



Άσκηση 1. Η μοναδιαία κυψελίδα του αλουμινίου είναι κύβος με ακμή $a=0,4049\text{nm}$. ι) πόσες μοναδιαίες κυψελίδες υπάρχουν σε τετραγωνικό φύλλο αλουμινίου $25\text{cm}\times 25\text{cm}$, πάχους $0,005\text{cm}$ και μάζας $8,44\text{g}$; ιι) πόσα άτομα υπάρχουν στο φύλλο; ιιι) πόσα άτομα υπάρχουν ανά μοναδιαία κυψελίδα; Το ατομικό βάρος (ή ατομική μάζα) του αλουμινίου είναι $26,97\text{g/mol}$ (ή $26,9\text{amu/άτομο}$), και $1\text{nm}=10^{-9}\text{m}$, $1\text{Å}=10^{-10}\text{m}$.

(Ατομικό βάρος ή ατομική μάζα ενός στοιχείου ισούται με την ολική μάζα του μέσου αριθμού πρωτονίων και νετρονίων στο άτομο. Μπορεί να εκφραστεί σε μονάδες amu/άτομο ή σε g/mol , σχετίζονται μεταξύ τους με τη σχέση: $1\text{amu/άτομο}=1\text{g/mol}$. Στο μάθημα θα χρησιμοποιούμε τη μονάδα g/mol)

Λύση:

$$\text{ι) } V_{\text{κυψ}} = [axb \cdot c] = a^3 = 0,4049^3 \cdot 10^{-21} \text{cm}^3 = 0,06638 \cdot 10^{-21} \text{cm}^3$$

$$\text{αριθμός κυψελίδων} = \frac{3,125\text{cm}^3}{0,06638 \cdot 10^{-21} \text{cm}^3} = 47 \cdot 10^{21} \text{κυψελίδες}$$

$$\text{ιι) αριθμός ατόμων} = \frac{6,022 \cdot 10^{23} \text{ατομα/mol} \cdot 8,44\text{g}}{26,97\text{g/mol}} = 188 \cdot 10^{21} \text{άτομα}$$

$$\text{ιιι) αριθμός ατόμων ανά κυψελίδα} = \frac{188 \cdot 10^{21} \text{άτομα}}{47 \cdot 10^{21} \text{κυψελίδες}} = 4 \text{άτομα/κυψελίδα}$$

Άσκηση 2. Ένα υποθετικό μέταλλο έχει μοναδιαία κυψελίδα με σταθερές πλέγματος $a=0,30\text{nm}$, $b=0,30\text{nm}$, $c=0,40\text{nm}$, και γωνίες α, β, γ ίσες με 90° . ι) σε ποιο κρυσταλλικό σύστημα ανήκει η κυψελίδα; ιι) Αν η κυψελίδα περιέχει 2 άτομα και το ατομικό βάρος είναι 141g/mol να βρείτε την πυκνότητα του μετάλλου. (όλα τα μέταλλα είναι κρυσταλλικά και η πυκνότητα μάζας τους $\rho=m/V$ είναι ίδια με την πυκνότητα της κυψελίδας τους $\rho=m_{\text{κυψ}}/V_{\text{κυψ}}$.)

Λύση:

Η μοναδιαία κυψελίδα ανήκει στο τετραγωνικό κρυσταλλικό σύστημα

$$\text{ι) } V_{\text{κυψ}} = [axb \cdot c] = a^2 c \sin 90^\circ = 0,30^2 \cdot 0,40 \cdot 10^{-21} \text{cm}^3 = 0,036 \cdot 10^{-21} \text{cm}^3$$

$$\rho = \frac{Z (\text{άτομα / κυψελίδα}) \cdot AB \left(\frac{\text{g}}{\text{mol}}\right)}{V_{\text{κυψελίδας}} (\text{cm}^3 / \text{κυψελίδα}) \cdot N_A \left(\frac{\text{άτομα}}{\text{mol}}\right)} = \frac{2 \cdot 141}{0,036 \cdot 10^{-21} \cdot 6,022 \cdot 10^{23}} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} = \frac{13\text{g}}{\text{cm}^3} = 13 \cdot 10^3 \text{Kg/m}^3$$

Άσκηση 3. Η μοναδιαία κυψελίδα του κρυσταλλικού ψευδαργύρου έχει βάση σχήματος ρόμβου με ακμή $a=2,66\text{Å}$, γωνία $\gamma=60^\circ$ και περιέχει δύο άτομα. Οι πλευρές είναι ορθογώνια κάθετα στη βάση μήκους $c=4,95\text{Å}$. Να υπολογίσετε τον όγκο της μοναδιαίας κυψελίδας και την πυκνότητα μάζας του ψευδαργύρου. Το ατομικό βάρος είναι $65,38\text{g/mol}$ ($1\text{nm}=10^{-9}\text{m}$ και $1\text{Å}=10^{-10}\text{m}$).

