

ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ



ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

**Μελέτη της δομής νανοσωματιδίων
τετραγωνικού κρυσταλλικού πλέγματος**

Παππάς Ευάγγελος
Διπλωματική Εργασία

Επιβλέπων Κωνσταντίνος Σιμσερίδης

ΑΘΗΝΑ 2017

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1^ο:

Θεωρία	3
Στερεό3
Είδη πλεγμάτων Bravais σε 3Δ	6
Διεύθυνση πλεγματικών ευθειών	8

Κεφάλαιο 2^ο:

Πρόγραμμα	10
Πρόγραμμα fortran εντοπισμού γειτόνων οιασδήποτε τάξεως σε κάθε ένα εκ των δύο τετραγωνικών πλεγμάτων Bravais..	10

Κεφάλαιο 3^ο:

Αποτελέσματα για τα δύο τετραγωνικά πλέγματα Bravais

Απλό τετραγωνικό πλέγμα	21
Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα	32

Βιβλιογραφία	52
---------------------	-----------

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1^ο :

Θεωρία

Στερεό

Ακολουθούν μερικές γενικές έννοιες, από την αναφορά [1]. Μπορούμε, τυπικώς, να ορίσουμε για όλες τις κατηγορίες στερεών:

$$\text{ΣΤΕΡΕΟ} = \text{ΠΛΕΓΜΑ} \oplus \text{ΒΑΣΗ}$$

Πλέγμα είναι ένα σύνολο μαθηματικών σημείων.

Βάση είναι ο δομικός λίθος, δηλαδή το άτομο, το μόριο, το ιόν, η πρωτεΐνη, το μακρομόριο κ.ο.κ. το οποίο τοποθετούμε με καθορισμένο προσανατολισμό σε κάθε πλεγματοειδές σημείο. Πλέγμα και βάση φτιάχνουν το στερεό.

Διακρίνονται οι παρακάτω κατηγορίες στερεών:

- **κρύσταλλοι** (crystals) ή **περιοδικοί κρύσταλλοι** (periodic crystals) ή **συμβατικοί κρύσταλλοι** (conventional crystals),
- **απεριοδικοί κρύσταλλοι** όπως **οιονεί κρύσταλλοι** (quasi crystals)
- **μορφοκλάσματα** (fractals), τα οποία χαρακτηρίζονται συχνά από αυτο-ομοιότητα (self-similarity)¹
- **άμορφα ή μηκρυσταλλικά στερεά ή υαλοειδή** (amorphous or non-crystalline solids or glasses).

Σύμφωνα με την International Union of Crystallography από το 1992 ο ορισμός του κρυστάλλου έχει γενικευθεί ώστε να περιλαμβάνει όλα τα υλικά που έχουν ουσιαστικά καλά καθορισμένη εικόνα περιθλάσεως ώστε το μεγαλύτερο μέρος της εντάσεως της περιθλάσεως να συγκεντρώνεται σε απότομες κορυφές παρά το πάντα παρόν διασπαρμένο υπόβαθρο. Ο ορισμός τροποποιήθηκε τότε ώστε να συμπεριλαμβάνει περιοδικούς κρυστάλλους και απεριοδικούς κρυστάλλους.

¹ Μια δομή με αυτο-ομοιότητα επαναλαμβάνεται αυτούσια σε άπειρο βαθμό μεγεθύνσεως, δηλαδή κάθε μέλος της σειράς μεγεθύνσεως περιέχει ολόκληρη τη δομή. Η αυτό-ομοιότητα μπορεί να είναι πλήρης όπως υπονοεί ο ορισμός αυτός, αλλά γενικότερα μπορεί να είναι μερική, στατιστική, ακόμα και ποιοτική και όχι ποσοτική κ.ο.κ.. Αυτό-ομοιότητα μπορεί να υπάρχει και στους οιονεί κρυστάλλους αλλά πιθανόν και σε άλλες δομές.

Η διαφορά μεταξύ περιοδικών κρυστάλλων και απεριοδικών κρυστάλλων εντοπίζεται στην ύπαρξη συμμετρίας μετατοπίσεως ή μεταφοράς (translation symmetry) στους περιοδικούς κρυστάλλους. Όμως οι περιοδικοί και απεριοδικοί κρύσταλλοι αλλά και τα fractals μπορεί να έχουν άλλες συμμετρίες όπως περιστροφής ως προς άξονα, ανακλάσεως σε επίπεδο, αντιστροφής ως προς σημείο, δηλαδή στις κατηγορίες αυτές υπάρχει ΤΑΞΗ και μάλιστα μακράς εμβέλειας (long range order) που καλύπτει δηλαδή όλο το στερεό.

Στην περίπτωση των **αμόρφων ΔΕΝ υπάρχει ΤΑΞΗ**. Για την ακρίβεια, δεν υπάρχει τάξη μακράς εμβέλειας, αλλά είναι δυνατόν να υπάρχει **τάξη μικρής εμβέλειας** (short range order) πράγμα που σημαίνει ότι μπορεί μια σε μικρή περιοχή να υπάρχει τάξη, αλλά διαφορετικές μικρές περιοχές δεν έχουν την ίδια μορφής τάξη.

Στην περίπτωση των **κρυστάλλων** ή αλλιώς **περιοδικών κρυστάλλων** ή αλλιώς **συμβατικών κρυστάλλων**, το **κρυσταλλικό πλέγμα** (crystal lattice) είναι ένα σύνολο μαθηματικών σημείων \mathbf{r} με περιοδικότητα στο χώρο που δημιουργείται παίρνοντας σε γραμμικό συνδυασμό ακέραιες φορές (n_1, n_2, n_3) τα γραμμικώς ανεξάρτητα **θεμελιώδη ανύσματα μεταφοράς ή μετατοπίσεως** (ΘΑΜ, primitive translation vectors) του πλέγματος $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$,

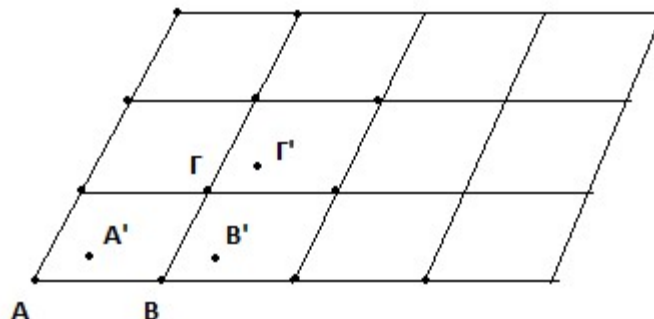
$$\mathbf{r} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \cdot \quad (1)$$

Τυπικά για $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ έχουμε την αρχή των αξόνων που ταυτίζεται με κάποιο πλεγματοκό σημείο. Εφ' όσον τα $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, είναι θεμελιώδη, για κάθε σημείο A που ανήκει στο ΠΛΕΓΜΑ υπάρχουν ακέραιοι n_1, n_2, n_3 τέτοιοι ώστε $\mathbf{OA} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$, αλλά και αντιστρόφως, για κάθε τριάδα ακεραίων n_1, n_2, n_3 , το σημείο $n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ ανήκει στο πλέγμα. Προφανώς, χρειαζόμαστε 3, 2, 1 ΘΑΜ, σε τρεις, δύο, μία διαστάσεις, αντιστοίχως. Να σημειωθεί ότι συνήθως υπάρχουν αρκετά σύνολα πιθανών θεμελιωδών ανυσμάτων. Λόγω της κατασκευής του κρυσταλλικού πλέγματος από τα θεμελιώδη ανύσματα μεταφοράς, οι κρύσταλλοι έχουν **μεταφορική συμμετρία** (translational symmetry) και είναι ακριβώς αυτό που τους διαχωρίζει από τους απεριοδικούς κρυστάλλους και τα άμορφα. Ένας κρύσταλλος μπορεί να έχει και άλλου είδους συμμετρία π.χ. **συμμετρία αντιστροφής ως προς σημείο, συμμετρία περιστροφής, συμμετρία ανακλάσεως σε επίπεδο**. Όμως, αποδεικνύεται (*θεώρημα περιορισμού των δυνατών περιστροφών σε περιοδικούς κρυστάλλους*) ότι μόνο συμμετρίες περιστροφής ως προς $2\pi / n$, όπου $n = 2, 3, 4, 6$ επιτρέπονται στους περιοδικούς κρυστάλλους. Δηλαδή η συμμετρία μετατοπίσεως περιορίζει τη συμμετρία περιστροφής σε στροφές κατά $180^\circ, 120^\circ, 90^\circ, 60^\circ$. Τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως ορίζουν τη **θεμελιώδη κυψελίδα** (ΘΚ, primitive cell) με τις ιδιότητες:

1. η επανάληψη της ΘK με την βοήθεια των ΘAM γεμίζει όλο το χώρο χωρίς κενά ή επικαλύψεις,
2. σε κάθε θεμελιώδη κυψελίδα αντιστοιχεί ένα πλεγματοκό σημείο. Να σημειωθεί ότι η θεμελιώδης κυψελίδα, στους περιοδικούς κρυστάλλους, είναι **μία και η εκλογή της δεν είναι μοναδική**. Δηλαδή μπορεί να υπάρχει και άλλη θεμελιώδης κυψελίδα $\Theta K'$ επαναλαμβάνοντας την οποία να γεμίζει όλος ο χώρος χωρίς κενά ή επικαλύψεις. Όμως δεν χρειάζεται να χρησιμοποιήσουμε δύο κυψελίδες μαζί για να καλύψουμε όλο το χώρο χωρίς κενά ή επικαλύψεις. Οι πιθανές διαφορετικές θεμελιώδεις κυψελίδες ενός συγκεκριμένου πλέγματος έχουν τον ίδιο όγκο $V^{\Theta K}$ (σε 3Δ) ή το ίδιο εμβαδό $S^{\Theta K}$ (σε 2Δ) ή το ίδιο μήκος $L^{\Theta K}$ (σε 1Δ).

