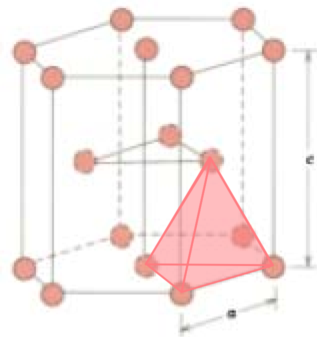
Υλικά – 1η Ομάδα Ασκήσεων

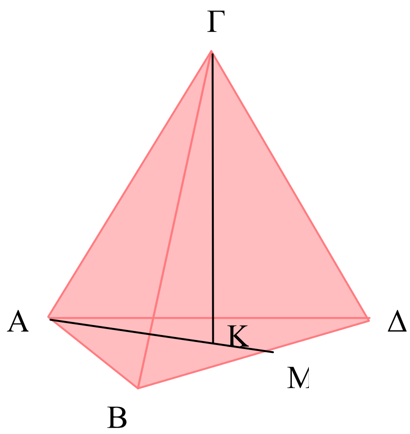
Ημερομηνία παράδοσης: 6η Μαΐου 2004

Κρυσταλλικές δομές



(1) Η μέγιστης πυκνότητας εξαγωνική (μπε – hcp) έχει συντελεστή ατομικής πλήρωσης (το ποσοστό του όγκου της μοναδιαίας κυψελίδας που καλύπτουν τα άτομα – σκληρές σφαίρες) 0.74. Ποια θα πρέπει να είναι η τιμή του λόγου c/a στο αριστερό σχήμα (όπου τα άτομα απεικονίζονται ως σφαίρες μειωμένων διαστάσεων για λόγους ευκρίνειας) ώστε να επιτυγχάνεται ο παραπάνω συντελεστής; Κάνετε μία υπόθεση για την απόκλιση από αυτήν την τιμή που παρουσιάζουν τα πραγματικά υλικά. (Υπόδειξη: στο τετράεδρο που σκιαγραφείται τα τέσσερα άτομα είναι σε επαφή.)

<u>Απάντηση:</u>



Σύμφωνα με το παραπάνω σχήμα, το ύψος του τετραέδρου θα είναι ίσο με $c/2$. Εφόσον τα τέσσερα άτομα στις κορυφές του τετραέδρου εφάπτονται (αν δεν συνέβαινε αυτό ο συντελεστής ατομικής πλήρωσης θα ήταν μικρότερος από 0.74) το πρόβλημα ανάγεται στον υπολογισμό του ύψους ενός κανονικού τετραέδρου με ακμή $a = 2r$, όπου r η ατομική ακτίνα. Η γεωμετρία ενός κανονικού τετραέδρου δίνεται στο σχήμα αριστερά. Το ύψος του, ΓΚ, τέμνει το ύψος του τριγώνου ΑΒΔ της βάσης, ΑΜ, στα 2/3, ΑΚ = ⅔ ΑΜ. Το ύψος του ΑΒΔ, ΑΜ, είναι και διάμεσος, ΒΜ = ½ ΒΔ. Όμως, ΒΔ = ΑΒ = $2r$ (τα άτομα της βάσης εφάπτονται. Άρα:

$$\triangle \mathrm{ABM} : \mathrm{AM} = \sqrt{\mathrm{AB}^2 - \mathrm{BM}^2} = \sqrt{(2r)^2 - r^2} = r\sqrt{3}$$

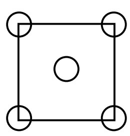
Επίσης, τα άτομα πάνω στην ΑΓ είναι σε επαφή, ΑΓ = $2r$. Άρα:

$$\triangle \mathrm{AK\Gamma} : \Gamma\mathrm{K} = \sqrt{\mathrm{A\Gamma}^2 - \mathrm{AK}^2} = \sqrt{(2r)^2 - \left(\frac{2}{3}\sqrt{3}r\right)^2} = \sqrt{\frac{8}{3}}r \cong 1.633r$$

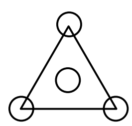
Δηλαδή, ΓΚ/r = ΓΚ/(½ΑΒ) = (2ΓΚ)/ΑΒ = c/a = 1.633

(2) Σχεδιάστε την ατομική διάταξη του επιπέδου (100) για την εδροκεντρωμένη κυβική (εκκ – fcc) και του (111) για την χωροκεντρωμένη κυβική (χκκ – bcc).

