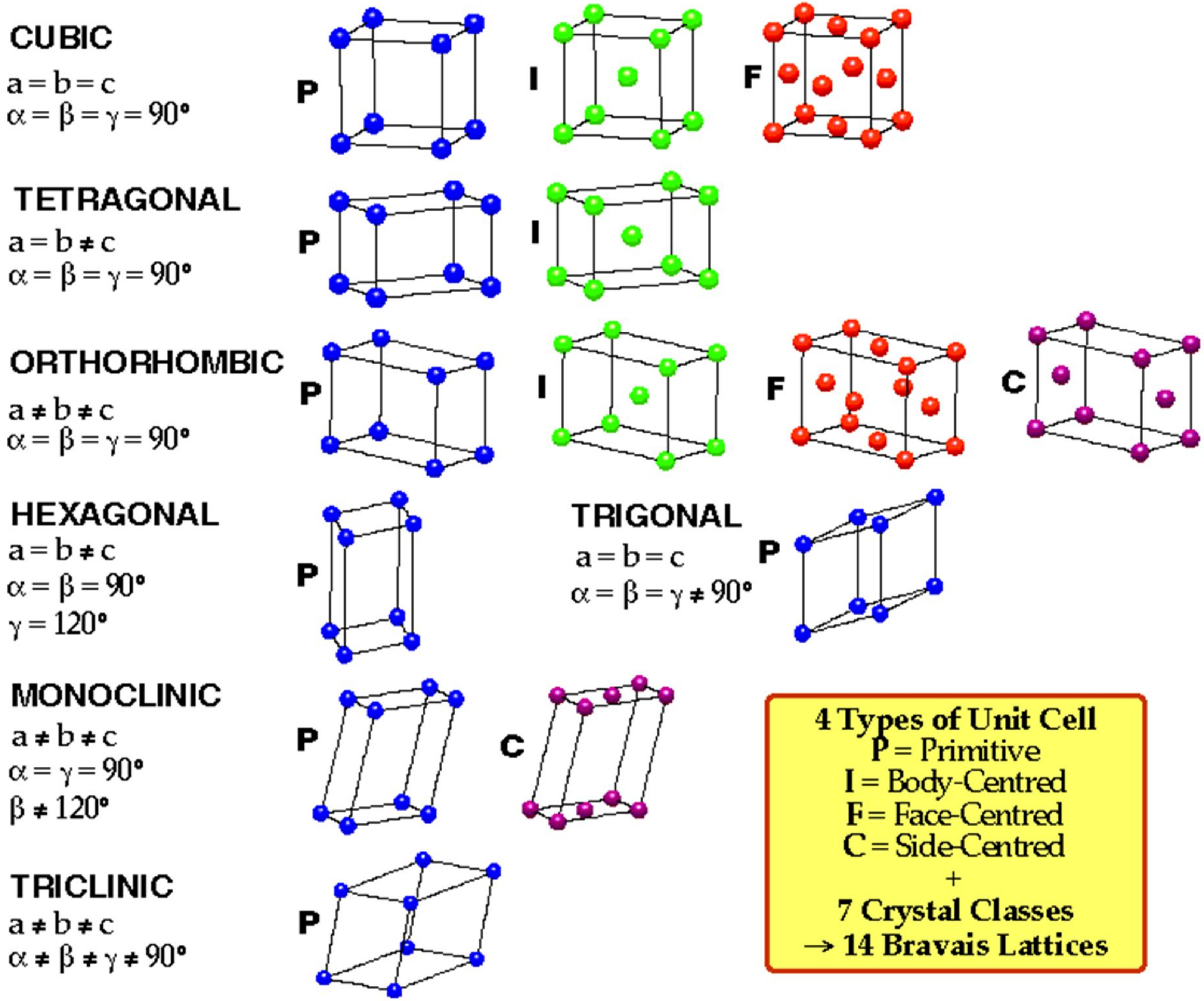
(110)



(111)



$(\bar{1}00)$


CUBIC
a = b = c
α = β = γ = 90°
P
I
F
TETRAGONAL
a = b ≠ c
α = β = γ = 90°
P
I
ORTHORHOMBIC
a ≠ b ≠ c
α = β = γ = 90°
P
I
F
C
HEXAGONAL
a = b ≠ c
α = β = 90°
γ = 120°
P
TRIGONAL
a = b = c
α = β = γ ≠ 90°
P
MONOCLINIC
a ≠ b ≠ c
α = γ = 90°
β ≠ 120°
P
C
TRICLINIC
a ≠ b ≠ c
α ≠ β ≠ γ ≠ 90°
P
4 Types of Unit Cell
P = Primitive
I = Body-Centred
F = Face-Centred
C = Side-Centred
+
7 Crystal Classes
→ 14 Bravais Lattices

Αριθμός πρώτων γειτόνων ή αριθμός σύνταξης

- CN : τα πλεγματικά σημεία Bravais που είναι κοντύτερα σε ένα δεδομένο σημείο δίνουν τον αριθμό των πρώτων (κοντινότερων) γειτόνων.

- Επειδή το πλέγμα Bravais είναι περιοδικό, όλα τα σημεία έχουν τον ίδιο CN που είναι μία ιδιότητα του πλέγματος.

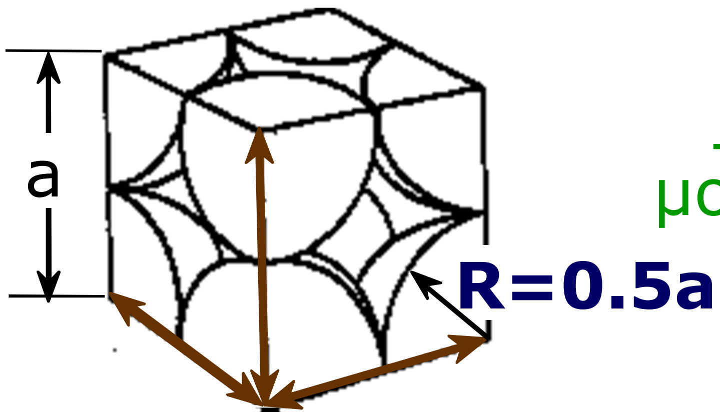
- Ένα απλό κυβικό έχει 6, Ένα χωροκεντρωμένο 8, Και ένα εδροκεντρωμένο 12 πρώτους γείτονες.

