

2. ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΟΜΗ

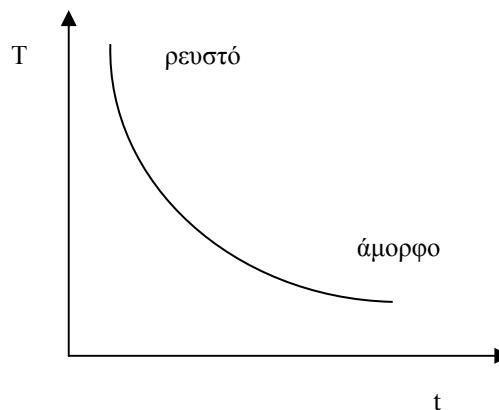
2.1 ΑΜΟΡΦΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ

Κατά την ψύξη ενός υγρού είναι δυνατό, ενώ η θερμοκρασία του γίνεται μικρότερη του σημείου τήξης του, το υγρό να χάσει μεν τη ρευστότητά του, δηλαδή να στερεοποιηθεί, τα μόριά του όμως να μην αποκτήσουν καθορισμένη διάταξη, με αποτέλεσμα το ρευστό να περιέλθει σε **στερεά άμορφη κατάσταση**. Τα άμορφα σώματα μπορούν να θεωρηθούν ότι είναι υγρά με εξαιρετικά μικρή ρευστότητα, (η οποία ωστόσο πάντοτε υπάρχει) και μεγάλο ιξώδες.

Χαρακτηριστική περίπτωση είναι το γυαλί. Έχει διαπιστωθεί ότι τα παλιά τζάμια σε παράθυρα εκκλησιών έχουν γίνει με το χρόνο παχύτερα στο κάτω μέρος τους, λόγω της προς τα κάτω ροής του γυαλιού με την επίδραση του βάρους του.

Στα άμορφα σώματα η γραφική παράσταση της μεταβολής της θερμοκρασίας τους με το χρόνο κατά τη διάρκεια της πήξης τους (**καμπύλη τήξης**) είναι μία συνεχής καμπύλη, στην οποία δεν υπάρχει χαρακτηριστικό σημείο για το σημείο τήξης.

ΣΧΗΜΑ 2.1: Καμπύλη απόψυξης για άμορφο σώμα.



2.2 ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ

Κρύσταλλος ή κρυσταλλίτης είναι τμήμα της στερεάς ύλης που εμφανίζει την ίδια δομή σε όλη του την έκταση.

Κύριο χαρακτηριστικό των κρυσταλλικών σωμάτων είναι η **κρυσταλλική δομή**. Κρυσταλλική δομή ορίζεται μία διάταξη ατόμων στο χώρο η οποία παρουσιάζει περιοδικότητα στις τρεις διαστάσεις. Οι βασικές τους ιδιότητες είναι οι ακόλουθες:

A. Είναι σώματα **ανισότροπα**, δηλαδή οι ιδιότητές τους δεν είναι οι ίδιες κατά τις διάφορες διευθύνσεις μέσα στη μάζα τους.

B. Έχουν συγκεκριμένο γεωμετρικό σχήμα, το οποίο αποτελείται από επίπεδες επιφάνειες που τέμνονται σε ευθείες ακμές. Μεγαλύτερη σημασία από

την εξωτερική κατασκευή έχει η εσωτερική δομή των ατόμων ή μορίων, από τα οποία κατασκευάζεται ο κρύσταλλος.

Γ. Έχουν **καθορισμένο σημείο τήξης**, το οποίο αποτελεί και μέτρο ελέγχου της καθαρότητάς τους. Η καμπύλη τήξης τους εμφανίζει για τους καθαρούς κρυστάλλους χαρακτηριστικό ευθύγραμμο τμήμα, παράλληλο με τον άξονα των χρόνων, που αντιστοιχεί στο σημείο τήξης του υλικού. Για μη καθαρούς κρυστάλλους εμφανίζεται επίσης χαρακτηριστική περιοχή πήξης, η οποία όμως δεν αντιστοιχεί σε διατήρηση σταθερής θερμοκρασίας.

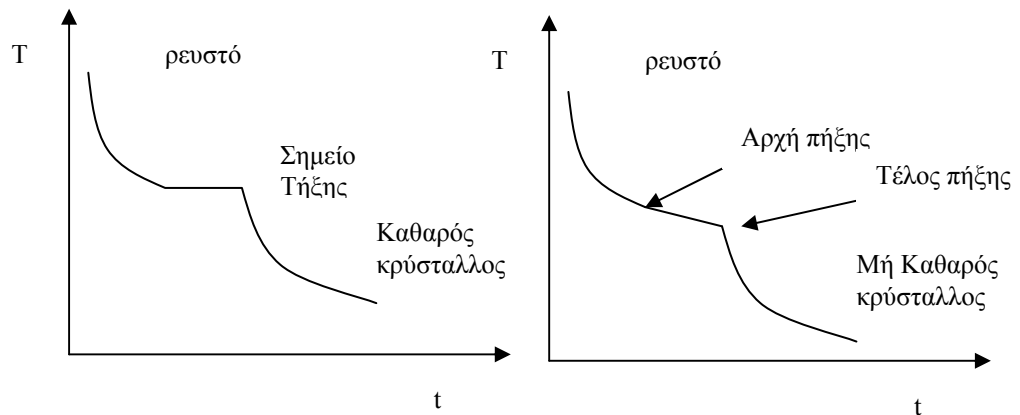
Δ. Με εξαίρεση τους κρυστάλλους του κυβικού συστήματος, όλοι οι κρύσταλλοι είναι **διπλοθλαστικοί**, δηλαδή κάθε φωτεινή ακτίνα που τους διαπερνά χωρίζεται σε δύο επιμέρους ακτίνες, **πολωμένες** σε κάθετα επίπεδα

Στοιχειώδες κύτταρο ονομάζεται το μικρότερο σύνολο ατόμων, το οποίο αν επαναληφθεί στις τρεις διαστάσεις δημιουργεί την κρυσταλλική δομή.

Κρυσταλλικό πλέγμα είναι η κρυσταλλική δομή χωρίς την παρουσία των δομικών στοιχείων (ατόμων ή μορίων).

Κυψελίδα χαρακτηρίζουμε τη γεωμετρική δομή του στοιχειώδους κυττάρου χωρίς τα δομικά στοιχεία του.

ΣΧΗΜΑ 2.2: Καμπύλες απόψυξης για καθαρό κρύσταλλο και μη καθαρό κρύσταλλο.



