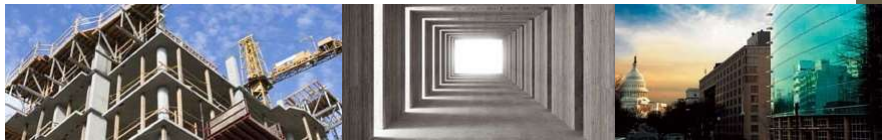


ΟΙΚΟΛΟΓΙΑ & ΧΗΜΕΙΑ ΓΙΑ ΜΗΧΑΝΙΚΟΥΣ

Εισαγωγή στη Χημεία Υλικών ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ & ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

CRYSTAL STRUCTURE & PROPERTIES



Μπαδογιάννης Ε.

87

ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ

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

Μπαδογιάννης Ε. - 1^η Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 88 }

88

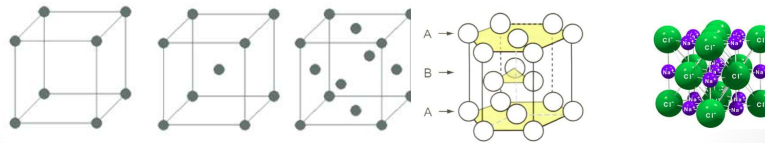
ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΑ – ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΟΜΗ

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^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

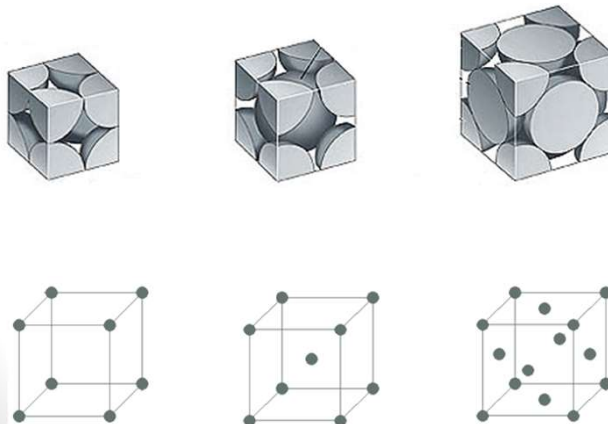
89

89

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

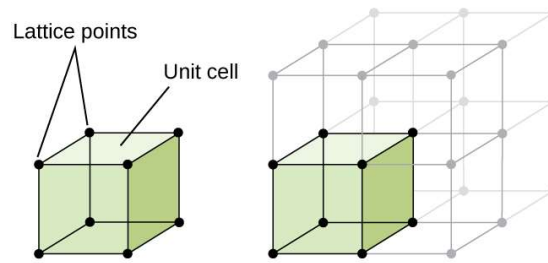
Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

90

90

ΜΟΝΑΔΙΑΙΑ ΚΥΨΕΛΙΔΑ – ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ ΠΛΕΓΜΑΤΩΝ

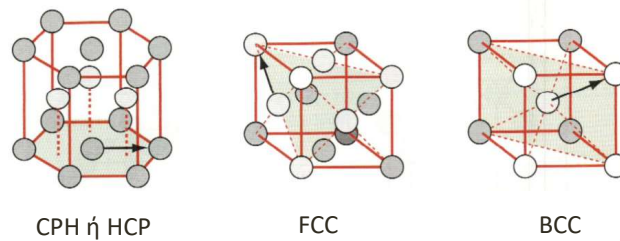
- Η επανάληψη της μοναδιαίας κυψελίδας στις τρεις διαστάσεις του χώρου, παράγει το κρυσταλλικό πλέγμα,
- αντιπροσωπεύει τη συμμετρία της κρυσταλλικής δομής,
- έτσι, οι θέσεις των ατόμων να μπορούν να δημιουργηθούν από μεταθέσεις ακέραιων αποστάσεων της μοναδιαίας κυψελίδας, προς τη διεύθυνση της κάθε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



91

ΠΛΕΓΜΑΤΑ

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



CPH ή HCP

FCC

BCC

92

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.