Λύση: Η μοναδιαία κυψελίδα περιέχει 2 άτομα. Ο όγκος της μοναδιαίας κυψελίδας είναι:

$$V_{\text{κυψ}} = [axb \cdot c] = a^2 \cdot c \sin 60^\circ = (2,66 \cdot 10^{-10})^2 \cdot 4,95 \cdot 10^{-10} \cdot 0,866 = 3,03 \cdot 10^{-29} \text{m}^3$$

Το ατομικό βάρος του ψευδαργύρου είναι $65,38\text{g/mol}$ οπότε η μάζα του ατόμου σε g είναι $m=AB/N_A=65,38/6,022 \cdot 10^{23}=1,086 \cdot 10^{-22} \text{g}$.

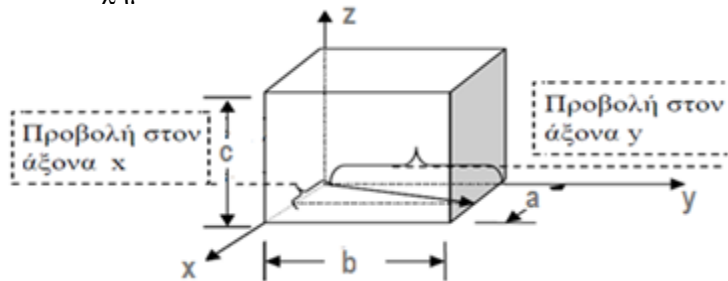


Η πυκνότητα μάζας είναι $\rho = m_{\text{κυψ.}} / V_{\text{κυψ.}}$, όπου $m_{\text{κυψ.}}$ είναι η συνολική μάζα όλων των ατόμων που περιέχει η κυψελίδα και είναι ίση με το γινόμενο του αριθμού των ατόμων στην κυψελίδα (z) επί τη μάζα ενός ατόμου AB/N_A , συνεπώς η πυκνότητα δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\rho = \frac{Z (\text{άτομα/κυψελίδα}) \cdot AB \left(\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)}{V_{\text{κυψελίδας}} \left(\frac{\text{cm}^3}{\text{κυψελίδα}} \right) \cdot N_A \left(\frac{\text{άτομα}}{\text{mol}} \right)} = \frac{2 \cdot 1,086 \cdot 10^{-22} \text{ g}}{3,03 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3} = 7,17 \cdot \frac{10^3 \text{ Kg}}{\text{m}^3} = \frac{7,17 \text{ g}}{\text{cm}^3}$$

Η πυκνότητα μάζας που υπολογίσαμε είναι η θεωρητική τιμή της πυκνότητας του ψευδαργύρου, διαφέρει πολύ λίγο από την πειραματική τιμή $7,14 \text{ g/cm}^3$.

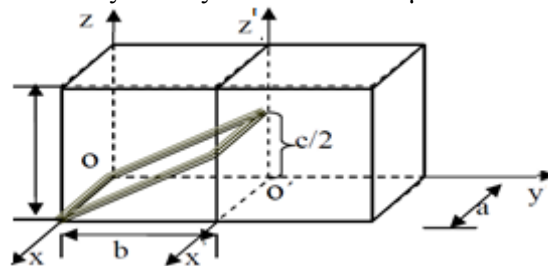
Άσκηση 4. Να οριστούν οι δείκτες Miller του σκιασμένου επιπέδου και της διεύθυνσης που φαίνονται στο παρακάτω σχήμα :



Δείκτες Miller επιπέδου			
Άξονες	x	y	z
Τομές επιπέδου	∞	1	∞
Αντιστροφή	0	1	0
Αναγραφή σε παρενθέσεις	(010)		

Δείκτες Miller διεύθυνσης			
Άξονες	x	y	z
Προβολές	1/2	1	0
Μικρότεροι ακέραιοι	1	2	0
Αναγραφή σε αγκύλες	[120]		

Άσκηση 5. Να προσδιορίσετε τους δείκτες Miller του τονισμένου επιπέδου στο παρακάτω σχήμα.