Μια κυψελίδα που χρησιμοποιείται ως μονάδα επαναλήψεως για να καλύψει όλο το χώρο χωρίς κενά ή επικαλύψεις ονομάζεται για το λόγο αυτό **μοναδιαία κυψελίδα** (unit cell). Βεβαίως, μπορούμε να καλύψουμε το χώρο με μεγαλύτερη κυψελίδα από τη θεμελιώδη κυψελίδα ως μονάδα επαναλήψεως. Μια τέτοια μοναδιαία κυψελίδα περιέχει περισσότερα του ενός πλεγματοκά σημεία, έχει μεγαλύτερο όγκο (3Δ) ή εμβαδό (2Δ) ή μήκος (1Δ) από μια θεμελιώδη κυψελίδα. Δηλαδή η ΘK είναι η μικρότερη μοναδιαία κυψελίδα. Με άλλα λόγια μια θεμελιώδης κυψελίδα είναι μοναδιαία αλλά δεν συμβαίνει αναγκαστικά το αντίστροφο.

Σε ένα πλέγμα Bravais όλα τα πλεγματοκά σημεία είναι ισοδύναμα, ενώ σε ένα πλέγμα που δεν είναι Bravais μερικά από τα πλεγματοκά σημεία δεν είναι ισοδύναμα. Ένα πλέγμα που δεν είναι πλέγμα Bravais μπορεί να θεωρηθεί ότι προκύπτει από συνδυασμό δύο ή περισσότερων πλεγμάτων Bravais που το ένα έχει διεισδύσει στο άλλο. Ένα τέτοιο παράδειγμα που δεν είναι πλέγμα Bravais βλέπουμε στην κάτωθι εικόνα:



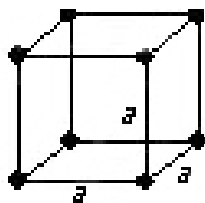
Εικόνα. Τα πλεγματοκά σημεία A, B, Γ ανήκουν σε ένα πλέγμα Bravais και τα σημεία A', B', Γ' ανήκουν σε ένα άλλο πλέγμα Bravais.

Είδη πλεγμάτων Bravais σε 3Δ

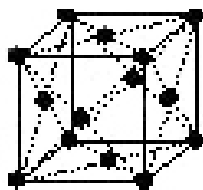
Ακολουθούν μερικές γενικές έννοιες, π.χ. δείτε τις αναφορές [1,2]. Σε τρεις διαστάσεις υπάρχουν 14 δυνατοί τύποι πλεγμάτων Bravais, οι οποίοι ταξινομούνται σε 7 κρυσταλλικά συστήματα, ανάλογα με τα 7 είδη των συμβατικών μοναδιαίων κυψελίδων: κυβικό, τετραγωνικό, ορθορομβικό, τριγωνικό, εξαγωνικό, μονοκλινές και τρικλινές. Παρακάτω παρατίθενται τα 7 κρυσταλλικά συστήματα με τις συνθήκες για τις πλευρές και τις γωνίες της συμβατικής κυψελίδας κάθε συστήματος. Με λατινικά γράμματα (a, b, c) συμβολίζονται οι πλευρές και με ελληνικά (α, β, γ) οι αντίστοιχες γωνίες π.χ. γ είναι η γωνία που σχηματίζουν οι πλευρές ακαι b. Υπενθυμίζεται ότι η απλή διάταξη κάθε συστήματος (δηλαδή η ύπαρξη πλεγματικών σημείων μόνο στις κορυφές της συμβατικής κυψελίδας) συμβολίζεται με P, η εδροκεντρωμένη διάταξη (δηλαδή η ύπαρξη πλεγματικών σημείων, εκτός από της κορυφές και στο κέντρο κάθε έδρας της συμβατικής κυψελίδας) συμβολίζεται με F, η χωροκεντρωμένη διάταξη (δηλαδή η ύπαρξη πλεγματικών σημείων, εκτός από τις κορυφές και στο κέντρο της συμβατικής κυψελίδας) συμβολίζεται με I και η βασηκεντρωμένη διάταξη (δηλαδή η ύπαρξη πλεγματικών σημείων, εκτός από τις κορυφές και στα κέντρα των βάσεων της συμβατικής κυψελίδας) συμβολίζεται με C.

Εικόνα 2. Τα είδη πλεγμάτων Bravais σε 3Δ.

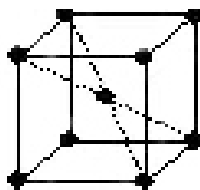
1. Κυβικό σύστημα



ΑΠΛΟ (sc)



ΕΔΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (fcc)

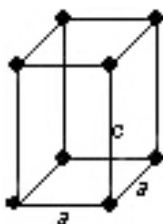


ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (bcc)

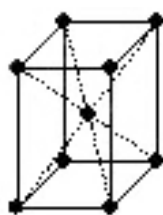
$$a = b = c$$

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

2. Τετραγωνικό σύστημα



ΑΠΛΟ (P)

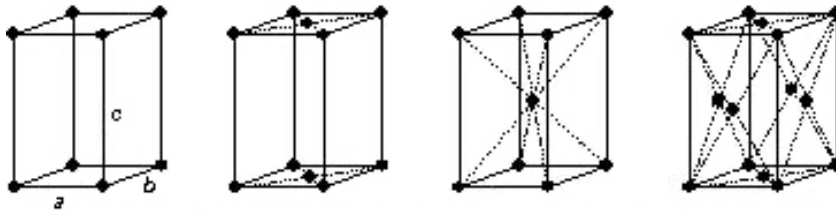


ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (I)

$$a = b \neq c$$

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

3. Ορθορομβικό σύστημα

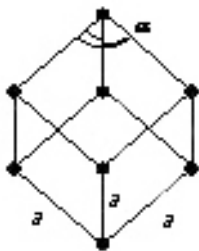


$$a \neq b \neq c$$

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

ΑΠΛΟ (P) ΒΑΣΗΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (C) ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (I) ΕΔΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (F)

4. Ρομβοεδρικό σύστημα

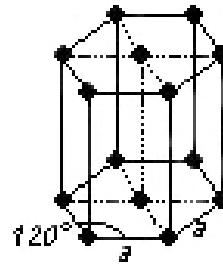


$$a = b = c$$

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

ΡΟΜΒΟΕΔΡΙΚΟ

5. Εξαγωνικό σύστημα

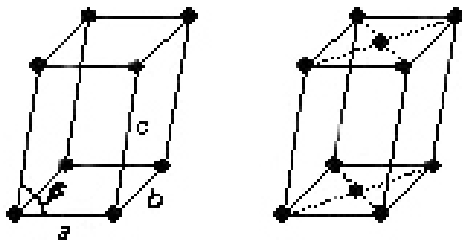


$$a = b \neq c$$

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

ΕΞΑΓΩΝΙΚΟ (P)

6. Μονοκλινές σύστημα

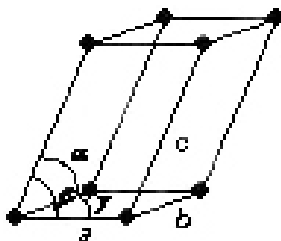


$$a \neq b \neq c$$

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

ΑΠΛΟ (P) ΒΑΣΗΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (C)

7. Τρικλινές σύστημα



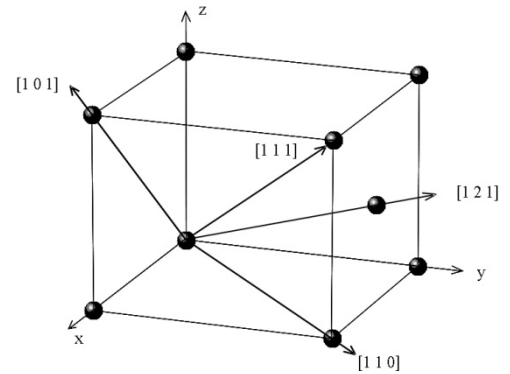
$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$

ΤΡΙΚΛΙΝΕΣ (P)

Διεύθυνση πλεγματικών ευθειών

Ακολουθείται το εδάφιο 1.7 σ.σ. 33-34 της αναφοράς [2]. Έχει διαφοροποιηθεί το σχήμα σε σχέση με το πρωτότυπο. Αποδεικνύεται ότι, όταν μία ευθεία περιέχει δύο τουλάχιστον πλεγματικά σημεία, τότε περιέχει άπειρα πλεγματικά σημεία. Η ευθεία αυτή λέγεται **πλεγματική ευθεία** και η διεύθυνσή της μπορεί να καθορισθεί προφανώς από τα συνημίτονα διεύθυνσης. Παρόλα αυτά έχει επικρατήσει στην Φυσική Στερεάς Κατάστασης να καθορίζεται μια διεύθυνση σε ένα κρύσταλλο με τη χρησιμοποίηση τριών δεικτών u, v, w που λέγονται **δείκτες διεύθυνσεως** και περικλείονται σε άγκιστρα δηλαδή $[u, v, w]$. Οι δείκτες αυτοί είναι ακέραιοι, έχουν μέγιστο κοινό διαιρέτη (ΜΚΔ) την μονάδα και βρίσκονται ως εξής:



Εικόνα 3. Δείκτες διεύθυνσης πλεγματικών ευθειών.

