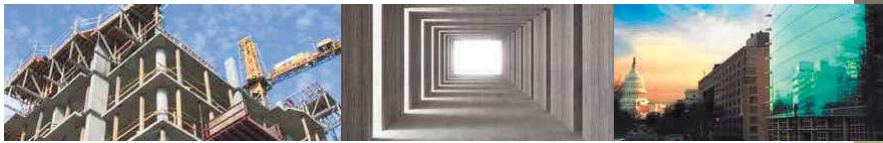


## ΟΙΚΟΛΟΓΙΑ & ΧΗΜΕΙΑ ΓΙΑ ΜΗΧΑΝΙΚΟΥΣ

### Εισαγωγή στη Χημεία Υλικών ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ & ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

*CRYSTAL STRUCTURE & PROPERTIES*



Μπαδογιάννης Ε.

## ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ

- Κρυσταλλογραφία και κρυσταλλική δομή
- Μοναδιαία κυψελίδα
- Τρόποι στοίβαξης
- Πλέγματα
- Αριθμός ένταξης
- Αριθμός ατόμων στη μοναδ. Κυψελίδα
- Συντ/της ατομικής πλήρωσης
- Σταθερά πλέγματος
- Κρυσταλλογραφικά επίπεδα & Διευθύνσεις
- Δείκτες Miller κρυσταλλικού επιπέδου

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. – ΟΚΜ

[ 93 ]

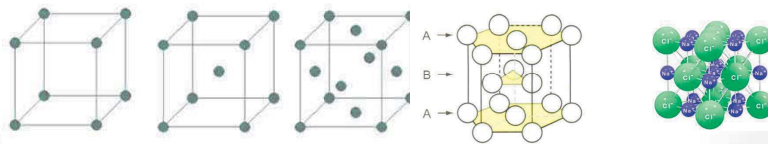
## ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΑ – ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΟΜΗ

Τι είναι;

**Κρυσταλλικό υλικό:** Τα άτομα του βρίσκονται σε μία επαναλαμβανόμενη ή περιοδική διάταξη προς τις τρεις διευθύνσεις.

**Κρυσταλλική δομή:** Ο τρόπος που τα άτομα ή μόρια είναι διευθετημένα στον χώρο

**Κρυσταλλογραφία:** η γλώσσα που περιγράφει αυτή τη διάταξη των ατόμων ή των μορίων κρυστάλλων στον χώρο



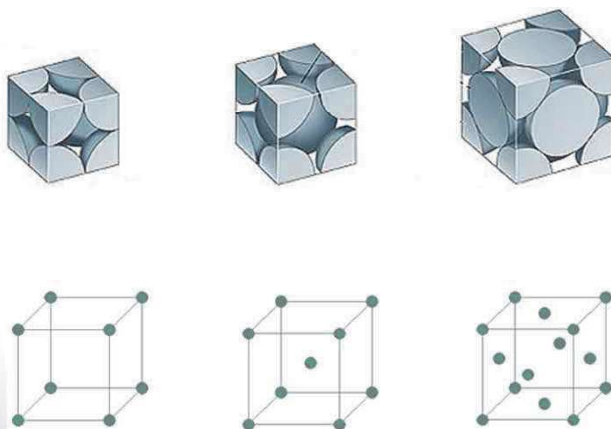
Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. – ΟΚΜ

[ 94 ]

## ΜΟΝΑΔΙΑΙΑ ΚΥΨΕΛΙΔΑ – ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ ΠΛΕΓΜΑΤΩΝ

ή μοναδιαίο κελί ή κρύσταλλος (ή κρυσταλλίτης ή κόκκος):

- Η μικρότερη επαναλαμβανόμενη δομή ατόμων με τη μεγαλύτερη γεωμετρική συμμετρία. Στις περισσότερες κρυσταλλικές δομές είναι παραλληλεπίπεδα ή πρίσματα



Απεικόνιση με  
μοντέλο  
ατομικών  
σκληρών  
σφαιρών

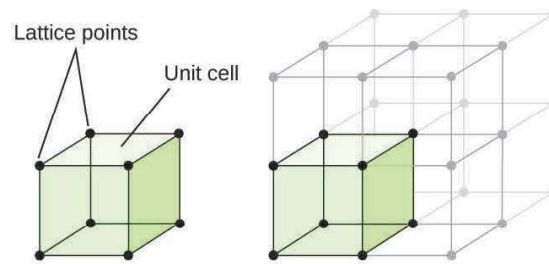
Απεικόνιση με  
μοντέλο  
μικρών  
σκληρών  
σφαιρών

