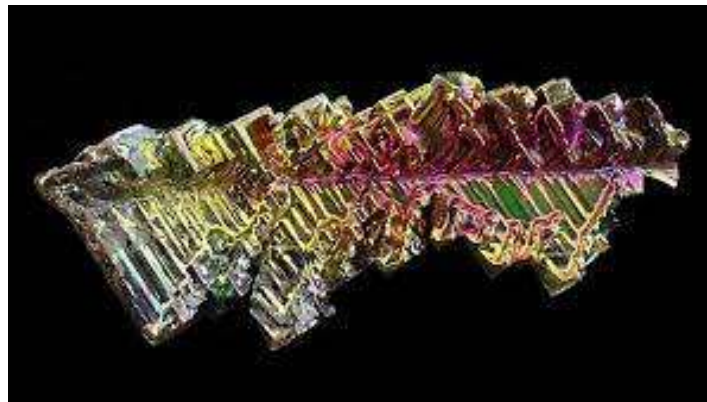


Βασικές αρχές κρυσταλλογραφίας

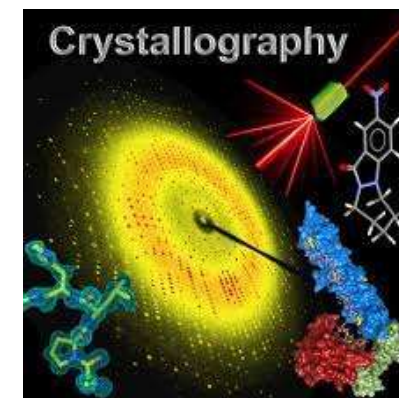
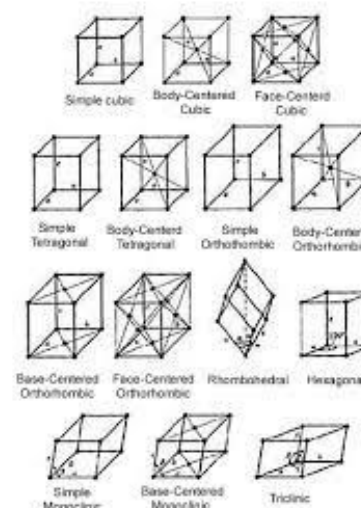
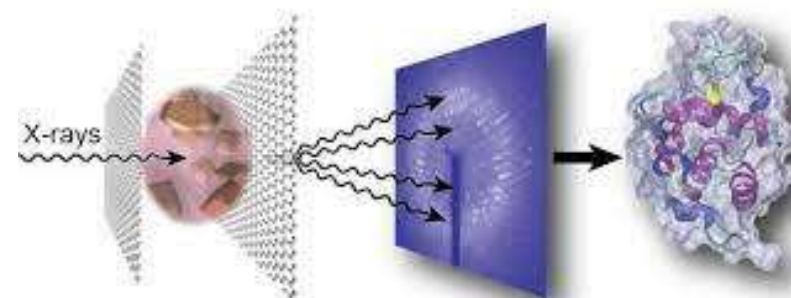


Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

B. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

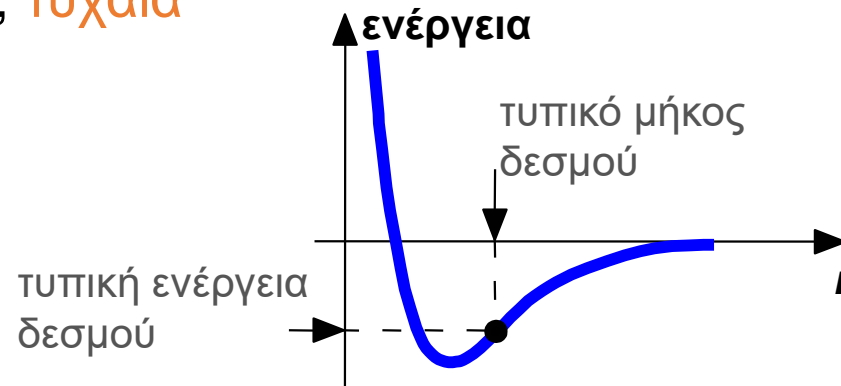
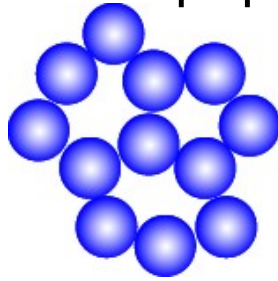
- Ποιες είναι οι διαφορές, ως προς τη διάταξη των ατόμων, μεταξύ κρυσταλλικών και μη-κρυσταλλικών στερεών;
- Εύρεση και συμβολισμός των κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων και επιπέδων.
- Υπό ποιες συνθήκες μπορεί να μεταβάλλεται μία ιδιότητα των υλικών ανάλογα με τη διεύθυνση μέτρησης;



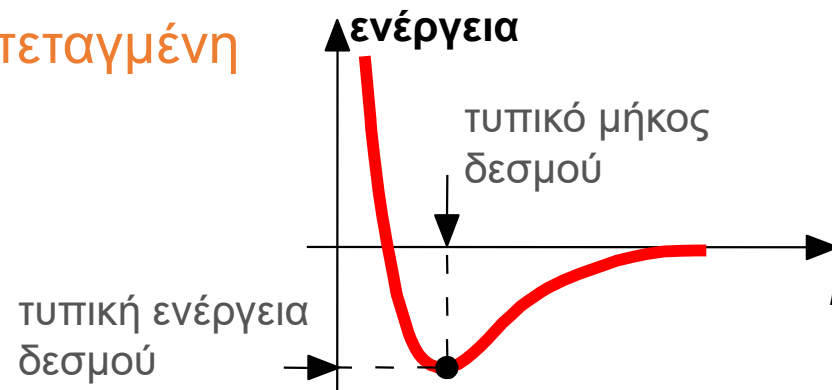
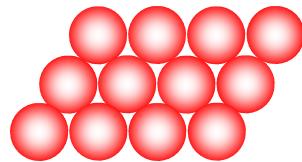
ΒΑΣΙΚΕΣ ΑΡΧΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΑΣ

Ενέργεια δεσμών και ατομική πλήρωση

- Μη-πυκνή πλήρωση, **τυχαία** τοποθέτηση ατόμων



- Πυκνή πλήρωση, **διατεταγμένη** τοποθέτηση ατόμων

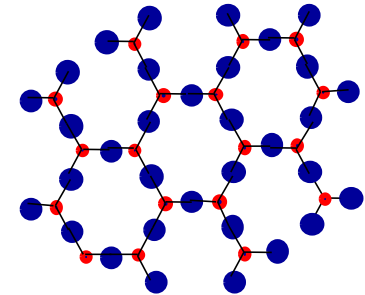


Οι διατεταγμένες δομές πυκνής πλήρωσης τείνουν να έχουν χαμηλότερες ενέργειες.

Δομή ατόμων και υλικά

Κρυσταλλικά υλικά...

- περιοδική διάταξη ατόμων σε 3Δ σχηματισμούς
- τυπική σε:
 - μέταλλα
 - πολλά κεραμικά
 - ορισμένα πολυμερή



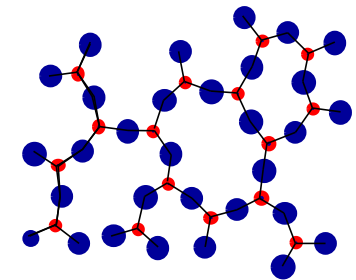
Κρυσταλλικό SiO₂

Διασκευή από Σχ. 3.11(α),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Μη-κρυσταλλικά υλικά...

- μη-περιοδική δομή ατόμων
- εμφανίζεται:
 - σε πολύπλοκες δομές
 - κατά την ταχεία ψύξη

• Si • Οξυγόνο



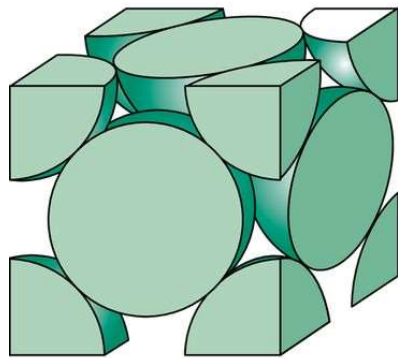
Μη-κρυσταλλικό SiO₂

Διασκευή από Σχ. 3.11(β),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

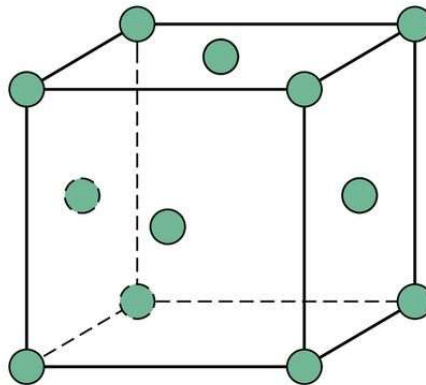
"άμορφο" = μη-κρυσταλλικό

Κρυσταλλικές δομές

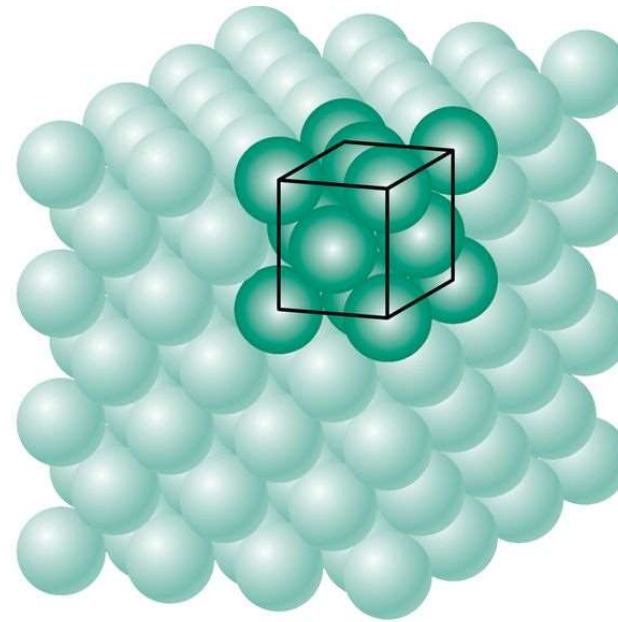
- Κρυσταλλική δομή
- Πλέγμα



(a)



(b)

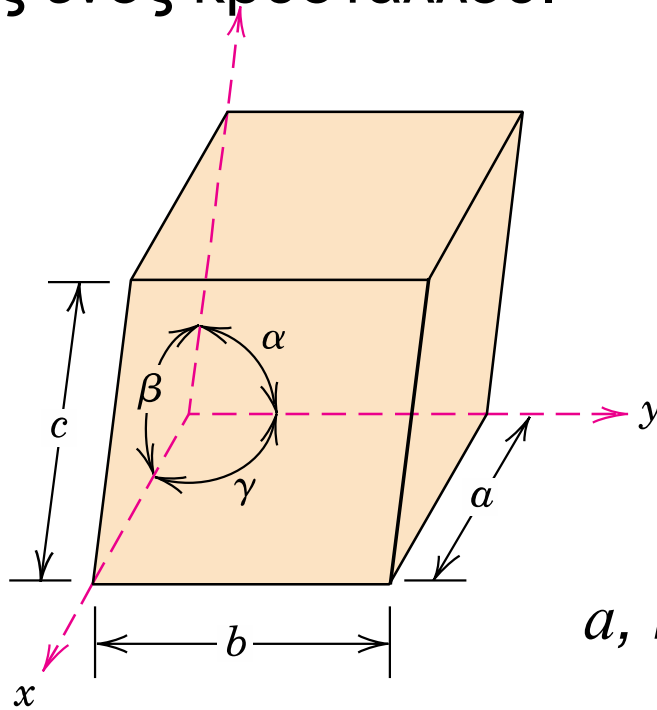
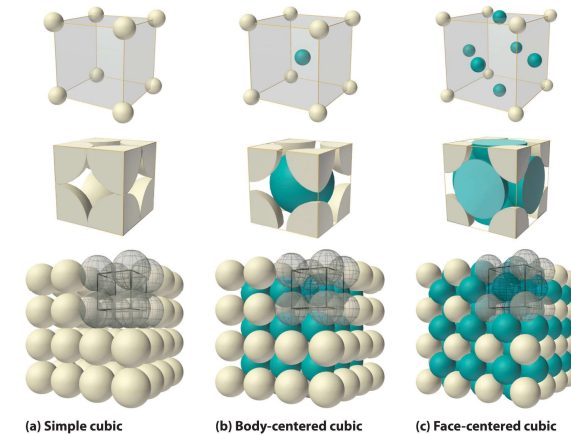


(c)

‘Μοντέλο ατομικών σκληρών σφαιρών’

Κρυσταλλικά συστήματα

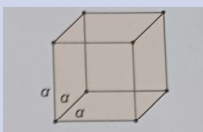
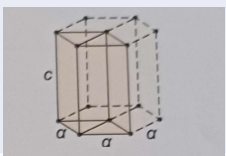
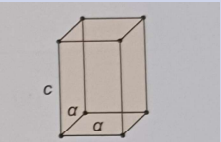
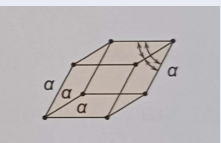
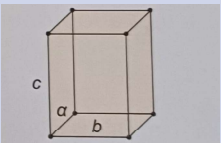
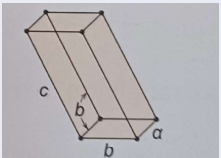
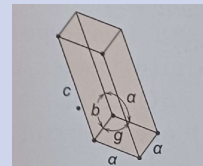
Μοναδιαία κυψελίδα: ο στοιχειώδης (ελάχιστος) όγκος που εμπεριέχει το πλήρες (επαναλαμβανόμενο) μοτίβο πλέγματος ενός κρυστάλλου.



