



# ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΙΚΑ ΥΛΙΚΑ

## Ενότητα 2: ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΟΜΗ

ΛΙΤΣΑΡΔΑΚΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ  
ΤΗΜΜΥ



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ  
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ  
*επένδυση στην κοινωνία της γνώσης*  
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

# Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



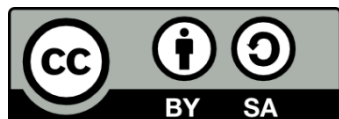
# Χρηματοδότηση

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





# ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΟΜΗ



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

# Περιεχόμενα ενότητας

1. Κρυσταλλική δομή
  - i. Άμορφα υλικά – κρυσταλλικά υλικά
  - ii. Μορφή των κρυστάλλων
  - iii. Συμμετρία στο επίπεδο και στο χώρο
  - iv. Κρυσταλλικό πλέγμα & Πλέγματα Bravais
  - v. Περιγραφή της κρυσταλλικής δομής
  - vi. Διευθύνσεις και επίπεδα



# Σκοποί ενότητας

- Να μπορούν οι φοιτητές να ορίζουν τα άμορφα και τα κρυσταλλικά υλικά.
- Να μπορούν οι φοιτητές να αναγνωρίζουν τα βασικά στοιχεία συμμετρίας.
- Να μπορούν οι φοιτητές να περιγράφουν την κρυσταλλική δομή ενός υλικού.



# Γενικά

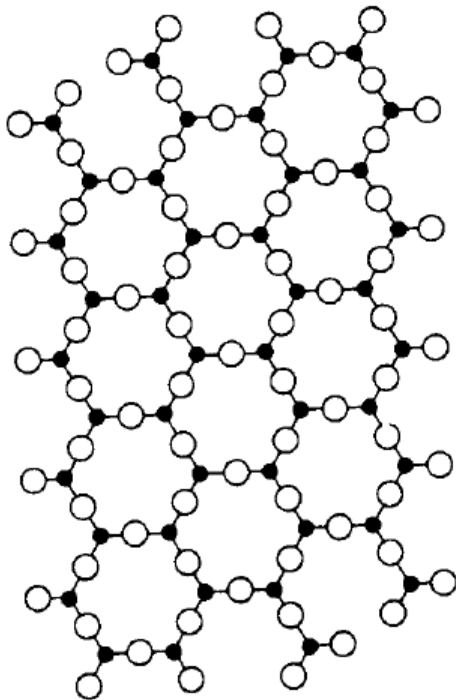
Τα υλικά μπορούν να ταξινομηθούν με βάση την κανονικότητα με την οποία διευθετούνται τα άτομα ή τα ιόντα μεταξύ τους.

- Κρυσταλλικά υλικά: εμφανίζουν τάξη μακράς εμβέλειας.
- Άμορφα υλικά: η τάξη μεγάλης κλίμακας απουσιάζει. Ωστόσο μπορεί να παρατηρηθεί τάξη μικρής εμβέλειας.

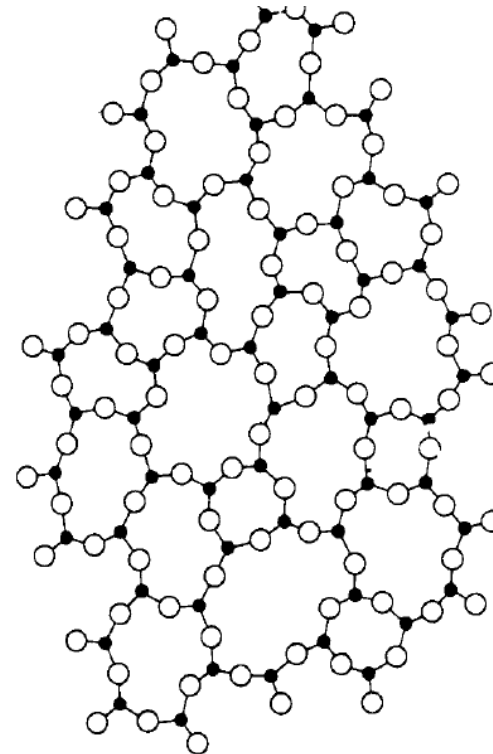


# Κρυσταλλική και Μη κρυσταλλική δομή

Δισδιάστατο σκαρίφημα της δομής του κρυσταλλικού διοξειδίου του πυριτίου.

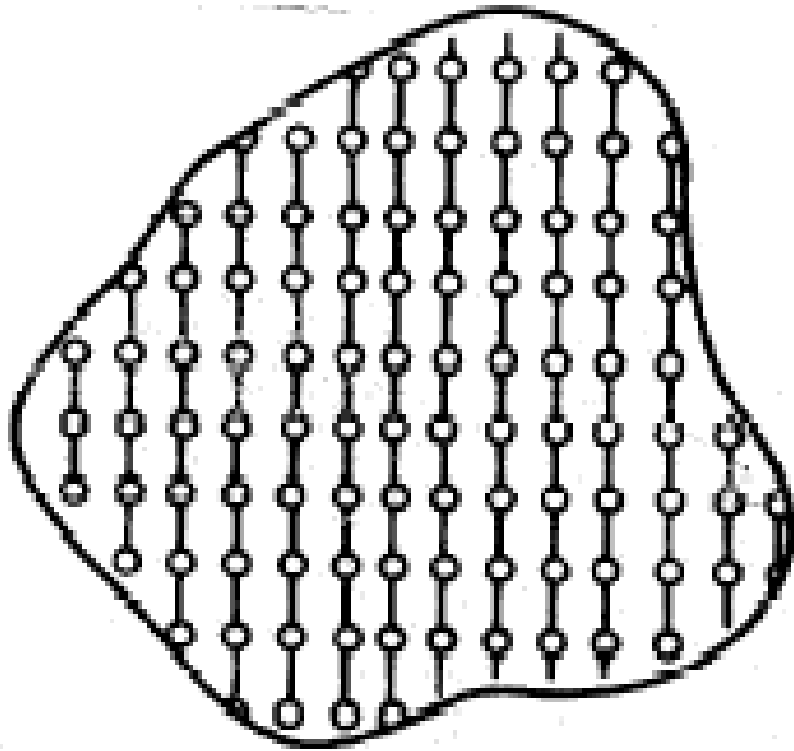


Δισδιάστατο σκαρίφημα της δομής του μη-κρυσταλλικού διοξειδίου του πυριτίου.