93

93

Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

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

93

Συχνότερα απαντώμενες δομές

The Periodic Table of the Elements

94


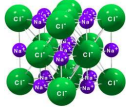
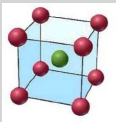

94

Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

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

94

ΔΙΕΥΘΕΤΗΣΗ ΑΤΟΜΩΝ ΣΤΟ ΠΛΕΓΜΑ

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

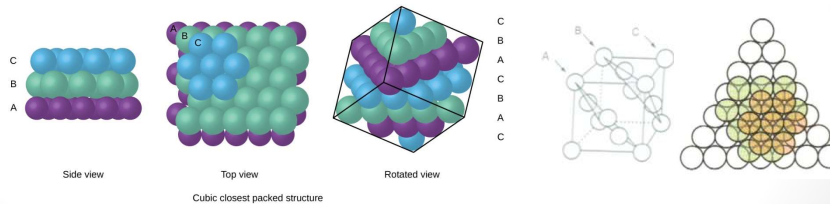
Μπαρογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

95

95

Χαρακτηριστικά δομής FCC

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

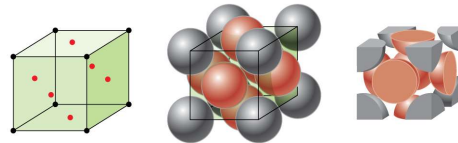
Μπαρογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

96

96

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	Χημικός, πυρηνικός, κρυογενικός εξοπλισμός, μαγειρικά σκεύη,...
Άργυρος, χρυσός, λευκόχρυσος	Κοσμήματα, κέρματα....

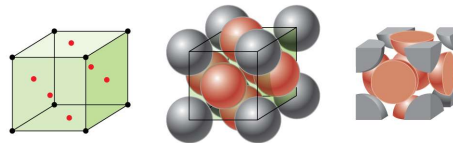


Face-centered cubic structure

97

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



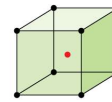
Face-centered cubic structure

98

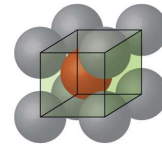
Χαρακτηριστικά δομής BCC

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

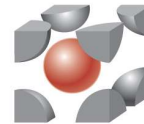
Lattice point location



Cubic unit cells

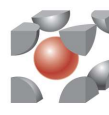
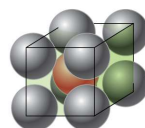
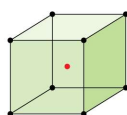


Body-centered cubic



Τεχνικά Υλικά με δομή BCC

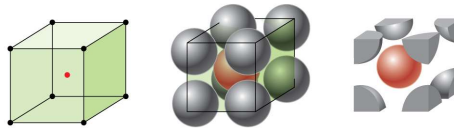
Είδος	Τυπικές Χρήσεις
Σίδηρος, χάλυβας μεσαίας περιεκτικότητας σε C	Κατασκευές, αυτοκίνητα, δοχεία, κ.α.
Ανθρακούχοι χάλυβες, χάλυβες χαμηλής κραμάτωσης	Εξαρτήματα μηχανών, εργαλεία, σωλήνες, εξαρτήματα μονάδων παραγωγής ενέργειας
Βολφράμιο	Λαμπτήρες πυρακτώσεως
Χρώμιο	Επιμεταλλώσεις



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

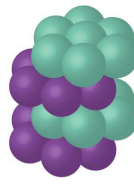
Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 101 }

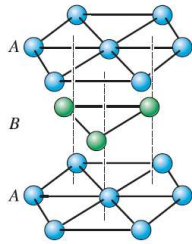
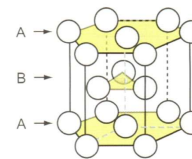
101

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
- Πυκνά επίπεδα με σειρά ABAB...