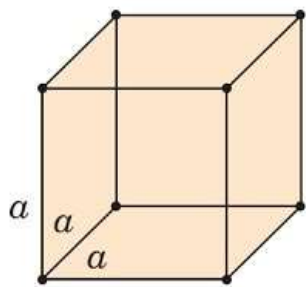
7 κρυσταλλικά συστήματα

14 κρυσταλλικά πλέγματα (ή
πλέγματα Bravais)

a , b , c και α , β , γ παράμετροι πλέγματος

Κρυσταλλικό Σύστημα	Μήκη Αξόνων	Γωνίες Αξόνων	Γεωμετρία Μοναδιαίας Κυψελίδας	Παραδείγματα																												
Κυβικό	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		Fe, Cu, NaCl, NaBr, διαμάντι, σιδηροπυρίτης																												
Εξαγωνικό	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$		Γραφίτης, ZnO, CdS, πάγος, κορούνδιο (ρουμπίνι, ζαφείρι)																												
Τετραγωνικό	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		Sn, SnO2, MnO2, NH4Br, χαλκοπυρίτης																												
Ρομβοεδρικό (ή τριγωνικό)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$		Bi, Al2O3, NaNO3, KNO3, τοπάζιο, αιματίτης, ασβεστίτης, δολομίτης																												
Ορθορομβικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		Ιόδιο, KNO3, ρομβικό θείο, αραγωνίτης , ολιβίνης																												
Μονοκλινές	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$		Ζάχαρη, θείο, βόραξ, Τάλκης, Μελαμίνη																												
Τρικλινές	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	 <table><tr><th>Σύστημα</th><th>Μοναδιαία Κυψελίδα</th><th>Αξόνες</th><th>Γωνίες</th></tr><tr><td>Κυβικό</td><td>$a=b=c$</td><td>$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$</td><td>$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$</td></tr><tr><td>Τετραγωνικό</td><td>$a=b \neq c$</td><td>$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$</td><td>$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$</td></tr><tr><td>Ορθορομβικό</td><td>$a \neq b \neq c$</td><td>$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$</td><td>$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$</td></tr><tr><td>Ρομβοεδρικό</td><td>$a=b=c$</td><td>$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$</td><td>$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$</td></tr><tr><td>Μονοκλινικό</td><td>$a \neq b \neq c$</td><td>$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$</td><td>$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$</td></tr><tr><td>Τρικλινικό</td><td>$a \neq b \neq c$</td><td>$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$</td><td>$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$</td></tr></table>	Σύστημα	Μοναδιαία Κυψελίδα	Αξόνες	Γωνίες	Κυβικό	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$	Τετραγωνικό	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$	Ορθορομβικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$	Ρομβοεδρικό	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$	Μονοκλινικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$	Τρικλινικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$	H3BO3, K2Cr2O7, CuSO4·5H2O, κυανίτης, πλαγιόκλαστα
Σύστημα	Μοναδιαία Κυψελίδα	Αξόνες	Γωνίες																													
Κυβικό	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$																													
Τετραγωνικό	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$																													
Ορθορομβικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$																													
Ρομβοεδρικό	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$																													
Μονοκλινικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$																													
Τρικλινικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$																													

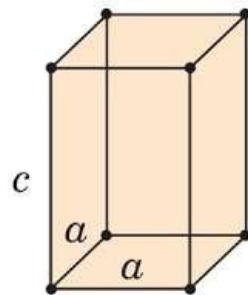
Seven Crystal Systems



Cubic

$$a = b = c$$

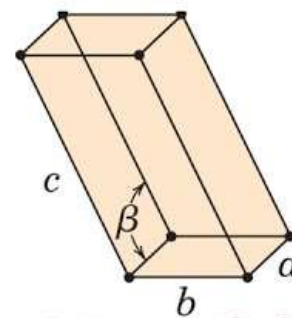
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Tetragonal

$$a = b \neq c$$

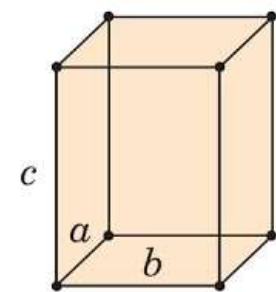
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

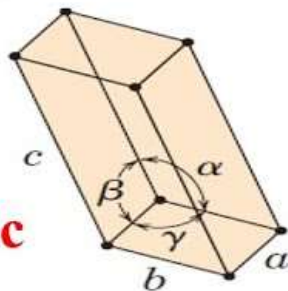
$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



Orthorhombic

$$a \neq b \neq c$$

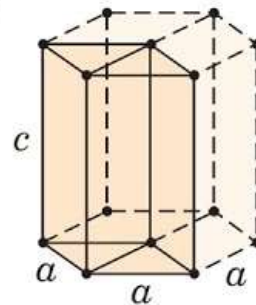
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Triclinic

$$a \neq b \neq c$$

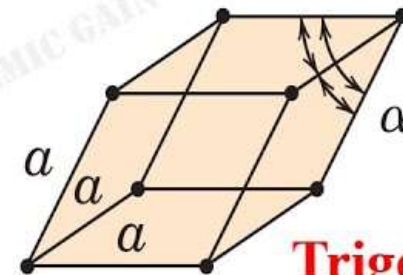
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Hexagonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

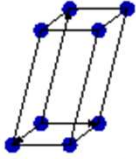
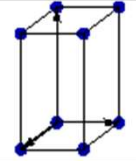
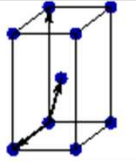
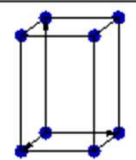
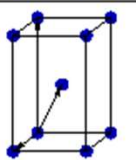
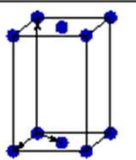
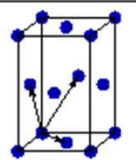
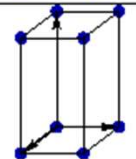
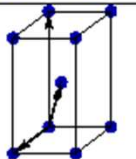
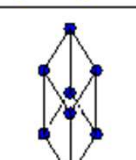
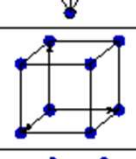
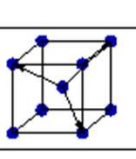
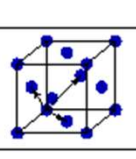
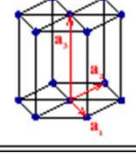


Trigonal

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

Sr. No.	Crystal System	Axial length of Unit Cell	Inter axial angles	Number of Lattice in the system
1	Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3
2	Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2
3	Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	4
4	Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	2
5	Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	1
6	Trigonal	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	1
7	Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \text{ and } \gamma = 120^\circ$	1

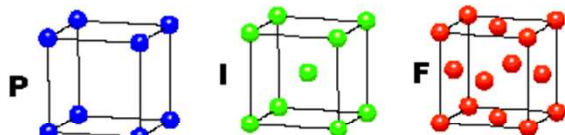
Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				

7 κρυσταλλικά συστήματα και 14 κρυσταλλικά πλέγματα (ή πλέγματα Bravais)

CUBIC

$$a = b = c$$

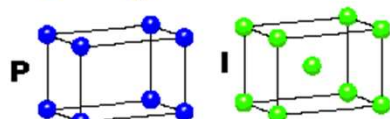
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

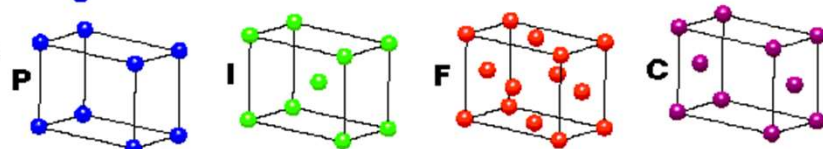
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

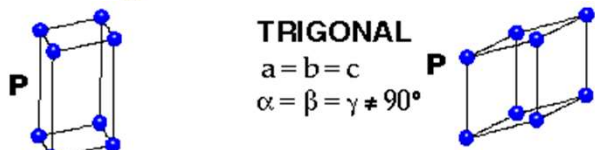


HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

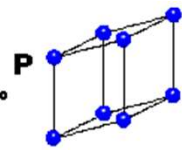
$$\gamma = 120^\circ$$



TRIGONAL

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

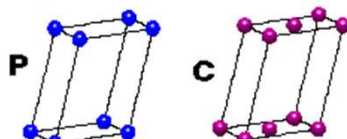


MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

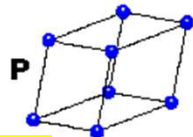
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

P: απλό, βασικό

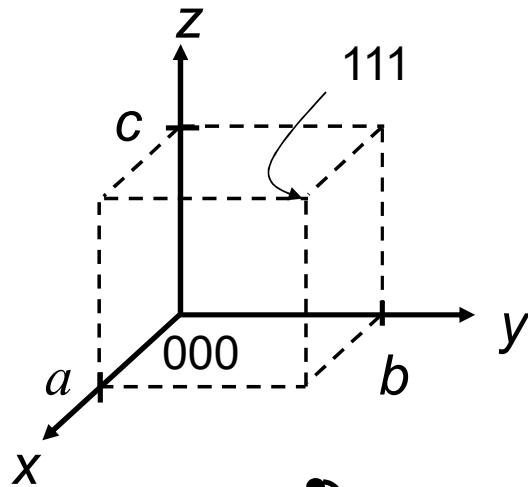
Body-centered: χωροκεντρωμένο ή ενδοκεντρωμένο

Face-centered: εδροκεντρωμένο ή ολοεδρικά κεντρωμένο

Side-centered: πλευροκεντρωμένο ή μονοεδρικά κεντρωμένο

Triclinic	$\bar{1}$		$P\bar{1}$		
Monoclinic	$2/m$		$P2/m$		$C2/m$
Orthorhombic	mmm		$Pmmm$		$Cmmm$
Tetragonal	$4/mmm$		$P4/mmm$		$I4/mmm$
Rhombohedral	$\bar{3}m$		$R\bar{3}m$		
Hexagonal	$6/mmm$		$P6/mmm$		
Cubic	$m\bar{3}m$		$Pm\bar{3}m$		$Im\bar{3}m$
					$Fm\bar{3}m$