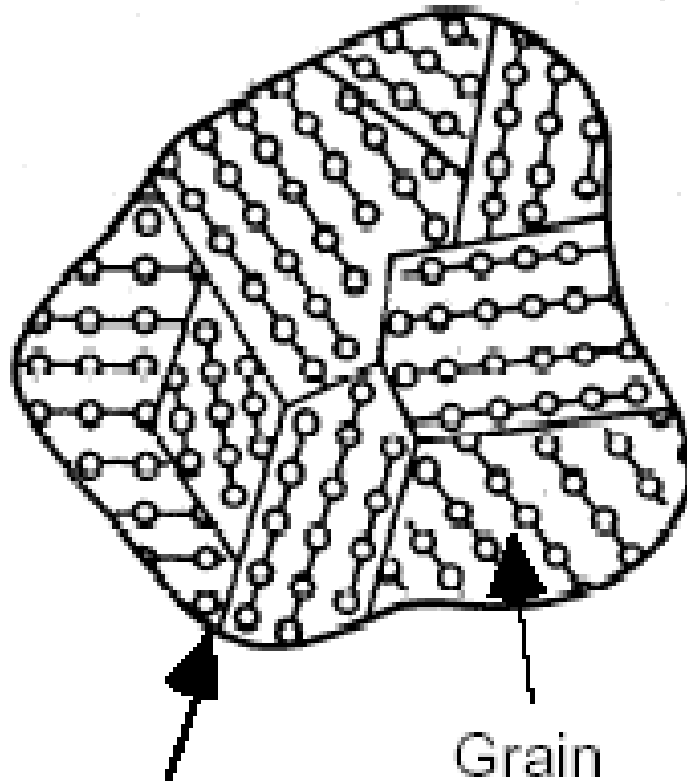
# ΜΟΝΟΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ



Ένα κρυσταλλικό στερεό του οποίου η περιοδική και επαναλαμβανόμενη διεύθυνση των ατόμων εκτείνεται στο σύνολο του δείγματος χωρίς διακοπή.



# ΠΟΛΥΚΡΥΣΤΑΛΛΟΙ



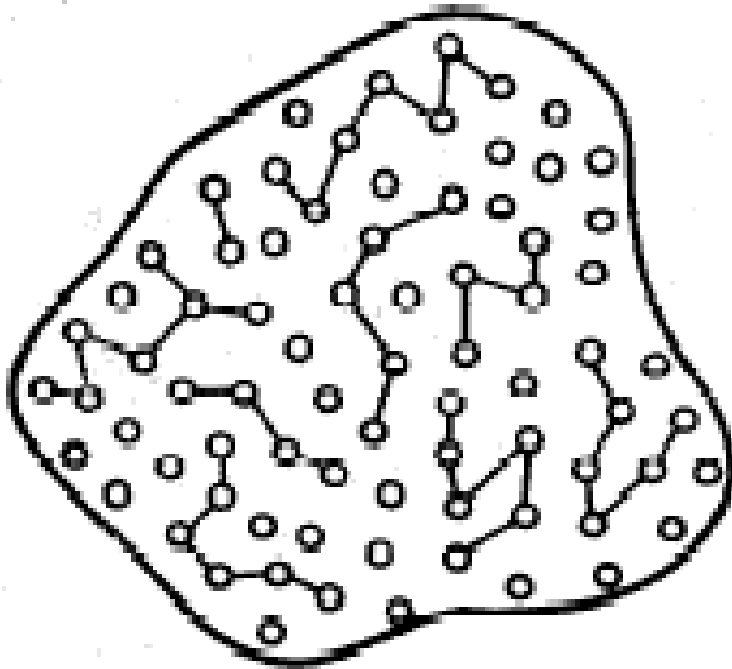
Ένα κρυσταλλικό στερεό που αποτελείται από ένα σύνολο πολλών μικρών κρυστάλλων ή κόκκων. Οι κόκκοι αυτοί έχουν τυχαίους κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς.

Grain boundary

Grain



# ΑΜΟΡΦΑ ΥΛΙΚΑ



· Ένα στερεό υλικό που δεν έχει καθορισμένη δομή και τα μόρια ή τα ιόντα από τα οποία αποτελείται διατάσσονται κατά τυχαίο τρόπο.

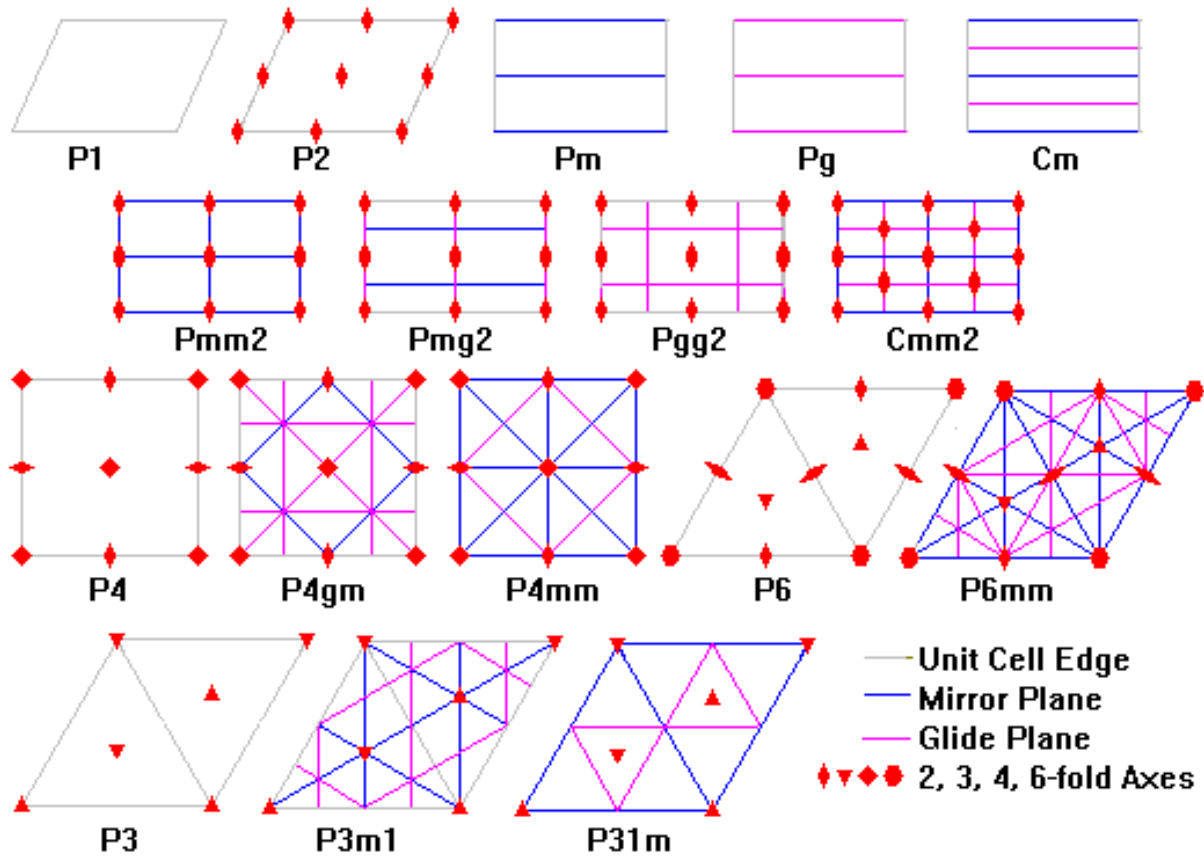


# ΜΟΡΦΗ ΤΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ

- Μορφή κρυστάλλων – όχι δομή των κρυστάλλων  
<http://www.uwgb.edu/dutchs/symmetry/xlforms.htm>
- Σχηματισμός κρυστάλλων από κυψελίδες  
<http://www.uwgb.edu/dutchs/symmetry/unitcell.htm>