Παράγοντας ατομικής συνεκτικότητας

$$APF = \frac{\text{Όγκος ατόμων στη μοναδιαία*}}{\text{Όγκος της μοναδιαίας}}$$

*θεωρώντας τα άτομα σαν σφαίρες

- APF απλού κυβικού = 0.52

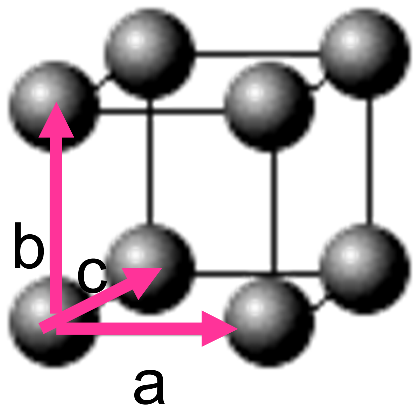


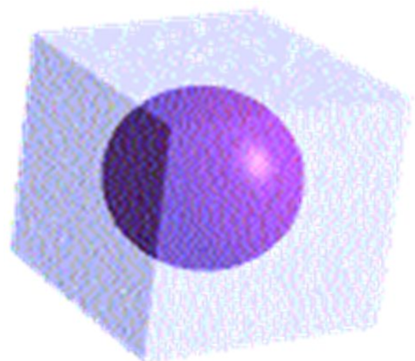
$$APF = \frac{\underbrace{1}_{\text{άτομα / μοναδιαίας}} \; \underbrace{\frac{4}{3} p (0.5a)^3}_{\text{όγκος / ατόμου}}}{\underbrace{a^3}_{\text{όγκος / μοναδιαίας}}}$$

1-κυβικό κρυσταλλικό σύστημα

α- απλό κυβικό (SC)

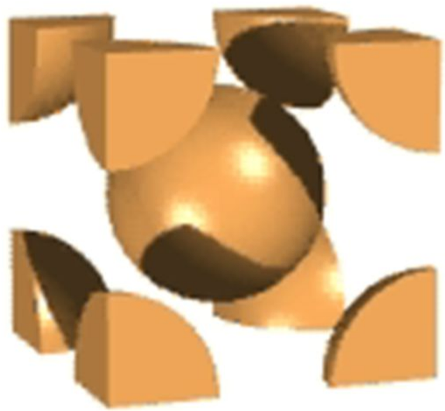
- Το απλό κυβικό έχει ένα πλεγματικό σημείο, άρα η κυψελίδα είναι θεμελιώδης.
- Τα άτομα ανήκουν κατά 1/8 στη κυψελίδα.
- CN=6.

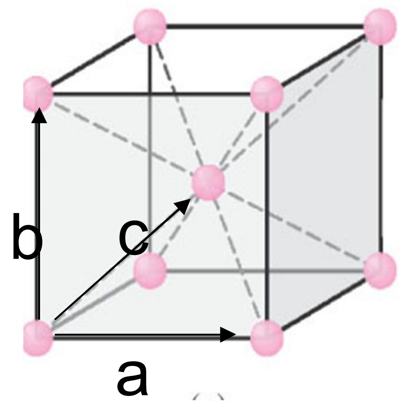




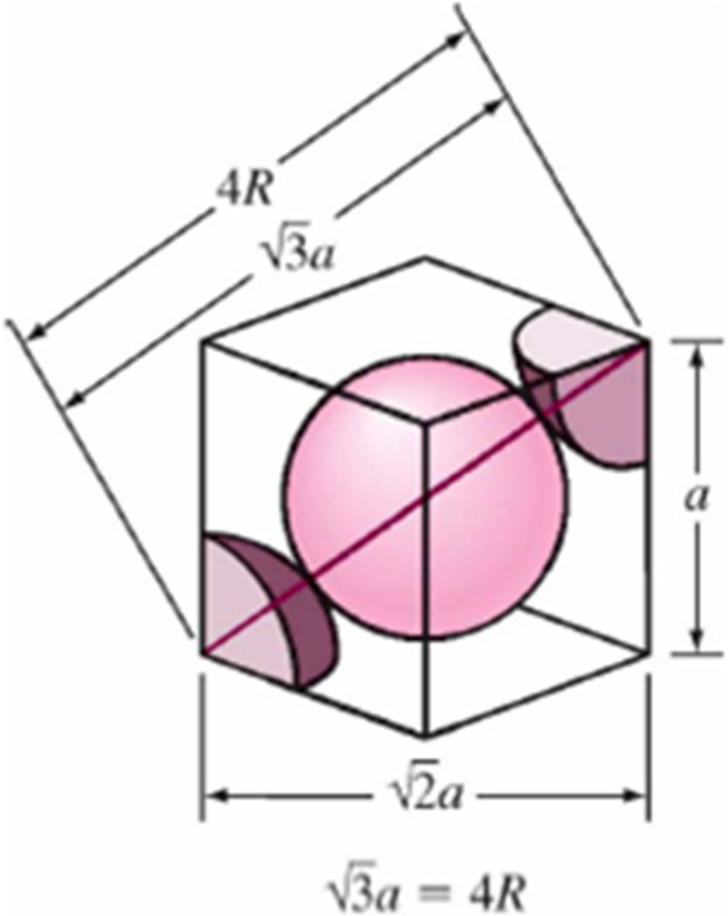
b- (BCC)