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. – ΟΚΜ

[ 95 ]

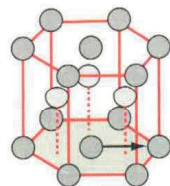
## ΜΟΝΑΔΙΑΙΑ ΚΥΨΕΛΙΔΑ – ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ ΠΛΕΓΜΑΤΩΝ

- Η επανάληψη της μοναδιαίας κυψελίδας στις τρεις διαστάσεις του χώρου, παράγει το κρυσταλλικό πλέγμα,
- αντιπροσωπεύει τη συμμετρία της κρυσταλλικής δομής,
- έτσι, οι θέσεις των ατόμων να μπορούν να δημιουργηθούν από μεταθέσεις ακέραιων αποστάσεων της μοναδιαίας κυψελίδας, προς τη διεύθυνση της κάθε ακμής της.

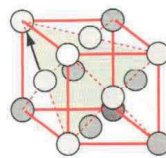


## ΠΛΕΓΜΑΤΑ

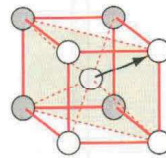
- Τα πλέγματα χαρακτηρίζονται:
  - από την επαναλαμβανόμενη γεωμετρία της διάταξης των κρυστάλλων
  - από τον βαθμό συμμετρίας τους



CPH ή HCP



FCC



BCC

## ΕΙΔΗ ΠΛΕΓΜΑΤΩΝ

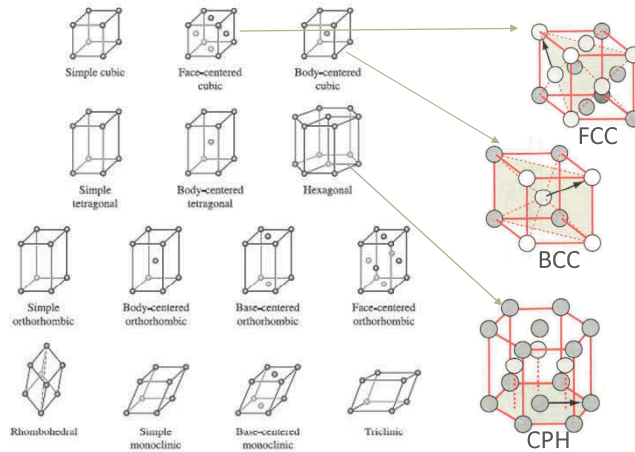


Figure 3-6 The fourteen types of Bravais lattices grouped in seven crystal systems. The actual unit cell for a hexagonal system is shown in Figures 3-8 and 3-13.

68/92 μέταλλα έχουν τις δομές που επισημαίνονται: FCC/BCC/CPH

## Συχνότερα απαντώμενες δομές

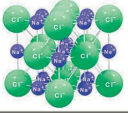
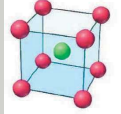
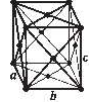
The Periodic Table of the Elements

Legend:

- alkali metals
- alkaline earth metals
- transition metals
- lanthanoids
- actinoids
- metalloids
- nonmetals
- noble gases
- unknown elements

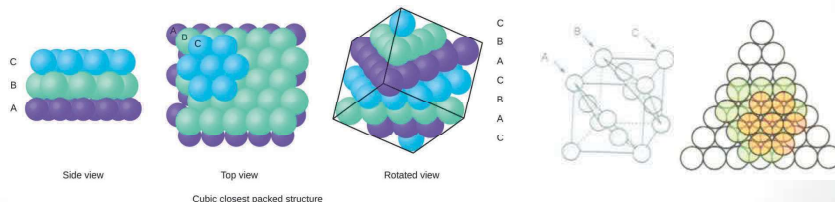
68/92 μέταλλα έχουν τις δομές που επισημαίνονται: FCC/BCC/CPH