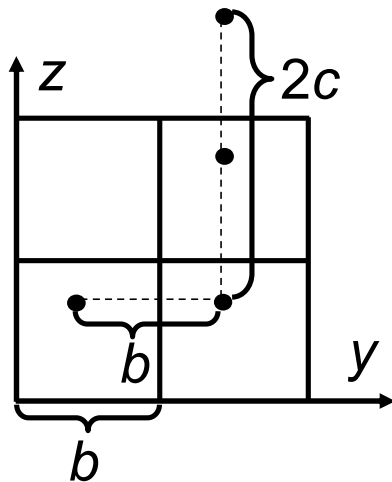
Χαρακτηριστικά μοναδιαίας κυψελίδας



Οι συντεταγμένες του σημείου στο κέντρο της μοναδιαίας κυψελίδας είναι

$$a/2, b/2, c/2 \quad \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$$

Οι συντεταγμένες των σημείων στις γωνίες της μοναδιαίας κυψελίδας είναι 111

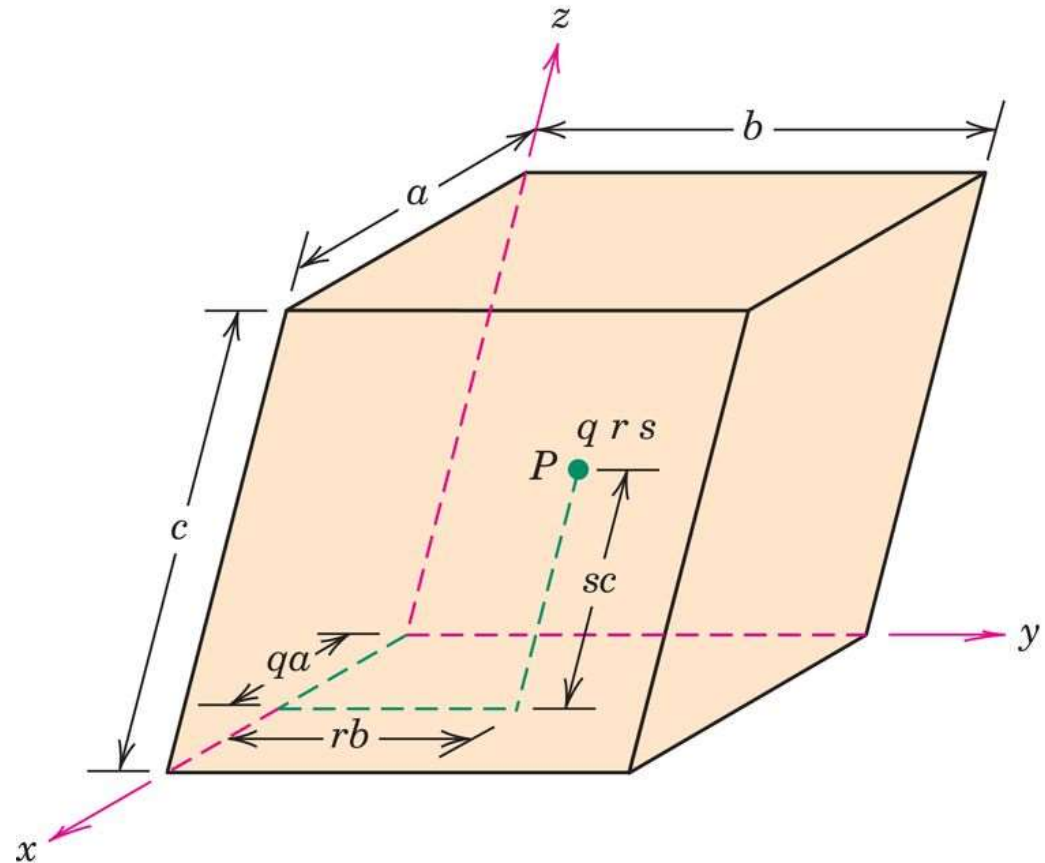


Μετατόπιση κατά ακέραιο πολλαπλάσιο των σταθερών πλέγματος οδηγεί στην ίδια ακριβώς θέση μιας παρακείμενης μοναδιαίας κυψελίδας

Συντεταγμένες σημείων

q, r, s

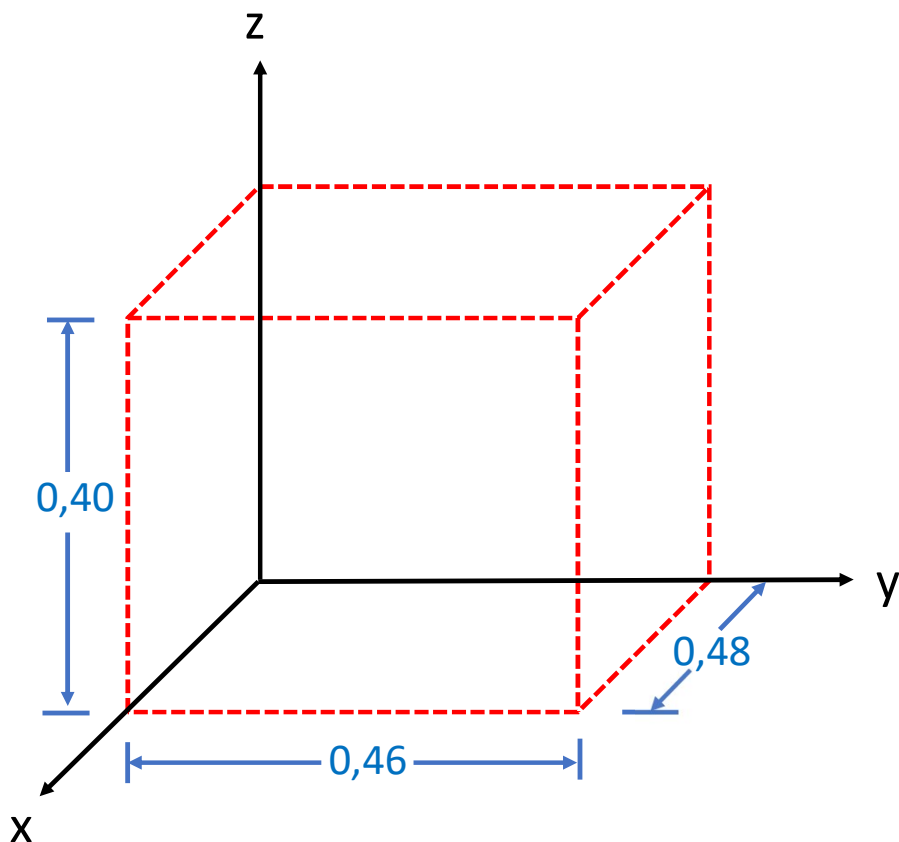
Πλεγματικές θέσεις: qa, rb, sc





Θέση ενός σημείου με καθορισμένες συντεταγμένες

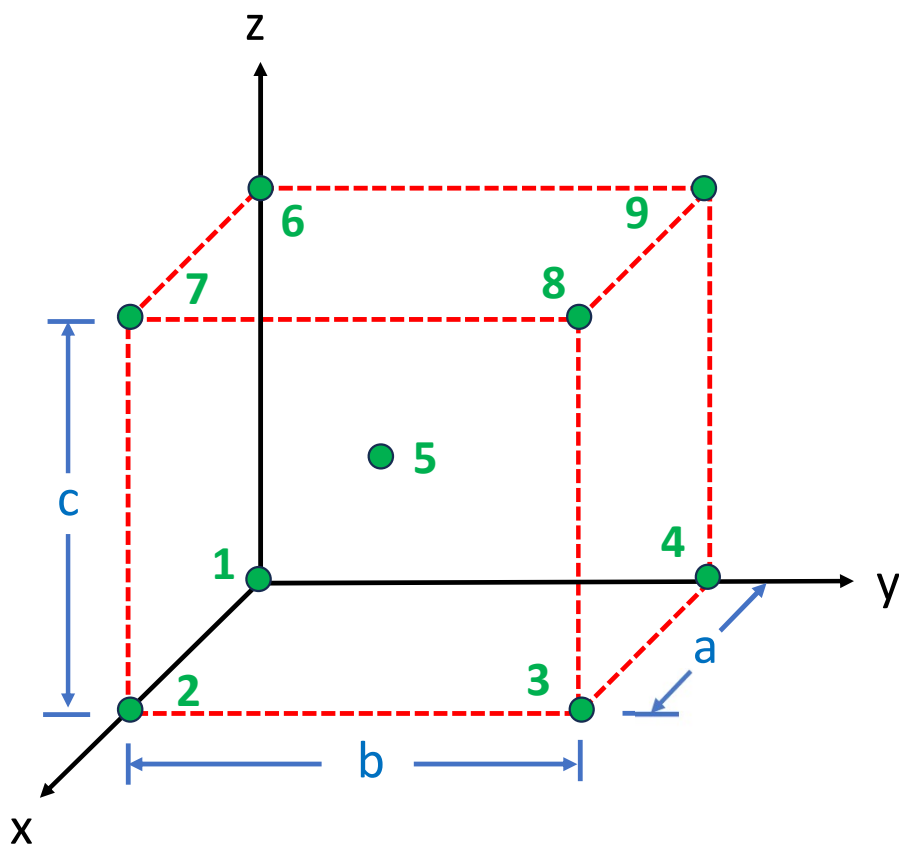
Στην μοναδιαία κυψελίδα που φαίνεται στο σχήμα, τοποθετείστε ένα σημείο με συντεταγμένες $\frac{1}{4} \ 1 \ \frac{1}{2}$





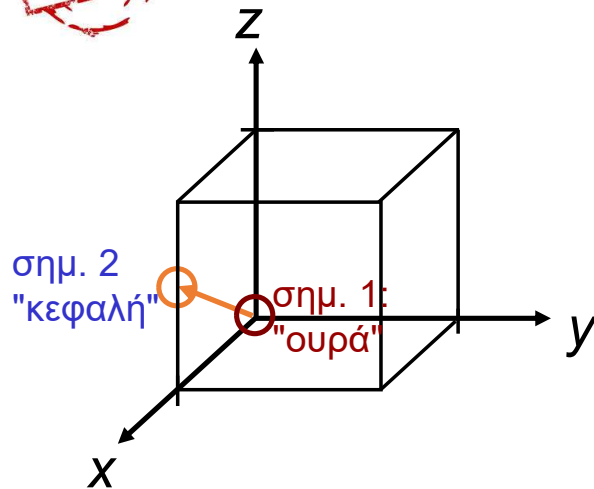
Προσδιορισμός δεικτών συντεταγμένων ενός σημείου

Προσδιορίστε τους δείκτες συντεταγμένων για όλα τα αριθμημένα **σημεία** της μοναδιαίας κυψελίδας του σχήματος



Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις

Αλγόριθμος προσδιορισμού



1. Εύρεση των συντεταγμένων για την "ουρά" και την "κεφαλή" του διανύσματος, σημεία 1 (x_1, y_1, z_1) και 2 (x_2, y_2, z_2), αντίστοιχα.
2. Αφαίρεση των συντεταγμένων του σημείου "ουράς" από αυτές του σημείου "κεφαλής".
3. Κανονικοποίηση των διαφορών των συντεταγμένων βάσει των παραμέτρων πλέγματος a, b , και c :

$$\frac{x_2 - x_1}{a} \quad \frac{y_2 - y_1}{b} \quad \frac{z_2 - z_1}{c}$$

4. Προσαρμογή κάθε τιμής στον μικρότερο ακέραιο
5. Το αποτέλεσμα περικλείεται σε αγκύλες, χωρίς κόμματα

Π.χ.:

σημ. 1 $x_1 = 0, y_1 = 0, z_1 = 0$

σημ. 2 $x_2 = a, y_2 = 0, z_2 = c/2$

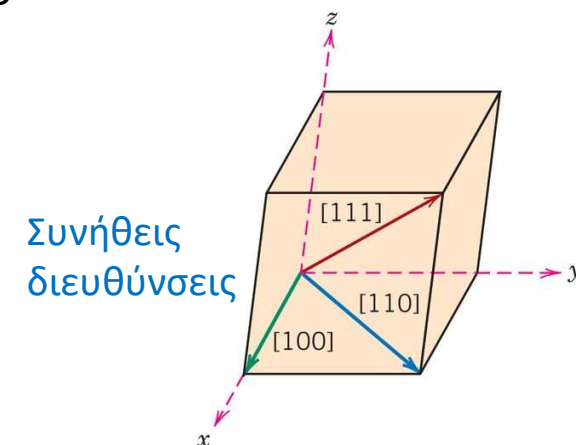
$$\frac{a-0}{a} \quad \frac{0-0}{b} \quad \frac{c/2-0}{c}$$

$[uvw]$

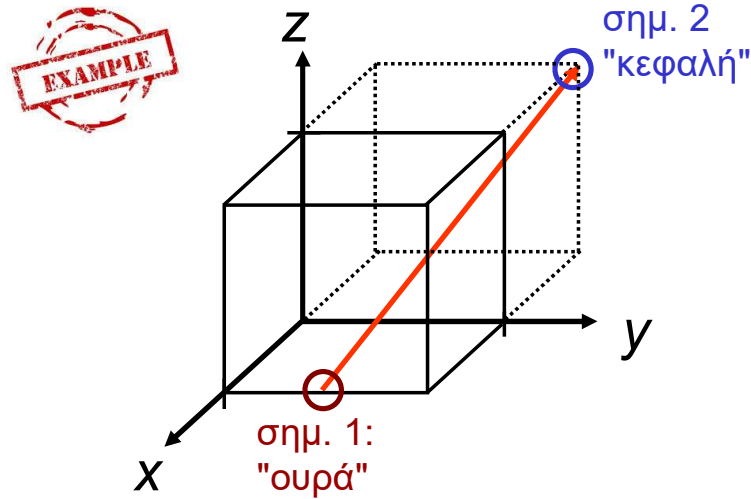
$$\Rightarrow 1, 0, 1/2 \Rightarrow 2, 0, 1$$

$$\Rightarrow [201]$$

Για κάθε ένα από τους άξονες υπάρχουν αρνητικές και θετικές τιμές π.χ.
 $[1\bar{1}1]$



Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις



Παράδειγμα 2:

σημ. 1 $x_1 = a, y_1 = b/2, z_1 = 0$

σημ. 2 $x_2 = -a, y_2 = b, z_2 = c$

$$\frac{-a - a}{a} \quad \frac{b - b/2}{b} \quad \frac{c - 0}{c}$$

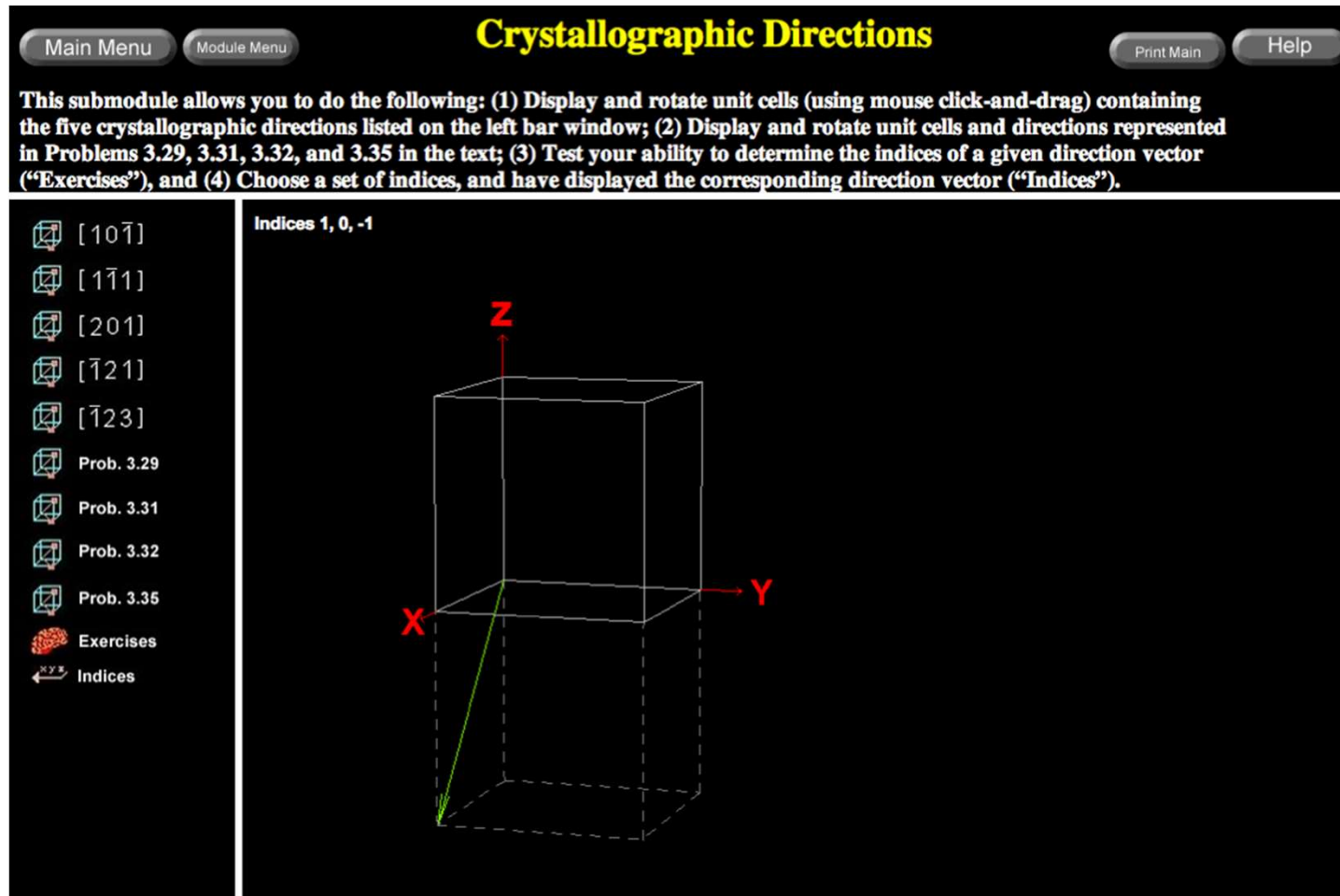
$$\Rightarrow -2, 1/2, 1$$

Πολλαπλασιασμός $\times 2$ για απαλοιφή του κλάσματος

$-4, 1, 2 \Rightarrow [\bar{4}12]$ η υπεργράμμιση στο 4
αναπαριστά αρνητικό δείκτη

“οικογένειες” διευθύνσεων: $\langle uvnw \rangle$

Προσομοίωση* μοναδιαίας κυψελίδας (κρυσταλλογραφική διεύθυνση [101])



* Στο λογισμικό VMSE

<https://drbuc2jl8158i.cloudfront.net/VMSE/index.html>

<https://drbuc2jl8158i.cloudfront.net/VMSE/index.html>

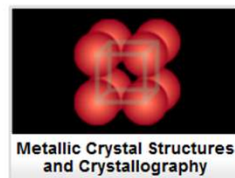
Virtual Materials Science and Engineering



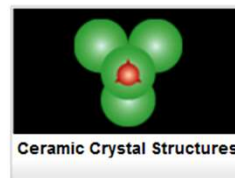
Virtual Materials Science and Engineering (VMSE), is composed of (1) interactive 3-D simulations and animations, and (2) a materials properties/cost database.



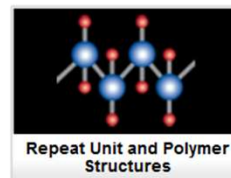
Engineering Materials
Properties Database



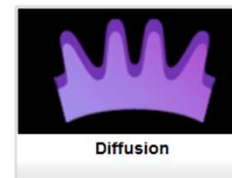
Metallic Crystal Structures
and Crystallography



Ceramic Crystal Structures



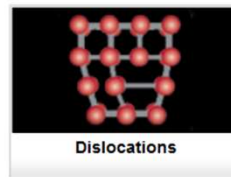
Repeat Unit and Polymer
Structures



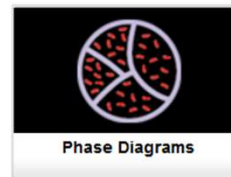
Diffusion



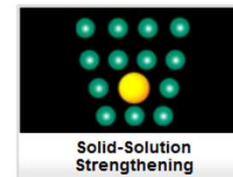
Tensile Tests



Dislocations



Phase Diagrams



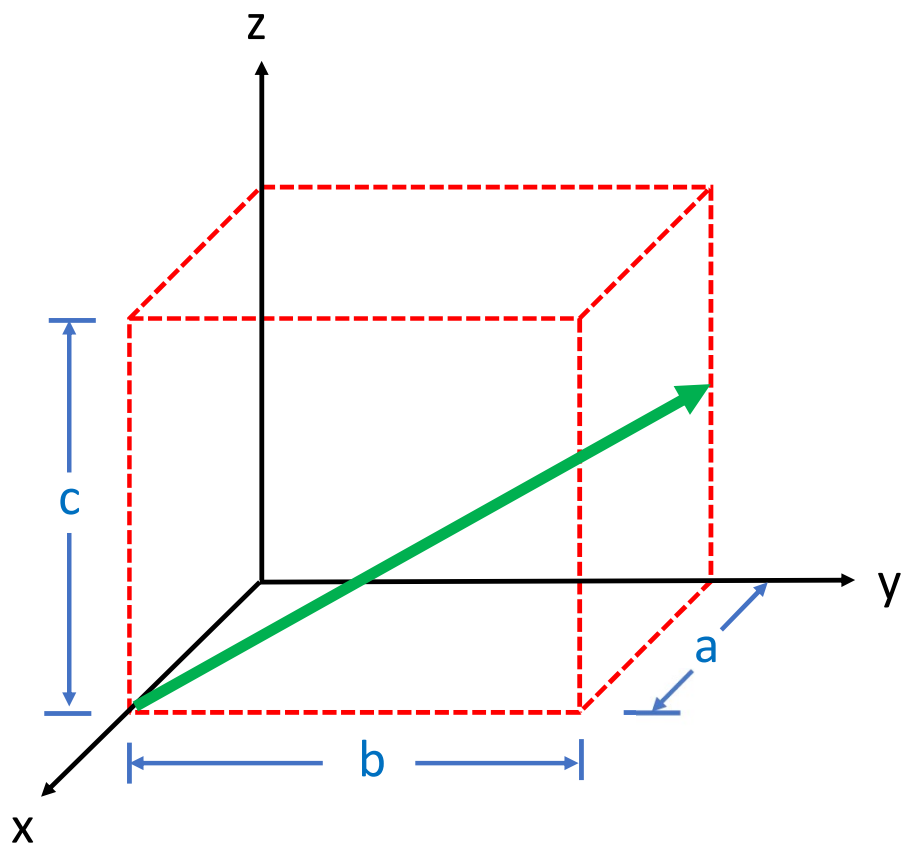
Solid-Solution
Strengthening





Καθορισμός δεικτών διεύθυνσης

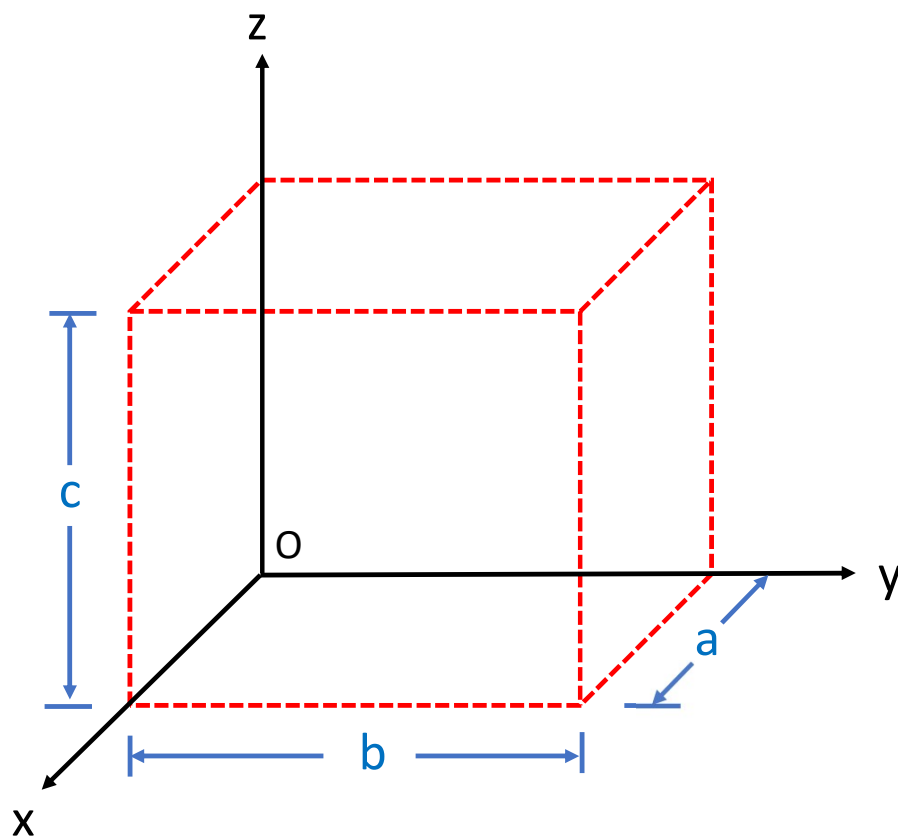
Να οριστούν οι δείκτες της διεύθυνσης του παρακάτω σχήματος





Σχεδιασμός καθορισμένης κρυσταλλογραφικής διεύθυνσης

Να σχεδιαστεί η διεύθυνση $[1\bar{1}0]$ στην μοναδιαία κυψελίδα του σχήματος. Η ουρά είναι το σημείο O (αρχή συντεταγμένων)



Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις

Κρυσταλλογραφικά ισοδύναμες: η απόσταση μεταξύ των ατόμων κατά μήκος της κάθε διεύθυνσης είναι η ίδια.