# ΣΥΜΜΕΤΡΙΑ ΣΤΟ ΕΠΙΠΕΔΟ

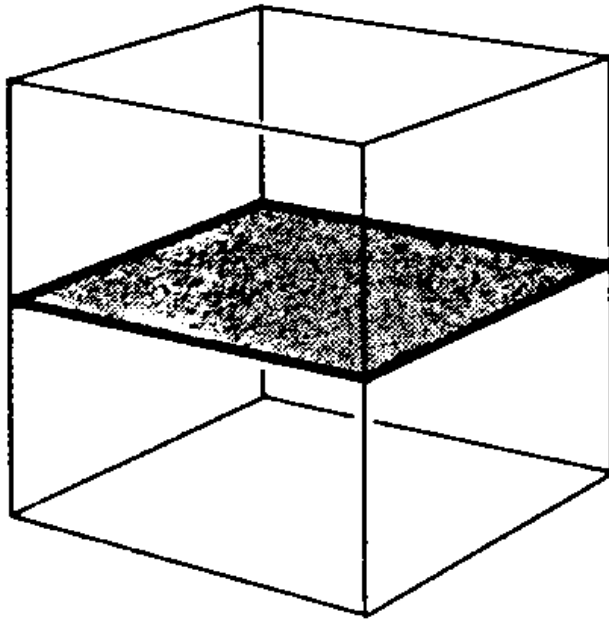


# ΣΥΜΜΕΤΡΙΑ ΣΤΟ ΧΩΡΟ

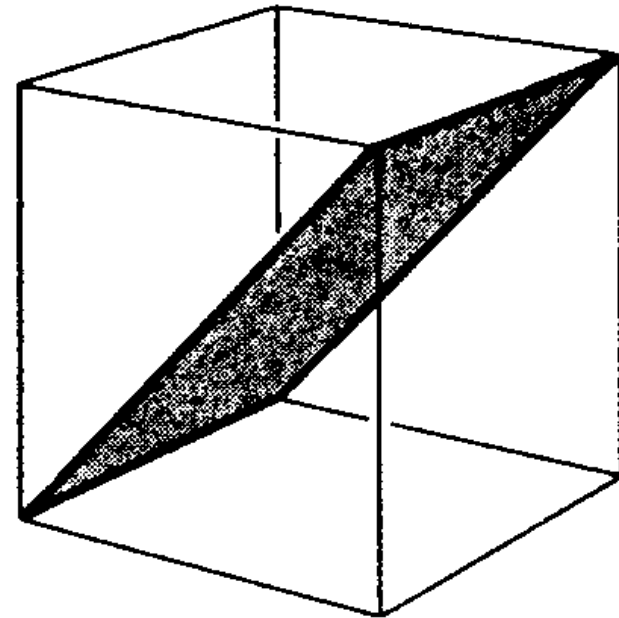
- Σημείο συμμετρίας.
- Επίπεδο συμμετρίας (ανάκλαση).
- Άξονας στροφής η τάξης (στροφή κατά  $2\pi/n$  μοίρες).
- Άξονας ελίκωσης.
- Αλγεβρική Ομάδα: Το σύνολο των διεργασιών συμμετρίας που αφήνουν αμετάβλητη μια περιοδική δομή έχει τις ιδιότητες μιας αλγεβρικής ομάδας.
- 230 «ομάδες συμμετρίας χώρου».
- "ομάδες συμμετρίας σημείου" (χωρίς μετατόπιση).



# ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ (1)



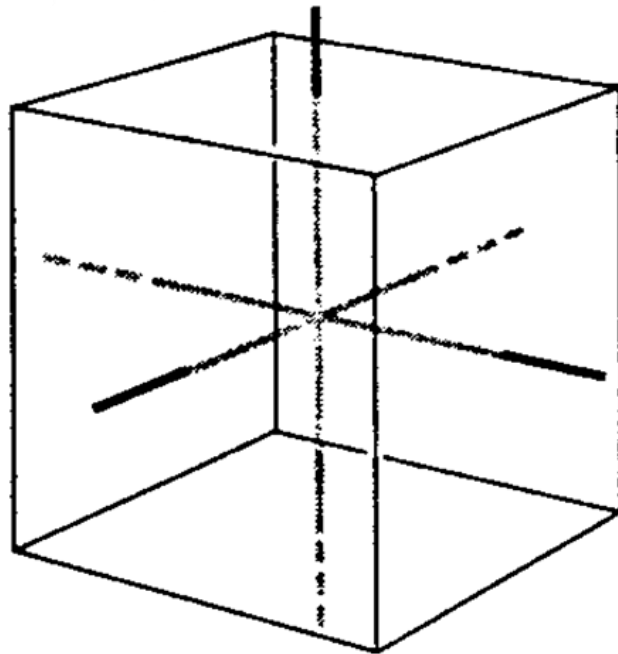
Ένα επίπεδο συμμετρίας παράλληλο προς τις έδρες ενός κύβου.



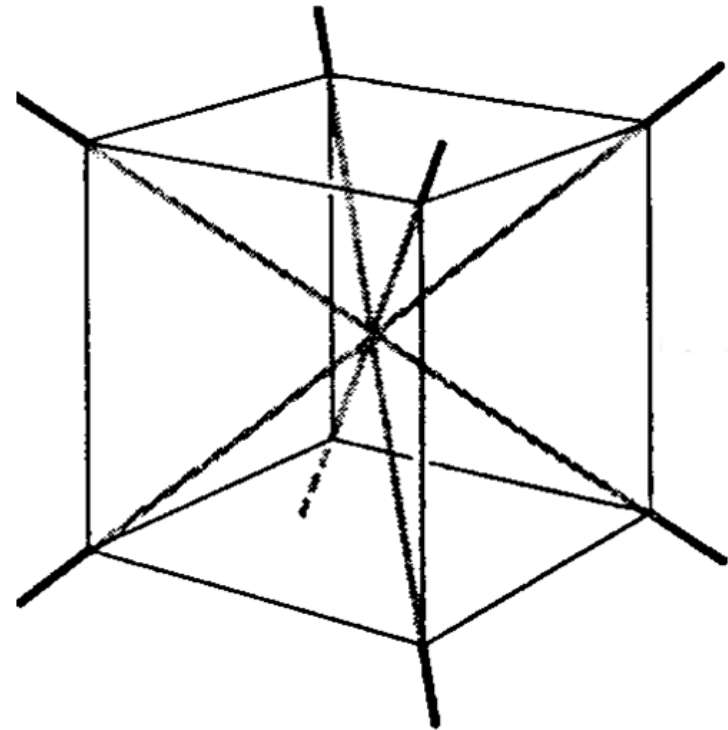
Ένα διαγώνιο επίπεδο συμμετρίας σε ένα κύβο.



# ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ (2)



Οι τρεις τετραεδρικοί άξονες ενός κύβου.

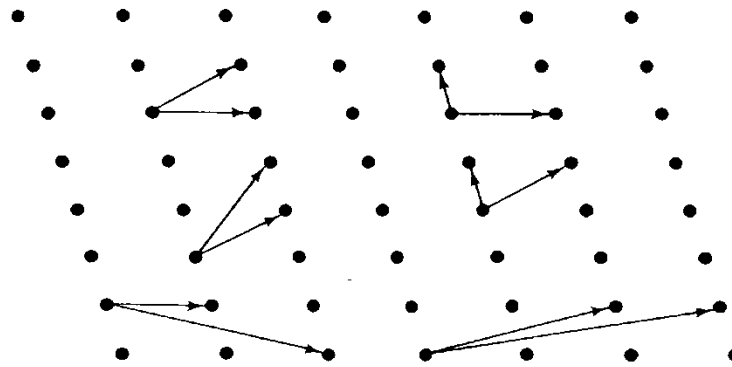


Οι τέσσερις τριεδρικοί άξονες ενός κύβου.





# ΤΟ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ



- Το πλέγμα είναι μια μαθηματική κατασκευή.
- Ορίζουμε διανύσματα βάσης  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  : με τη μικρότερη περίοδο επανάληψης (άπειροι συνδυασμοί).
- Κόμβοι του πλέγματος: ορίζονται από το διάνυσμα  $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}$ .  
όπου ( $n_{1,2,3}$  : ακέραιοι)



# ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ

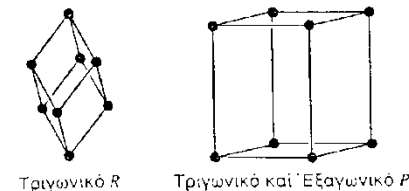
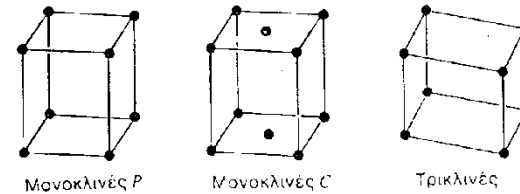
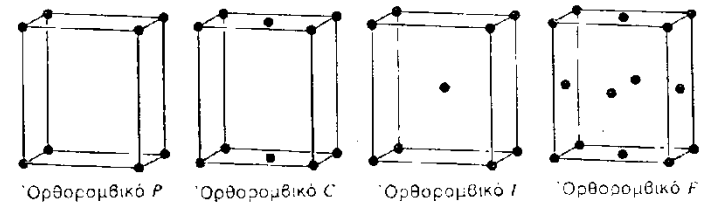
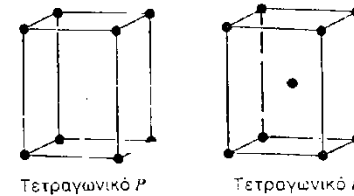
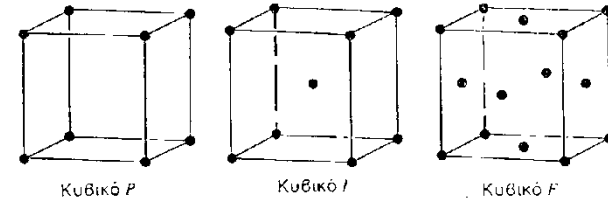
Στον πίνακα που ακολουθεί παρουσιάζονται τα επτά κρυσταλλικά συστήματα ( επί τοις ουσίας συστήματα συντεταγμένων).

System	Axials lengths and angles	Bravais lattice	Lattice symbol
Cubic	Three equal axes at right angles $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple	P
		Body-centered	I
		Face-centered	F
Tetragonal	Three axes at right angles, two equal $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple	P
		Body-centered	I
Orthorhombic	Three unequal axes at right angles $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple	P
		Body-centered	I
		Base-centered	C
		Face-centered	F
Rhombohedral <sup>®</sup>	Three equal axes, equally inclined $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Simple	R
Hexagonal	Two equal coplanar axes at $120^\circ$ , third axis at right angles $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Simple	P
Monoclinic	Three unequal axes, one pair not at right angles $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Simple	P
		Base-centered	C
Triclinic	Three unequal axes, unequally inclined and none at right angles $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq 90^\circ$	Simple	P



# ΠΛΕΓΜΑΤΑ BRAVAIS

- 7 κρυσταλλικά συστήματα
- 14 είδη πλεγμάτων στο χώρο (πλέγματα Bravais)
  - απλά
  - ενδο-κεντρωμένα (body-centered)
  - εδρο-κεντρωμένα (face-centered)



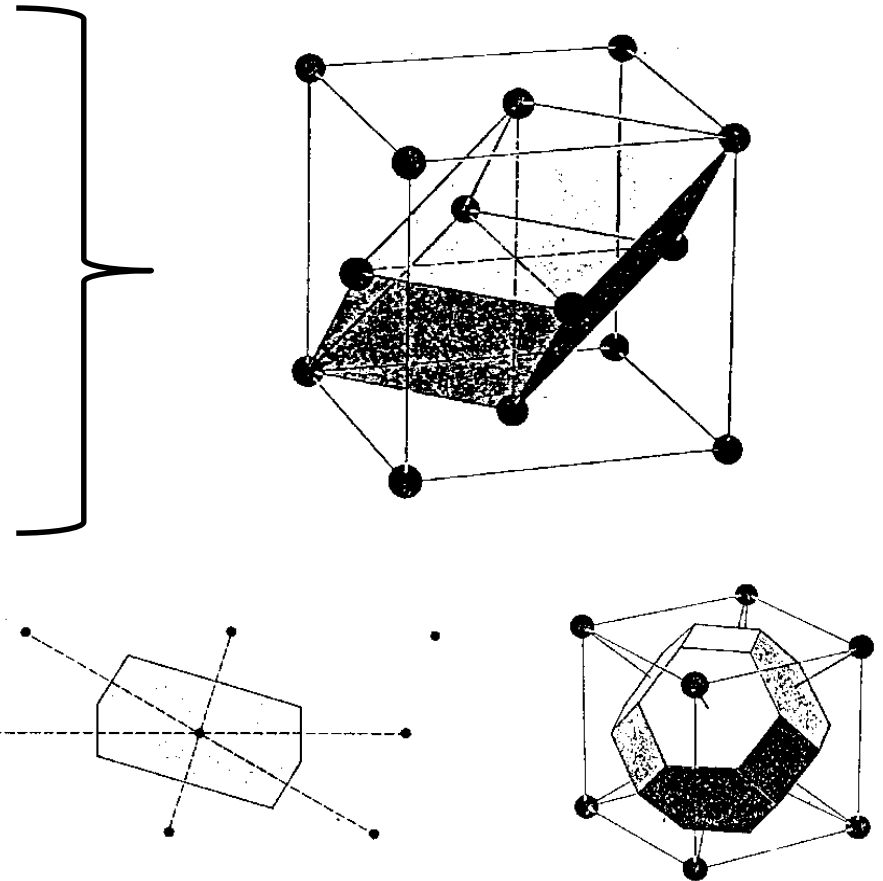
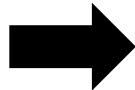
# ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