- BCC έχει 2 πλεγματικά σημεία BCC η κυψελίδα αυτή δεν είναι θεμελιώδης.
- Cn=8





APF του BCC



$$APF_{BCC} = \frac{V_{atoms}}{V_{unit\ cell}} = 0.68$$

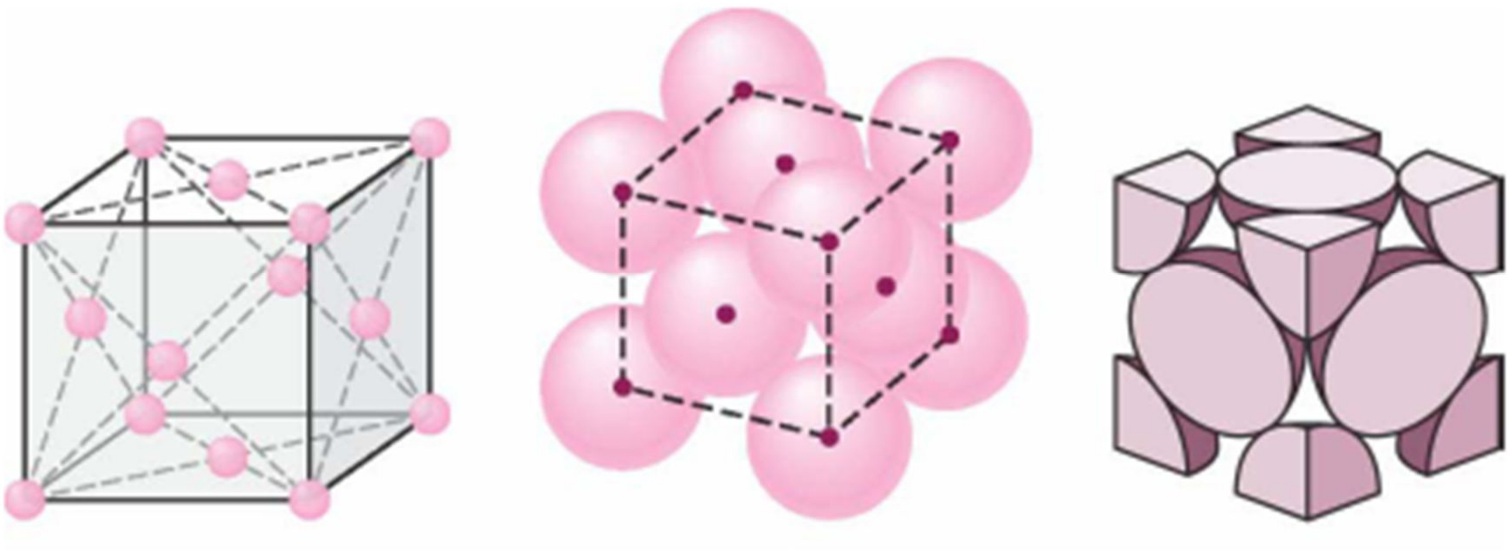
$$\frac{\text{atom}}{\text{unit cell}} \qquad \frac{\text{volume}}{\text{atom}}$$

$$APF = \frac{\boxed{2}\ \boxed{\frac{4}{3}\pi(0,433a)^3}}{\boxed{a^3}}$$

$$\frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}$$

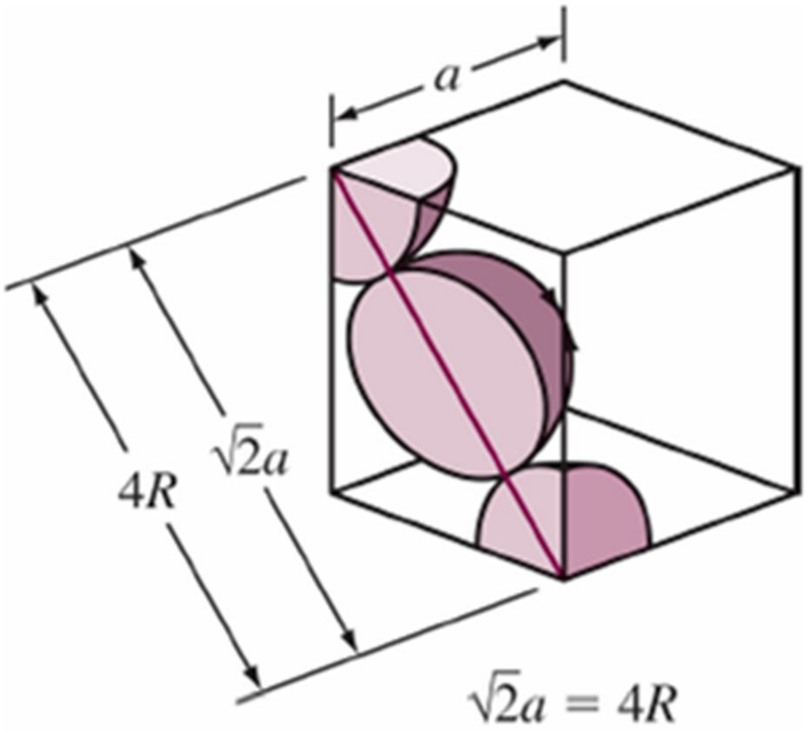
c- (FCC)

- 4 άτομα άρα δεν είναι θεμελιώδης.



APF του FCC

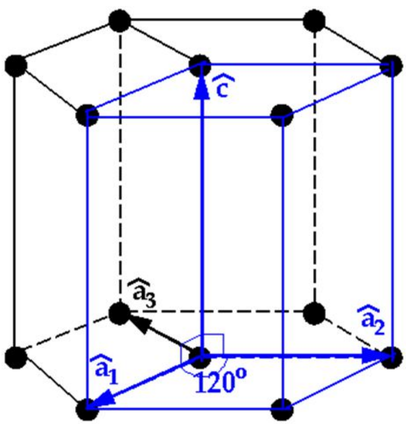
$$APF_{FCC} = \frac{V_{atoms}}{V_{unit\ cell}} = 0,74$$

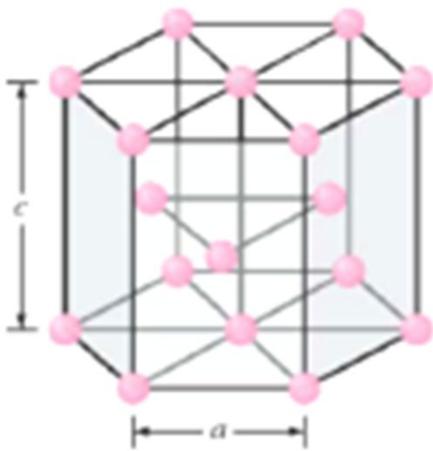


$$APF = \frac{\underbrace{\boxed{4}}_{\frac{\text{atom}}{\text{unit cell}}}\ \underbrace{\boxed{\frac{4}{3}\pi(0,353a)^3}}_{\frac{\text{volume}}{\text{atom}}}}{\underbrace{\boxed{a^3}}_{\frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}}}$$

2 – εξαγωνικό σύστημα

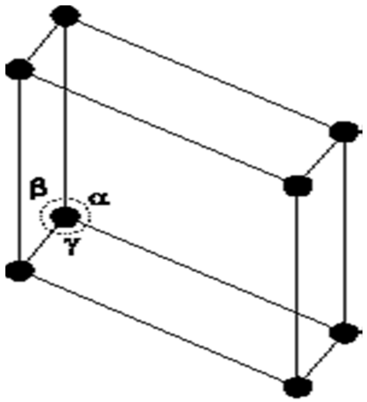
- Ένα κρυσταλλικό σύστημα στο οποίο υπάρχουν 3 ίσοι και ομοεπίπεδοι άξονες με γωνίες μεταξύ τους 60, και ένας κάθετος σε αυτούς που έχει διαφορετικό μήκος.