## ΔΙΕΥΘΕΤΗΣΗ ΑΤΟΜΩΝ ΣΤΟ ΠΛΕΓΜΑ

| Είδος                | Περιγραφή                                                                       | Απεικόνιση                                                                          |
|----------------------|---------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| Πρωτογενής           | Άτομα μόνο στις γωνίες.<br>Σύμβολο P.                                           |  |
| Εδροκεντρωμένο       | Άτομα στις γωνίες και<br>στα κέντρα των εδρών.<br>Σύμβολα, A, B, C.             |   |
| Χωροκεντρωμένο       | Άτομα στις γωνίες και<br>στο κέντρο της<br>μοναδιαίας κυψελίδας.<br>Σύμβολο, I. |  |
| Ολοεδρικά κεντρωμένο | Άτομα στις γωνίες και<br>στα κέντρα όλων των<br>εδρών. Σύμβολο, F.              |  |

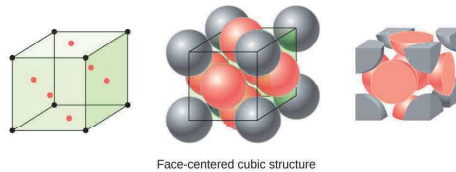
## Χαρακτηριστικά δομής FCC

- Άτομα στις ακμές και από ένα (1) σε κάθε έδρα
- Άτομα εφάπτονται κατά τις διαγώνιες
- Πυκνά επίπεδα με σειρά ABCABC...



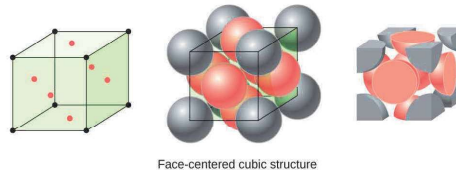
### Τεχνικά Υλικά με δομή FCC

| Είδος                                                     | Τυπικές Χρήσεις                                                 |
|-----------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|
| Αλουμίνιο και κράματά του                                 | Αεροπλάνα, διαστημικά σκάφη, τρένα, κουτιά αναψυκτικών, κ.α.    |
| Νικέλιο και κράματά του                                   | Εξαρτήματα αεροστροβίλων                                        |
| Χαλκός και α-ορείχαλκος                                   | Ηλεκτρικοί αγωγοί, τριβείς, κτλ                                 |
| Μόλυβδος                                                  | Μπαταρίες, επενδύσεις ειδικών κτιρίων, στέγες,                  |
| Ωστενιτικοί ανοξείδωτοι χάλυβες (Fe σε υψηλή θερμοκρασία) | Χημικός, πυρηνικός, κρυογενικός εξοπλισμός, μαγειρικά σκεύη,... |
| Άργυρος, χρυσός, λευκόχρυσος                              | Κοσμήματα, κέρματα....                                          |



### Χαρακτηριστικά Υλικών με δομή FCC

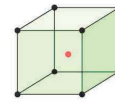
- Πολύ όλκιμα όταν είναι καθαρά (χωρίς προσμίξεις)
- Σκληραίνουν & μαλακώνουν κατόπιν κατάλληλης κατεργασίας, άρα είναι γενικά κατεργάσιμα υλικά
- Διατηρούν ολκιμότητα και δυσθραυστότητα στο απόλυτο μηδέν



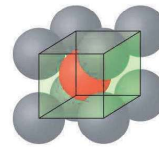
## Χαρακτηριστικά δομής BCC

- Άτομα στις ακμές του κύβου και ένα (1) στο κέντρο
- Άτομα εφάπτονται μόνο στην εσωτερική διαγώνιο (υπάρχει χώρος...)
- 21 μέταλλα με αυτή τη δομή

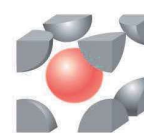
Lattice point location



Cubic unit cells

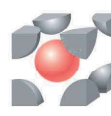
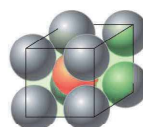
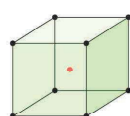