- Δομή = πλέγμα + άτομα (ή ομάδες ατόμων) στους κόμβους
- Για την περιγραφή απαιτούνται:
  - Κρυσταλλική ομάδα (τύπος πλέγματος & στοιχεία συμμετρίας)
  - Διαστάσεις (πλευρές & γωνίες)
  - Θέσεις ατόμων (συντεταγμένες)

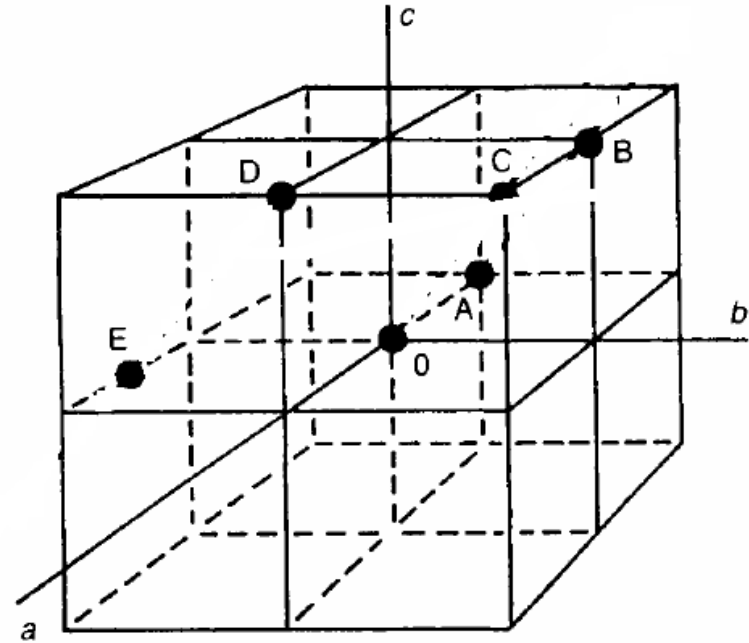
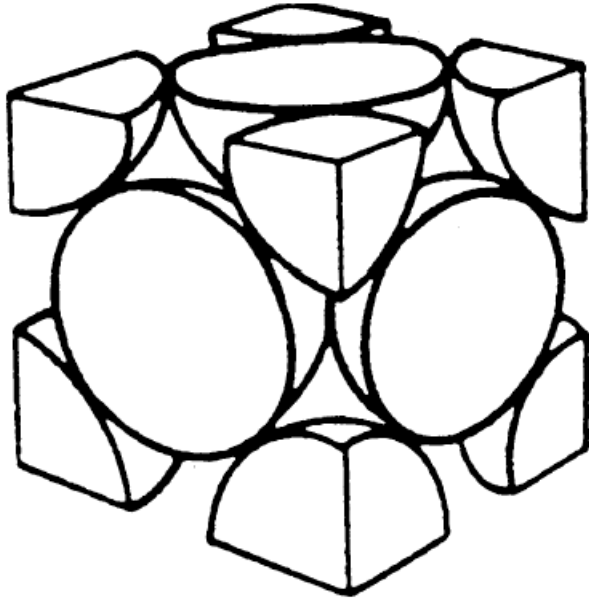


# ΚΥΨΕΛΙΔΑ

- στοιχειώδης - περιλαμβάνει 1 κόμβο (άπειροι συνδυασμοί)
- (συμβατική) μοναδιαία, με τη συμμετρία του πλέγματος
- Στοιχειώδης με τη συμμετρία του πλέγματος : Wigner-Seitz



# ΑΤΟΜΑ ΑΝΑ ΚΥΨΕΛΙΔΑ

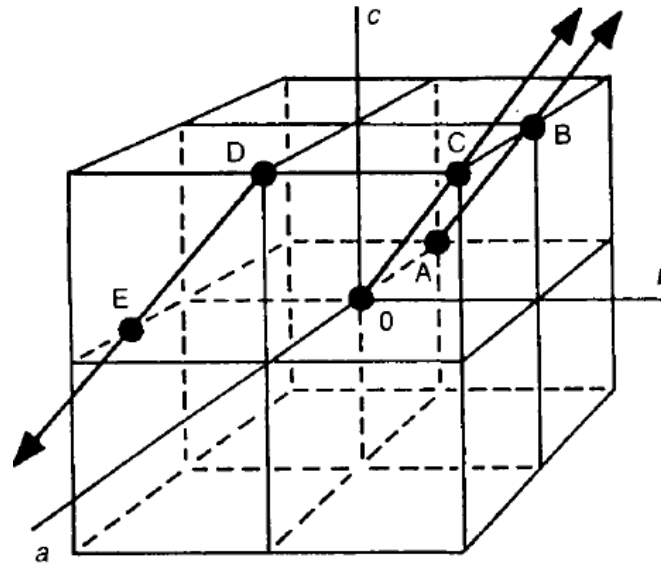


Συνεισφορά:

- $1/8$  από κάθε άτομο στις κορυφές.
- $1/4$  από κάθε άτομο στις ακμές.
- $1/2$  από κάθε άτομο στις έδρες.