3 - τρικλινές
4 - μονοκλινές

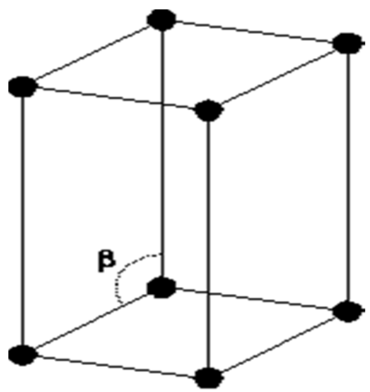
- Η μικρότερη συμμετρία. 3 άξονες διαφορετικών μηκών και όχι κάθετοι μεταξύ τους.



Τρικλινές (απλό)

$\alpha \neq ß \neq \gamma \neq 90$

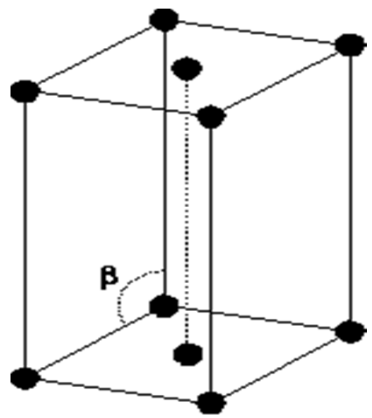
$a \neq b \neq c$



Μονοκλινές (απλό)

$\alpha = \gamma = 90^o$, $ß \neq 90^o$

$a \neq b \neq c$

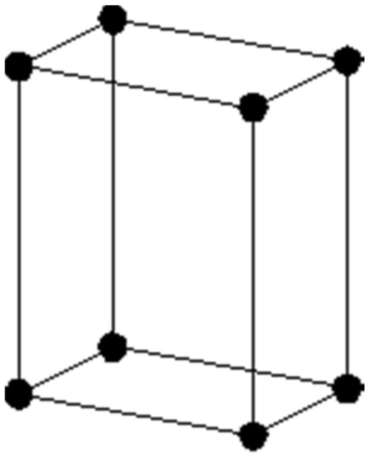


Μονοκλινές (βασωκεντρωμένο)

$\alpha = \gamma = 90^o$, $ß \neq 90^o$

$a \neq b \neq c$,

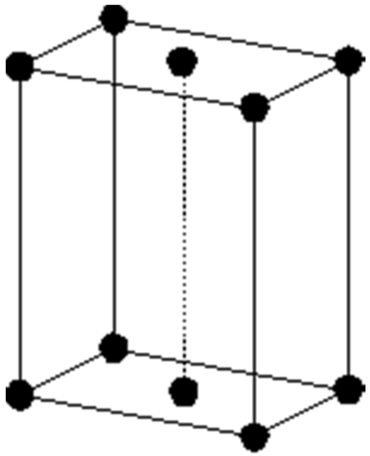
5 – ορθορομβικό



Orthorhombic (Simple)

$\alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$

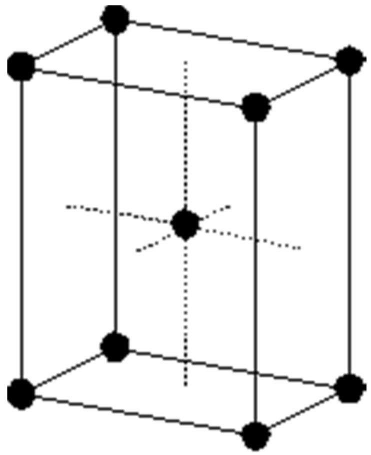
$a \neq b \neq c$



Orthorhombic (Base-centred)

$\alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$

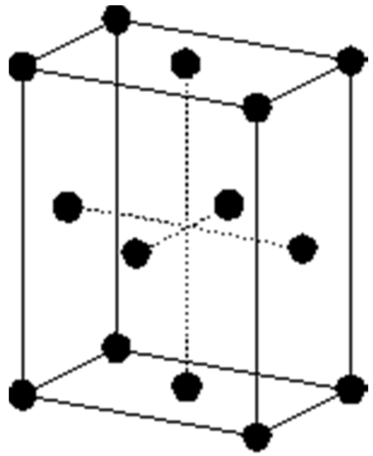
$a \neq b \neq c$



Orthorhombic (BC)

$\alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$

$a \neq b \neq c$

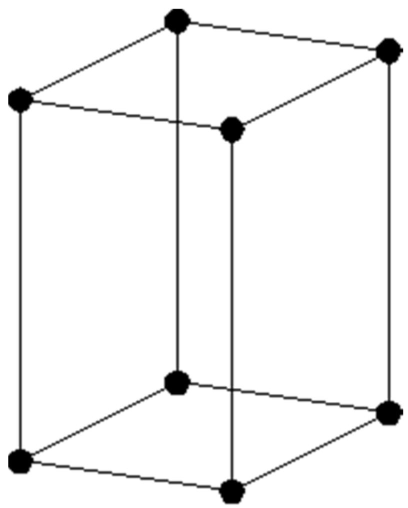


Orthorhombic (FC)

$\alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$

$a \neq b \neq c$

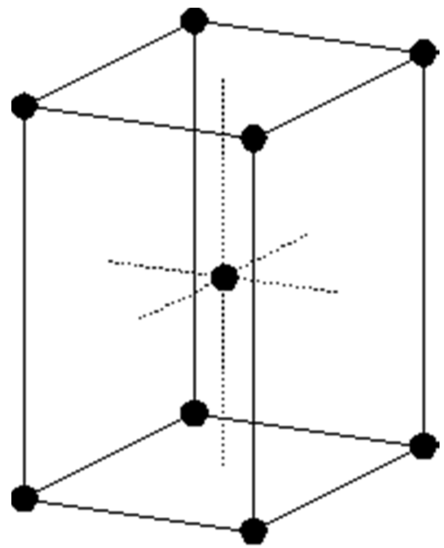
6 – τετραγωνικό



Tetragonal (P)