Body-centered cubic



## Τεχνικά Υλικά με δομή BCC

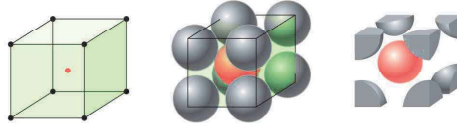
| Είδος                                           | Τυπικές Χρήσεις                                                               |
|-------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| Σίδηρος, χάλυβας μεσαίας περιεκτικότητας σε C   | Κατασκευές, αυτοκίνητα, δοχεία, κ.α.                                          |
| Ανθρακούχοι χάλυβες, χάλυβες χαμηλής κραμάτωσης | Εξαρτήματα μηχανών, εργαλεία, σωλήνες, εξαρτήματα μονάδων παραγωγής ενέργειας |
| Βολφράμιο                                       | Λαμπτήρες πυρακτώσεως                                                         |
| Χρώμιο                                          | Επιμεταλλώσεις                                                                |



Body-centered cubic structure

### Χαρακτηριστικά Υλικών με δομή BCC

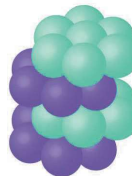
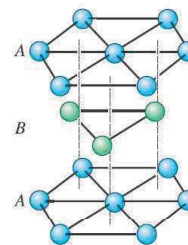
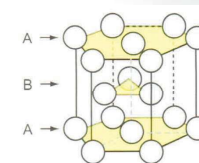
- Όλκιμα εν θερμώ
- Δύσθραυστα σε θερμοκρασία δωματίου - Ψαθυρά σε χαμηλή θερμοκρασία
- Η αντοχή εξαρτάται από τη θερμοκρασία
- Σκληραίνουν με κραμάτωση (στον ενδιάμεσο χώρο)



Body-centered cubic structure

### Χαρακτηριστικά δομής HCP

- Εξαγωνική μοναδ. κυψελίδα με άτομα σε κάθε γωνία και ένα άτομο στη μέση
- Ενδιάμεσα τρίγωνο με 3 άτομα
- Επανάληψη Εξαγωνικής μοναδ. κυψελίδας με άτομα σε κάθε γωνία και ένα άτομο στη μέση

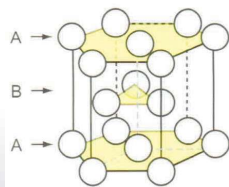


Hexagonal closest packed

- Πυκνά επίπεδα με σειρά ABAB...

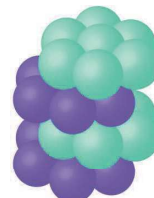
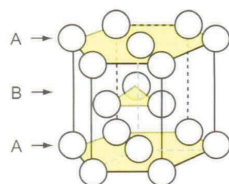
### Τεχνικά Υλικά με δομή HCP

| Είδος                   | Τυπικές Χρήσεις                                                                 |
|-------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| Ψευδάργυρος             | Χύτευση σε μήτρα, επιμετάλλωση                                                  |
| Μαγνήσιο                | Ελαφρές κατασκευές                                                              |
| Τιτάνιο και κράματά του | Ελαφρά εξαρτήματα υψηλής αντοχής (αεροσκάφη), βιοϊατρική και χημική τεχνολογία. |
| Κοβάλτιο                | Υπερκράματα, εμφυτεύματα,                                                       |
| Βηρύλλιο                | Το ελαφρότερο μέταλλο (κόστος, τοξικότητα)                                      |



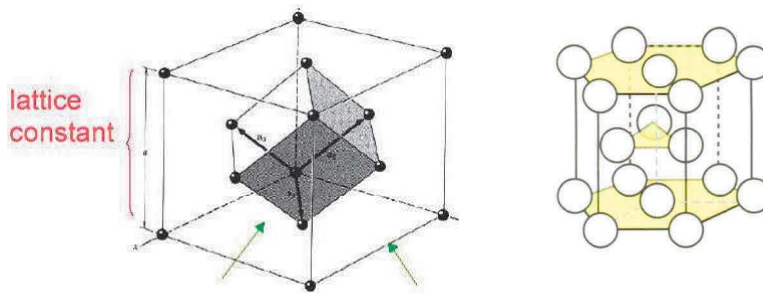
### Χαρακτηριστικά Υλικών με δομή HCP

- Όλκιμα, αλλά λιγότερο σε σχέση με τα BCC
- Περισσότερο ανισότροπα μέταλλα σε σχέση με αυτά που έχουν δομή BCC και FCC



## Σταθερά Πλέγματος

Μήκος έδρας π.χ. κύβου, από ακμή σε ακμή του μοναδιαίου κελιού ή 2 διαδοχικών ακμών στο εξάγωνο.