Ας υποθέσουμε ότι η πλεγματική ευθεία δεν διέρχεται από την αρχή των αξόνων O . Θεωρούμε τότε μια άλλη πλεγματική ευθεία παράλληλη προς τη δοθείσα που να διέρχεται από την αρχή των αξόνων και παίρνουμε πάνω σε αυτή ένα τυχαίο πλεγματικό σημείο A . Τότε το διάνυσμα \overrightarrow{OA} προφανώς γράφεται $\overrightarrow{OA} = l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c}$ (τα $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα της συμβατικής κυψελίδας, δηλαδή παράλληλα στα $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ του ορθοκανονικού συστήματος αξόνων, οπότε τα l_1, l_2, l_3 είναι οι συντεταγμένες του διανύσματος θέσης). Η τριάδα των ακεραίων l_1, l_2, l_3 καθορίζει πλήρως τη διεύθυνση. Διαιρούμε τους ακεραίους αυτούς με το ΜΚΔ οπότε προκύπτουν τρεις (πιθανώς άλλοι) ακέραιοι u, v, w . Οι ακέραιοι αυτοί λέγονται **δείκτες διεύθυνσης** και η διεύθυνση, όπως προαναφέρθηκε, συμβολίζεται με $[u v w]$. Σημειώνεται ότι αν κάποιος από τους δείκτες προκύπτει αρνητικός, τότε τοποθετούμε το αρνητικό αυτό πρόσημο επάνω από τον αριθμό.

Διευκρινίζεται ότι, όταν μιλάμε γενικά για μία διεύθυνση, δεν εννοούμε μια συγκεκριμένη ευθεία, αλλά ένα σύνολο παράλληλων ευθειών. Το σύμβολο $[u v w]$ παριστάνει σμήνος παράλληλων πλεγματικών ευθειών (που είναι ισοδύναμες λόγω της συμμετρίας της πλεγματικής μετατόπισης).

Όταν σε μια μοναδιαία κυψελίδα υπάρχει συμμετρία περιστροφής, τότε υπάρχουν αρκετές μη παράλληλες διευθύνσεις που είναι ισοδύναμες μεταξύ τους (λόγω ακριβώς της συμμετρίας περιστροφής). Για παράδειγμα, σε κυβικό κρύσταλλο οι διευθύνσεις $[100], [010], [001]$, οι οποίες είναι διευθύνσεις ακμών, είναι ισοδύναμες. Σε αυτή την περίπτωση συμβολίζουμε όλες μαζί τις

ισοδύναμες αυτές διευθύνσεις με το σύμβολο $\langle uvw \rangle$. Δηλαδή το σύμβολο $\langle 100 \rangle$ στο κυβικό σύστημα υποδεικνύει όλες τις εξής έξι (6) διευθύνσεις: $[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]$, οι οποίες είναι οι διευθύνσεις των ακμών. Επίσης το σύμβολο $\langle 111 \rangle$ αναφέρεται σε όλες τις διαγωνίους χώρου του κύβου. Βεβαίως οι «διευθύνσεις» $\langle 100 \rangle$ και $\langle 111 \rangle$ δεν είναι ισοδύναμες.

Νέο σύμβολο

Για την μελέτη των τετραγωνικών πλεγμάτων Bravais μας δημιουργήθηκε η ανάγκη χρήσης ενός νέου συμβόλου πλεγματικών ευθειών, $\{ab, c\}$, σύμφωνα με το οποίο τα a και b μπορούν να αλλάζουν πρόσημο και θέση, ενώ το c μόνο πρόσημο. Επί παραδείγματι, το σύμβολο $\{10,0\}$ αποδίδει τις πλεγματικές διευθύνσεις $[100], [010], [\bar{1}00], [0\bar{1}0]$, ενώ το σύμβολο $\{21,1\}$ αποδίδει τις πλεγματικές διευθύνσεις $[211], [\bar{2}11], [2\bar{1}1], [\bar{2}\bar{1}1], [21\bar{1}], [\bar{2}1\bar{1}], [2\bar{1}\bar{1}], [\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$ και $[121], [1\bar{2}1], [\bar{1}21], [\bar{1}\bar{2}1], [12\bar{1}], [1\bar{2}\bar{1}], [\bar{1}2\bar{1}], [\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$.

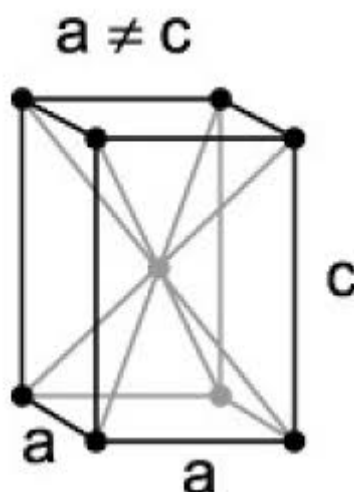
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2ο :

Πρόγραμμα

Πρόγραμμα fortran εντοπισμού γειτόνων οιασδήποτε τάξεως σε κάθε ένα εκ των δύο τετραγωνικών πλεγμάτων Bravais.

Σε αυτό το κεφάλαιο παραθέτουμε το πρόγραμμα, το οποίο χρησιμοποιήσαμε για τον υπολογισμό του αριθμού, της αποστάσεως, αλλά και των πλεγματικών διευθύνσεων των γειτόνων οιασδήποτε τάξεως ενός πλεγματικού σημείου, για κάθε πλέγμα της επιλογής μας. Το πρόγραμμα δημιούργησε ο επιβλέπων καθηγητής Κωνσταντίνος Σιμσερίδης. Παραλλαγές του προγράμματος που περιγράφουν το κάθε είδος πλέγματος μπορούν να χρησιμοποιηθούν εφόσον γίνεται αναφορά στο πρωτότυπο. Το κάτωθι πρόγραμμα αποτελεί την παραλλαγή για το χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα (body-centered tetragonal lattice – bct).

Υπάρχουν δύο επιλογές για το σχετικό μέγεθος της πλεγματικής σταθεράς στον άξονα z (c) σε σχέση με το μέγεθος της πλεγματικής σταθεράς στο επίπεδο xy (a).



Ας ονομάσουμε $D_1 = \sqrt{2a^2 + c^2}/2$ και $D_2 = a$. Αν $c < a\sqrt{2} \Leftrightarrow D_1 < D_2$. Συνεπώς, η διεύθυνση στην οποία βρίσκονται οι πρώτοι γείτονες ενός πλεγματοειδούς σημείου διαφοροποιείται ανάλογα με το αν $c < a\sqrt{2}$ ή $c > a\sqrt{2}$. Οπότε, για το χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα μελετούμε δύο χαρακτηριστικές περιπτώσεις. Ας θέσουμε την πλεγματοειδή σταθερά στο xy επίπεδο $a = 1$. Στην πρώτη περίπτωση, η πλεγματοειδή σταθερά στην z κατεύθυνση, λαμβάνεται $c = 1.2$, ενώ στη δεύτερη περίπτωση λαμβάνεται $c = 1.6$. Εδώ παραθέτουμε το πρόγραμμα που αναφέρεται στην πρώτη περίπτωση.

```

program bct1

implicit none

!      Declarations...

integeruptonn,dimk

parameter (uptonn=30,dimk=7)

      integer k1,k2,k3,i,j,l,sum,newsum,metrasis,nos,metrima
integer count(uptonn)
integer lhelp,l1,l2,l3
real*8 mikro,step
real*8 distance,D,aa,c
real*8 r(uptonn)
real*8 a(3,3)
real*8  ar(-dimk:dimk,-dimk:dimk,-dimk:dimk,3)
real*8  arn(-dimk:dimk,-dimk:dimk,-dimk:dimk)
real*8  arn2(-dimk:dimk,-dimk:dimk,-dimk:dimk)

!      External functions
integergcd,gcdthree

!      Executable Statements...

!      Here I take parameter aa = 1
aa=1.0d0
      c=1.2d0
nos=(2*dimk+1)**3 ! number of lattice sites