2.3 ΚΑΤΗΓΟΡΙΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ

Ένα σώμα θεωρείται συμμετρικό αν έχει ένα ή περισσότερα στοιχεία συμμετρίας (επίπεδα, άξονες ή σημεία). **Χαμηλή συμμετρία** εμφανίζει ένα σώμα αν έχει π.χ. ένα επίπεδο συμμετρίας, ενώ **υψηλή συμμετρία** όταν εμφανίζει πολλά στοιχεία συμμετρίας (π.χ. ο κύβος ο οποίος εμφανίζει πολλά επίπεδα και άξονες συμμετρίας).

Το **επίπεδο συμμετρίας** χωρίζει το στερεό σχήμα σε δύο ταυτόσημα ή κατοπτρικά όμοια σχήματα. Ο **άξονας συμμετρίας** επιτρέπει στο σχήμα να παίρνει την ίδια θέση στο χώρο περισσότερο από μία φορές κατά την πλήρη περιστροφή του γύρω από τον εν λόγω άξονα. Αν αυτό συμβαίνει **η** φορές κατά τη διάρκεια μία πλήρους περιστροφής, τότε αρκεί η περιστροφή του κατά γωνία

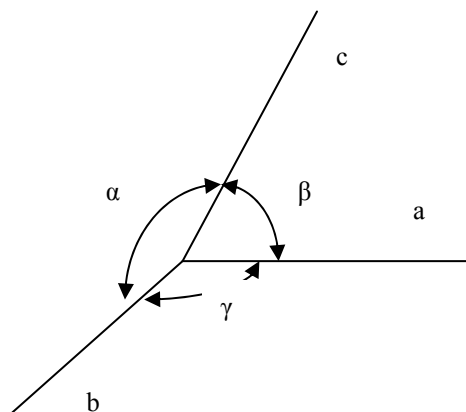
$$\varphi = 2\pi/\eta$$

Ο αριθμός **η** εκφράζει την τάξη συμμετρίας του άξονα και παίρνει τιμές 2, 3, 4 ή 6.

Κρυσταλλογραφικοί άξονες είναι ευθείες που τέμνονται στο κέντρο του κρυστάλλου και ταυτίζονται, αν είναι αυτό δυνατό, με τους άξονες συμμετρίας του. Ουσιαστικά αποτελούν σύστημα συντεταγμένων στο χώρο για την περιγραφή του κρυστάλλου, το οποίο δεν είναι απαραίτητα ορθοκανονικό. Χαρακτηρίζονται από τα γράμματα **a**, **b** και **c** τα οποία αντιστοιχούν στα μοναδιαία τους διανύσματα (τις αντίστοιχες πλευρές του στοιχειώδους κυττάρου), με το πρώτο να έχει κατεύθυνση προς τον παρατηρητή, το δεύτερο παράλληλο προς τον παρατηρητή και με φορά προς τα δεξιά, ενώ το τρίτο έχει κατεύθυνση προς τα πάνω. Οι μεταξύ των αξόνων γωνίες χαρακτηρίζονται με τα γράμματα **α**, **β**, **γ**. Η γωνία **α** αντιστοιχεί στη γωνία μεταξύ των αξόνων **b** και **c** κ.ο.κ.

ΣΧΗΜΑ 2.3:

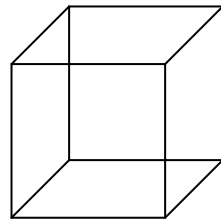
Κρυσταλλογραφικοί
άξονες και αντίστοιχες
γωνίες.



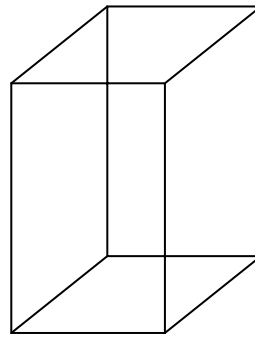
Ανάλογα με τη σχέση των γωνιών και των πλευρών του στοιχειώδους κυττάρου, οι κρύσταλλοι χωρίζονται σε **7 κρυσταλλογραφικά συστήματα**.

A/A	ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΟ ΣΥΣΤΗΜΑ	ΓΕΩΜΕΤΡΙΚΟ ΣΧΗΜΑ ΚΥΨΕΛΙΔΑΣ	ΓΩΝΙΕΣ α, β, γ	ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ a, b, c
1	Κυβικό	Κύβος	$\alpha=\beta=\gamma=90$	$a=b=c$
2	Τετραγωνικό	Ορθ. Πρίσμα	$\alpha=\beta=\gamma=90$	$a=b > c$
3	Ορθορομβικό	Ορθ. Πρίσμα	$\alpha=\beta=\gamma=90$	$a > b > c$
4	Ρομβοεδρικό	Παραλληλεπίπεδο	$\alpha=\beta=\gamma < 90$	$a=b=c$
5	Μονοκλινές	Παραλληλεπίπεδο	$\alpha=\gamma=90$ $\beta > 90$	$a > b > c$
6	Τρικλινές	Παραλληλεπίπεδο	$\alpha > \beta > \gamma$ > 90	$a > b > c$
7	Εξαγωνικό	Πρίσμα	$\alpha=\beta=90$ $\gamma=120$	$a=b > c$

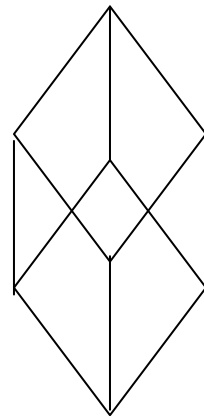
ΣΧΗΜΑ 2.4: Τα 7 κρυσταλλογραφικά συστήματα.



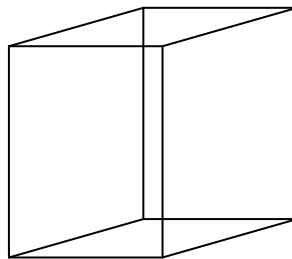
ΚΥΒΙΚΟ



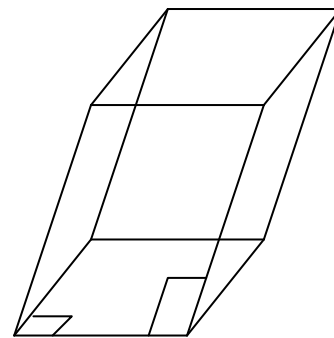
ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΟ



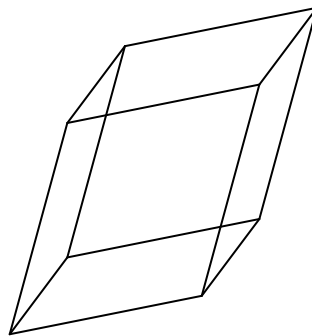
ΡΟΜΒΟΕΔΡΙΚΟ



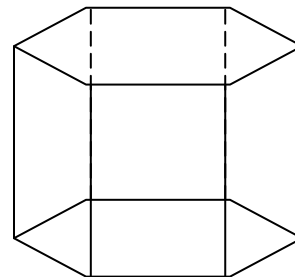
ΟΡΘΟΡΟΜΒΙΚΟ



ΜΟΝΟΚΛΙΝΕΣ



ΤΡΙΚΛΙΝΕΣ



ΜΕΓΙΣΤΗΣ
ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ
ΕΞΑΓΩΝΙΚΟ

Για κάθε κρυσταλλική δομή τα βασικά χαρακτηριστικά είναι τα ακόλουθα:

- Ο αριθμός των ατόμων (τ) ανά κύτταρο
- Η ελάχιστη απόσταση (δ) μεταξύ των κέντρων δύο γειτονικών ατόμων
- Ο αριθμός συνδιάταξης (CN) δηλαδή ο αριθμός των πιο κοντινών γειτονικών ατόμων σε ίση απόσταση (δ) από τυχαίο άτομο.
- Ο αριθμός ατομικής πλήρωσης (APF), δηλαδή ο όγκος των ατόμων του στοιχειώδους κυττάρου προς τον όγκο της κυψελίδας, ο οποίος αποτελεί ένα μέτρο της πυκνότητας της κρυσταλλικής δομής.

Ανάλογα με την φύση των ελκτικών δυνάμεων που υφίστανται μεταξύ των δομικών τους μονάδων διακρίνονται σε:

- Ιοντικής κατασκευής (δομικές μονάδες ιόντα).
- Ομοιοπολικής κατασκευής (δομικές μονάδες άτομα).
- Μοριακής κατασκευής (δομικές μονάδες μόρια ή άτομα στην περίπτωση των στερεοποιημένων ευγενών αερίων).
- Μεταλλικής κατασκευής (δομικές μονάδες μεταλλοκατιόντα).

2.4 ΔΕΙΚΤΕΣ Miller ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

Οι δείκτες Miller είναι ακέραιοι αριθμοί που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή επιπέδων, διευθύνσεων, οικογενειών επιπέδων ή οικογενειών διευθύνσεων, σε μία κρυσταλλική δομή. Για χαρακτηρισμό επιπέδων περικλείονται εντός παρενθέσεων (), για κρυσταλλικές διευθύνσεις χρησιμοποιούνται αγκύλες [], για οικογένεια επιπέδων άγκιστρα {}, ενώ για οικογένεια διευθύνσεων χρησιμοποιούνται βέλη < >. Σε περίπτωση αρνητικού δείκτη, το - γράφεται πάνω από τον δείκτη.

2.4.1 Κυβικά συστήματα

Στα κυβικά συστήματα έχουμε τρεις δείκτες Miller: h, k, l. Οι δείκτες Miller ενός επιπέδου είναι οι αντίστροφοι των αποτεμνουσών του επιπέδου με τους τρεις άξονες, μειούμενοι στους ελάχιστους ακεραίους (μετά από διαίρεση με τον μέγιστο κοινό διαιρέτη).

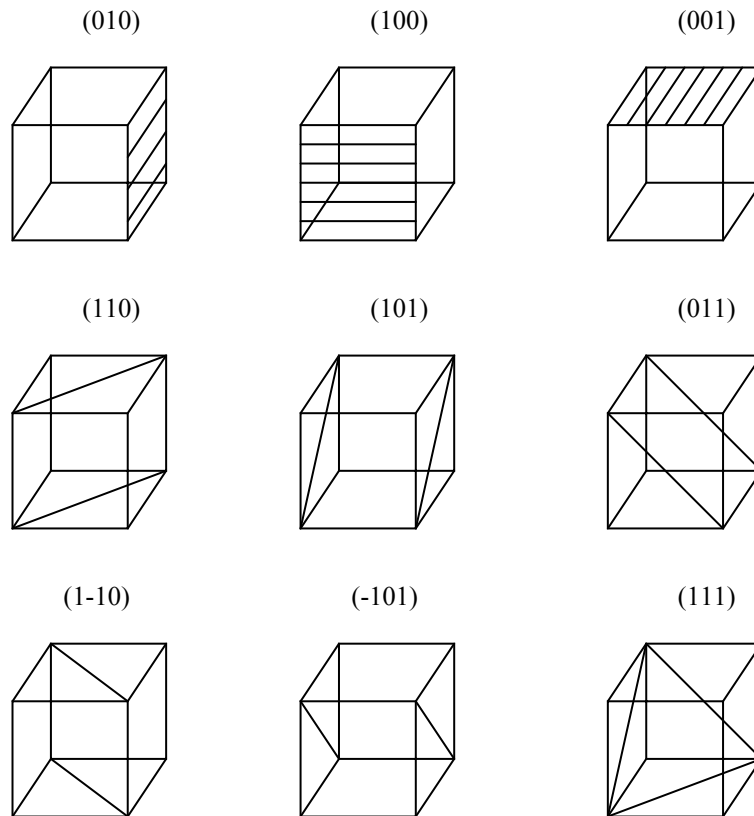
Όλα τα παράλληλα και ισαπέχοντα επίπεδα έχουν τους ίδιους δείκτες Miller.

Για κάποια κρυσταλλογραφική διεύθυνση, οι δείκτες Miller προκύπτουν αν φέρουμε διάνυσμα παράλληλο προς τη διεύθυνση από την αρχή των αξόνων. Οι συντεταγμένες του διανύσματος είναι και οι δείκτες Miller (οι μικρότεροι ακέραιοι).

Στο κυβικό σύστημα μία διεύθυνση είναι κάθετη στο επίπεδο με ίδιους δείκτες Miller.

ΣΧΗΜΑ 2.5:

Παραδείγματα
κρυσταλλογραφικών
επιπέδων κυβικού
συστήματος.