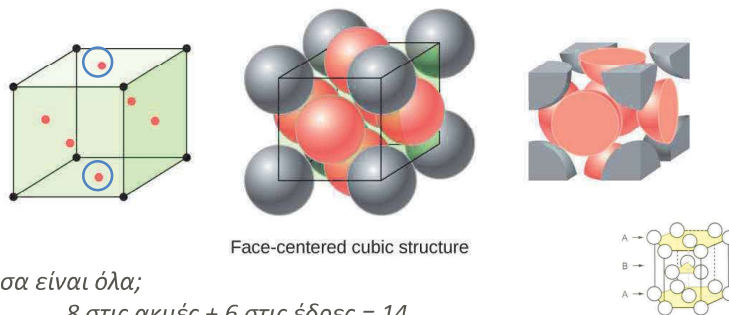


Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. - ΟΚΜ

[ 111 ]

## Αριθμός ένταξης

Ο αριθμός των ατόμων που γειτονεύει κάθε άτομο. π.χ. στη δομή FCC, ο αριθμός ένταξης είναι 12.



Face-centered cubic structure

Πόσα είναι όλα;

$$8 \text{ στις ακμές} + 6 \text{ στις έδρες} = 14$$

Πόσα δεν γειτνιάζουν (δεν τέμνονται τα επίπεδά τους);

$$\text{το απέναντι κάτω και ο εαυτός του} = 2$$

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. - ΟΚΜ

[ 112 ]

## Αριθμός ατόμων ανά μοναδιαία κυψελίδα

Ένα % των ατόμων της μον. κυψελίδας, ανάλογα με τη θέση της και το είδος του πλέγματος, μπορεί να είναι κοινά (να διαμοιράζεται) σε δύο ή περισσότερες κυψελίδες.

Π.χ. στο κυβικό σύστημα.

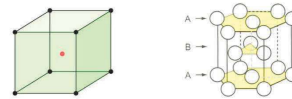
$$\text{Αρ. ατόμων ανά μον. κυψελίδα: } N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8}$$

$N_i$  : αρ. εσωτερικών ατόμων

$N_f$  : αρ. ατόμων στις επιφάνειες

$N_c$  : αρ. ατόμων στις κορυφές

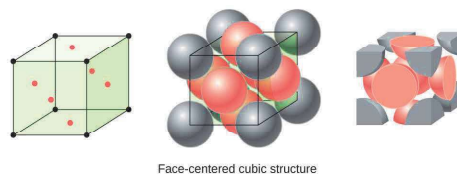
$$\text{π.χ. FCC } N = 0 + 6 \cdot \frac{1}{2} + 8 \cdot \frac{1}{8} = 4$$



## Συντελεστής Ατομικής Πλήρωσης (APF)

**Συντελεστής Ατομικής Πλήρωσης (Atomic Pack Factor):** Το κλάσμα του αθροίσματος των όγκων των σφαιρών σε μια μοναδιαία κυψελίδα προς τον όγκο της μοναδιαίας κυψελίδας (μοντέλο σκληρών σφαιρών).

$$\text{APF} = \frac{\text{Όγκος των ατόμων της μοναδ.κυψελίδας}}{\text{Ολικός όγκος μοναδ.κυψελίδας}} = \frac{N \cdot \text{Όγκος ατόμου}}{\text{Ολικός όγκος μοναδ.κυψελίδας}}$$



Face-centered cubic structure

π.χ. FCC...

## Θεωρητικός Υπολογισμός Πυκνότητας

$$\rho = \frac{N A}{V_c N_A}$$

$N$  = αριθμός ατόμων ανά μον. κυψελίδα (atoms/unit cell)

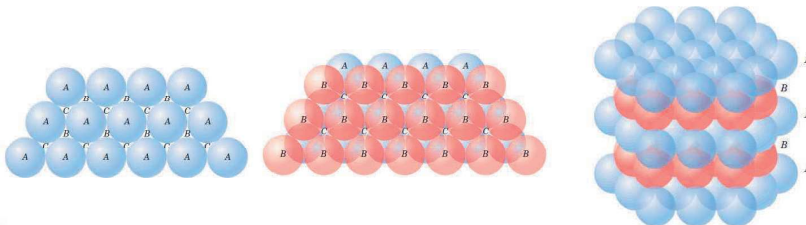
$A$  = ατομική μάζα (g/mol)