$\alpha = ß = \gamma = 90^o$

$a = b \neq c$



Tetragonal (BC)

$\alpha = ß = \gamma = 90^o$

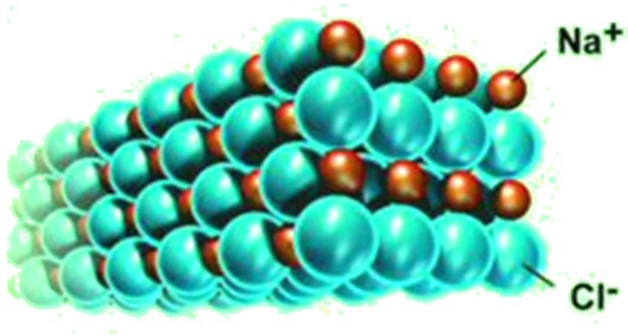
$a = b \neq c$

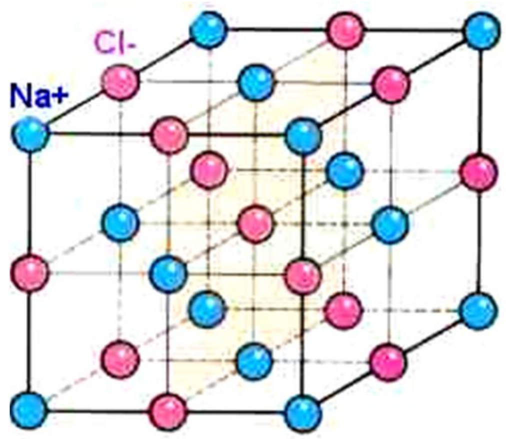
Οι πιο σημαντικές κρυσταλλικές δομές

- Δομή χλωριούχου νατρίου $Na^{+}Cl^{-}$.
- Δομή χλωριούχου καισίου $Cs^{+}Cl^{-}$.
- Εξαγωνική δομή (πυκνής διάταξης).
- Δομή διαμαντιού.
- Δομή θειούχου ψευδαργύρου.

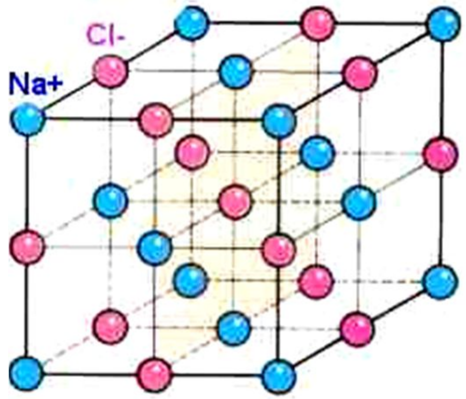
1 – Δομή χλωριούχου νατρίου

- **Κρυσταλλώνεται στο κυβικό αλλά με διαφορετική μοναδιαία κυψελιδα.**
- **Αποτελείται από ίσο αριθμό νατρίων και χλωρίων τοποθετημένων εναλλάξ σε σημεία ενός απλού κυβικού.**
- **Κάθε ιόν έχει έξη κοντινότερους γείτονες του άλλου είδους.**





Δομή χλωριούχου νατρίου



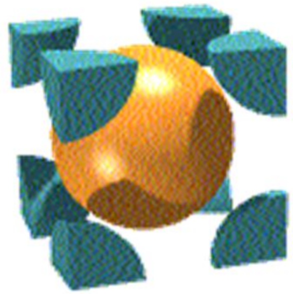
- Η δομή είναι ένα εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα Bravais με βάση που αποτελείται από ένα νάτριο στην αρχή των αξόνων και ένα χλώριο στο κέντρο της κυψελίδας

$$a/2(\vec{x}+\vec{y}+\vec{z})$$

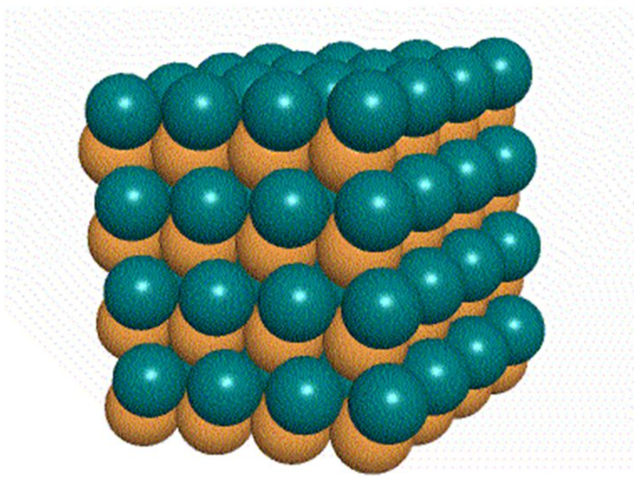
- LiF,NaBr,KCl,LiI,κ.λ.π.

2-Δομή χλωριούχου καισίου $Cs^{+}Cl^{-}$

- **Κρυσταλλώνεται στο κυβικό.**



- ***Αποτελείται από ίσο αριθμό ιόντων καισίου και χλωρίου τοποθετημένων στα σημεία ενός χώρο-κεντρωμένου πλέγματος και κάθε ιόν έχει 8 πρώτους γείτονες του άλλου είδους.***