π.χ. Κυβική συμμετρία:

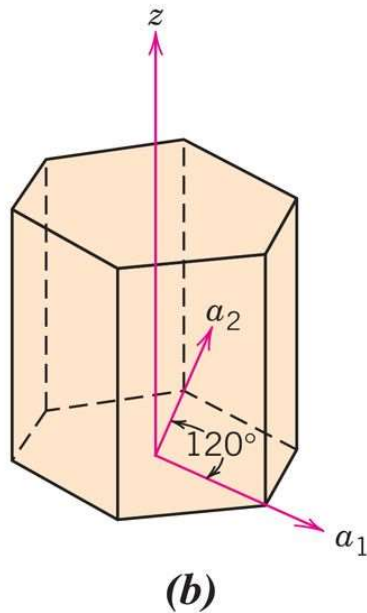
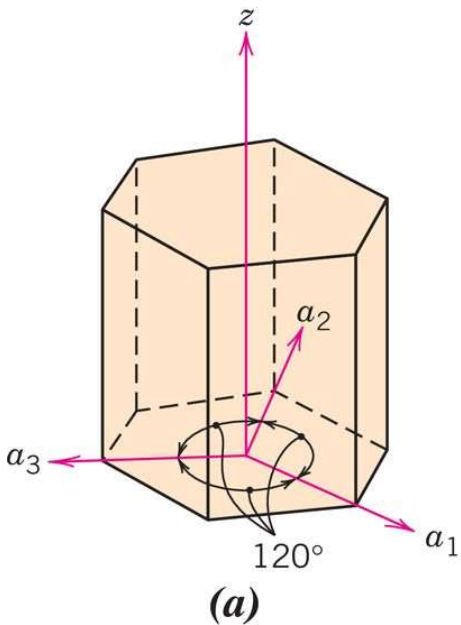
- $[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$, $[00\bar{1}]$ – Οικογένεια $\langle 100 \rangle$

- Στην κυβική συμμετρία διευθύνσεις που έχουν ίδιους δείκτες ανεξαρτήτου σειράς ή προσήμου όπως $[123]$ και $[\bar{2}1\bar{3}]$ είναι ισοδύναμες. Δεν ισχύει στα υπόλοιπα κρυσταλλικά συστήματα π.χ. σε κρυστάλλους με τετραγωνική συμμετρία οι $[100]$ και $[010]$ είναι ισοδύναμες ενώ δεν είναι ισοδύναμες οι $[100]$ και $[001]$.

Διευθύνσεις σε εξαγωνικούς κρυστάλλους

Σε εξαγωνικά κρυσταλλικά συστήματα μερικές κρυσταλλογραφικά ισοδύναμες διευθύνσεις δεν έχουν την ίδια τριάδα δεικτών π.χ. οι $[111]$ και $[\bar{1}01]$

Λύση: Σύστημα συντεταγμένων τεσσάρων αξόνων ή **συντεταγμένες Miller-Bravais**.



$$[UVW] \rightarrow [uvtw]$$

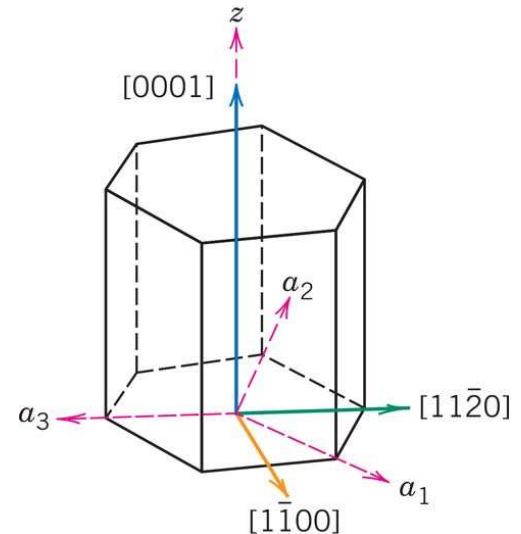
$$u = 1/3 (2U - V)$$

$$v = 1/3 (2V - U)$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = W$$

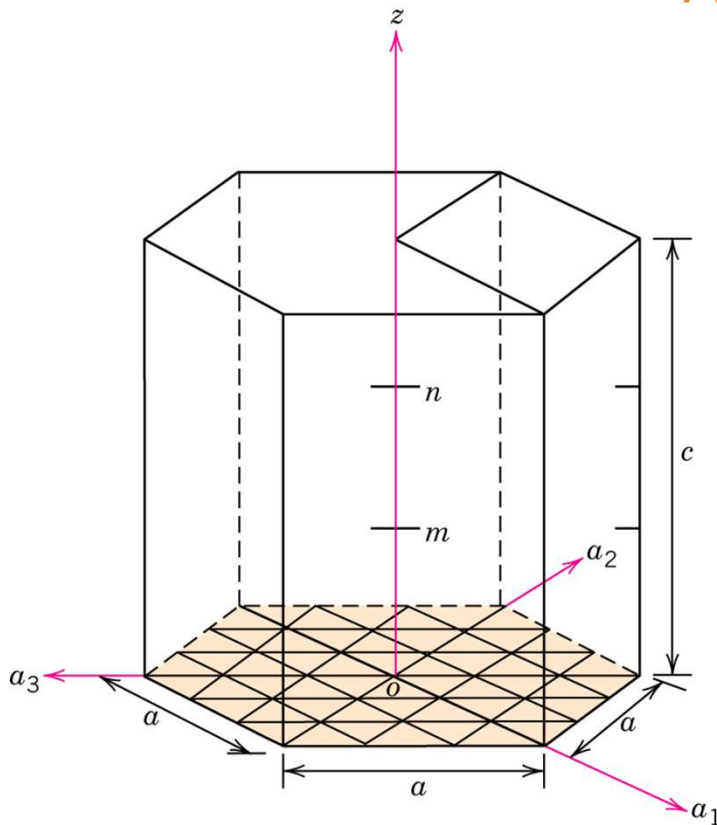
Π.χ. η διεύθυνση $[010]$
γίνεται: $[\bar{1}2\bar{1}0]$



Μεγίστης πυκνότητας εξαγωνική, HCP (Hexagonal Close-Packed)

Σχεδιασμός κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων, δομή HCP (1)

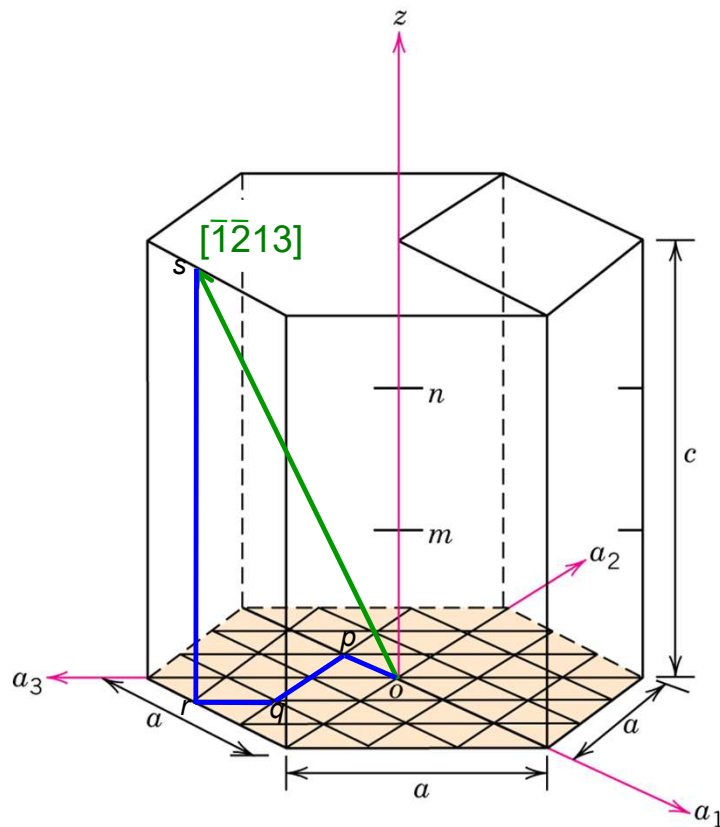
Αλγόριθμος (δείκτες Miller-Bravais)



1. Απαλοιφή των αγκύλων
2. Διαίρεση με τον μεγαλύτερο ακέραιο, έτσι ώστε όλες οι τιμές να είναι ≤ 1
3. Πολλαπλασιασμός όρων με κατάλληλη διάσταση της μοναδιαίας κυψελίδας [δηλ. a για τους άξονες a_1 , a_2 , και a_3 ή c για τον z άξονα] για υπολογισμό προβολών
4. Κατασκευή του διανύσματος με τοποθέτηση της "ουράς" στο σημείο αρχής των αξόνων και επέκταση, βάσει των υπολογισμένων προβολών, για τον εντοπισμό του σημείου "κεφαλής"

Σχεδιασμός κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων, δομή HCP (2)

- Σχεδίαση της διεύθυνσης $[\bar{1}\bar{2}13]$ σε μοναδιαία κυψελίδα πλέγματος εξαγωνικής δομής.



Αλγόριθμος

1. Απαλοιφή αγκύλων

a_1	a_2	a_3	z
-1	-2	1	3

2. Διαίρεση διά 3

$-\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	1
----------------	----------------	---------------	---

3. Υπολογισμός προβολών

$-\frac{a}{3}$	$-\frac{2a}{3}$	$\frac{a}{3}$	c
----------------	-----------------	---------------	-----

4. Κατασκευή διανύσματος

έναρξη στο σημείο o

$-a/3$ μονάδες πάνω στον άξονα a_1 έως το σημείο p

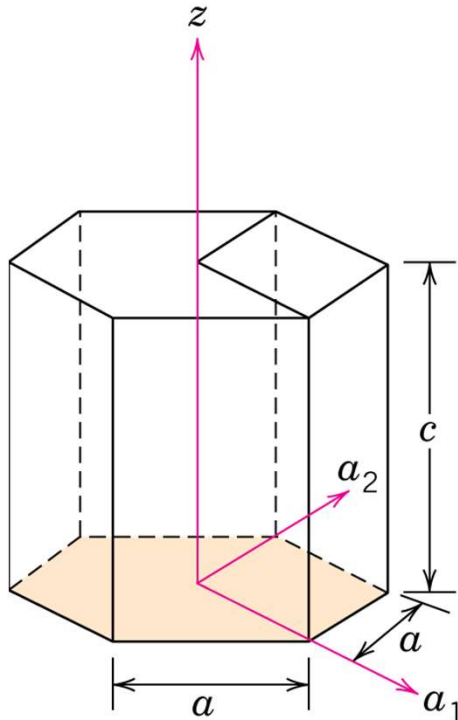
$-2a/3$ μονάδες παράλληλα στον άξονα a_2 έως το σημείο q

$a/3$ μονάδες παράλληλα στον άξονα a_3 έως το σημείο r

c μονάδες παράλληλα στον z άξονα έως το σημείο s

Η διεύθυνση $[\bar{1}\bar{2}13]$ αναπαρίσταται μέσω του διανύσματος από το σημείο o έως το σημείο s

Καθορισμός κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων, δομή HCP (1)



Αλγόριθμος

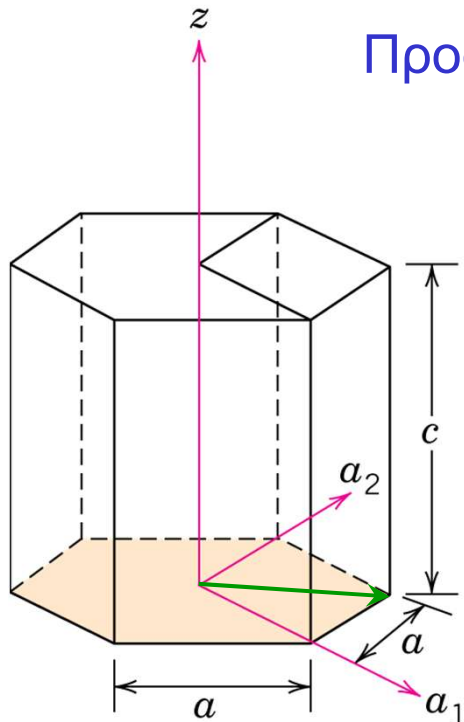
1. Εύρεση συντεταγμένων "ουράς" διανύσματος [σημ. 1: $x_1, y_1, & z_1$] και "κεφαλής" διανύσματος [σημ. 2: $x_2, y_2, & z_2$] βάσει των τριών αξόνων (a_1, a_2, z)
2. Αφαίρεση των συντεταγμένων του σημείου "ουράς" από αυτές του σημείου "κεφαλής" και κανονικοποίηση αποτελέσματος βάσει διαστάσεων (a και c) της μοναδιαίας κυψελίδας
3. Προσαρμογή στις πλησιέστερες (μικρότερες) ακέραιες τιμές
4. Η προκύπτουσα τριάδα σημείων (συντεταγμένες σε σύστημα τριών αξόνων) περικλείεται σε αγκύλες, χωρίς κόμματα: $[u'v'w']$
5. Μετατροπή σε συντεταγμένες πλέγματος Miller-Bravais (τεσσάρων αξόνων) χρησιμοποιώντας τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$u = \frac{1}{3}(2u' - v') \quad v = \frac{1}{3}(2v' - u')$$

$$t = -(u + v) \quad w = w'$$

6. Προσαρμογή αποτελεσμάτων στις πλησιέστερες (μικρότερες) ακέραιες τιμές και τοποθέτηση σε αγκύλες: $[uvtw]$