$V_c$  = όγκος μοναδ. Κυψελίδας ( $\text{cm}^3$ )

$N_A$  = Αριθμός Avogadro ( $6.022 \cdot 10^{23}$  atoms/mols)

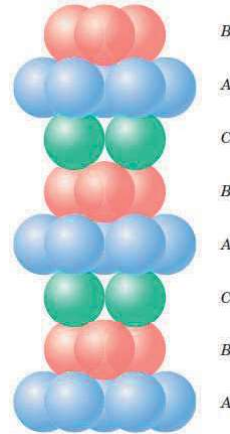
## ΤΡΟΠΟΙ ΣΤΟΙΒΑΞΗΣ: Ι. Μεγίστης πυκνότητας (close packed)

1<sup>ος</sup> τρόπος: Στοίβαξη ατόμων στρώματος Β πάνω στις κοιλότητες που δημιουργεί το πρώτο στρώμα Α σε μορφή ΑΒΑΒΑΒ... έτσι ώστε τα άτομα της τρίτης στρώσης να βρίσκονται ακριβώς πάνω από άτομα της Α στρώσης και όχι σε κοιλότητα της Α στρώσης (εξαγωνική μεγίστης πυκνότητας, close-packed hexagonal, απαντάται στην εξαγωνική, HCP)



## ΤΡΟΠΟΙ ΣΤΟΙΒΑΞΗΣ: II. Μεγίστης πυκνότητας (close packed)

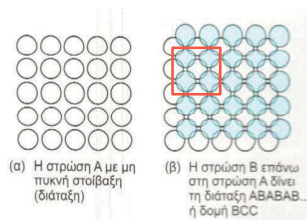
2<sup>ος</sup> τρόπος: Τα άτομα της τρίτης στρώσης C να βρίσκονται πάνω από κοιλότητα της A στρώσης και όχι πάνω από άτομα. Η επανάληψη στην περίπτωση αυτή είναι ABCABCABC... (απαντάται στην κυβική εδροκεντρωμένη δομή, face-centred cubic, FCC).



Και στους 2 τρόπους **APF=0.74** (οι σφαίρες καταλαμβάνουν το 74% του χώρου)

## ΤΡΟΠΟΙ ΣΤΟΙΒΑΞΗΣ: II. Αραιής στοίβαξης

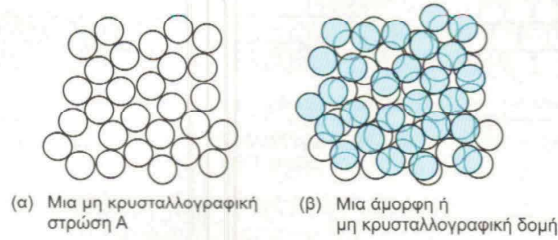
Τα άτομα της A στρώσης απέχουν μεταξύ τους. Η στρώση B τοποθετείται πάνω από τα κενά που δημιουργούνται ανά 4 άτομα της στρώσης A. Η επιστοίβαξη ABAB.... απαντάται στην κυβική χωροκεντρωμένη δομή (body-centered, BCC).



Συντελεστής ατομικής πλήρωσης APF=0.64

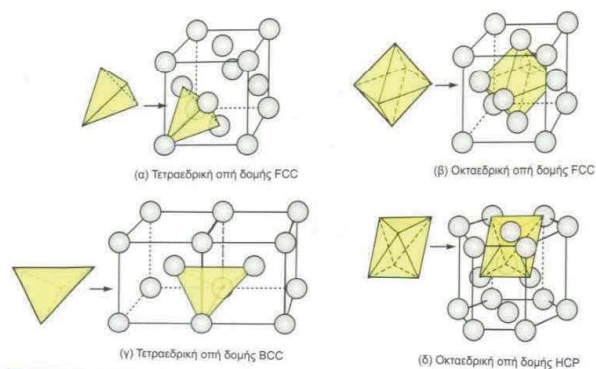
### ΤΡΟΠΟΙ ΣΤΟΙΒΑΞΗΣ: ΙΙΙ. Άμορφη στοίβαξη