Hexagonal closest packed



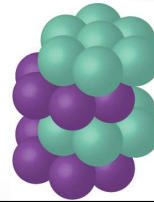
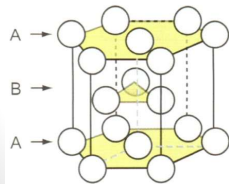
Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 102 }

102

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)

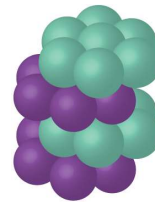
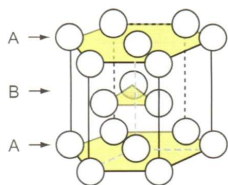
Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

103

103

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

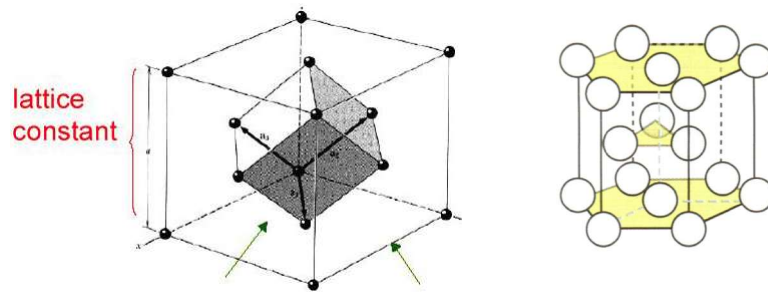
Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

104

104

Σταθερά Πλέγματος

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



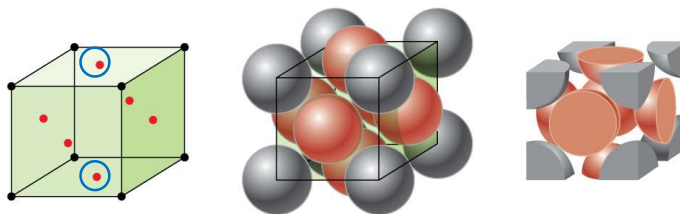
Μπασογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 105 }

105

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);

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

Μπασογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 106 }

Google Drive Ασκ. 3

106

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.

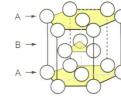
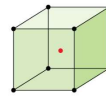
$$\text{Αρ. ατόμων ανά μον. κυψελίδα: } N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8}$$

N_i : αρ. εσωτερικών ατόμων

N_f : αρ. ατόμων στις επιφάνειες

N_c : αρ. ατόμων στις κορυφές

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



Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 107 }

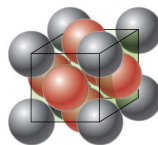
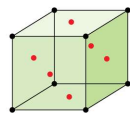
Google Drive Ασκ. 4

107

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...

Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 108 }

Google Drive Ασκ. 5, 6

108

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 (cm^3)

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

Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

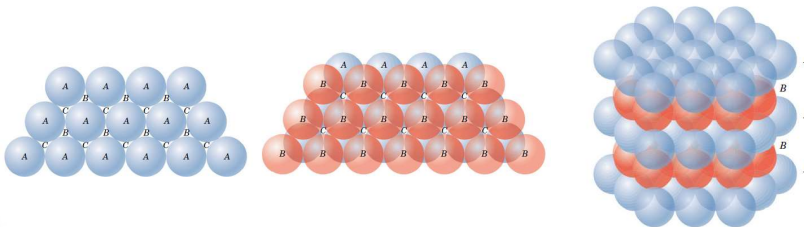
(109)

Google Drive Ασκ. 7

109

ΤΡΟΠΟΙ ΣΤΟΙΒΑΞΗΣ: Ι. Μεγίστης πυκνότητας (close packed)

1^{ος} 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 μέγιστης πυκνότητας, close-packed hexagonal, απαντάται στην εξαγωνική, HCP)



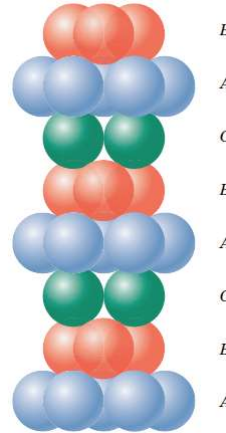
Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

(110)

110

ΤΡΟΠΟΙ ΣΤΟΙΒΑΞΗΣ: II. Μεγίστης πυκνότητας (close packed)

2^{ος} 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)

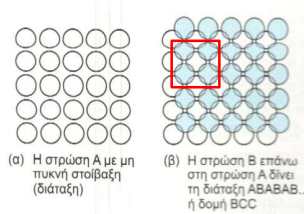
Μπαδογιάννης Ε. - 1^η Εξάμ. - ΟΧΜ

(111)