Καθορισμός κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων, δομή HCP (2)



Προσδιορισμός δεικτών για το πράσινο διάνυσμα

Παράδειγμα

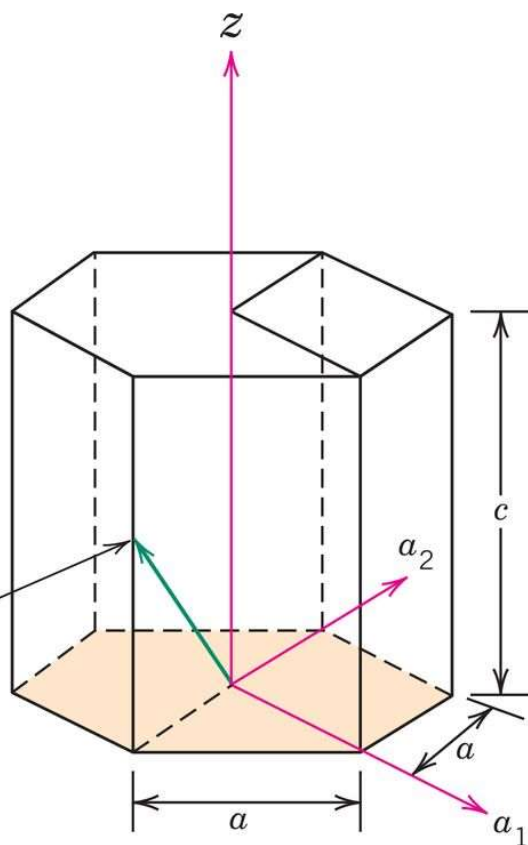
	a_1	a_2	z
1. Θέση "ουράς"	0	0	0
Θέση "κεφαλής"	a	a	$0c$
2. Κανονικοποίηση	1	1	0
3. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές	1	1	0
4. Τοποθέτηση σε αγκύλες	[110]		
5. Μετατροπή σε αντίστοιχες παραμέτρους 4-αξόνων			

$$u = \frac{1}{3} [(2)(1) - (1)] = \frac{1}{3} \quad v = \frac{1}{3} [(2)(1) - (1)] = \frac{1}{3}$$

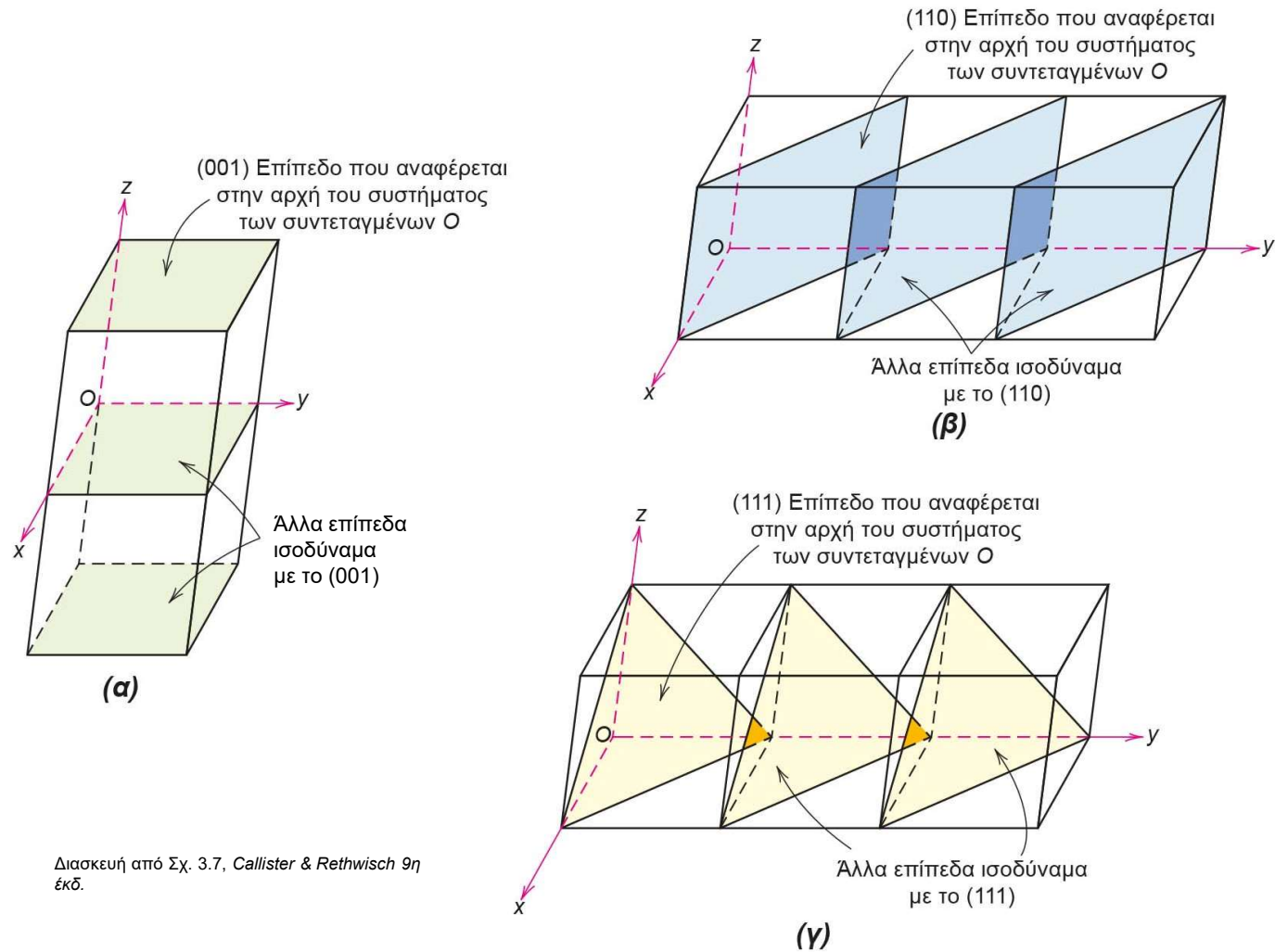
$$t = -\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right) = -\frac{2}{3} \quad w = 0$$

6. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές & τοποθέτηση σε αγκύλες

$$\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, 0 \Rightarrow 1, 1, -2, 0 \Rightarrow [11\bar{2}0]$$


$$\left. \begin{aligned} a''_1 &= 0a \\ a''_2 &= -a \\ z'' &= c/2 \end{aligned} \right\}$$


Κρυσταλλογραφικά επίπεδα



Διασκευή από Σχ. 3.7, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

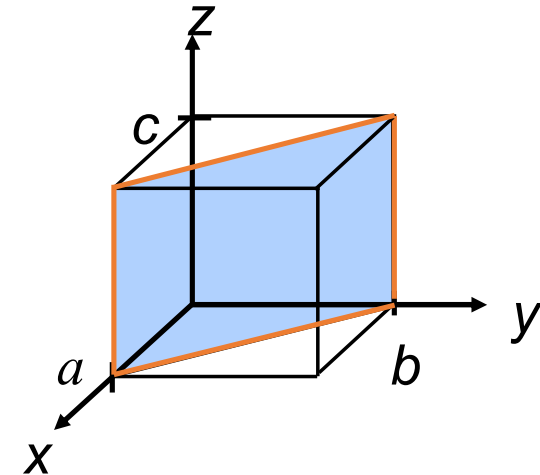
Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

- **Δείκτες Miller (hkl)** : Υπολογισμός μαθ. αντίστροφου για τις συντεταγμένες ενός επιπέδου (σημεία τομής με τους τρεις άξονες), απαλοιφή δεκαδικών & κοινών πολλαπλασίων. Όλα τα παράλληλα επίπεδα έχουν ίδιους δείκτες Miller.
- Αλγόριθμος
 1. Ανάγνωση συντεταγμένων του επιπέδου ως προς άξονες a , b , c
 2. Υπολογισμός αντιστρόφων των συντεταγμένων
 3. Αναγωγή στις πλησιέστερες (μικρότερες) ακέραιες τιμές
 4. Τοποθέτηση αποτελέσματος σε παρενθέσεις, χωρίς κόμματα: **(hkl)**

Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

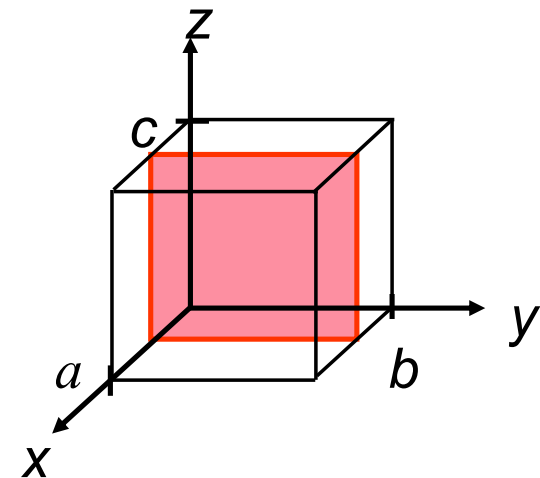
Παράδειγμα

	a	b	c
1. Συντεταγμένες	1	1	∞
2. Υπολογισμός αντιστρόφων	1/1	1/1	1/ ∞
	1	1	0
3. Αναγ. σε ακέραιες τιμές	1	1	0
4. Δείκτες Miller	(110)		



Παράδειγμα

	a	b	c
1. Συντεταγμένες	1/2	∞	∞
2. Υπολογισμός αντιστρόφων	1/1/2	1/ ∞	1/ ∞
	2	0	0
3. Αναγ. σε ακέραιες τιμές	2	0	0
4. Δείκτες Miller	(100)		

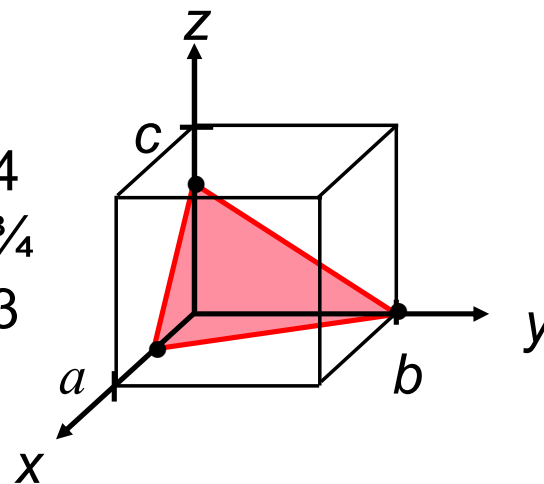


Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

- Παράδειγμα
1. Συντεταγμένες
 2. Υπολογισμός αντιστρόφων
 3. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές
 4. Δείκτες Miller

	a	b	c
1. Συντεταγμένες	$1/2$	1	$3/4$
2. Υπολογισμός αντιστρόφων	$1/1/2$	$1/1$	$1/3/4$
	2	1	$4/3$
3. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές	6	3	4

(634)