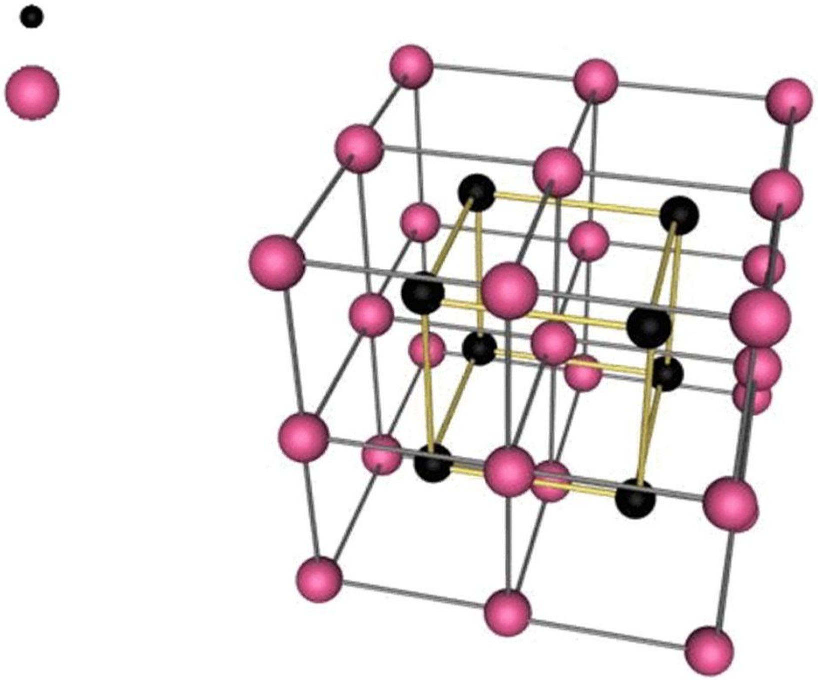
Δομή χλωριούχου καισίου Cs^+Cl^-

- Είναι ένα απλό κυβικό πλέγμα Bravaisμε μία βάση όπου ένα ιόν καισίου είναι στην αρχή και ένα ιόν χλωρίου στο κέντρο του κύβου.

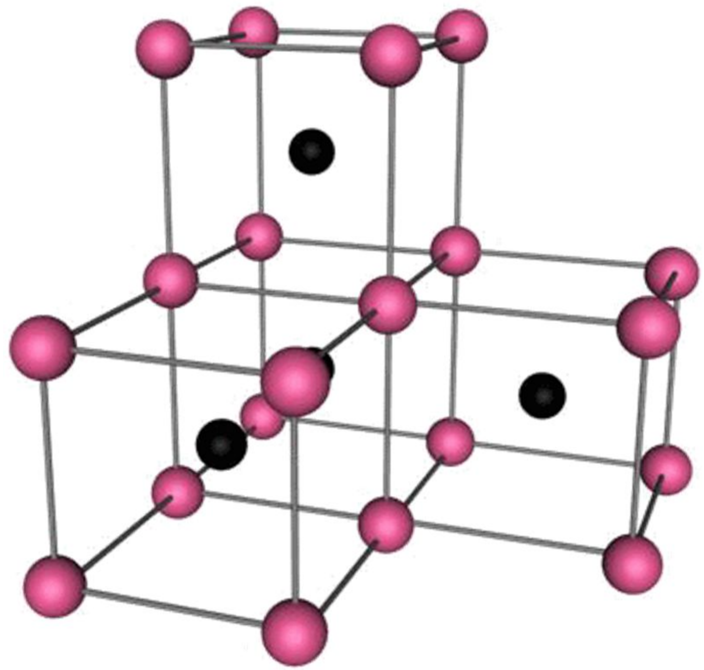
$$a/2(\vec{x}+\vec{y}+\vec{z})$$

- CsBr,CsI, κ.λ.π. .