**2.4.2 Εξαγωνικό σύστημα**

Στο εξαγωνικό σύστημα ορίζονται 4 δείκτες Miller: h , k , i , l οι οποίοι αναφέρονται στους 4 άξονες a_1 , a_2 , a_3 και c . Οι τρεις πρώτοι βρίσκονται στο επίπεδο της βάσης ανά 120 μοίρες και ο τέταρτος είναι κάθετος στη βάση του εξαγωνικού πρίσματος. Οι τρεις πρώτοι δείκτες συνδέονται με τη σχέση

$$h + k = -i$$

Αν h' , k' και l' οι δείκτες Miller για σύστημα τριών αξόνων a_1 , a_2 , και c , τότε οι αντίστοιχοι για το σύστημα των 4 αξόνων προκύπτουν από τις σχέσεις:

$$h = (2h' - k')/3$$

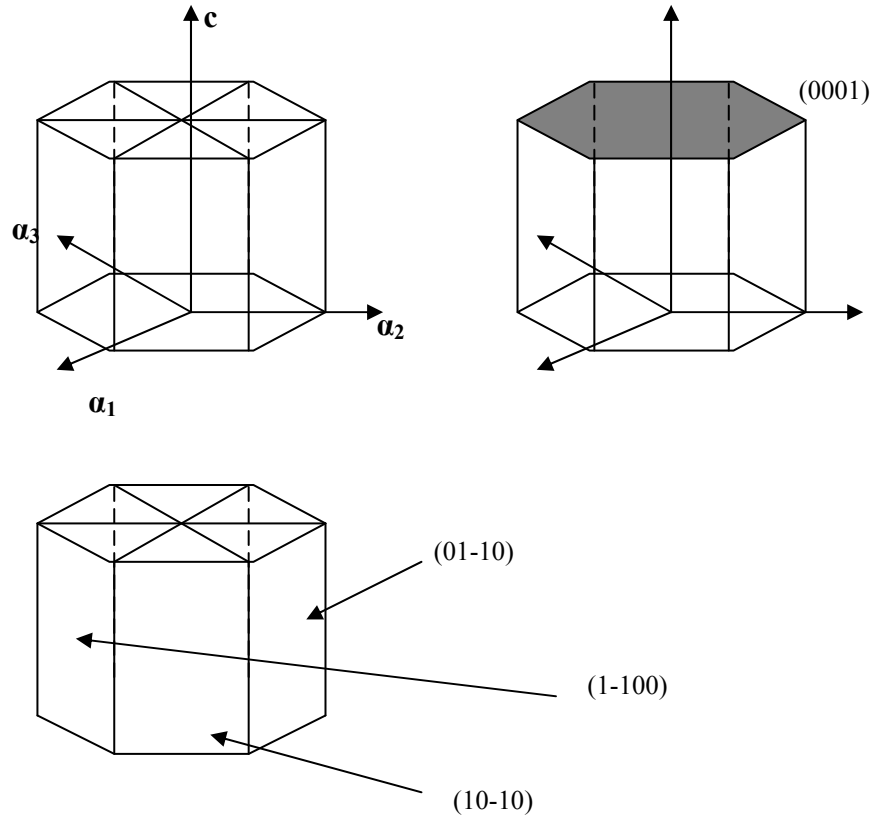
$$k = (2k' - h')/3$$

$$i = -(h' + k')/3$$

$$l = l'$$

φυσικά μετατρέποντάς τους στη μορφή των ελαχίστων ακεραίων. Αυτή είναι η πιο εύκολη διαδικασία για την εύρεσή τους.

ΣΧΗΜΑ 2.6: Άξονες και επίπεδα εξαγωνικού συστήματος.



2.5 ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΗ ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΟΙΚΟΓΕΝΕΙΑΣ ΠΑΡΑΛΛΗΛΩΝ ΕΠΙΠΕΔΩΝ

Η απόσταση d μεταξύ δύο παραλλήλων διαδοχικών επιπέδων που έχουν τους ίδιους δείκτες Miller (h, k, l) για ορθογώνιο σύστημα αξόνων δίδεται

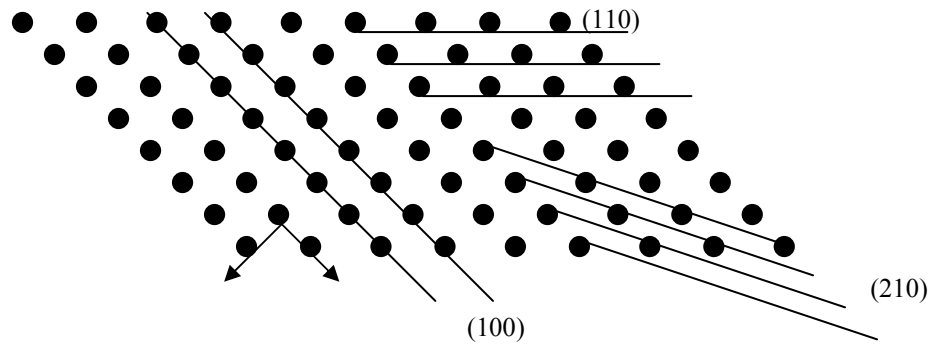
$$d = 1 / [(h^2/a^2) + (k^2/b^2) + (l^2/c^2)]^{1/2}$$

Για το κυβικό σύστημα γίνεται

$$d = 1 / [h^2 + k^2 + l^2]^{1/2}$$

Καθώς οι δείκτες Miller αυξάνονται η απόσταση d ελαττώνεται και ταυτόχρονα ελαττώνεται και η πυκνότητα των πλεγματικών κόμβων στα επίπεδα αυτά.

ΣΧΗΜΑ 2.7:
Μεταβολή των
πλεγματικών
αποστάσεων με αλλαγή
των
κρυσταλλογραφικών
διευθύνσεων.



2.6 ΚΥΡΙΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΕΣ ΔΟΜΕΣ ΤΩΝ ΜΕΤΑΛΛΩΝ

Τα περισσότερα μέταλλα κρυσταλλώνονται σε ένα από τους παρακάτω τρεις τύπους κρυσταλλικής δομής:

- Κυβικό Χωροκεντρωμένο σύστημα (body centered cubic - bcc)
- Κυβικό Εδροκεντρωμένο σύστημα (face centered cubic - fcc)
- Μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα (hexagonal close packed - hcp)

2.6.1 Κυβικό Χωροκεντρωμένο (bcc)

Τα άτομα τοποθετούνται στις κορυφές και στο κέντρο στοιχειώδους κυψελίδας κυβικού πλέγματος πλευράς a .

Αριθμός ατόμων ανά κύτταρο (τ):

Κάθε άτομο κορυφής ανήκει κατά $1/8$ στο κύτταρο, ενώ το κεντρικό ανήκει εξ' ολοκλήρου, άρα:

$$\tau = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$$

Ελάχιστη ενδοατομική απόσταση (δ):

Είναι η απόσταση μεταξύ του κεντρικού ατόμου και των ατόμων της κορυφής. Αν r η ακτίνα του ατόμου τότε ισχύει

$$4r = 2\delta$$

και

$$4r = a \cdot 3^{1/2}$$

άρα

$$\delta = (a \cdot 3^{1/2})/2$$

Αριθμός Συνδιάταξης (CN):

Το κεντρικό άτομο ισαπέχει από τα 8 άτομα των κορυφών άρα

$$CN = 8$$

Αριθμός ατομικής πλήρωσης (APF):

$$APF = (V_{\text{ατόμων}}) / (V_{\text{κυψελίδας}})$$

$$= (\tau * (4/3)\pi r^3) / a^3$$

$$= (2 * (4/3)\pi r^3) / (4r/3^{1/2})^3$$

$$= 8,373 r^3 / 12,32 r^3$$

$$= 0,68$$

Το 68% του όγκου του κυττάρου καταλαμβάνεται από άτομα ενώ το υπόλοιπο 32% παραμένει κενό. Ο κρύσταλλος δηλαδή δεν αποτελεί τελείως συμπαγή δομή αλλά είναι δυνατό να χωρέσει και άλλα άτομα. Η κυψελίδα του bcc σχηματίζει δύο ειδών κενά. Ένα οκταεδρικής μορφής με μέγιστη χωρητικότητα σφαίρα ακτίνας 0,154r και ένα τετραεδρικής μορφής με μέγιστη ακτίνα ξένου σώματος ίση με 0,291r.