```

```

mikro=1.0d-6

do l=1,uptonn
count(l)=0
enddo

write(*,*) 'distances of neighbors given by r(l) i.e. uptonn'

if (c.lt.aa*dsqrt(2.0d0)) then
    D=dsqrt(2.0d0*aa**2+c**2)/2
else
    D=aa
endif

write(*,1212) D
1212 format('diameter of hard spheres,
& D = lattice parameter (taken sqrt(3)/2 here) = ',f12.5)

r(1)=D
r(2)=aa
r(3)=c
r(4)=aa*dsqrt(2.0d0)
r(5)=dsqrt(aa**2+c**2)
    r(6)=dsqrt((0.5*aa)**2+(1.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(7)=dsqrt(2*aa**2+c**2)
r(8)=dsqrt(2*(0.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(9)=2*aa
r(10)=dsqrt(2*(1.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(11)=dsqrt(aa**2+(2*aa)**2)
r(12)=dsqrt((2*aa)**2+c**2)

```

```

        r(13)=dsqrt((0.5*aa)**2+(1.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(14)=2*c
r(15)=dsqrt(aa**2+(2*aa)**2+c**2)
r(16)=dsqrt(aa**2+(2*c)**2)
        r(17)=dsqrt((0.5*aa)**2+(2.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(18)=dsqrt(2*(1.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(19)=dsqrt(2*aa**2+(2*c)**2)
r(20)=2*aa*dsqrt(2.0d0)
        r(21)=dsqrt((1.5*aa)**2+(2.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(22)=3*aa
r(23)=dsqrt(2*(2*aa)**2+c**2)
r(24)=dsqrt(2*(0.5*aa)**2+(2.5*c)**2)
        r(25)=dsqrt((0.5*aa)**2+(2.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(26)=dsqrt((2*aa)**2+(2*c)**2)
r(27)=dsqrt(aa**2+(3*aa)**2)
r(28)=dsqrt((3*aa)**2+c**2)
        r(29)=dsqrt(aa**2+(2*aa)**2+(2*c)**2)
r(30)=dsqrt(aa**2+(3*aa)**2+c**2)

do l=1,uptonn
write(*,1313) l,r(l)
1313  format('r(',i2,')=',f12.5)
enddo

open(unit=1,file="primitive_vectors_bct1")
write(1,*) 'body centered tetragonal lattice'
write(1,*) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
do j=1,3
write(1,*) 'j:vector ', j

```

```

doi=1,3
if (j.eq.i) then
if (j.eq.3) then
a(i,j)=-c/2
else
a(i,j)=-aa/2
endif
else
if (i.eq.3) then
a(i,j)=c/2
else
a(i,j)=aa/2
endif
endif
endif
write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
enddo
enddo
1      format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=',f20.16)
close(unit=1)

```

```

do k1=-dimk,dimk; do k2=-dimk,dimk; do k3=-dimk,dimk
doi=1,3
ar(k1,k2,k3,i)=0.0d0
enddo
enddo; enddo ; enddo

```

```

open(unit=33,file="ar_bct1")
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk

```

```

write(33,*) 'k1,k2,k3',k1,k2,k3
doi=1,3
ar(k1,k2,k3,i)=k1*a(i,1)+k2*a(i,2)+k3*a(i,3)
write(33,*) 'i', i, ar(k1,k2,k3,i)
enddo
      write(44,*) ar(k1,k2,k3,1),ar(k1,k2,k3,2),ar(k1,k2,k3,3) ! to
draw
enddo
enddo
enddo
close(unit=33)

```

```

open(unit=4,file="arn2+arn_bct1")
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk
write(4,*) 'k1,k2,k3',k1,k2,k3
      arn2(k1,k2,k3)=ar(k1,k2,k3,1)**2+ar(k1,k2,k3,2)**2+
&ar(k1,k2,k3,3)**2
arn(k1,k2,k3)=dsqrt(arn2(k1,k2,k3))
write(4,*) 'arn2',arn2(k1,k2,k3)
write(4,*) 'arn', arn(k1,k2,k3)
enddo
enddo
enddo
close(unit=4)

```

```

open(unit=7,file="arn_uptonn_bct1")
write(7,*) 'arn given by r(1) i.e. uptonn for bct1 lattice'
sum=0

```

```

do l=1,uptonn !!!
distance=r(l)
count(l)=0
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk

if (abs(arn(k1,k2,k3)-distance).lt.mikro) then
count(l)=count(l)+1
      write(7,*) 'k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)', k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)
doi=1,3
      write(7,7) k1,k2,k3,i,ar(k1,k2,k3,i)
7      format ('ar(',i3,',',i3,',',i3,',',i1,')=',f20.16)
enddo

! -->For bct1 lattice
      l1=(-k1+k2+k3)
      l2=(k1-k2+k3)
      l3=(k1+k2-k3)
lhelp=gcdthree(abs(l1),abs(l2),abs(l3))
      l1=l1/lhelp; l2=l2/lhelp; l3=l3/lhelp
!      Syn8hkh aplopoihs
      if ((mod(l1,2)==0).AND.(mod(l2,2)==0).AND.(mod(l3,2)==0)) then
      l1=l1/2
      l2=l2/2
      l3=l3/2
endif
      write(100+l,*) ar(k1,k2,k3,1),ar(k1,k2,k3,2),ar(k1,k2,k3,3),
&arn(k1,k2,k3),l1,l2,l3 ! to draw
endif

```



```

enddo
enddo
enddo

sum=sum+count(l)
write(7,77) l,count(l)
write(*,77) l,count(l)
77    format('count(',i2,')=',i3)
write(7,*) '      '
enddo !!!
write(7,777) sum
write(*,777) sum
777   format('sum=',i4)
write(*,*) ''
write(*,*) 'Already described sum=',sum
close(unit=7)

metrasis=0
distance=r(uptonn)
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk
if (arn(k1,k2,k3).gt.(distance+mikro)) then
metrasis=metrasis+1
endif
enddo
enddo
enddo

write(*,*) 'Rest          metrasis=', metrasis
write(*,*) ''

```

```

write(*,*) 'Origin          ', 1
write(*,*) ''
write(*,*) '      number of sites=', nos
write(*,*) ''
if (1+sum+metrasis.ne.nos) then
write(*,*) '1+sum+metrasis.ne.nos'
else
write(*,*) 'Summations are correct!'
endif
write(*,*) ''

open(unit=9,file="arn_inside_investigation_shell_bct1")
write(9,*) 'arn_inside_investigation_shell_bct1'
write(*,*) 'arn_inside_investigation_shell_bct1'
metrima=0
step=0.11d0
distance=r(uptonn)+mikro
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk
if ((arn(k1,k2,k3).gt.distance).and.
&   (arn(k1,k2,k3).lt.(distance+step))) then
    write(9,*) 'k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3) ',k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)
metrima=metrima+1
endif
enddo
enddo
enddo
write(*,*) 'metrima=', metrima
close(unit=9)

```

```
end
```

```
!      GCD FUNCTION
```

```
integer function gcd(x,y)
```

```
implicit none
```

```
integer x,y      ! function arguments
```

```
integer a,b,c    ! local variables
```

```
      a=x
```

```
      b=y
```

```
gcd=0            ! initialization
```

```
if ((a.eq.0).AND.(b.eq.0)) then
```

```
write(*,*) 'function gcd: there is no gcd'
```

```
endif
```

```
if (a<b) then
```

```
      c=a
```

```
      a=b
```

```
      b=c
```

```
endif
```

```
if ((a.ne.0).AND.(b.eq.0)) then
```

```
gcd=a
```

```
endif
```

```
if ((a.ne.0).AND.(b.ne.0)) then
```

```

        c = mod(a, b)      !   compute c, the remainder
if (c == 0) then      !   if c is zero, we are done.  GCD = b
gcd=b
else
gcd=1
endif
endif

```

```

return
end

```

```

!   GCDTHREE FUNCTION

```

```

integer function gcdthree(x,y,z)
implicit none

```

```

integer  x, y, z  ! function arguments
integera,b,c,d  ! local variables
integergcd

```

```

        a=x

```

```

        b=y

```

```

        c=z

```

```

gcdthree=0 ! just an initialization

```

```

        d=gcd(a,b)

```

```

gcdthree=gcd(c,d)

```

```

return
end

```

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3ο :

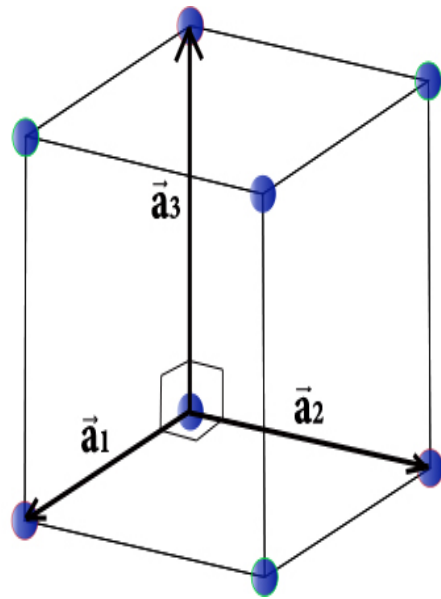
Αποτελέσματα για τα δύο τετραγωνικά πλέγματα Bravais.