Αναγραφή “οικογένειας” επιπέδων: $\{hkl\}$

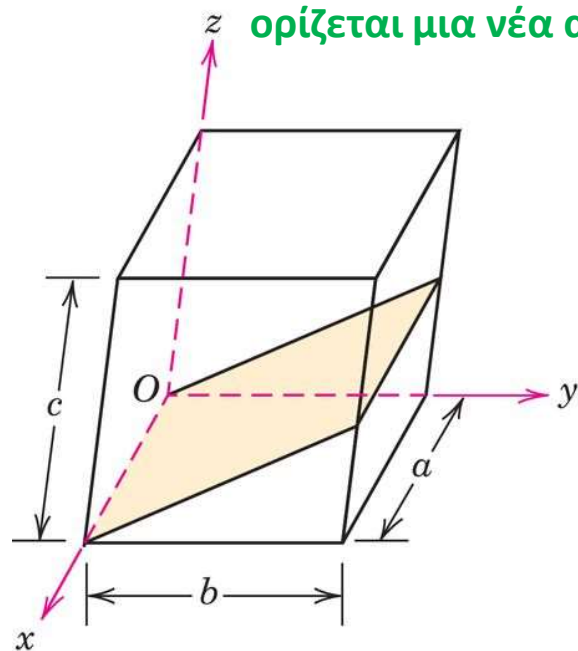
Π.χ.: $\{100\} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$



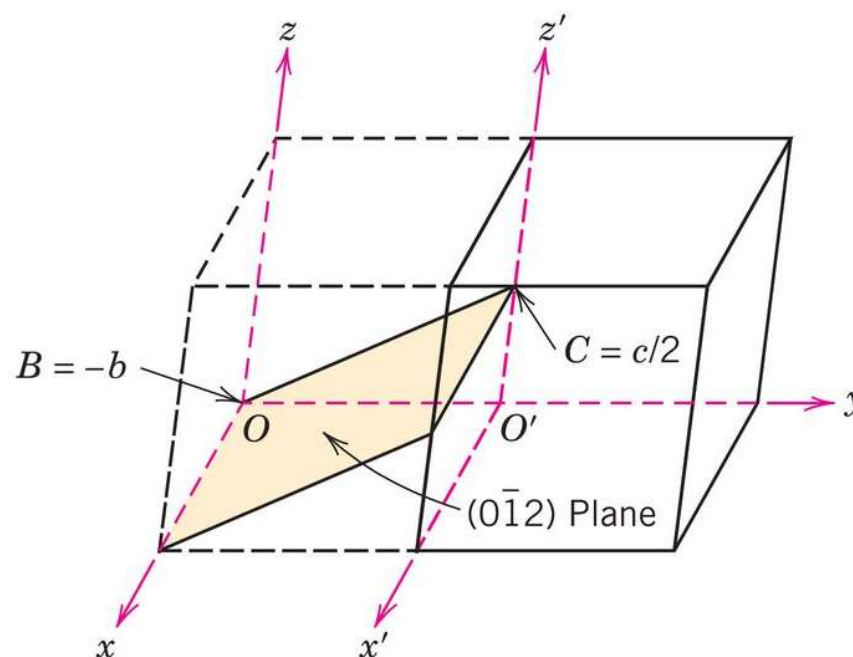
Προσδιορισμός δεικτών Miller ενός επιπέδου

Προσδιορίστε τους δείκτες Miller του επιπέδου του παρακάτω σχήματος

Εάν το επίπεδο διέρχεται από την αρχή του συστήματος των συντεταγμένων τότε κατασκευάζεται άλλο επίπεδο, παράλληλο προς αυτό μέσα στην κυψελίδα με κατάλληλη μετατόπιση. Δηλαδή ορίζεται μια νέα αρχή.



(a)

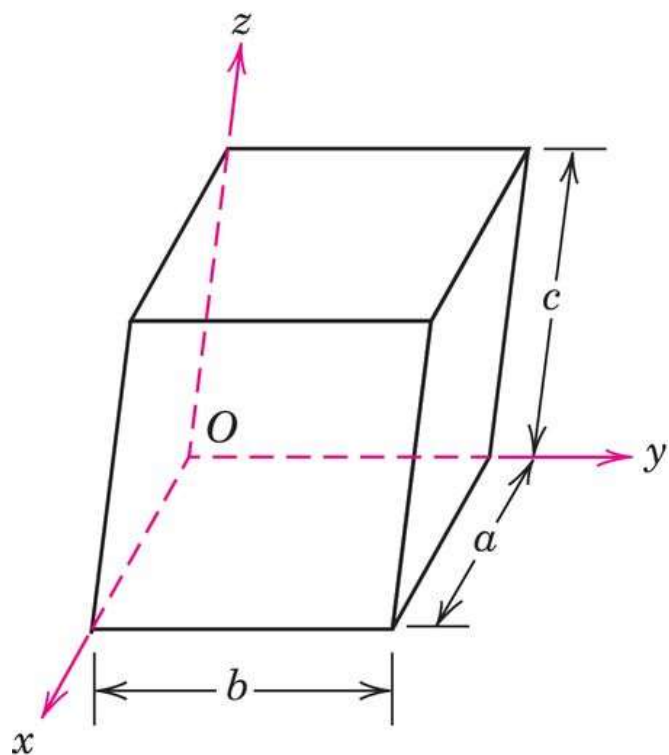


(b)

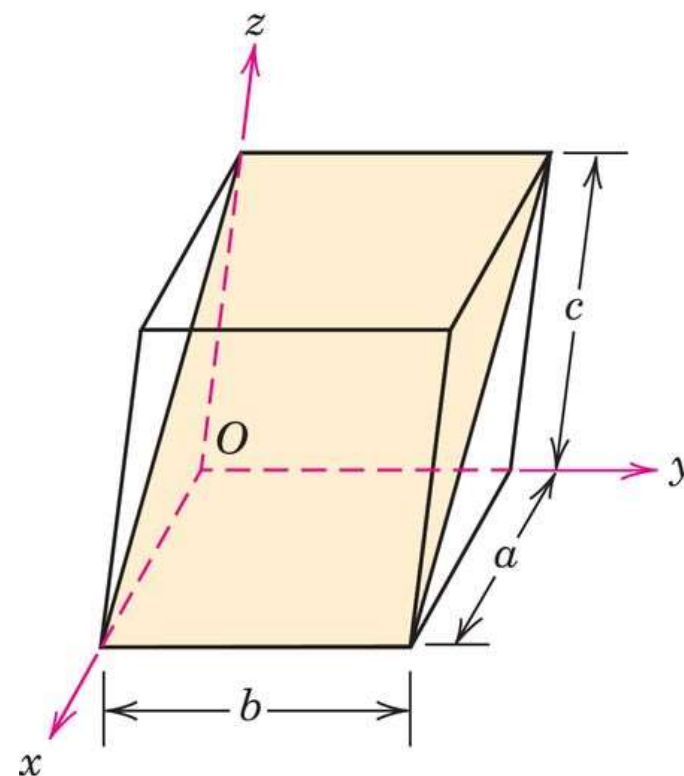


Κατασκευή συγκεκριμένου κρυσταλλογραφικού επιπέδου

Κατασκευάστε το επίπεδο (101) μέσα στην ακόλουθη μοναδιαία κυψελίδα



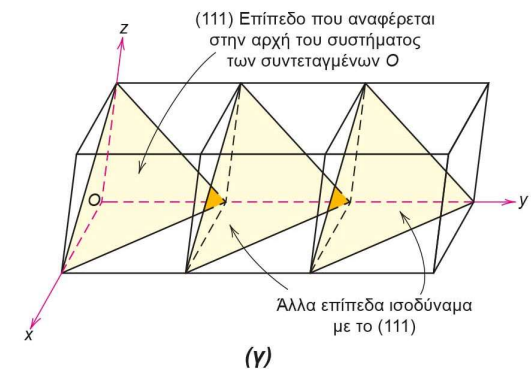
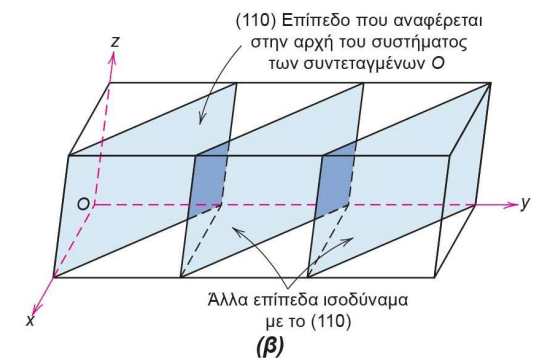
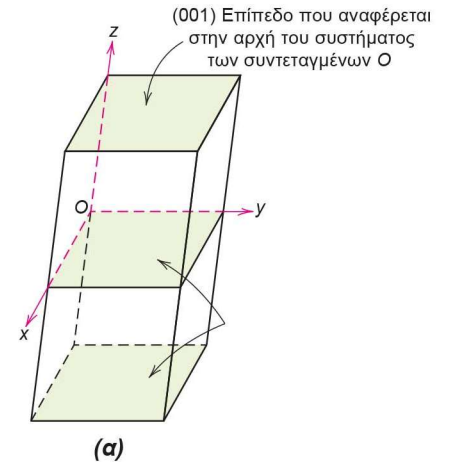
(a)



(c)

Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

- Εάν δύο από τους δείκτες h, k, l είναι μηδενικοί [πχ. (100)] τότε το επίπεδο είναι παράλληλο με μία από τις έδρες της μοναδιαίας κυψελίδας
- Εάν ένας από τους δείκτες h, k, l είναι μηδενικός [πχ. (110)] τότε το επίπεδο είναι παραλληλόγραμμο, έχοντας δύο πλευρές που να συμπίπτουν αντικριστές ακμές της μοναδιαίας κυψελίδας
- Εάν κανένας από τους δείκτες h, k, l δεν είναι μηδενικός [πχ. (111)] τότε όλες οι τομές θα διέρχονται από τις έδρες της μοναδιαίας κυψελίδας



Προσομοίωση κρυσταλλογραφικών επιπέδων (VMSE)

Crystallographic Planes

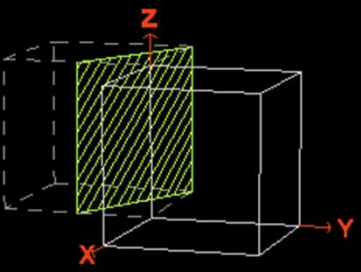
Main Menu Module Menu Help

This submodule allows you to do the following: (1) Display and rotate (using mouse click-and-drag) unit cells containing the five crystallographic planes listed on the left bar window; (2) Display and rotate unit cells and planes represented in Problems 3.40, 3.41, 3.42 and 3.49 in the text; (3) Test your ability to determine the indices of a given plane (“Exercises”), and (4) Choose a set of indices, and have displayed the

Select the correct set of indices for the plane shown.

(0 1 1)
(1 1 $\bar{1}$)
(2 0 1)
($\bar{1}$ 3 0)
(3 $\bar{2}$ 1)
Prob. 3.40
Prob. 3.41
Prob. 3.42
Prob. 3.49
Exercises
Indices

(3 $\bar{1}$ 2)
(0 0 $\bar{1}$)
($\bar{1}$ 1 2)
($\bar{1}$ 3 2)
($\bar{1}$ $\bar{2}$ 0)
(0 $\bar{1}$ 1)

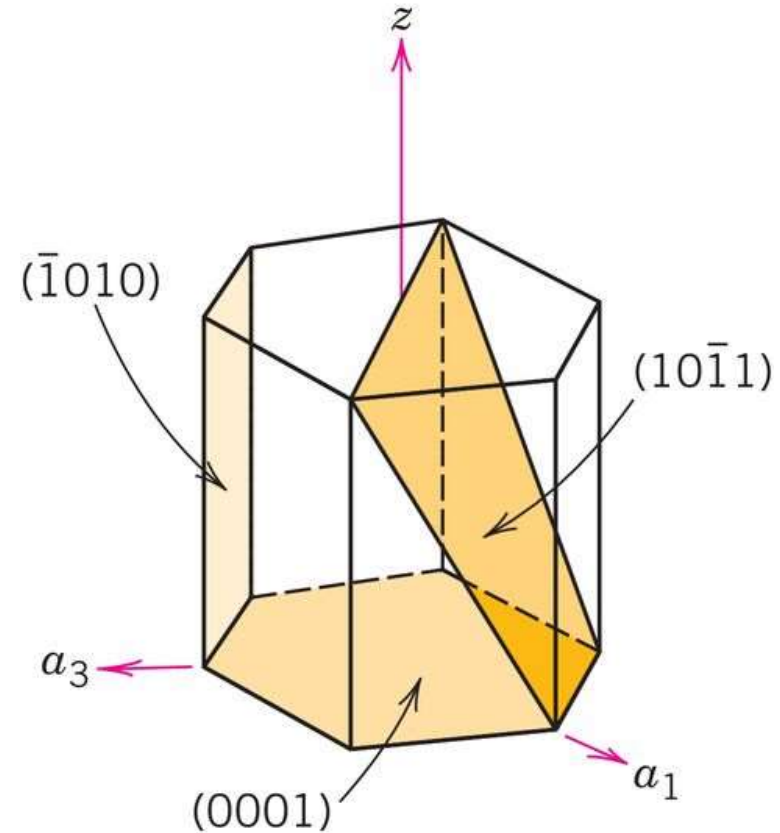


Το λογισμικό VMSE παρέχει επιπλέον δυνατότητες πρακτικής εξάσκησης στη “δεικτοδότηση” κρυσταλλογραφικών επιπέδων