111

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

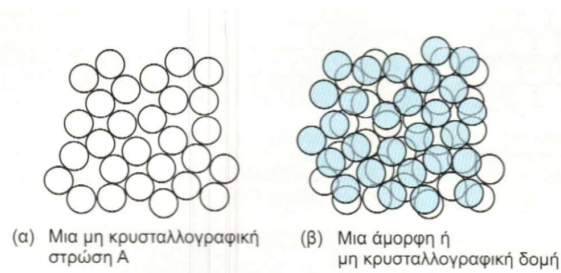
Μπαδογιάννης Ε. - 1^η Εξάμ. - ΟΧΜ

(112)

112

ΤΡΟΠΟΙ ΣΤΟΙΒΑΞΗΣ: ΙΙΙ. Άμορφη στοίβαξη

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



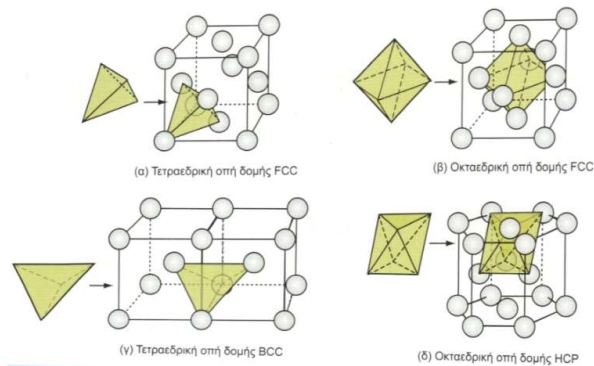
Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

113

113

Ενδιάμεσος χώρος – «Οπές»

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



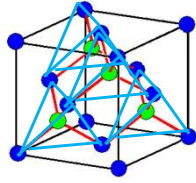
Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

114

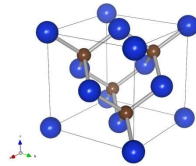
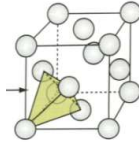
Παράδειγμα: Ο Χάλυβας έχει δομή BCC, αλλά και FCC σε υψηλότερη θερμοκρασία. Ο άνθρακας μπορεί να καταλάβει τον ενδιάμεσο χώρο. Αυτό δίνει στον χάλυβα αντοχή λόγω της σχετικής παραμόρφωσης που δέχεται το πλέγμα.

114

Κρύσταλλοι Κεραμικών - Κυβική δομή διαμαντιού (DC)



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



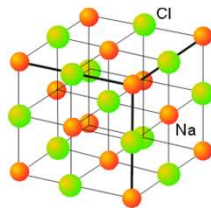
Καρβίδιο του πυριτίου: πλέγμα FCC Si (Si-μπλε) με ένα πρόσθετο άτομο C σε κάθε μια από τις τετραεδρικές ενδιάμεσες οπές (C-καφέ)

Μπασογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

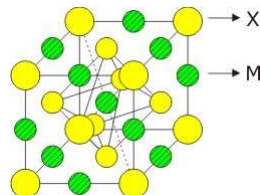
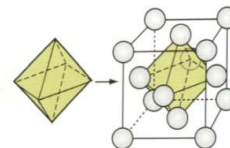
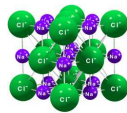
(115)

115

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



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



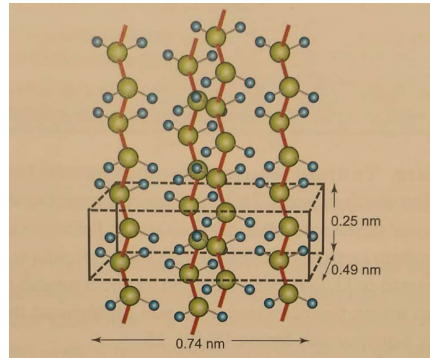
π.χ MgO: πλέγμα FCC O, με άτομα μετάλλου (Mg) να καταλαμβάνουν οκταεδρικές οπές.

Μπασογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

(116)

116

Κρύσταλλοι Πολυμερών



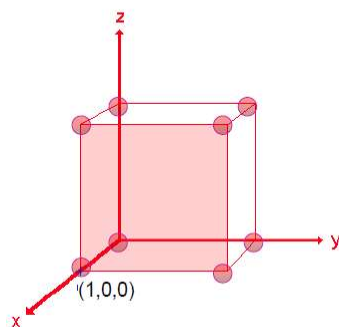
Παράδειγμα Πολυαιθελυνίου:
Ευθυγραμμισμένες αλυσίδες με επαναλαμβανόμενη δομή.

Μπαζογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 117 }

117

ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ



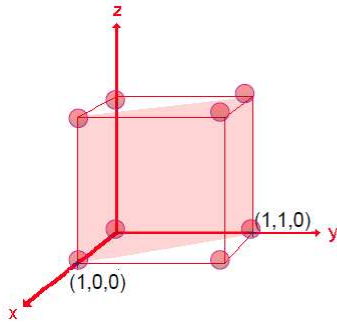
Άξονας	x	y	z
Σημεία τομής	1	∞	∞
αντίστροφοι	1/1	1/ ∞	1/ ∞
μικρότερος λόγος	1	0	0
Δείκτες Miller	(100)		

Μπαζογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 118 }

118

ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ



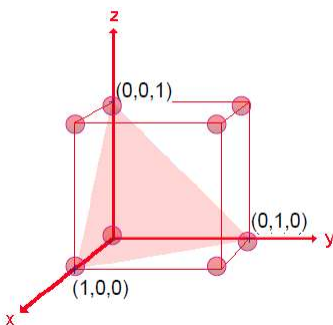
Άξονας	x	y	z
Σημεία τομής	1	1	∞
αντίστροφοι	1/1	1/1	1/ ∞
μικρότερος λόγος	1	1	0
Δείκτες Miller (110)			

Μπαλογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

(119)

119

ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ



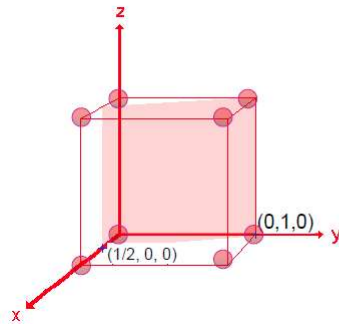
Άξονας	x	y	z
Σημεία τομής	1	1	1
αντίστροφοι	1/1	1/1	1/1
μικρότερος λόγος	1	1	1
Δείκτες Miller (111)			

Μπαλογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

(120)

120

ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ



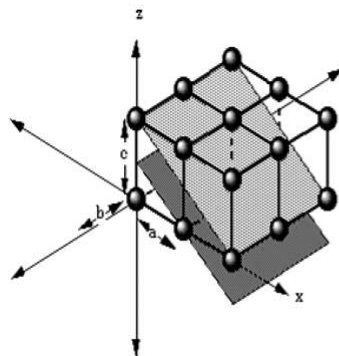
Άξονας	x	y	z
Σημεία τομής	1/2	1	∞
αντίστροφοι	1/(1/2)	1/1	1/ ∞
μικρότερος λόγος	2	1	0
Δείκτες Miller (210)			

Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

(121)

121

ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ



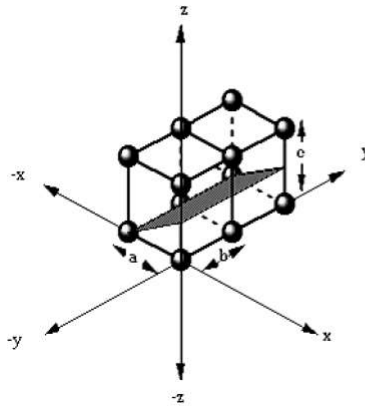
Άξονας	a	b	c
Σημεία τομής	1	∞	1/2
αντίστροφοι	1/1	1/ ∞	1/(1/2)
μικρότερος λόγος	1	0	2
Δείκτες Miller (102)			

Μπαδογιάννης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

(122)

122

ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΕΠΙΠΕΔΑ-ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER ΕΠΙΠΕΔΟΥ



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

Μπαδουράκης Ε. - 1^ο Εξάμ. - ΟΧΜ

{ 123 }