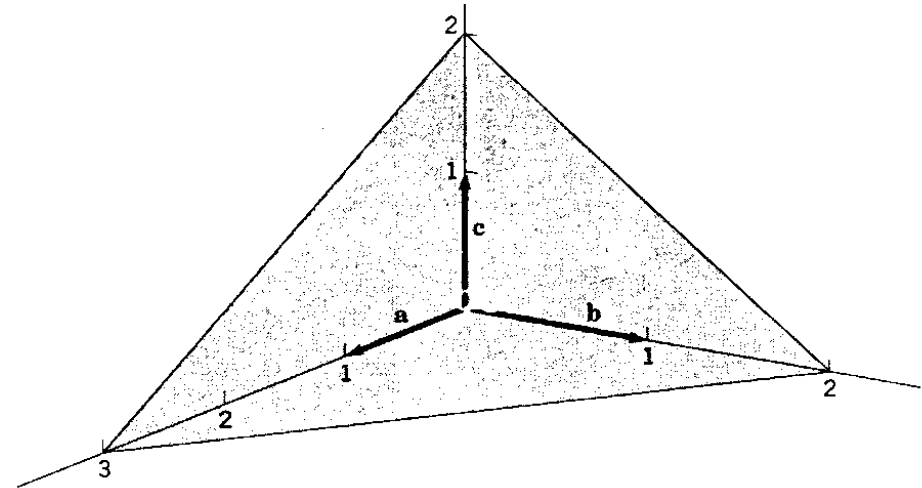
# ΔΙΕΥΘΥΝΣΕΙΣ ΚΑΙ ΕΠΙΠΕΔΑ



- κρυσταλλική διεύθυνση  $[hkl]$  : τρεις μικρότεροι ακέραιοι, που αποτελούν τις συντεταγμένες ενός διανύσματος με την ίδια διεύθυνση
- $\langle hkl \rangle$ , ισοδύναμες διευθύνσεις, (π.χ οι διευθύνσεις  $[100]$ ,  $[010]$  και  $[001]$  σε ένα κυβικό πλέγμα είναι ισοδύναμες  $\rightarrow \langle 100 \rangle$ .



# ΔΕΙΚΤΕΣ Miller (1)

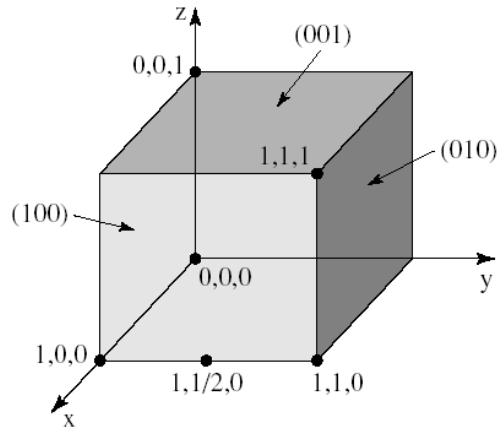


- δείκτες Miller (hkl) :
  - Παίρνουμε τα σημεία τομής 3, 2, 2
  - Παίρνουμε τον αντίστροφο αριθμό  $1/3, 1/2, 1/2$
  - Αναγωγή σε ακέραιο (2,3,3)
- ισοδύναμα επίπεδα {hkl}
- Μόνο στα κυβικά πλέγματα, η διεύθυνση [hkl] είναι κάθετη στο επίπεδο (hkl).

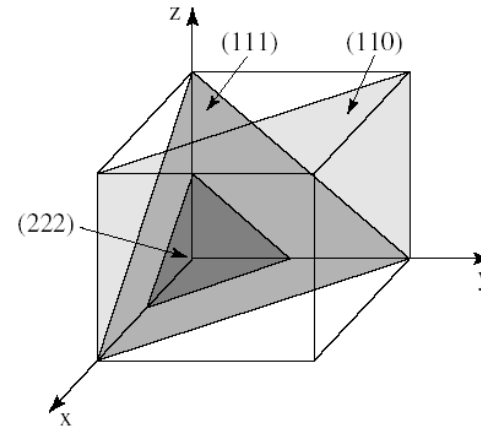




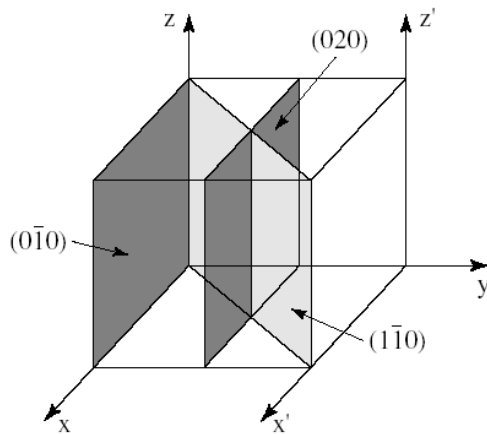
# ΔΕΙΚΤΕΣ Miller (2)



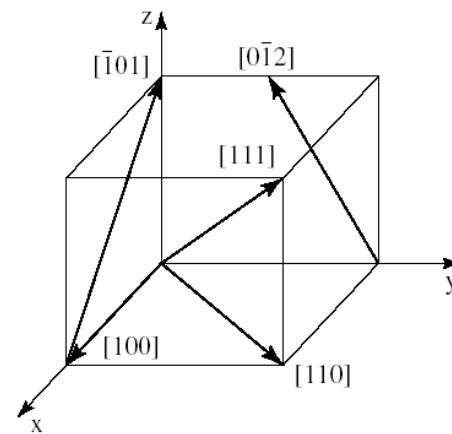
(a)



(b)



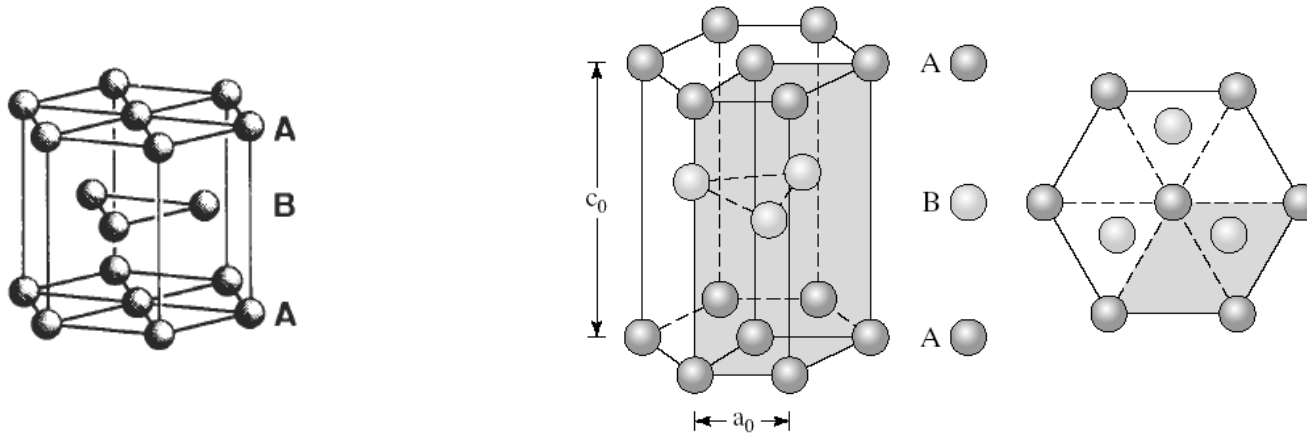
(c)