Εξαγωνικοί κρύσταλλοι - Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

- Τέσσερις δείκτες h, k, i, l
- Ο i προσδιορίζεται από το άθροισμα των h και k από τη σχέση:

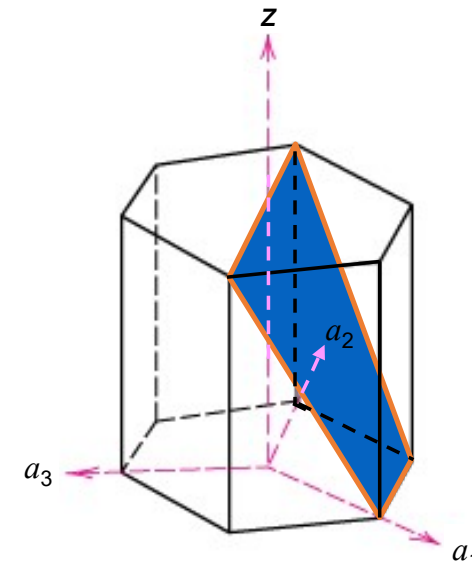
$$i = -(h+k)$$



Κρυσταλλογραφικά επίπεδα (δομή HCP)

- Για τη μοναδιαία κυψελίδα σε πλέγματα εξαγωνικής δομής χρησιμοποιείται το ίδιο σκεπτικό

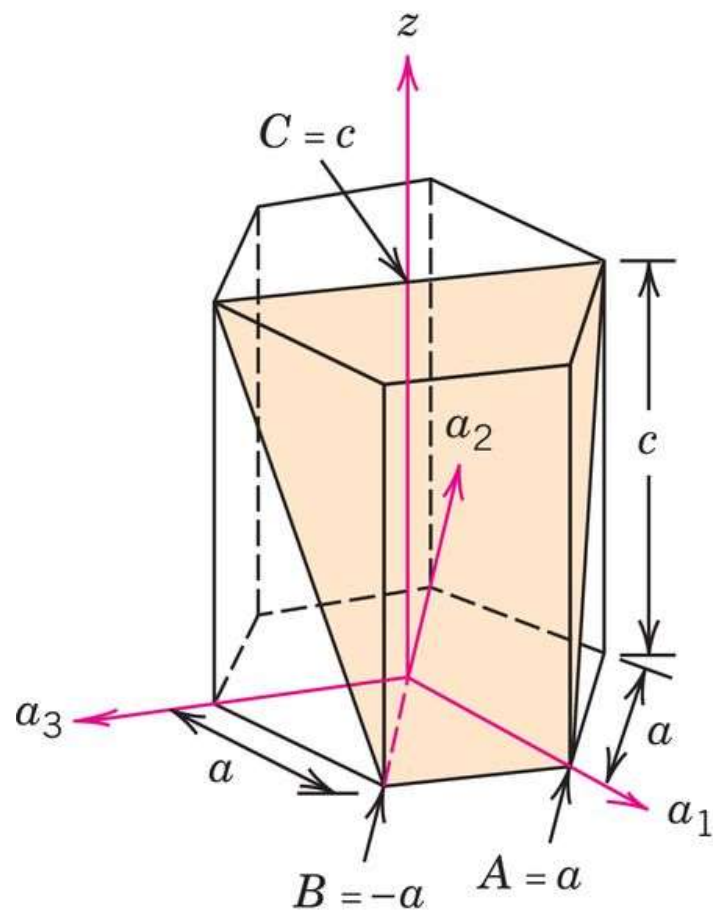
Παράδειγμα	a_1	a_2	a_3	c
1. Συντεταγμένες	1	∞	-1	1
2. Υπολογισμός αντιστρόφων	1	$1/\infty$	-1	1
	1	0	-1	1
3. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές	1	0	-1	1
4. Δείκτες Miller-Bravais	$(10\bar{1}1)$			



Διασκευή από Σχ. 3.8,
Callister & Rethwisch 9η έκδ.



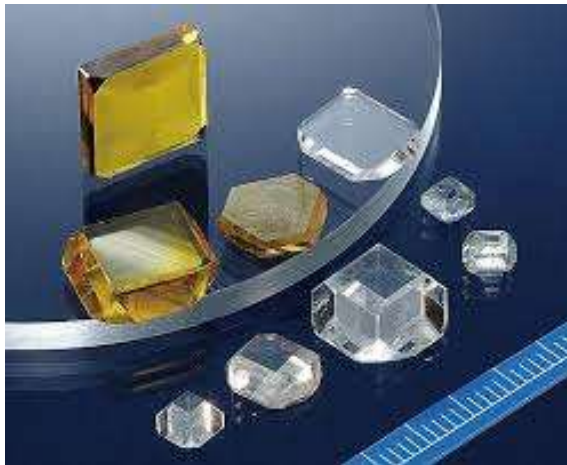
Καθορισμός δεικτών Miller-Bravais ενός επιπέδου σε μια εξαγωνική μοναδιαία κυψελίδα
Ορίστε τους δείκτες Miller-Bravais για το επίπεδο της εξαγωνικής μοναδιαίας κυψελίδας του σχήματος.



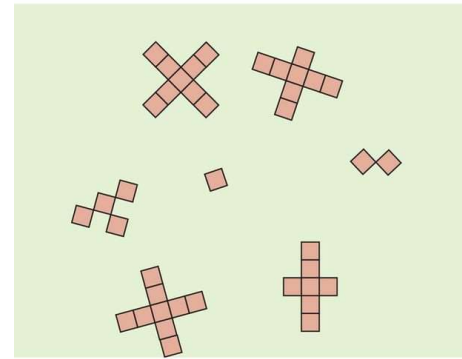
Μονοκρύσταλλοι



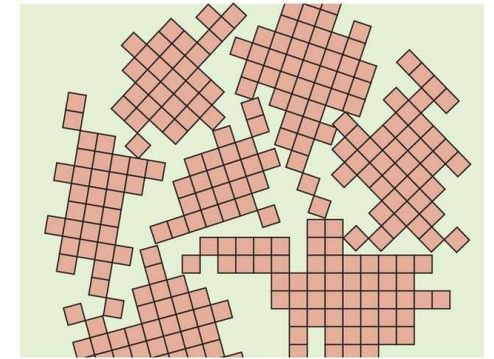
© William D. Callister, Jr.



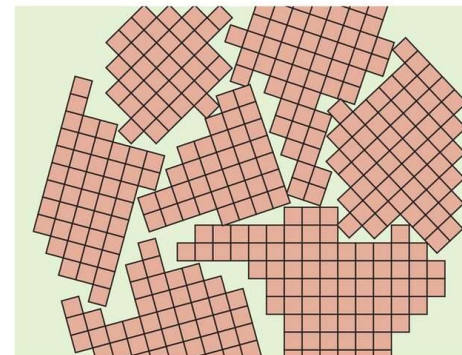
Πολυκρυσταλλικά υλικά



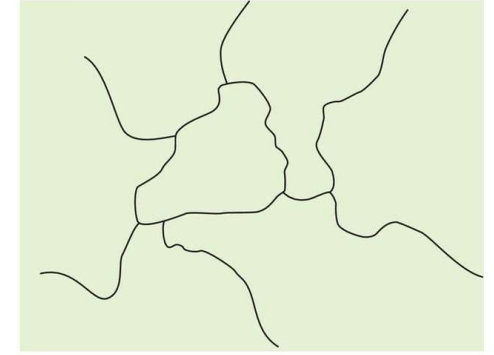
(a)



(b)



(c)



(d)

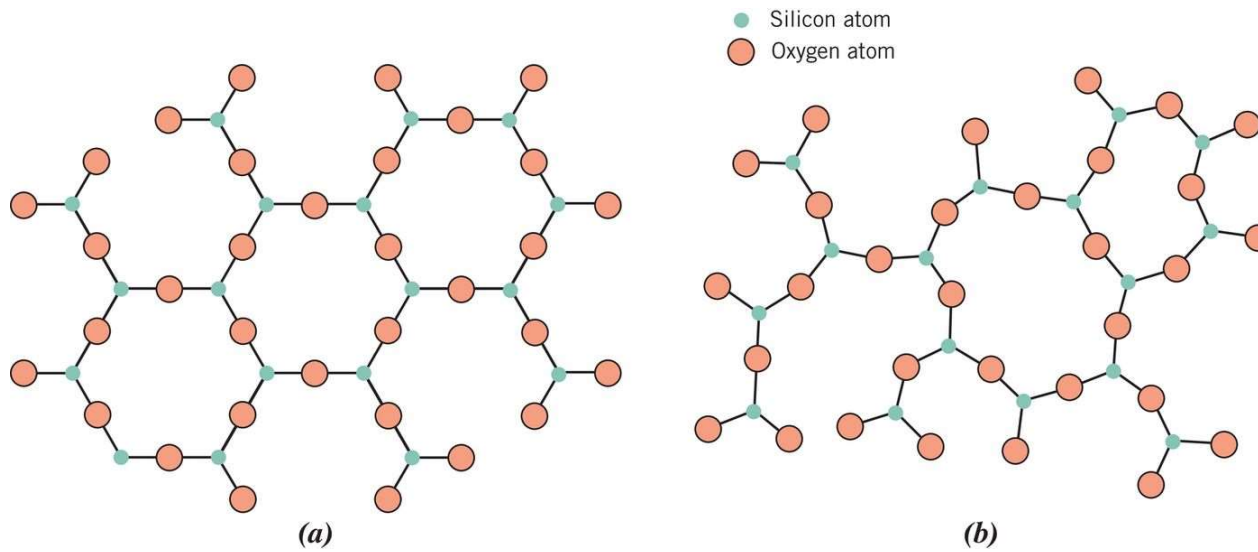
Κατευθυντικότητα και ανισοτροπία

- **Ισοτροπία:** Υλικά στα οποία οι μετρούμενες ιδιότητες είναι ανεξάρτητες από τη διεύθυνση της μέτρησης.
- **Ανισοτροπία:** Κατευθυντικότητα των ιδιοτήτων (εξάρτηση από τη διεύθυνση μέτρησης). *[πχ μέτρο ελαστικότητας, ηλεκτρική αγωγιμότητα ή δείκτης διάθλασης]*
- **Βαθμός ανισοτροπίας:** συνάρτηση της συμμετρίας των κρυσταλλικών δομών – αυξάνεται με τη μείωση της δομικής συμμετρίας (π.χ. τρικλινείς δομές είναι εξαιρετικά ανισοτροπικές)

Μέτρο Ελαστικότητας (Gra)			
Μέταλλο	[100]	[110]	[111]
Αλουμίνιο	63.7	72.6	76.1
Χαλκός	66.7	130.3	191.7
Σίδηρος	125.0	210.5	272.7
Βολφράμιο	384.6	384.6	384.6

Πολυκρυσταλλικά υλικά συμπεριφέρονται πάντα ισοτροπικά

Μη κρυσταλλικά υλικά (ή άμορφα υλικά)





ΣΥΝΟΨΗ



- Σε ένα στερεό, τα άτομα “διευθετούνται” είτε σε **κρυσταλλικές** είτε σε **άμορφες** δομές.
- Σε κρυσταλλικά υλικά, τα **κρυσταλλογραφικά επίπεδα**, **σημεία** και **διευθύνσεις** καθορίζονται βάσει σχημάτων δεικτοδότησης.
 - Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις: **γραμμική ατομική πυκνότητα**
 - Κρυσταλλογραφικά επίπεδα: **επίπεδη ατομική πυκνότητα**
- Τα κρυσταλλικά υλικά κατηγοριοποιούνται σε **μονοκρυσταλλικά** και **πολυκρυσταλλικά**.
 - **Μονοκρυσταλλικά**: γενικά, οι ιδιότητες μεταβάλλονται ανάλογα με τον προσανατολισμό (δηλ., είναι **ανισότροπα** υλικά).
 - **Πολυκρυσταλλικά**: γενικά, οι ιδιότητες είναι μη-κατευθυντικές (δηλ., είναι **ισότροπα** υλικά), με τυχαίο προσανατολισμό κόκκων.