<u>Απάντηση:</u>

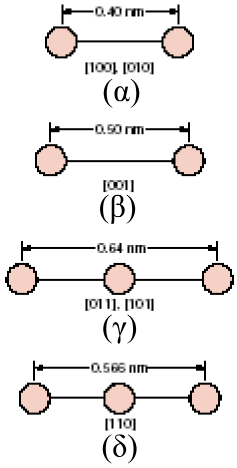


fcc (100)



bcc (111)

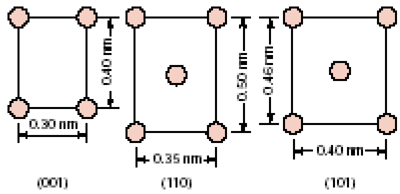
(3) Στο σχήμα δεξιά δίνονται οι διατάξεις των ατόμων για διάφορες κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις για ένα υποθετικό μέταλλο. Για κάθε διεύθυνση οι κύκλοι αναπαριστούν μόνο τα άτομα που περιέχονται στην μοναδιαία κυψελίδα και είναι μειωμένων διαστάσεων (δεν φαίνεται αν εφάπτονται ή όχι). Σε ποιο από τα εφτά κρυσταλλικά συστήματα ανήκει η μοναδιαία κυψελίδα; Πως θα ονομαζόταν η δομή αυτή; (Υπόδειξη: προφανώς δεν είναι κυβικό γιατί οι διευθύνσεις [100], [010] δεν είναι ισοδύναμες με την [001], δηλ., δεν έχουν την ίδια ατομική πυκνότητα.)



<u>Απάντηση:</u>

Παρατηρούμε τα εξής:
Στις διευθύνσεις της βάσης (α), [100] και [010], οι αποστάσεις των ατόμων είναι ίσες, $a = b$.
Η διαγώνιος της βάσης (β), [110], είναι 0.566 nm = $2^{1/2} \cdot 0.40$ nm = $2^{1/2} \cdot a$, δηλ., η βάση είναι τετραγωνική, $\alpha = 90°$, και στο κέντρο περιέχει ένα άτομο.
Οι διαγώνιες των όρθιων εδρών, [011] και [101], είναι 0.64 nm = $(0.5^2 + 0.4^2)^{1/2}$ nm = $(c^2 + a^2)^{½}$, δηλ., οι όρθιες έδρες είναι ορθογώνιες, $\beta = \gamma = 90°$, και στο κέντρο περιέχουν ένα άτομο.
Σύμφωνα με τα παραπάνω η δομή ανήκει στο τετραγωνικό σύστημα και το προφανές όνομα θα ήταν εδροκεντρωμένη τετραγωνική.

(4) Όπως η άσκηση (3) με τα ατομικά επίπεδα που φαίνονται στο παρακάτω σχήμα.



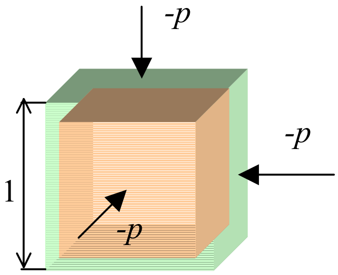
Παρατηρούμε τα εξής:
Οι ακμές της βάσης είναι διαφορετικές, $a = 0.3$ nm, $b = 0.4$ nm.
Στο (110) η μια πλευρά είναι 0.50 nm = $(0.3^2 + 0.4^2)^{1/2}$ nm = $(a^2 + b^2)^{1/2}$, άρα $c = 0.35$ nm και στο κέντρο περιέχει ένα άτομο.
Στο (101) η μια πλευρά είναι 0.46 nm = $(0.3^2 + 0.35^2)^{1/2}$ nm = $(a^2 + c^2)^{1/2}$ και στο κέντρο περιέχει ένα άτομο.
Άρα η δομή ανήκει στο ορθορομβικό σύστημα και το προφανές όνομα θα ήταν χωροκεντρωμένη ορθορομβική.