Απλό τετραγωνικό πλέγμα (simple tetragonal lattice - st)

Το απλό τετραγωνικό πλέγμα (st) λαμβάνεται όταν, για τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (Θ.Α.Μ) $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ισχύει ότι τα μέτρα μόνο των δύο πρώτων είναι ίσα και οι γωνίες που σχηματίζουν μεταξύ τους ανά δύο, είναι ορθές, δηλαδή

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a \text{ και } (\vec{a}_1, \vec{a}_2) = (\vec{a}_2, \vec{a}_3) = (\vec{a}_3, \vec{a}_1) = 90^\circ.$$

Μία αναπαράσταση του κυβικού πλέγματος φαίνεται στο διπλανό σχήμα. Παραθέτουμε αμέσως μετά το κομμάτι του προγράμματος στο οποίο ορίζονται τα Θ.Α.Μ., από τα οποία, το ένα έχει μόνο x συνιστώσα, το δεύτερο έχει μόνο y συνιστώσα και το τρίτο μόνο z συνιστώσα.



Σχήμα. Τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (Θ.Α.Μ.) του απλού τετραγωνικού πλέγματος.

Παραθέτουμε αμέσως μετά το κομμάτι του προγράμματος στο οποίο ορίζονται τα Θ.Α.Μ.:

```
open(unit=1, file="primitive_vectors_st")

write(1,*) 'simple tetragonal lattice'
write(1,*) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
do j=1,3
write(1,*) 'j:vector ', j
do i=1,3
if (j.ne.3) then
if (j.eq.i) then
a(i,j)=1.0d0
else
a(i,j)=0.0d0
endif
else
if (j.eq.i) then
a(i,j)=c
```

```

else
a(i,j)=0.0d0
endif
endif
write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
enddo
enddo
1      format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=',f20.16)
close(unit=1)

```

Το κομμάτι του προγράμματος το οποίο καταγράφει τις γνωστές αποστάσεις των γειτόνων από δεδομένο πλεγματοκό σημείο δίνεται παρακάτω:

```

r(1)=D
r(2)=c
r(3)=D*dsqrt(2.0d0)
r(4)=dsqrt(D**2+c**2)
r(5)=dsqrt(2*D**2+c**2)
r(6)=2.0d0*D
r(7)=dsqrt((2*D)**2+D**2)
r(8)=dsqrt((2*D)**2+c**2)
r(9)=2.0d0*c
r(10)=dsqrt((2*D)**2+D**2+c**2)
r(11)=dsqrt(D**2+(2*c)**2)
r(12)=dsqrt(2*D**2+(2*c)**2)
r(13)=dsqrt(2*(2*D)**2)
r(14)=3.0d0*D
r(15)=dsqrt(2*(2*D)**2+c**2)
r(16)=dsqrt((2*D)**2+(2*c)**2)
r(17)=dsqrt((3*D)**2+D**2)
r(18)=dsqrt((3*D)**2+c**2)
r(19)=dsqrt((2*D)**2+D**2+(2*c)**2)
r(20)=dsqrt((3*D)**2+D**2+c**2)
r(21)=3.0d0*c
r(22)=dsqrt((3*D)**2+(2*D)**2)
r(23)=dsqrt(2*(2*D)**2+(2*c)**2)
r(24)=dsqrt(D**2+(3*c)**2)
r(25)=dsqrt((3*D)**2+(2*D)**2+c**2)
r(26)=dsqrt((3*D)**2+(2*c)**2)
r(27)=dsqrt(2*D**2+(3*c)**2)
r(28)=dsqrt((3*D)**2+D**2+(2*c)**2)
r(29)=4.0d0*D
r(30)=dsqrt((2*D)**2+(3*c)**2)

```

Το κομμάτι του προγράμματος το οποίο υπολογίζει και έπειτα τυπώνει τις συντεταγμένες και τις αποστάσεις των πλεγματικών σημείων καθώς και τις διευθύνσεις των πλεγματικών ευθειών για κάθε τριάδα των k_1, k_2, k_3 δίνεται παρακάτω:

```

open(unit=7,file="arn_uptonn_st")
write(7,*) 'arn given by r(l) i.e. uptonn for st lattice'
sum=0
do l=1,uptonn
distance=r(l)
count(l)=0
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk

if (abs(arn(k1,k2,k3)-distance).lt.mikro) then
count(l)=count(l)+1
write(7,*) 'k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)', k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)
doi=1,3
write(7,7) k1,k2,k3,i,ar(k1,k2,k3,i)
7 format ('ar(',i3,',',i3,',',i3,',',i1,')=' ,f20.16)
enddo
l1=k1; l2=k2; l3=k3
lhelpp=gcdthree(abs(l1),abs(l2),abs(l3))
l1=l1/lhelpp; l2=l2/lhelpp; l3=l3/lhelpp
write(100+l,*) ar(k1,k2,k3,1),ar(k1,k2,k3,2),ar(k1,k2,k3,3),
&arn(k1,k2,k3),l1,l2,l3 ! to draw

endif


enddo
enddo
enddo

```


Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του προγράμματος, έως και την 30^η τάξη γειτόνων, για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξης ενός πλεγματικού σημείου, την απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο, καθώς και τα σύνολα πλεγματικών διευθύνσεων των γειτόνων κάθε τάξης.

Απλό τετραγωνικό πλέγμα			
ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ	ΣΥΝΟΛΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΩΝ ΔΙΕΥΘΥΝΣΕΩΝ
1 ^η	4	1.00000	{1 0, 0}
2 ^η	2	1.20000	{0 0, 1}
3 ^η	4	1.41421	{1 1, 0}
4 ^η	8	1.56205	{1 0, 1}
5 ^η	8	1.85472	<1 1 1>
6 ^η	4	2.00000	{1 0, 0}
7 ^η	8	2.23607	{2 1, 0}
8 ^η	8	2.33238	{2 0, 1}
9 ^η	2	2.39999	{0 0, 1}
10 ^η	16	2.53772	{2 1, 1}
11 ^η	8	2.60000	{1 0, 2}
12 ^η	8	2.78568	{1 1, 2}
13 ^η	4	2.82843	{1 1, 0}
14 ^η	4	3.00000	{1 0, 0}
15 ^η	8	3.07246	{2 2, 1}
16 ^η	8	3.12410	{1 0, 1}
17 ^η	8	3.16228	{3 1, 0}
18 ^η	8	3.23110	{3 0, 1}
19 ^η	16	3.28024	{2 1, 2}
20 ^η	16	3.38231	{3 1, 1}
21 ^η	2	3.59999	{0 0, 1}
22 ^η	8	3.60555	{3 2, 0}
23 ^η	8	3.70945	<1 1 1>
24 ^η	8	3.73631	{1 0, 3}
25 ^η	16	3.79999	{3 2, 1}
26 ^η	8	3.84187	{3 0, 2}
27 ^η	8	3.86782	{1 1, 3}
28 ^η	16	3.96989	{3 1, 2}
29 ^η	4	4.00000	{1 0, 0}
30 ^η	8	4.11825	{2 0, 3}

Επεξήγηση χρωμάτων

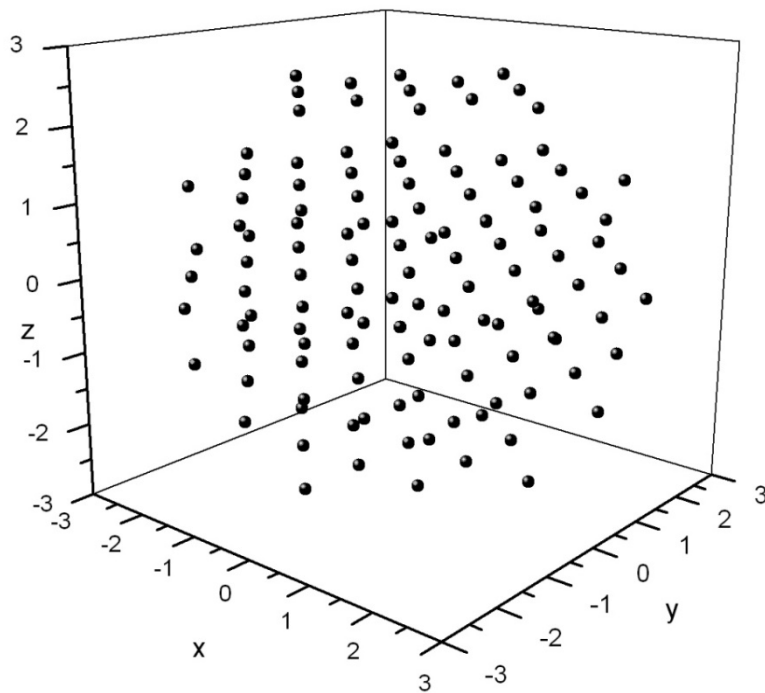
 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων $\langle 100 \rangle$, δηλαδή στις ακμές κύβων.

 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων $\langle 110 \rangle$, δηλαδή στις διαγωνίους εδρών.