Το επίπεδο περνάει από την αρχή των αξόνων. Πρέπει να αλλάξουμε το σημείο αναφοράς από το O στο O' και οι κρυσταλλικοί άξονες είναι x', y', z'

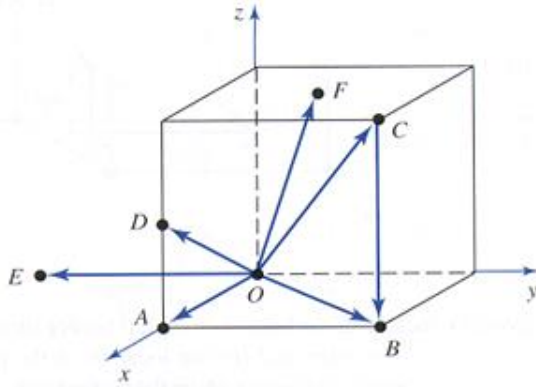
Δείκτες Miller επιπέδου			
Άξονες	X'	Y'	Z'
Τομές επιπέδου	∞	-1	1/2
Αντιστροφή	0	-1	2
Αναγραφή σε παρενθέσεις	$(0\bar{1}2)$		



Άσκηση 6. Το επίπεδο (210) στην κυβική κυψελίδα τέμνει τους κρυσταλλικούς άξονες x, y, z στα σημεία $\frac{1}{2}$, 1, και ∞ ;

Απάντηση: Ναι, διότι αντιστρέφοντας τις τομές $\frac{1}{2}$, 1, και ∞ προκύπτουν οι δείκτες Miller 2, 1, 0, δηλαδή το επίπεδο (210).

Άσκηση 7. Να οριστούν οι δείκτες Miller των παρακάτω διευθύνσεων



Απάντηση	
Διεύθυνση	Δείκτες [hkl]
\vec{OA}	[1 0 0]
\vec{OB}	[1 1 0]
\vec{OC}	[1 1 1]
\vec{OD}	[2 0 1]
\vec{OE}	[0 $\bar{1}$ 0]
\vec{OF}	[1 1 2]
\vec{CB}	[0 0 $\bar{1}$]

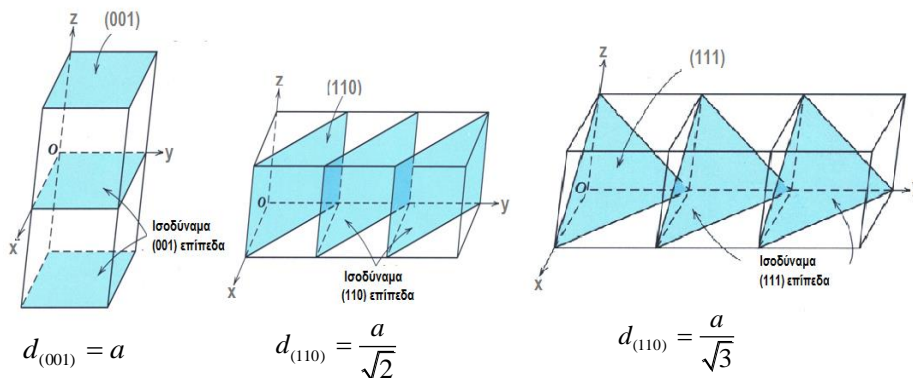
Άσκηση 8. Να βρείτε τη γωνία μεταξύ των διευθύνσεων [111] και $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ στην κυβική κυψελίδα.

Λύση Θα πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο 2 διανυσμάτων \mathbf{a} , \mathbf{b} στις διευθύνσεις αυτές. Γνωρίζουμε

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a \cdot b \cos \theta \Rightarrow \cos \theta = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{a \cdot b} = \frac{\alpha_1 \cdot \beta_1 + \alpha_2 \cdot \beta_2 + \alpha_3 \cdot \beta_3}{\sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2} \cdot \sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_3^2}}$$

Συνεπώς θα έχουμε: \cos γωνίας [111] και $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}] = -\frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} = -\frac{1}{3}$, και η γωνία είναι $109,5^\circ$

Άσκηση 9. Να βρείτε την απόσταση d μεταξύ διαδοχικών επιπέδων (001), (110), (111) στο κυβικό πλέγμα. Απάντηση: Η απόσταση d_{hkl} μεταξύ παραλλήλων επιπέδων (hkl) δίνεται από τη σχέση: $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ Με αντικατάσταση βρίσκουμε τις αποστάσεις των επιπέδων που φαίνονται στο παρακάτω σχήμα





Ασκήσεις για λύση

1. Τα θεμελιώδη διανύσματα μετατόπισης μιας κυψελίδας είναι :

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

Αφού βρείτε τα μήκη των διανυσμάτων \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , τις γωνίες α , β , γ , να βρείτε σε ποιο κρυσταλλικό σύστημα ανήκει η κυψελίδα και τέλος τον όγκο της.