Μέτρα ελαστικότητας

(5) Αποδείξτε την σχέση ανάμεσα στα μέτρα ελαστικότητας E, K, ν, $E = 3(1\text{-}2\nu)K$. (Υπόδειξη: θεωρήστε την υδροστατική πίεση ως τριαξονική εντατική κατάσταση και χρησιμοποιείστε την αρχή της επαλληλίας· θεωρήστε ότι τα γινόμενα των παραμορφώσεων, π.χ., $\varepsilon_x\varepsilon_y$, είναι αμελητέα.)

Απάντηση:

Ξεκινάμε από την εντατική κατάσταση της υδροστατικής πίεσης (θλιπτική, $-p$) σε κυβικό στοιχείο μοναδιαίας ακμής:



Η μεταβολή στον όγκο ΔV είναι:

$$\Delta V = (1+\varepsilon_x)(1+\varepsilon_y)(1+\varepsilon_z) = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z \qquad (1)$$

όπου θεωρούμε ότι οι δεύτερης τάξης παραμορφώσεις (π.χ., ε_z^2) είναι αμελητέες. Οι παραμορφώσεις δίνονται από σχέσεις:

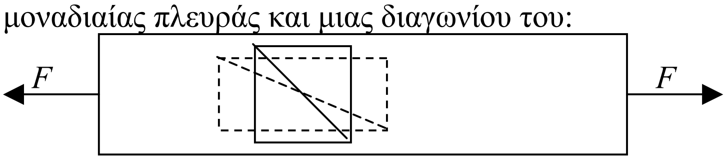
$$\left.\begin{aligned}
\varepsilon_x &= \frac{\sigma_x}{E} - \nu\frac{(\sigma_y + \sigma_z)}{E} = \frac{-p(2\nu-1)}{E}\\
\varepsilon_y &= \frac{\sigma_y}{E} - \nu\frac{(\sigma_x + \sigma_y)}{E} = \frac{-p(2\nu-1)}{E}\\
\varepsilon_z &= \frac{\sigma_z}{E} - \nu\frac{(\sigma_x + \sigma_y)}{E} = \frac{-p(2\nu-1)}{E}
\end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

Αντικαθιστώντας στην (1) τις σχέσεις για τις παραμορφώσεις:

$$\Delta V = -\frac{3(2\nu-1)p}{E} \qquad (3).$$

Όμως $K = -p/(\Delta V/V)$, και από την (3), $E = 3(1\text{-}2\nu)K$.

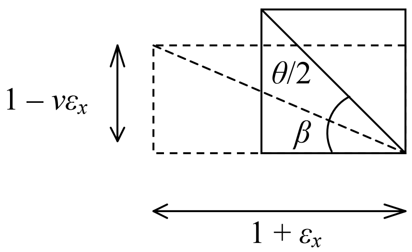
(6) Αποδείξτε την σχέση ανάμεσα στα μέτρα ελαστικότητας E, G, ν, $E = 2(1+\nu)G$. (Υπόδειξη: θεωρήστε ράβδο σε εφελκυσμό και αναλύστε την παραμόρφωση ενός τετραγωνικού στοιχείου μοναδιαίας πλευράς και μιας διαγωνίου του:



· θεωρήστε ότι η παραμόρφωση είναι πολύ μικρότερη της μονάδας.)

Απάντηση:

Το τετράγωνο θα παραμορφωθεί σε ορθογώνιο παραλληλόγραμμο, όπου $\beta = \pi/4 - \gamma_m/2$.



$$\tan\beta = \frac{\tan(\pi/4) - \tan(\theta/2)}{1+\tan(\pi/4)\tan(\theta/2)} \Rightarrow \gamma_m = \tan\theta = \frac{(1+\nu)\varepsilon_x}{1+\frac{1-\nu}{2}\varepsilon_x} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \gamma_m = (1+\nu)\varepsilon_x \Rightarrow \frac{\tau_m}{G} = (1+\nu)\frac{\sigma_x}{E} \qquad (1)$$

όπου υποθέτουμε ότι οι παραμορφώσεις είναι πολύ μικρές σε σχέση με τα αρχικά μεγέθη. Όμως, η μέγιστη διατμητική τάση εμφανίζεται σε κλίση 45° σε σχέση με τον άξονα εφελκυσμού, $\tau_m = ½\,\sigma_x$. Άρα η (1) είναι, $E = 2(1+\nu)G$.