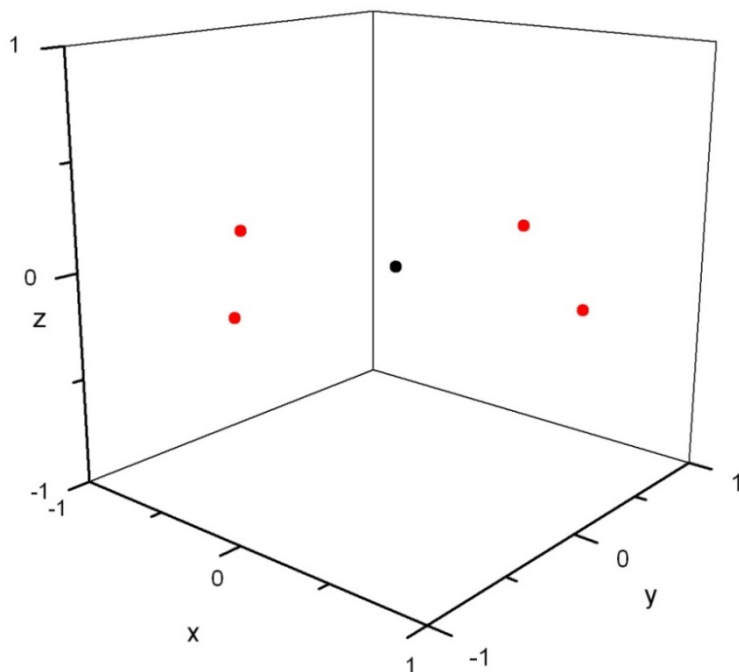
 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων $\langle 111 \rangle$, δηλαδή στις διαγωνίους κύβων.

 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων $\langle 211 \rangle$.

Παρακάτω παρουσιάζονται η γραφική παράσταση του απλού τετραγωνικού πλέγματος (Εικόνα 1), η διάταξη των γειτόνων της 1^{ης} έως την 4^η τάξη ξεχωριστά (Εικόνες 2, 3, 4, 5) και έπειτα οι ομαδοποιημένες διατάξεις των γειτόνων τάξεως 5 έως 11, 12 έως 18, 19 έως 25 και 26 έως 30 (Εικόνες 6, 7, 8, 9).

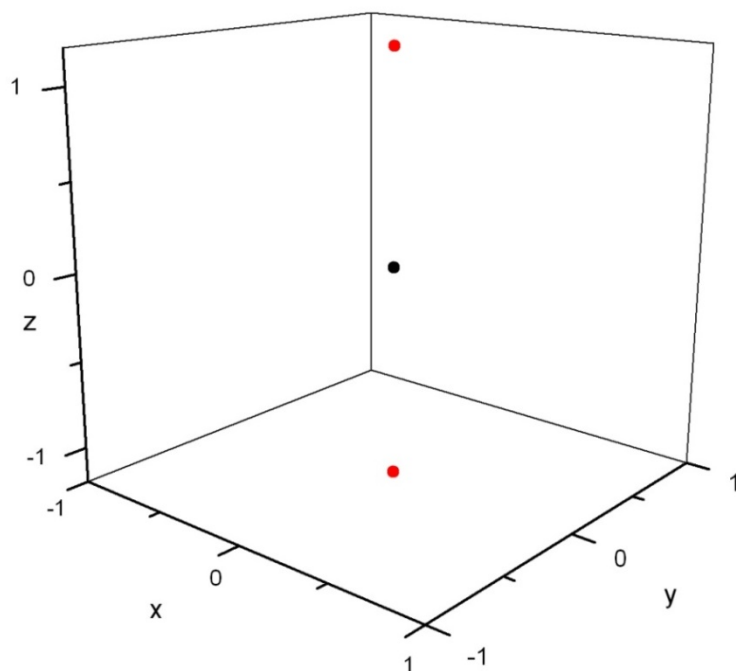


Εικόνα 1. Γενική άποψη του απλού τετραγωνικού πλέγματος (simple tetragonal lattice, st).

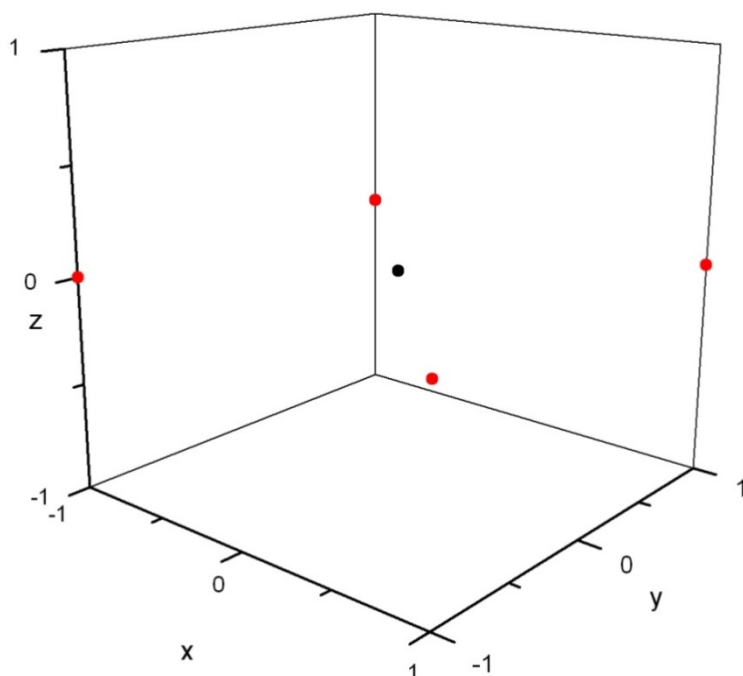


Εικόνα

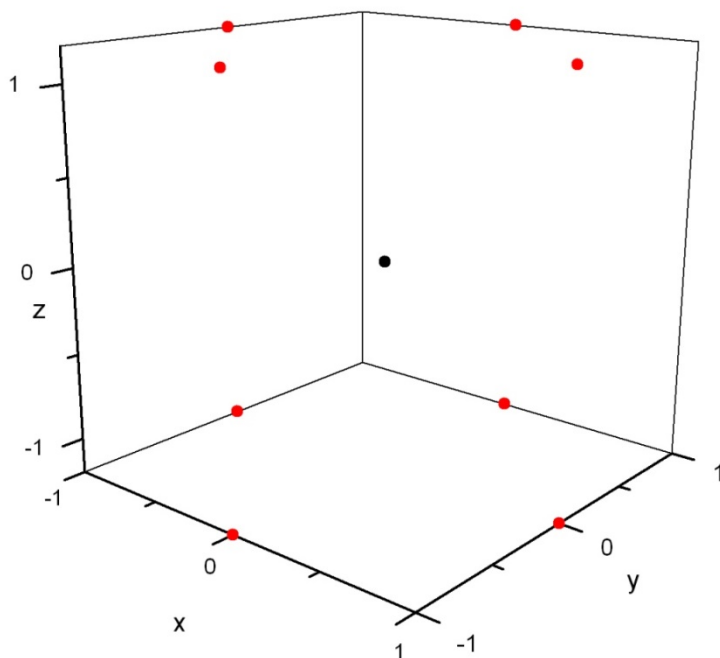
2. Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 1ης τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



Εικόνα 3. Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 2^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος

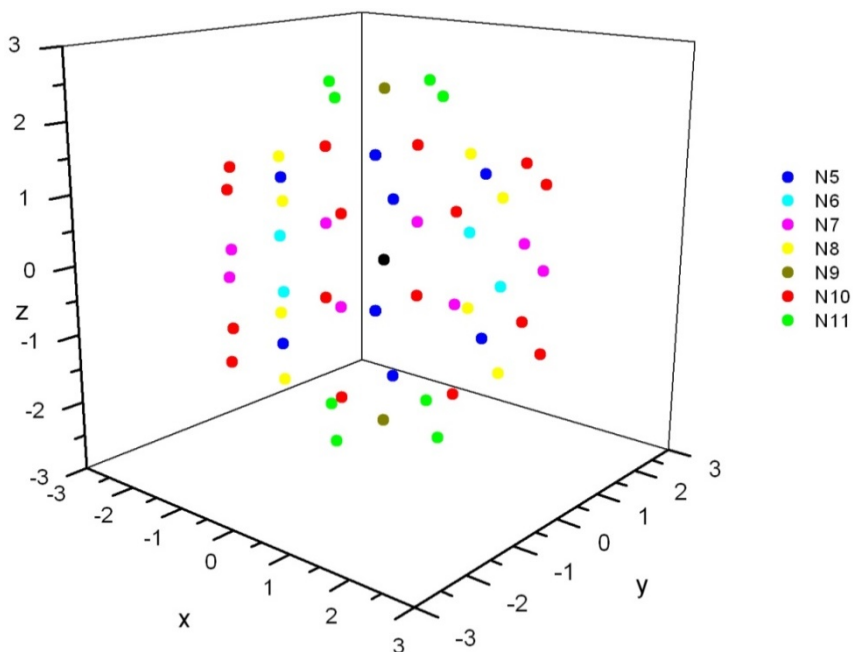


Εικόνα 4. Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 3^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