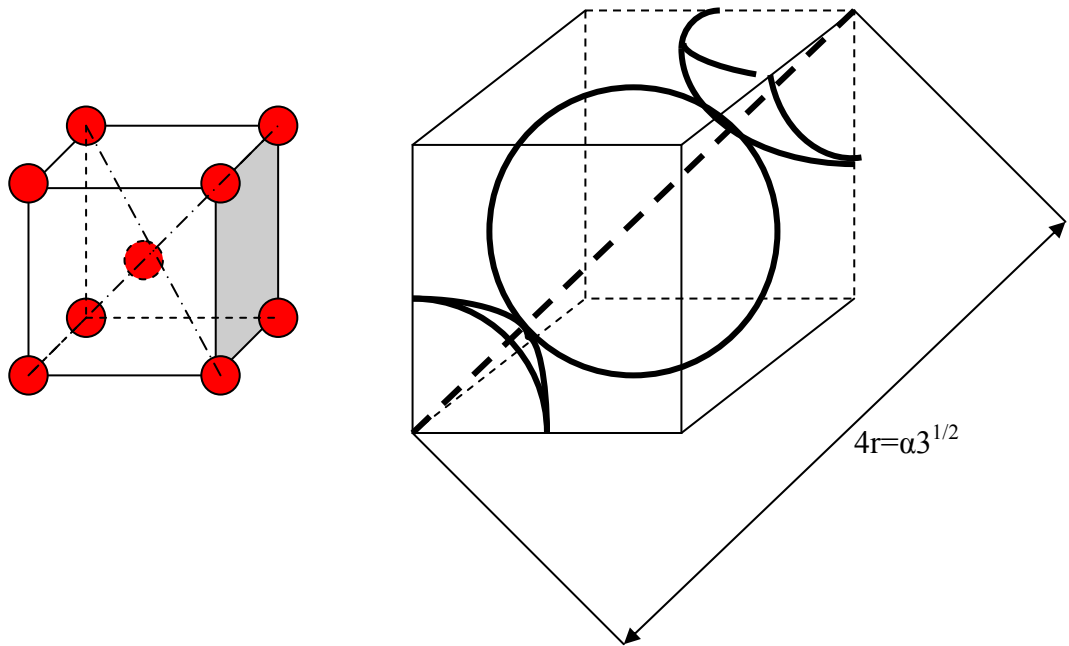
Αν σώμα μεγαλύτερης ακτίνας τοποθετηθεί εντός του τετραεδρικού κενού απαιτείται η μετατόπιση και των 4 ατόμων στις κορυφές του τετραέδρου, ενώ αντίθετα στο οκταεδρικό θα μετακινηθούν μόνο αυτά που αντιστοιχούν στα κέντρα του κύβου (οι ενδοατομικές αποστάσεις των κορυφών της έδρας επιτρέπουν να χωρέσει άτομο με ακτίνα πολύ μεγαλύτερη από 0,154r). Αυτή είναι μία πιθανή εξήγηση του λόγου που τα άτομα C προτιμούν τα οκταεδρικά κενά στο σχηματισμό των χαλύβων, μολονότι μικρότερα σε μέγεθος.

Πυκνότερα σε άτομα επίπεδα (6 σε αριθμό - οικογένεια {110}) είναι αυτά που σχηματίζονται από απέναντι ακμές και τις διαγώνιες των βάσεων που τις ενώνουν. Οι διευθύνσεις με την μέγιστη πυκνότητα είναι οι 4 διαγώνιοι του κύβου (8 διευθύνσεις - οικογένεια <111>).

Οι κυριότεροι εκπρόσωποι του bcc φαίνονται στον πίνακα που ακολουθεί:

ΜΕΤΑΛΛΟ	ΣΤΑΘΕΡΑ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ A (nm)	ΑΤΟΜΙΚΗ ΑΚΤΙΝΑ r (nm)
Χρόμιο	0,289	0,125
Σίδηρος	0,287	0,124
Μολυβδαίνιο	0,315	0,136
Κάλιο	0,533	0,231
Νάτριο	0,429	0,186
Ταντάλιο	0,330	0,143
Βολφράμιο	0,316	0,137
Βανάδιο	0,304	0,132

ΣΧΗΜΑ 2.8: Το Κυβικό Χωροκεντρωμένο σύστημα.



2.6.2. Κυβικό Εδροκεντρωμένο (fcc)

Τα άτομα τοποθετούνται στις 8 κορυφές της κυβικής κυψελίδας καθώς και στα κέντρα των 6 εδρών του κύβου πλευράς a .

Αριθμός ατόμων ανά κύτταρο (τ):

Κάθε άτομο κορυφής ανήκει κατά $1/8$ στο κύτταρο ενώ κάθε άτομο στο κέντρο της έδρας ανήκει κατά $1/2$ στο κύτταρο

$$\tau = 8 \cdot 1/8 + 6 \cdot 1/2 = 4$$

Ελάχιστη ενδοατομική απόσταση (δ):

Είναι η απόσταση μεταξύ του κεντρικού ατόμου κάθε έδρας και των ατόμων της κορυφής κάθε έδρας. Αν r η ακτίνα του ατόμου τότε ισχύει

$$4r = 2\delta$$

και

$$4r = a \cdot 2^{1/2}$$

άρα

$$\delta = (a \cdot 2^{1/2})/2$$

Αριθμός Συνδιάταξης (CN):

Κάθε άτομο κορυφής ανήκει κατά $1/8$ σε 8 διαφορετικά στοιχειώδη γειτονικά κύτταρα. Σε κάθε κύτταρο το άτομο αυτό έρχεται σε επαφή με τα 3

άτομα στα μέσα των αντίστοιχων εδρών που καταλήγουν στην εν λόγω κορυφή τα οποία όμως ανήκουν στο κύτταρο αυτό μόνο κατά το ήμισυ. Άρα

$$CN = 8 * 3/2 = 12$$

Αριθμός ατομικής πλήρωσης (APF):

$$APF = (V_{\text{ατόμων}}) / (V_{\text{κυψελίδας}})$$

$$= (\tau * (4/3)\pi r^3) / a^3$$

$$= (4 * (4/3)\pi r^3) / (4r/2^{1/2})^3$$

$$= 16,755 r^3 / 22,627 r^3$$

$$= 0,74$$

Το 74% του όγκου του κυττάρου καταλαμβάνεται από άτομα ενώ το υπόλοιπο 26% παραμένει κενό. Ο κρύσταλλος δηλαδή του fcc αποτελεί πιο συμπαγή δομή από τον κρύσταλλο του bcc.