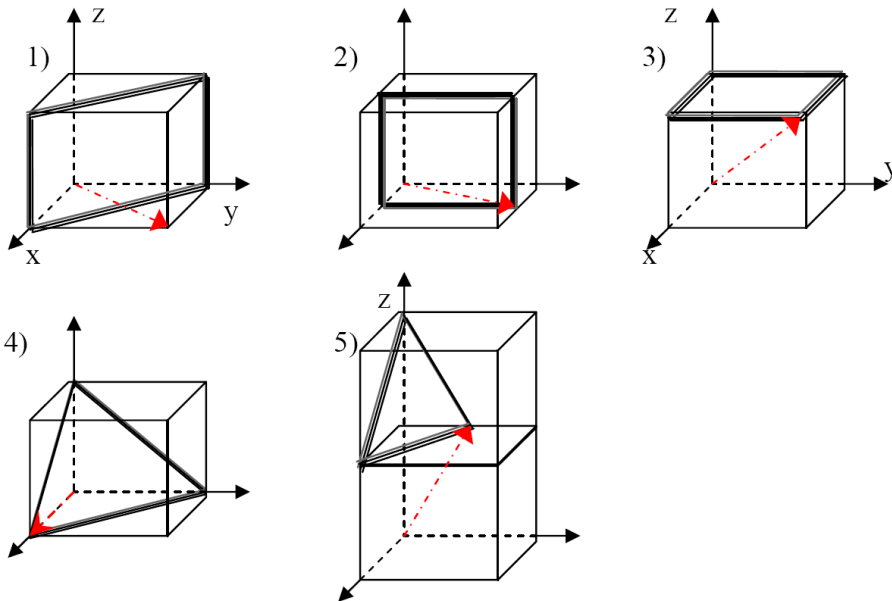
2. Τα θεμελιώδη διανύσματα μετατόπισης κρυστάλλου με βάση ενός ατόμου, είναι :

$$\mathbf{a}=3\hat{x}, \quad \mathbf{b}=3\hat{y}, \quad \mathbf{c}=\frac{3}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$

όπου \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} είναι τα μοναδιαία διανύσματα του καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων. Ποιό είναι το πλέγμα Bravais; Βρείτε τον όγκο της κυψελίδας.

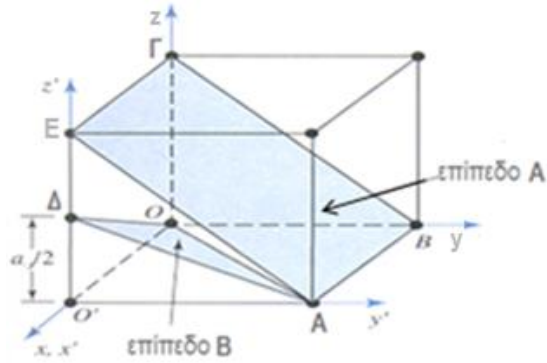
3. Να σχεδιάσετε τα επίπεδα (010), (012), (112) και τις αντίστοιχες διευθύνσεις στο κυβικό κρυσταλλικό πλέγμα.

4. Να γίνει η αντιστοίχιση των παρακάτω κρυσταλλικών επιπέδων με τους δείκτες Miller: α) (001), β) (121), γ) (111), δ) (110), ε) (200) καθώς και για τις παρακάτω κατευθύνσεις: i) [100] ii) [212] iii) [210] iv) [111] v) [110].