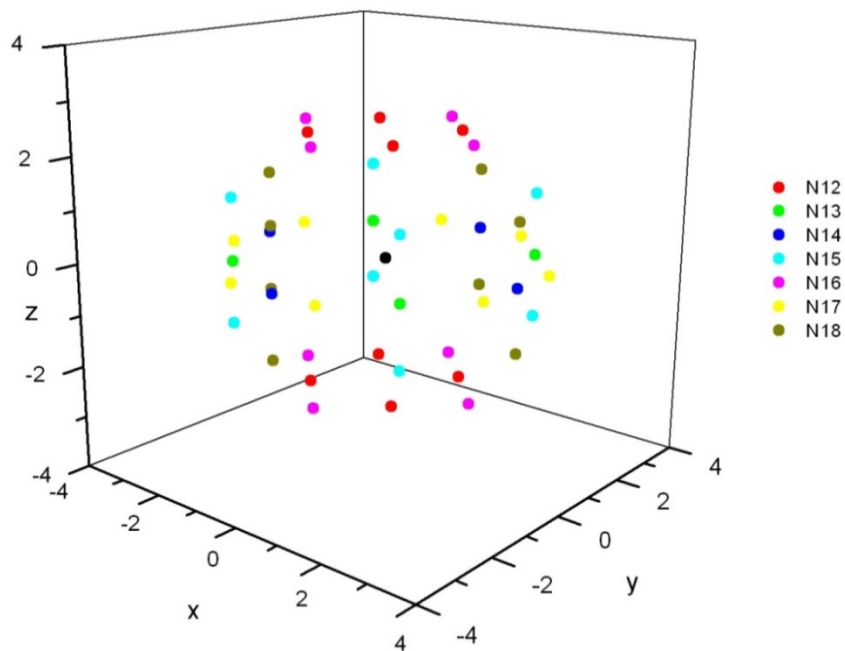


Εικόνα

5. Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 4^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

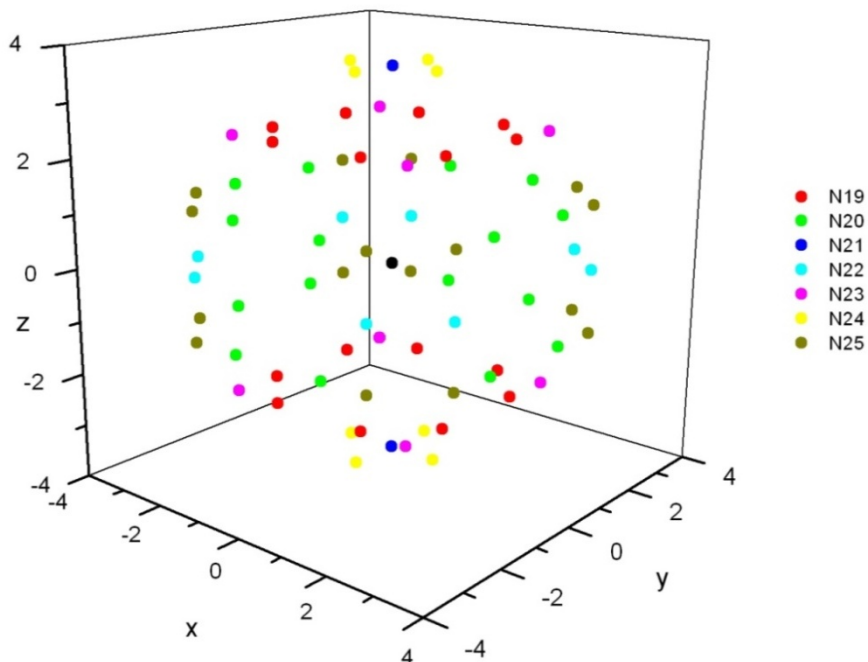


Εικόνα 6. Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 5^{ης} έως 11^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

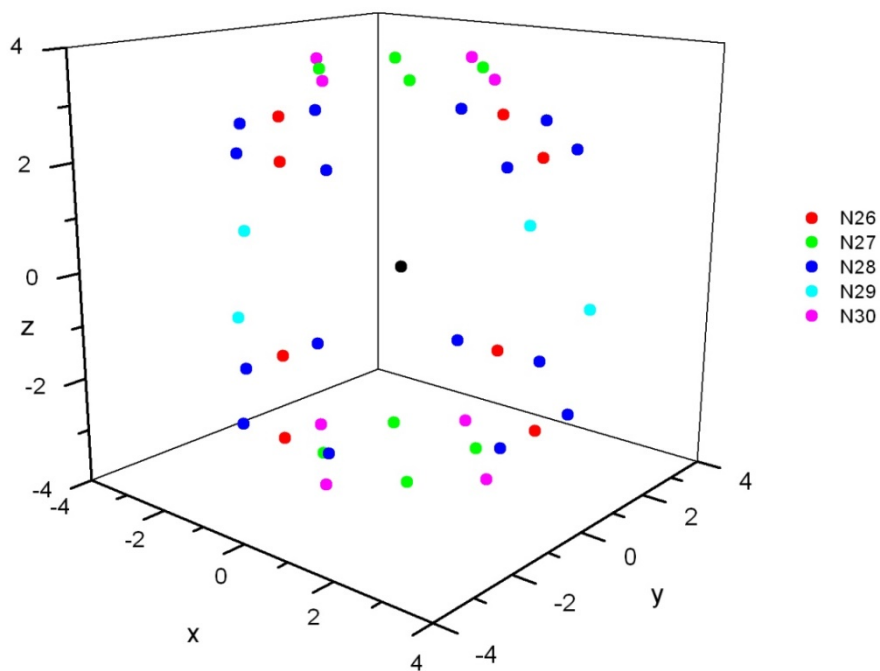


Εικόνα 7.

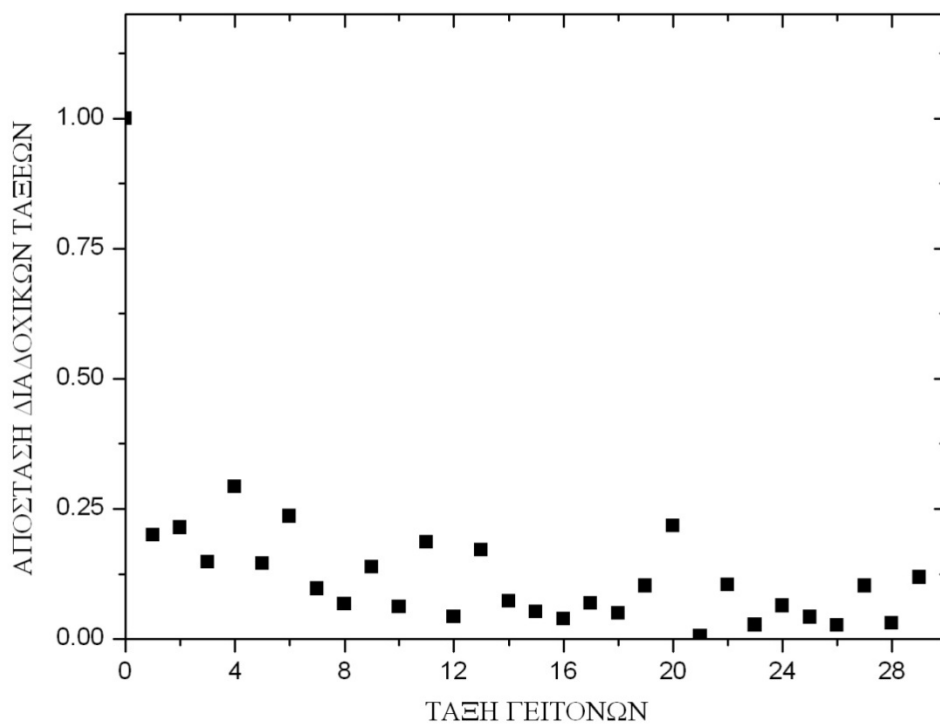
Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 12^{ης} έως 18^{ης} τάξης γύρω από ένα πλεγματοικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



Εικόνα 8. Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 19^{ης} έως 25^{ης} τάξης γύρω από πλεγματοικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

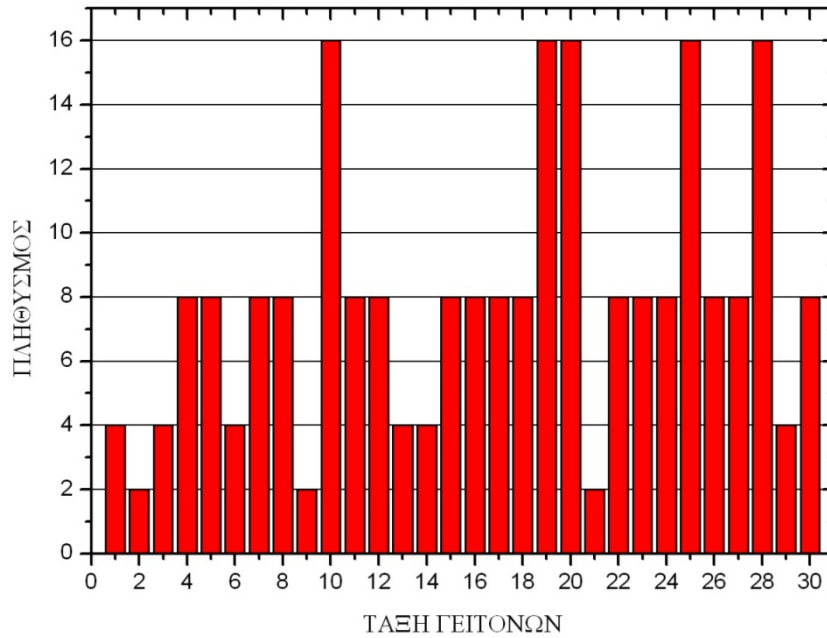


Εικόνα 9. Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 26^{ης} έως 30^{ης} τάξης γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