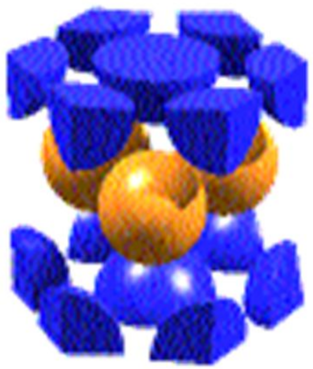
Δομή χλωριούχου καισίου $Cs^{+}Cl^{-}$

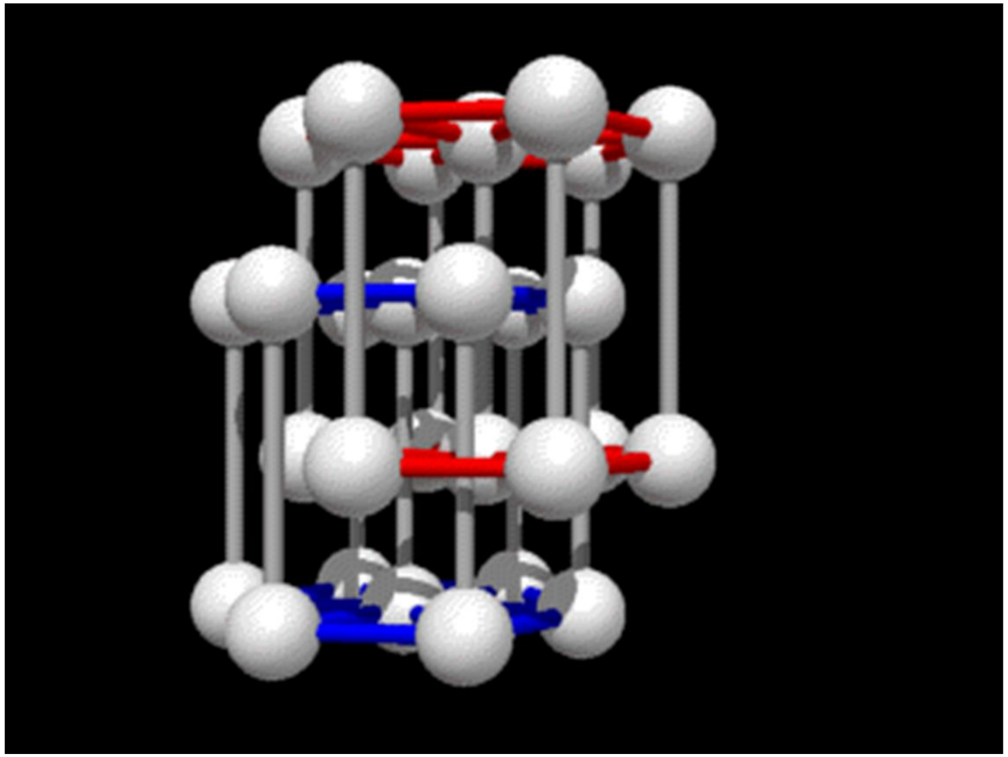


8 cell



3-Εξαγωνική δομή

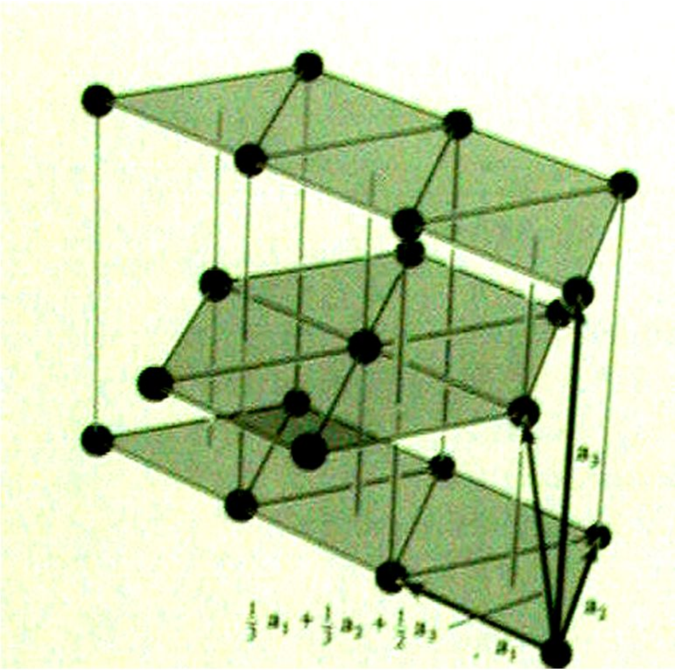


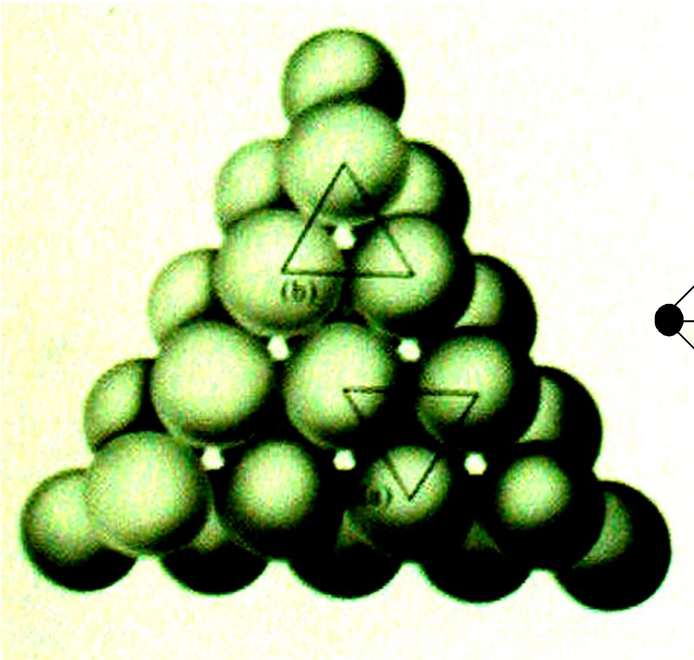


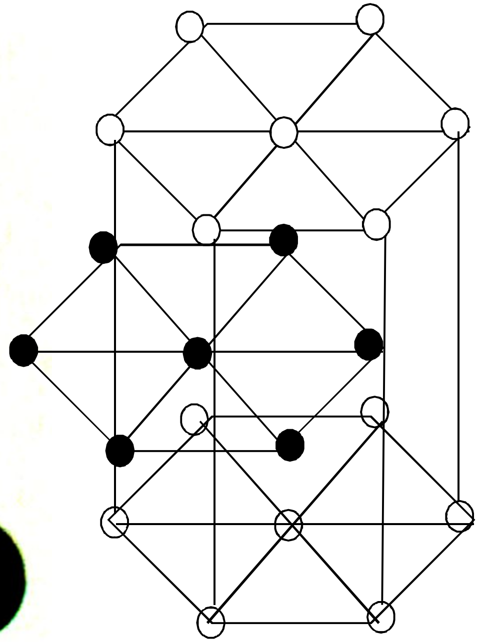
Εξαγωνική δομή

Πλέγμα Bravais : Εξαγωνικό
He, Be, Mg, Hf, Re, τρόπος
επιστοίβασης ABABAB

a=b a=120, c=1.633a,
βάση: (0,0,0) (2/3a ,1/3a,1/2c)