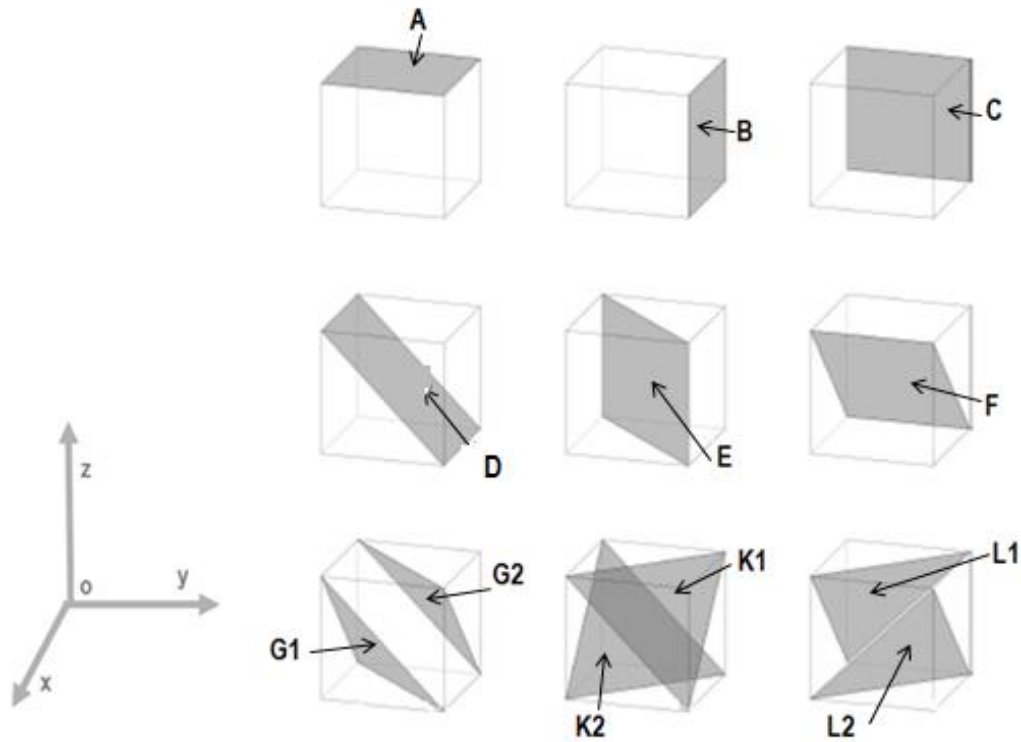


5. Να υπολογίσετε την γωνία μεταξύ των επιπέδων [111] και [001] στο κυβικό σύστημα

6. Να βρείτε τους δείκτες Miller των παρακάτω επιπέδων:



6. Να βρείτε τους δείκτες Miller των παρακάτω επιπέδων:





Ασκήσεις με μεγαλύτερο βαθμό δυσκολίας (Απαιτούνται γνώσεις αναλυτικής γεωμετρίας)

8. Να υπολογίσετε τους δείκτες Miller των διευθύνσεων που προκύπτουν από την τομή καθενός από τα εξής ζεύγη επιπέδων σε ένα κυβικό κρύσταλλο: επίπεδα (100) και (010), επίπεδα (111) και (11 $\bar{1}$), επίπεδα (10 $\bar{1}$) και (001).
9. Ποιές από τις παρακάτω διευθύνσεις βρίσκονται στο επίπεδο (110);
[112] [1 $\bar{1}$ 0] [001] [1 $\bar{1}$ 2]
10. Να δείξετε ότι σε μία κυβική κρυσταλλική δομή μια διεύθυνση [hkl] είναι κάθετη στο επίπεδο (hkl). Σε τετραγωνική κυψελίδα συμβαίνει αυτό;
11. Να βρείτε τους δείκτες Miller για το πλεγματοειδές επίπεδο που ορίζεται από τα σημεία με συντεταγμένες $P_1(022)$, $P_2(202)$ και $P_3(210)$ σε κυβική κυψελίδα. (Για να λύσετε την άσκηση διαβάστε "Επίπεδα στον τρισδιάστατο χώρο" στην αναλυτική γεωμετρία, πρέπει να βρείτε την εξίσωση του επιπέδου και στη συνέχεια τις τομές του με τους άξονες). Σωστή απάντηση (221).
12. Να βρείτε τους δείκτες Miller του επιπέδου που περιέχει τα τρία πλεγματοειδή σημεία $\mathbf{r}_1 = 2\mathbf{a} + \mathbf{b}$, $\mathbf{r}_2 = 3\mathbf{a} + \mathbf{c}$, $\mathbf{r}_3 = 3\mathbf{b} + \mathbf{c}$ (Παρόμοια με την προηγούμενη άσκηση)