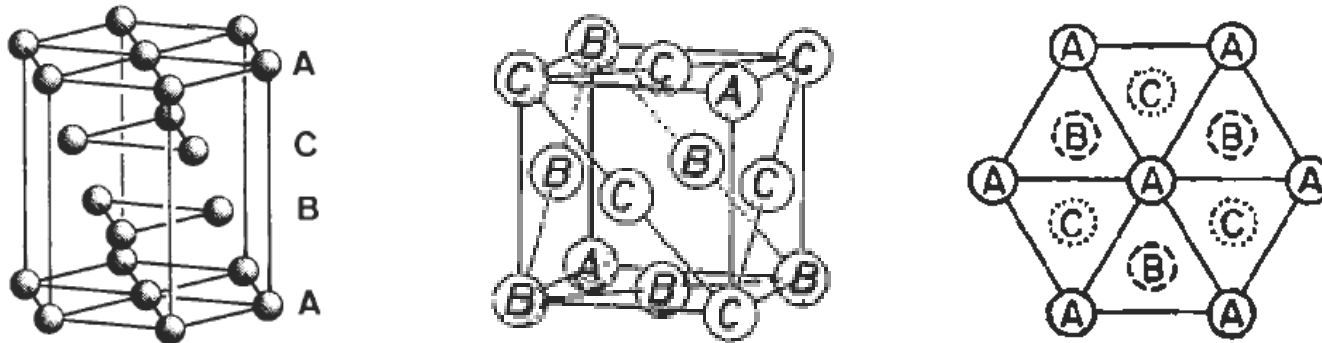
(d)



# ΠΥΚΝΗ ΔΙΑΤΑΞΗ ΑΤΟΜΩΝ

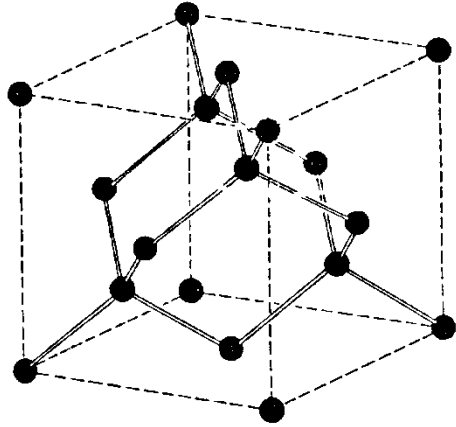


## 1. Εξαγωνική (hexagonal close packed $\rightarrow$ hcp)

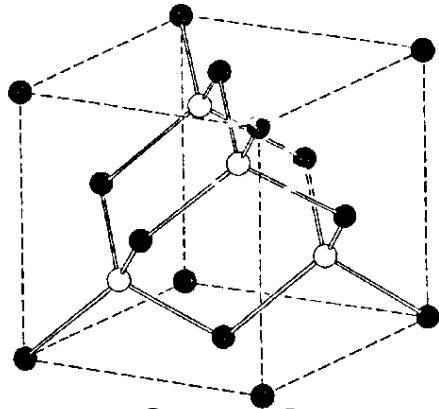
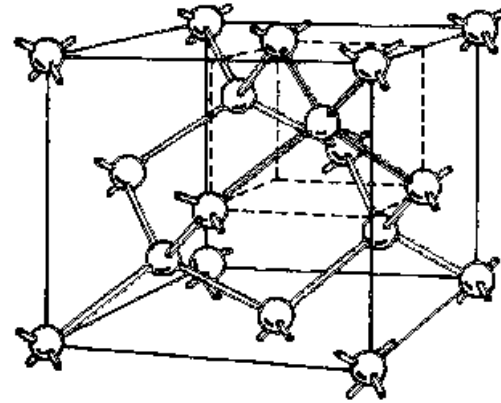


## 2. Κυβική (face centered cubic $\rightarrow$ fcc)

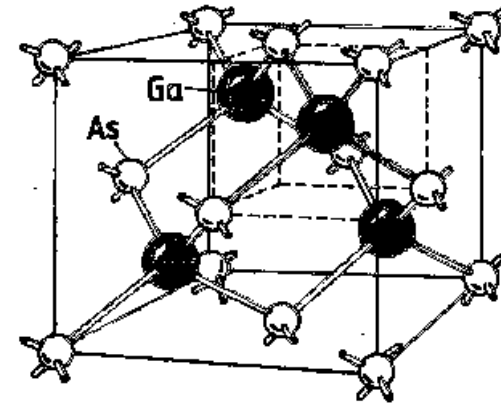
# ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΔΟΜΩΝ



1. Τύπου διαμαντιού (πυρίτιο)



2. Τύπου θειούχου ψευδαργύρου (GaAs)



# ΤΟ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΠΛΕΓΜΑ

- Το αντίστροφο πλέγμα είναι μια μαθηματική κατασκευή.
- Χρησιμοποιείται στη μελέτη της κρυσταλλικής περίθλασης, των συναρτήσεων με την περιοδικότητα του πλέγματος Bravais και της διατήρησης της ορμής σε περιοδικό δυναμικό.
- Ορίζεται από τα διανύσματα  $\mathbf{G}$  για τα οποία:

$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1 \Leftrightarrow \vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi m$$

(όπου  $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$  διάνυσμα του ορθού πλέγματος)

- Διανύσματα βάσης : 
$$b_i = \frac{2\pi(\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}{\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)} = 2\pi \frac{(\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}{V_C} \quad (i,j,k = 1,2,3)$$



# ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ

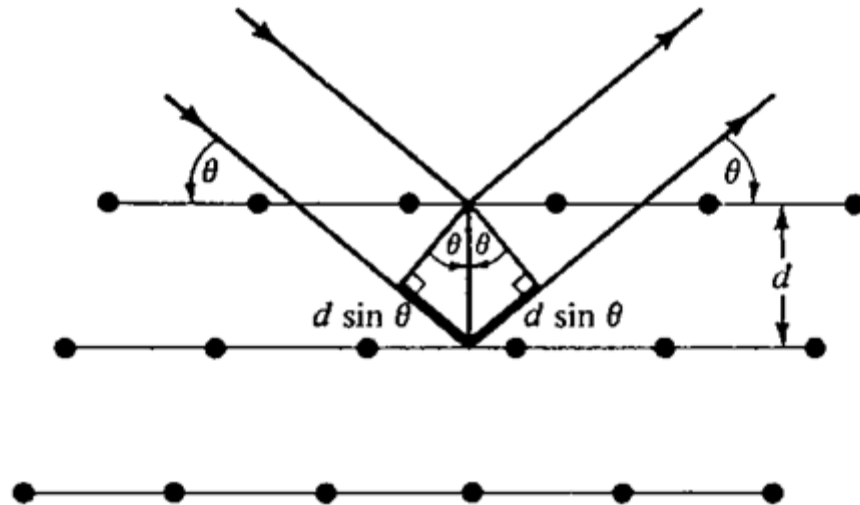
1. Το αντίστροφο πλέγμα είναι ένα πλέγμα Bravais.
2. Το κύμα  $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ , με κυματοδιάνυσμα  $\mathbf{k}$  ένα διάνυσμα  $\mathbf{G}$  του αντίστροφου πλέγματος, έχει την περιοδικότητα του (ορθού) πλέγματος Bravais:

$$\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{R})] = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) \Leftrightarrow \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) = 1$$

3. Το διάνυσμα  $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$  του αντίστροφου πλέγματος είναι κάθετο στο επίπεδο  $(hkl)$  του κρυστάλλου (του "ορθού" πλέγματος).