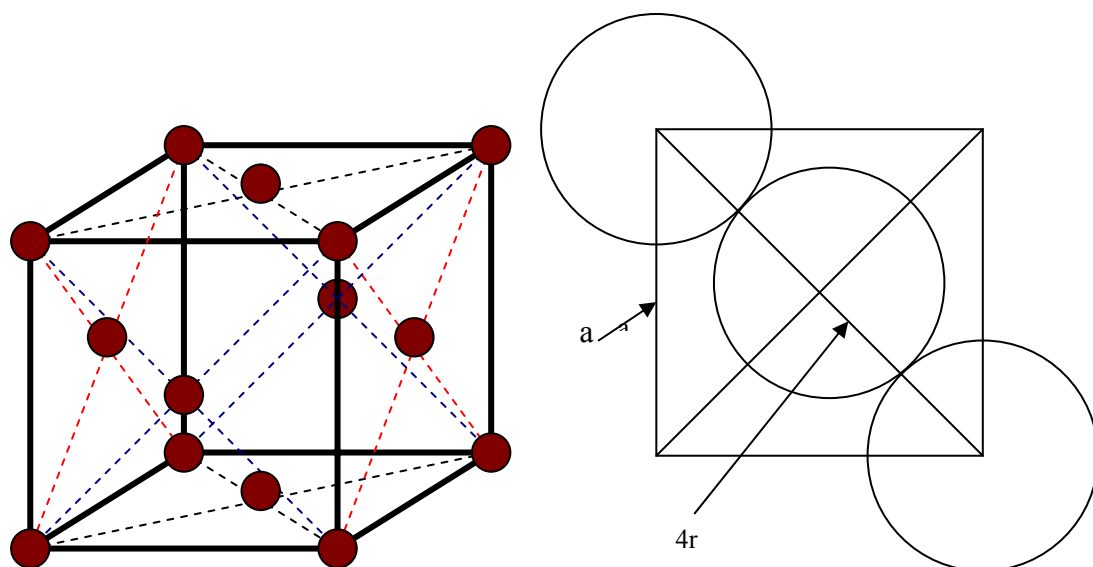
Η κυψελίδα του fcc σχηματίζει επίσης δύο ειδών κενά. Ένα οκταεδρικής μορφής με μέγιστη χωρητικότητα σφαίρα ακτίνας 0,414r και ένα τετραεδρικής μορφής με μέγιστη ακτίνα ξένου σώματος ίση με 0,225r.

Πυκνότερα σε άτομα επίπεδα (8 σε αριθμό – 4 οικογένειες {111}) είναι τα επίπεδα των εδρών του εγγεγραμμένου οκταέδρου που σχηματίζεται από τα κέντρα των εδρών του κύβου. Οι **διευθύνσεις με την μέγιστη πυκνότητα** είναι οι διαγώνιοι των εδρών του κύβου (3 διευθύνσεις - οικογένεια <110>).

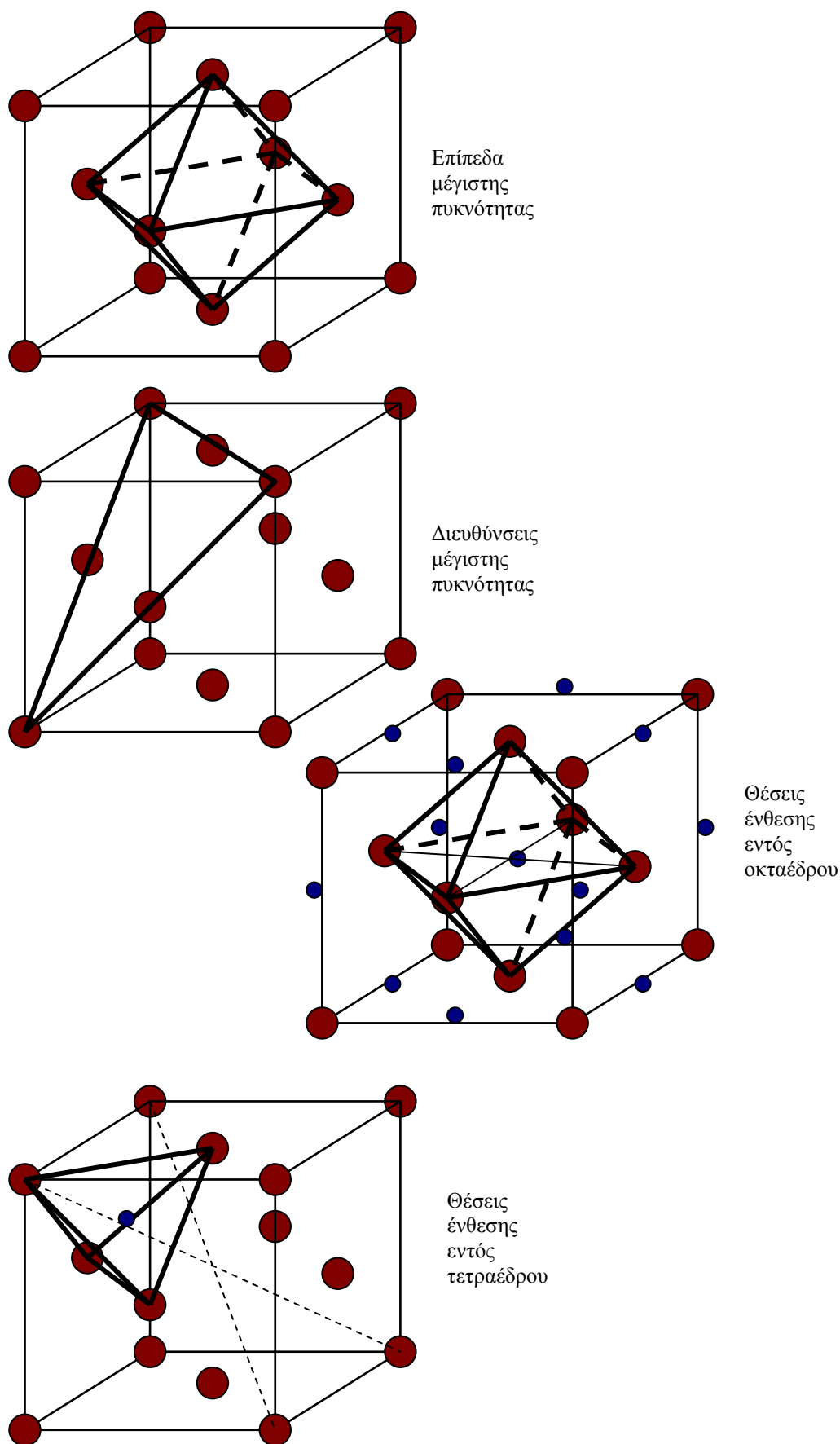
Οι κυριότεροι εκπρόσωποι του fcc φαίνονται στον πίνακα που ακολουθεί:

ΜΕΤΑΛΛΟ	ΣΤΑΘΕΡΑ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ a (nm)	ΑΤΟΜΙΚΗ ΑΚΤΙΝΑ r (nm)
Αλουμίνιο	0,405	0,143
Χαλκός	0,362	0,128
Χρυσός	0,408	0,144
Μόλυβδος	0,495	0,175
Νικέλιο	0,352	0,125
Πλατίνα	0,393	0,139
Άργυρος	0,409	0,144

ΣΧΗΜΑ 2.9: Το Κυβικό Εδροκεντρωμένο σύστημα.



ΣΧΗΜΑ 2.10: Επίπεδα και διευθύνσεις μέγιστης πυκνότητας, καθώς και θέσεις ένθεσης στο Κυβικό Εδροκεντρωμένο σύστημα.



2.6.3. Μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό (hcp)

Η στοιχειώδης κυψελίδα είναι ορθό πρίσμα με κανονική εξαγωνική βάση, το οποίο μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελείται από 6 ορθά πρίσματα ισοσκελούς τριγωνικής βάσης (αναλύουμε το κανονικό εξάγωνο της βάσης σε 6 ισοσκελή τρίγωνα).

Τα άτομα τοποθετούνται στις 12 κορυφές και στα 2 κέντρα των βάσεων, καθώς και στο παράλληλο προς τις βάσεις επίπεδο που τέμνει το ύψος του πρίσματος στο μέσον, ανά ένα στα κέντρα 3 (από τα 6) τριγωνικών πρισμάτων εναλλάξ.

Αριθμός ατόμων ανά κύτταρο (τ):

Κάθε άτομο κορυφής της βάσης ανήκει κατά $1/6$ στο κύτταρο ενώ κάθε άτομο στο κέντρο της βάσης ανήκει κατά το $1/2$ στο κύτταρο. Τα 3 άτομα στο μεσαίο επίπεδο ανήκουν εξ' ολοκλήρου στο κύτταρο, άρα

$$\tau = 12 * 1/6 + 2 * 1/2 + 3 = 6$$

Ελάχιστη ενδοατομική απόσταση (δ):

Είναι η απόσταση μεταξύ των ατόμων της βάσης και είναι ίση με την πλευρά του εξαγώνου a .

$$\delta = a$$

$$\text{ή}$$

$$r = a/2$$

Αριθμός Συνδιάταξης (CN):

Αν ο λόγος $c/a=1,633$ (c το ύψος του πρίσματος) τότε έχουμε τον ιδανικό τύπο δομής hcp με την πιό συμπαγή διάταξη. Στην περίπτωση αυτή τα άτομα στο κέντρο κάθε βάσης ισαπέχουν από τα 6 άτομα των κορυφών της βάσης, τα 3 άτομα στο εσωτερικό του πρίσματος, καθώς και από τα 3 κατοπτρικά τους στο διπλανό κύτταρο. Άρα

$$CN = 6 + 3 + 3 = 12$$

Στα πραγματικά στοιχεία ο λόγος c/a διαφέρει από την ιδανική τιμή προς τα πάνω ή προς τα κάτω, δηλώνοντας μία επιμήκυνση ή συμπίεση της στοιχειώδους κυψελίδας ως προς το ύψος του πρίσματος.

Αριθμός ατομικής πλήρωσης (APF):

Για τον ιδανικό τύπο κυψελίδας ισχύει

$$APF = (V_{\text{ατόμων}}) / (V_{\text{κυψελίδας}})$$

$$= (\tau * (4/3)\pi r^3) / [(6/4) 3^{1/2} a^2 c]$$

$$= (6 * (4/3)\pi r^3) / [12 * 3^{1/2} * 1,633] r^3$$

$$= 25,133 \text{ r}^3 / 33,941 \text{ r}^3$$

$$= 0,74$$

Το 74% του όγκου του κυττάρου καταλαμβάνεται από άτομα ενώ το υπόλοιπο 26% παραμένει κενό όπως ακριβώς και στο fcc. Ο κρύσταλλος δηλαδή του hcp αποτελεί την πιο συμπαγή δομή μαζί με τον κρύσταλλο του fcc.

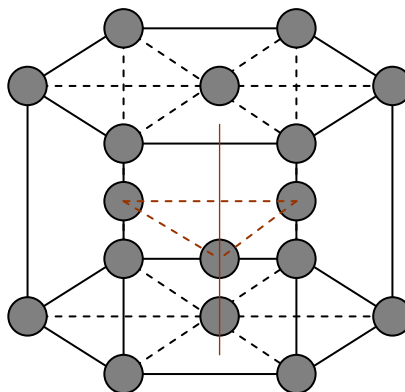
Η κυψελίδα του fcc σχηματίζει επίσης δύο ειδών κενά. Ένα οκταεδρικής μορφής με μέγιστη χωρητικότητα σφαίρα ακτίνας 0,414r και ένα τετραεδρικής μορφής με μέγιστη ακτίνα ξένου σώματος ίση με 0,225r, όπως ακριβώς και στο fcc.

Πυκνότερα σε άτομα επίπεδα είναι τα επίπεδα των εξαγωνικών βάσεων (0001) και (0002). Οι **διευθύνσεις με την μέγιστη πυκνότητα** είναι οι τρεις διαγώνιοι κάθε εξαγωνικής βάσης (οικογένεια <11-20>).