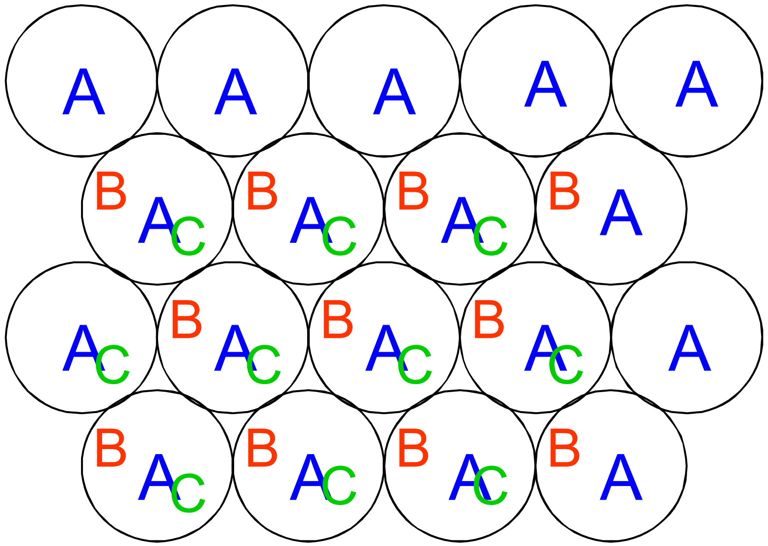


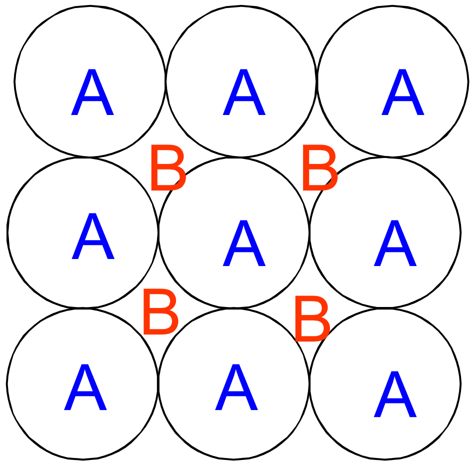




επιστοίβαση

Πυκνή στοίβαση





Ακολουθία ΑΒΑΒΑΒ
Εξαγωνικό

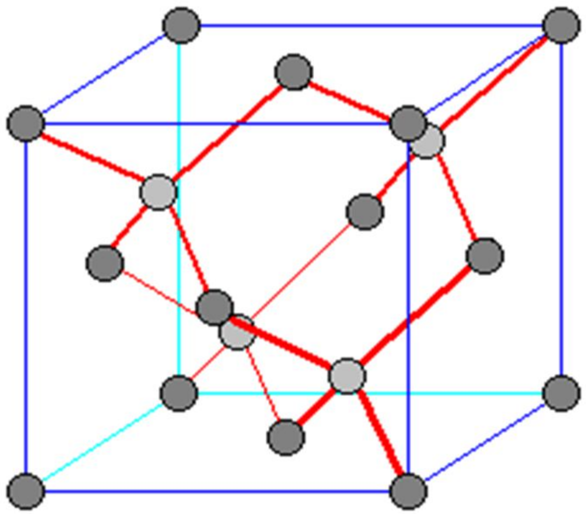
Ακολουθία ΑΒCΑΒCΑΒ..
εδροκεντρωμένο

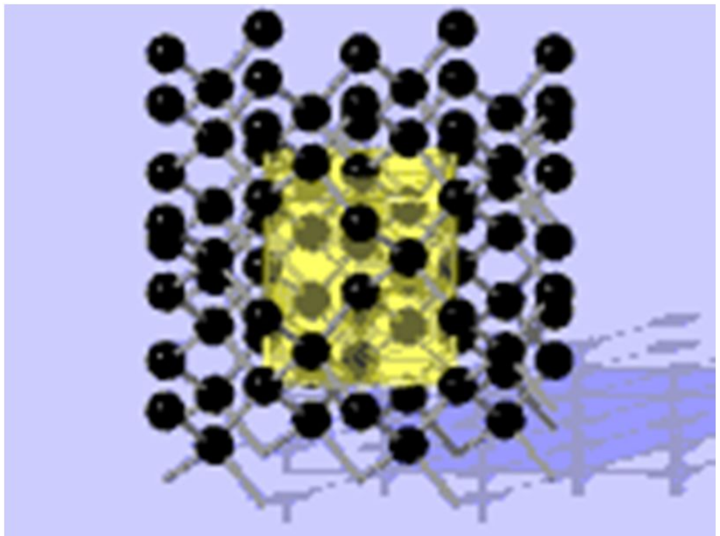
Ακολουθία ΑΑΑΑ…
-Απλό κυβικό

Ακολουθία ΑΒΑΒ…
χώροκεντρωμένο

4 – δομή διαμαντιού

- Αποτελείται από δύο ενδοσυνδεδεμένα εδροκεντρωμένα πλέγματα bravais.
- Υπάρχου 8 άτομα στη δομή διαμαντιού.
- Κάθε άτομο συνδέεται ομοιοπολικά με 4 άλλα άτομα.





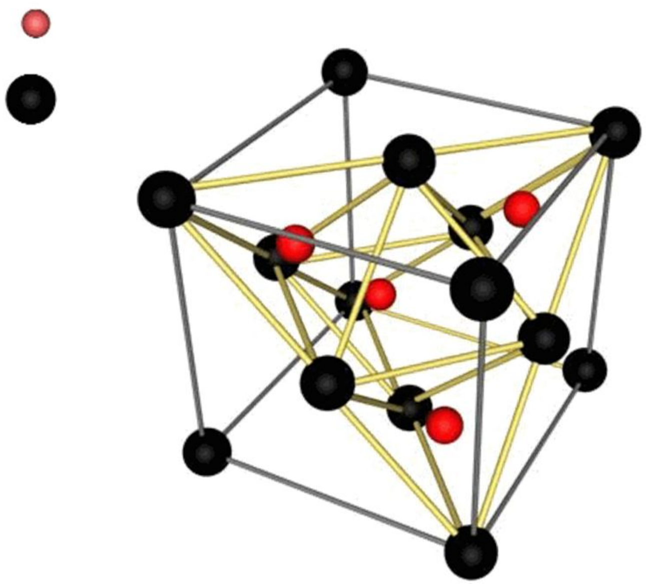
4 - δομή διαμαντιού

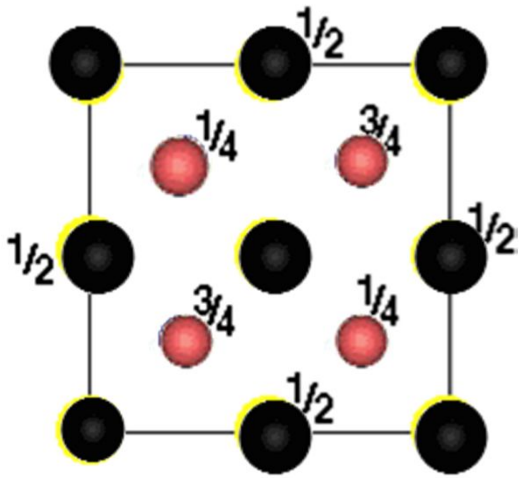
- Ο αριθμός συνεκτικότητας είναι 4.
- Η δομή διαμαντιού ΔΕΝ είναι πλέγμα Bravais.
- Si, Ge και C.

5- θειούχος ψευδάργυρος

- Έχει ίσο αριθμό ιόντων ψευδαργύρου και θείου σε δομή διαμαντιού κατανεμημένων έτσι ώστε κάθε ένα να έχει 4 γειτονικά ιόντα του άλλου είδους.
- AgI,GaAs,GaSb,InAs,

5- θειούχος ψευδάργυρος





Τέλος Ενότητας

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημειώματα

Σημείωμα Ιστορικού Εκδόσεων Έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.0.

Έχουν προηγηθεί οι κάτωθι εκδόσεις:

- Έκδοση 1.0 διαθέσιμη εδώ. http://ecourse.uoi.gr/course/view.php?id=1284 .

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Διδάσκων: Καθηγητής Γεώργιος Α. Ευαγγελάκης. «Φυσική Στερεάς Κατάστασης. Κρυσταλλική δομή». Έκδοση: 1.0. Ιωάννινα 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: http://ecourse.uoi.gr/course/view.php?id=1284 .

Σημείωμα Αδειοδότησης