# ΑΝΑΚΛΑΣΗ Bragg (1)

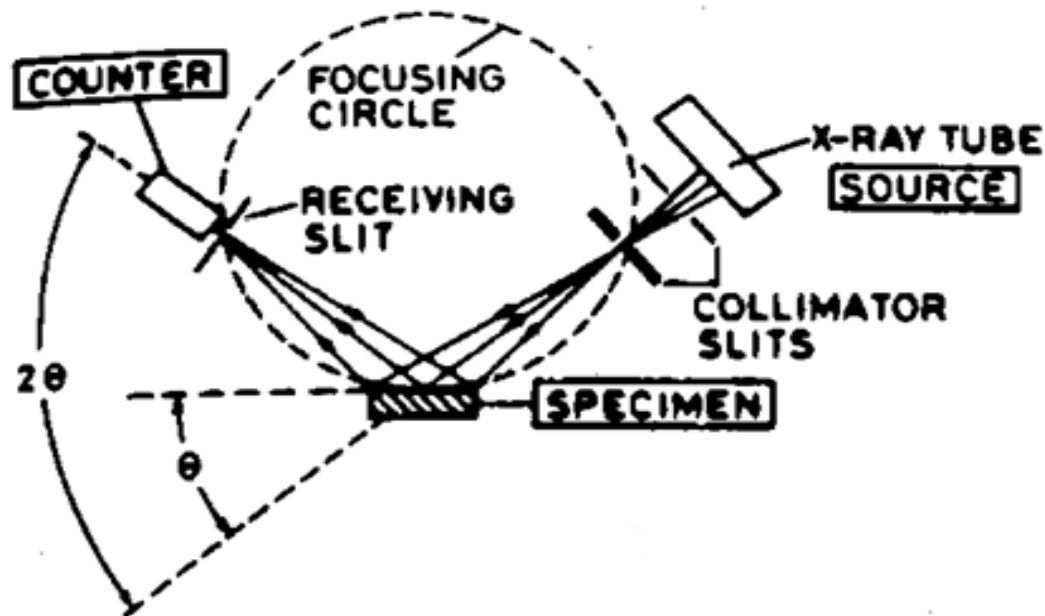


- Σκέδαση ακτινοβολίας ή σωματιδίων και εποικοδομητική συμβολή
- μέγιστα έντασης σε ορισμένες διευθύνσεις ( $\Delta\phi = n\lambda$ , όπου  $\phi = kx - \omega t$ )
  - αν υποθέσουμε κατοπτρική ανάκλαση με γωνία  $\theta$  από παράλληλα κρυσταλλικά επίπεδα απόστασης  $d$ ,  $\Delta\phi = 2d \cdot \sin\theta$

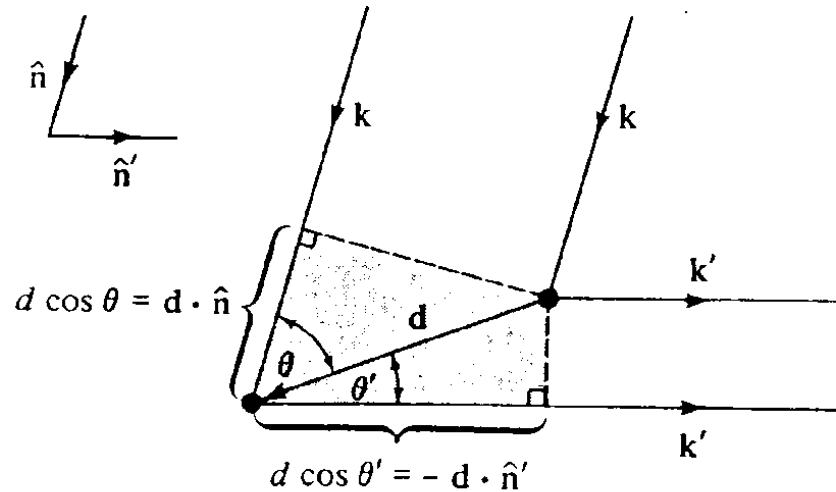


# ΑΝΑΚΛΑΣΗ Bragg (2)

- Συνθήκη Bragg :  $n\lambda = 2d \cdot \sin\theta$
- Μεταβάλλουμε το  $\lambda$  ή (συνήθως) το  $\theta$



# ΣΚΕΔΑΣΗ Laue (1)



- ελαστική σκέδαση  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = 2\pi/\lambda$ , σε τυχαίες διευθύνσεις,
- “Ανακλάσεις” (μέγιστα εντάσεων) προκύπτουν σε διευθύνσεις που συμβαίνει εποικοδομητική συμβολή.





# ΣΚΕΔΑΣΗ Laue (2)

- Συνθήκη περίθλασης:  $\Delta x = d \cos \theta + d \cos \theta' = d(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = n\lambda$   
( $\mathbf{q}$  και  $\mathbf{q}'$  είναι μοναδιαία διανύσματα διεύθυνσης)

Πολλαπλασιάζουμε επί  $2\pi/\lambda$ :

- $d(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \mathbf{R}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi n \Leftrightarrow \exp[i\mathbf{R}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] = \exp(2\pi n) = 1$
- Η διαφορά  $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$  ισούται με ένα διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος, και επομένως (συνθήκη περίθλασης) : *Περίθλαση προκύπτει όταν η μεταβολή του διανύσματος κύματος ισούται με ένα διάνυσμα του αντίστροφου πλέγματος,  $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}$ .*



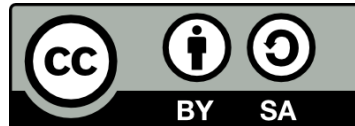
# Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Λιτσαρδάκης Γεώργιος.  
«Ηλεκτρολογικά Υλικά. Κρυσταλλική δομή». Έκδοση: 1.0. Θεσσαλονίκη 2014.  
Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:  
<https://opencourses.auth.gr/courses/OCRS492/>.



# Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά - Παρόμοια Διανομή [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

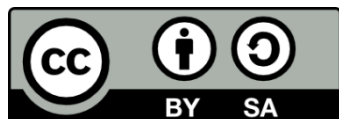
[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>





# Τέλος ενότητας

Επεξεργασία: Τονοζλής Γεώργιος  
Θεσσαλονίκη, 03/06/2015



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ  
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ  
ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

---

# Σημειώματα

# Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.