Οι κυριότεροι εκπρόσωποι του hcp φαίνονται στον πίνακα που ακολουθεί:

ΜΕΤΑΛΛΟ	ΣΤΑΘΕΡΑ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ a (nm)	ΣΤΑΘΕΡΑ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ c (nm)	ΑΤΟΜΙΚΗ ΑΚΤΙΝΑ r (nm)	c/a	% απόκλιση από ιδανικό
Κάδμιο	0,2973	0,5618	0,149	1,89	15,7
Ψευδάργυρος	0,2665	0,4947	0,133	1,856	13,6
Ιδανικό hcp				1,633	0
Μαγνήσιο	0,3209	0,5209	0,160	1,623	-0,66
Κοβάλτιο	0,2507	0,4069	0,125	1,623	-0,66
Ζιρκόνιο	0,3231	0,5148	0,160	1,593	-2,45
Τιτάνιο	0,2950	0,4683	0,147	1,587	-2,81
Βηρύλλιο	0,2286	0,3584	0,113	1,568	-3,98

ΣΧΗΜΑ 2.11: Το Μέγιστης Πυκνότητας Εξαγωνικό σύστημα.



2.7 ΔΟΜΕΣ ΜΕΓΙΣΤΗΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ

Οι δύο δομές fcc και hcp, οι οποίες εμφανίζουν την μέγιστη πυκνότητα, μοιάζουν πολύ περισσότερο από ότι μπορεί να φανεί εξετάζοντας τις στοιχειώδεις κυψελίδες τους. Και στα δύο υπάρχει μία διαδοχή όμοιων επιπέδων πυκνών σε άτομα. Η διαδοχή αυτή διαφέρει μόνο ως προς την τοποθέτηση του τρίτου επιπέδου.

Έστω ότι τοποθετούμε σε ένα επίπεδο σφαίρες κατά διάταξη μέγιστης πυκνότητας, η οποία είναι αυτή της βάσης του hcp συστήματος. Αυτή η διάταξη αποτελεί το επίπεδο Α. Μία δεύτερη στρώση είναι δυνατόν να τοποθετηθεί πάνω στην πρώτη, στα κενά που σχηματίζουν οι σφαίρες του Α επιπέδου. Υπάρχουν δύο δυνατές θέσεις για τις σφαίρες στο δεύτερο επίπεδο, που μπορούν να ονομαστούν Β και C. Αν τοποθετηθούν στη θέση Β τότε η τρίτη στρώση μπορεί να πάρει τις θέσεις C ή τις θέσεις Α. Στην πρώτη περίπτωση έχουμε τη διάταξη ABCABCABC που αντιστοιχεί στην fcc δομή, ενώ στη δεύτερη περίπτωση έχουμε τη διάταξη ABABABAB που αντιστοιχεί στην hcp δομή.

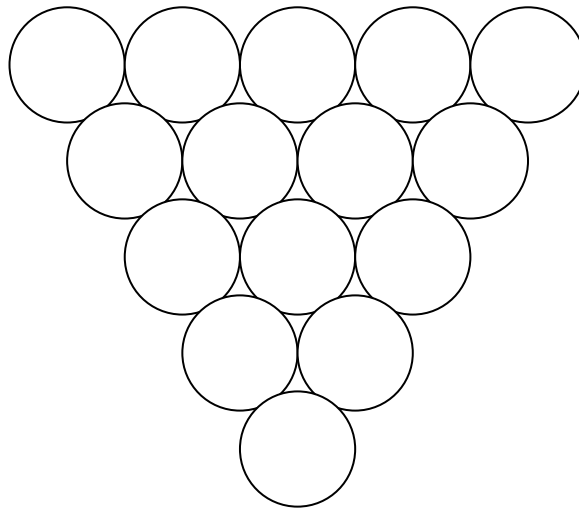
Από τη διαφορά στην τρίτη στρώση σφαιρών προκύπτουν δύο διαφορετικές κρυσταλλικές δομές με την ίδια όμως (μέγιστη) πυκνότητα. Εμφανίζουν όμως διαφορές στις φυσικές τους ιδιότητες με εντυπωσιακότερη την διαφορά σε πυκνά σε άτομα επίπεδα. Στο hcp είναι μόνο το επίπεδο της βάσης $\{0001\}$ ενώ στο fcc είναι τα 4 επίπεδα $\{111\}$.

Κάθε μέταλλο επιλέγει την δομή που απαιτεί την λιγότερη ενέργεια, η οποία δεν είναι κατ' ανάγκη μέγιστης πυκνότητας.

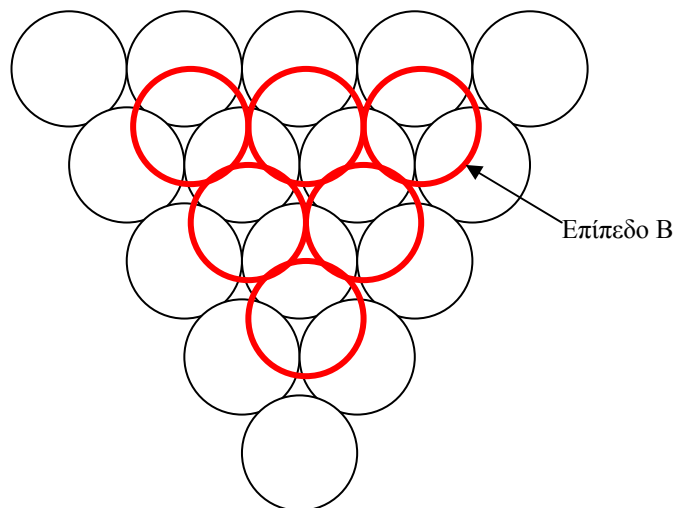
ΣΧΗΜΑ 2.12:

Εναλλακτική
τοποθέτηση πυκνών
επιπέδων για τη
δημιουργία των δύο
πυκνότερων δομών.

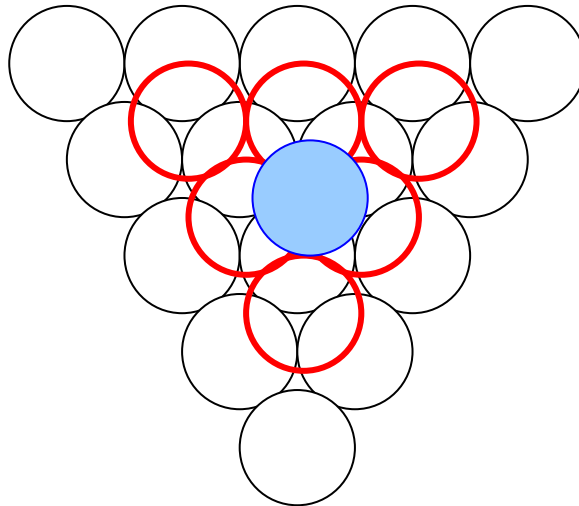
ΕΠΙΠΕΔΟ Α



Προσθήκη Επιπέδου Β πάνω στο Α



Προσθήκη Επιπέδου **Γ** πάνω στο **B** (σε διαφορετική θέση από το **A**) – Δομή **ABΓABΓ**



Προσθήκη Επιπέδου **A** πάνω στο **B** – Δομή **ABABAB**