Μη διατεταγμένη στοίβαξη (μη αποδοτικός τρόπος πλήρωσης χώρου). Μέγιστος συντελεστής ατομικής πλήρωσης  $APF=0.64$



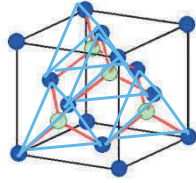
### Ενδιάμεσος χώρος – «Οπές»

Η μονάδα του χώρου μεταξύ ατόμων ή μορίων. Σημαντικός προκειμένου να χωρέσουν άλλα άτομα μέσα στο πλέγμα

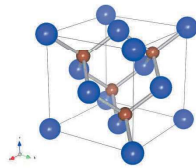
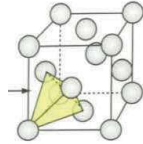


**Παράδειγμα:** Ο Χάλυβας έχει δομή BCC, αλλά και FCC σε υψηλότερη θερμοκρασία. Ο άνθρακας μπορεί να καταλάβει τον ενδιάμεσο χώρο. Αυτό δίνει στον χάλυβα αντοχή λόγω της σχετικής παραμόρφωσης που δέχεται το πλέγμα.

## Κρύσταλλοι Κεραμικών - Κυβική δομή διαμαντιού (DC)

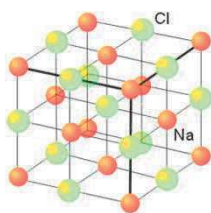


**Διαμάντι:** πλέγμα FCC με ένα πρόσθετο άτομο C σε κάθε μια από τις τετραεδρικές ενδιάμεσες οπές (πράσινα άτομα)

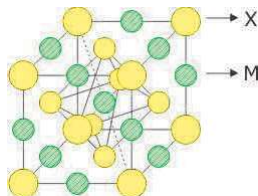
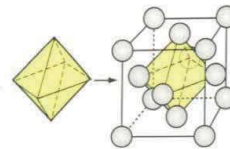
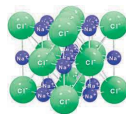


**Καρβίδιο του πυριτίου:** πλέγμα FCC Si (Si-μπλε) με ένα πρόσθετο άτομο C σε κάθε μια από τις τετραεδρικές ενδιάμεσες οπές (C-καφέ)

## Κρύσταλλοι Κεραμικών - Οξείδια με δομή ορυκτού άλατος (halite-αλίτης):

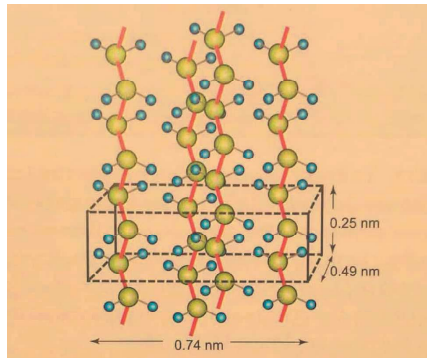


**π.χ NaCl:** πλέγμα FCC αμετάλλου (Cl) με άτομα μετάλλου (Na) να καταλαμβάνουν οκταεδρικές οπές.



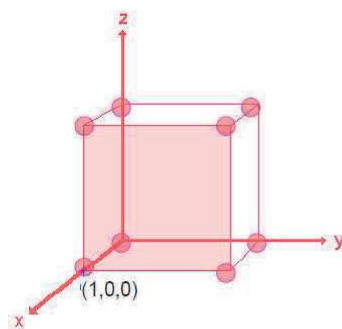
**π.χ MgO:** πλέγμα FCC O, με άτομα μετάλλου (Mg) να καταλαμβάνουν οκταεδρικές οπές.

## Κρύσταλλοι Πολυμερών



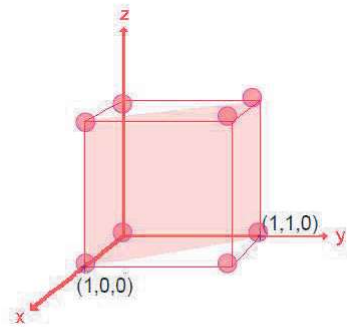
Παράδειγμα Πολυαιθελυνίου:  
Ευθυγραμμισμένες αλυσίδες με  
επαναλαμβανόμενη δομή.

## ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ



| Άξονας           | x     | y           | z           |
|------------------|-------|-------------|-------------|
| Σημεία τομής     | 1     | $\infty$    | $\infty$    |
| αντίστροφοι      | 1/1   | 1/ $\infty$ | 1/ $\infty$ |
| μικρότερος λόγος | 1     | 0           | 0           |
| Δείκτες Miller   | (100) |             |             |

### ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ

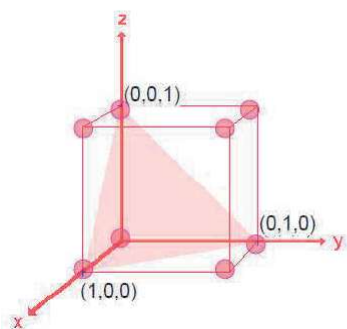


| Άξονας               | x   | y   | z           |
|----------------------|-----|-----|-------------|
| Σημεία τομής         | 1   | 1   | $\infty$    |
| αντίστροφοι          | 1/1 | 1/1 | 1/ $\infty$ |
| μικρότερος λόγος     | 1   | 1   | 0           |
| Δείκτες Miller (110) |     |     |             |

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. - ΟΚΜ

(125)

### ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ

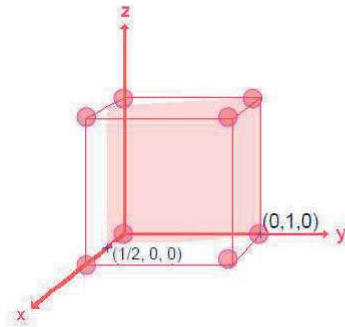


| Άξονας               | x   | y   | z   |
|----------------------|-----|-----|-----|
| Σημεία τομής         | 1   | 1   | 1   |
| αντίστροφοι          | 1/1 | 1/1 | 1/1 |
| μικρότερος λόγος     | 1   | 1   | 1   |
| Δείκτες Miller (111) |     |     |     |

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. - ΟΚΜ

(126)

### ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ

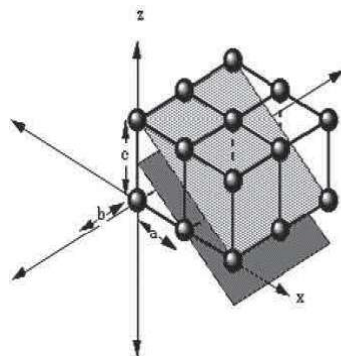


| Αξονας               | x       | y   | z           |
|----------------------|---------|-----|-------------|
| Σημεία τομής         | 1/2     | 1   | $\infty$    |
| αντίστροφοι          | 1/(1/2) | 1/1 | 1/ $\infty$ |
| μικρότερος λόγος     | 2       | 1   | 0           |
| Δείκτες Miller (210) |         |     |             |

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. – ΟΚΜ

(127)

### ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ

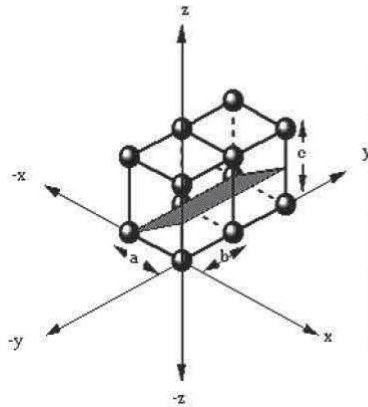


| Αξονας               | a   | b           | c       |
|----------------------|-----|-------------|---------|
| Σημεία τομής         | 1   | $\infty$    | 1/2     |
| αντίστροφοι          | 1/1 | 1/ $\infty$ | 1/(1/2) |
| μικρότερος λόγος     | 1   | 0           | 2       |
| Δείκτες Miller (102) |     |             |         |

Μπαδογιάννης Ε. - 1<sup>ο</sup> Εξάμ. – ΟΚΜ

(128)

# ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ



| Άξονας                       | a    | b           | c                   |
|------------------------------|------|-------------|---------------------|
| Σημεία τομής                 | -1   | $\infty$    | $\frac{1}{2}$       |
| αντίστροφοι                  | 1/-1 | 1/ $\infty$ | 1/( $\frac{1}{2}$ ) |
| μικρότερος λόγος             | -1   | 0           | 2                   |
| Δείκτες Miller $(\bar{1}02)$ |      |             |                     |