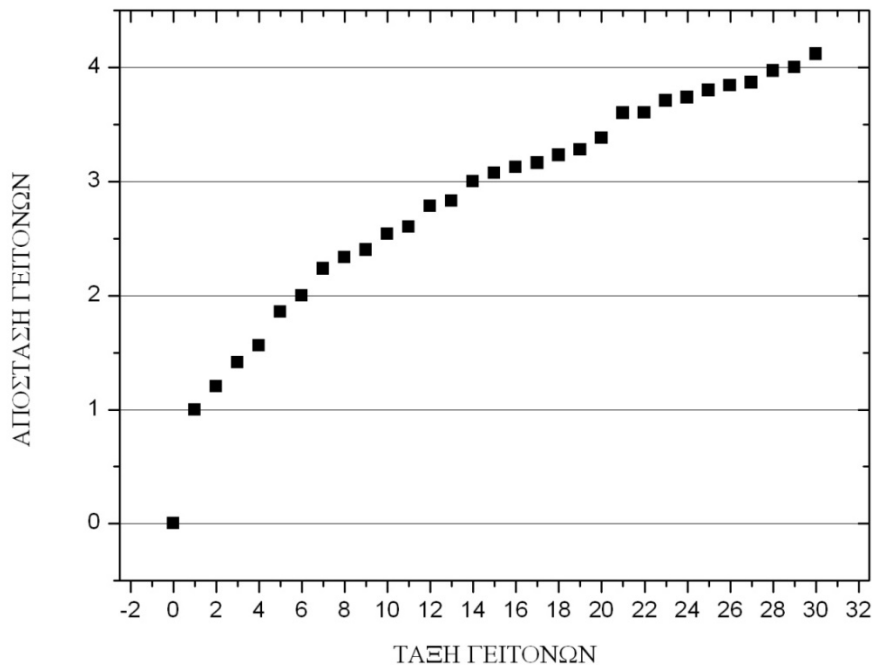
Εικόνα 10. Απλό τετραγωνικό πλέγμα. Γραφική παράσταση της απόστασης μεταξύ δύο διαδοχικών κελυφών συναρτήσει της τάξης γειτόνων.

Για την πληρέστερη ποιοτική ανάλυση του απλού τετραγωνικού πλέγματος, παραθέτουμε δύο διαγράμματα, τα οποία απεικονίζουν τον πληθυσμό και τις αποστάσεις γειτόνων από δεδομένο πλεγματοκό σημείο, συναρτήσει της τάξης γειτόνων.



Εικόνα

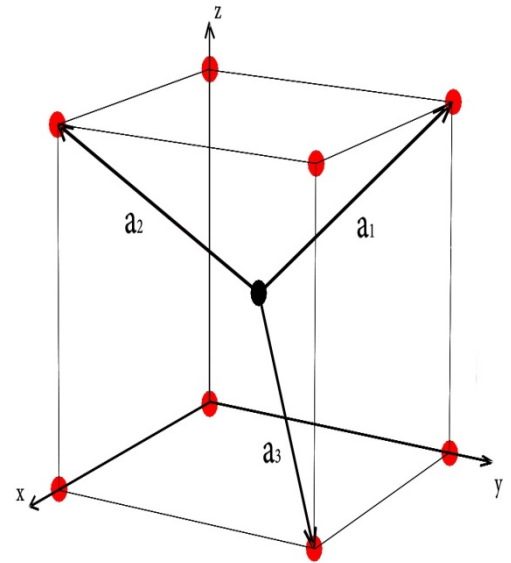
11. Πληθυσμός γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο απλό τετραγωνικό πλέγμα.



Εικόνα 12. Απόσταση γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο απλό τετραγωνικό πλέγμα.

Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα (body-centered tetragonal lattice - bct)

Το χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα (bct) λαμβάνεται όταν, εκτός από τα πλεγματικά σημεία στις κορυφές της συμβατικής κυψελίδας, έχουμε και ένα πλεγματικό σημείο στο κέντρο του κύβου (μαύρησφαίρα). Τα θεμελιώδη ανύσματα λαμβάνονται εάν ενώσουμε το πλεγματικό σημείο στο κέντρο του ορθογωνίου παραλληλογράμμου με τρία διαγώνια, ανά δύο, πλεγματικά σημεία στις κορυφές του.



Παραθέτουμε αμέσως μετά το κομμάτι του προγράμματος στο οποίο ορίζονται τα Θ.Α.Μ.:

```
open(unit=1,file="primitive_vectors_bct")

write(1,*) 'body centered tetragonal
lattice'
write(1,*) 'primitive vectors a(i,j)
i:component j:vector'
do j=1,3
write(1,*) 'j:vector ', j
do i=1,3
if (j.eq.i) then
if (j.eq.3) then
a(i,j)=-c/2
else
a(i,j)=-aa/2
endif
else
if (i.eq.3) then
a(i,j)=c/2
else
a(i,j)=aa/2
endif
endif
write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
enddo
enddo
1      format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=',f20.16)
close(unit=1)
```

Σχήμα. Τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (Θ.Α.Μ.) του χωροκεντρωμένου τετραγωνικού πλέγματος.

Το κομμάτι του προγράμματος το οποίο υπολογίζει και έπειτα τυπώνει τις συντεταγμένες και τις αποστάσεις των πλεγματικών σημείων, καθώς και τις διευθύνσεις των πλεγματικών ευθειών για κάθε τριάδα των k_1, k_2, k_3 δίνεται παρακάτω:

*Ανάγουμε το τετραγωνικό πλέγμα σε κυβικό για να μην υπάρχει σύγχυση για διαφορετικές τιμές του της σταθεράς c στον άξονα z .

```

open(unit=7,file="arn_uptonn_bct")
write(7,*) 'arn given by r(l) i.e. uptonn for bct lattice'
sum=0
do l=1,uptonn
distance=r(l)
count(l)=0
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk

if (abs(arn(k1,k2,k3)-distance).lt.mikro) then
count(l)=count(l)+1
write(7,*) 'k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)', k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)
doi=1,3
write(7,7) k1,k2,k3,i,ar(k1,k2,k3,i)
7 format ('ar(',i3,',',i3,',',i3,',',i1,')=' ,f20.16)
enddo

l1=-k1+k2+k3
l2=k1-k2+k3
l3=k1+k2-k3
lhhelp=gcdthree(abs(l1),abs(l2),abs(l3))
l1=l1/lhhelp; l2=l2/lhhelp; l3=l3/lhhelp
if ((mod(l1,2)==0).AND.(mod(l2,2)==0).AND.(mod(l3,2)==0)) then
l1=l1/2
l2=l2/2
l3=l3/2
endif
write(100+l,*) ar(k1,k2,k3,1),ar(k1,k2,k3,2),ar(k1,k2,k3,3),
&arn(k1,k2,k3),l1,l2,l3 ! to draw
endif

```

```
enddo
enddo
enddo
```

Όπως αναφέραμε και στο κεφάλαιο 2, για το χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα μελετούμε δύο περιπτώσεις. Στην πρώτη η πλεγματική σταθερά στην z κατεύθυνση, η οποία διαφέρει από τις x, y, είναι $c=1.2$ (bct1) και στην δεύτερη περίπτωση είναι $c=1.6$ (bct2).

BCT1

Παρατίθεται το κομμάτι του προγράμματος, το οποίο καταγράφει τις γνωστές αποστάσεις των γειτόνων από το πλεγματικό σημείο ανά τάξη έως τους γείτονες 30^{th} τάξης:

```
aa=1.0d0
c=1.2d0
if (c.lt.aa*dsqrt(2.0d0)) then
D=dsqrt(2.0d0*aa**2+c**2)/2
else
D=aa
Endif


r(1)=D
r(2)=aa
r(3)=c
r(4)=aa*dsqrt(2.0d0)
r(5)=dsqrt(aa**2+c**2)
r(6)=dsqrt((0.5*aa)**2+(1.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(7)=dsqrt(2*aa**2+c**2)
r(8)=dsqrt(2*(0.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(9)=2*aa
r(10)=dsqrt(2*(1.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(11)=dsqrt(aa**2+(2*aa)**2)
r(12)=dsqrt((2*aa)**2+c**2)
r(13)=dsqrt((0.5*aa)**2+(1.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(14)=2*c
r(15)=dsqrt(aa**2+(2*aa)**2+c**2)
r(16)=dsqrt(aa**2+(2*c)**2)
```

$r(17) = \text{dsqrt}((0.5*aa)**2 + (2.5*aa)**2 + (0.5*c)**2)$
 $r(18) = \text{dsqrt}(2*(1.5*aa)**2 + (1.5*c)**2)$
 $r(19) = \text{dsqrt}(2*aa**2 + (2*c)**2)$
 $r(20) = 2*aa*\text{dsqrt}(2.0d0)$
 $r(21) = \text{dsqrt}((1.5*aa)**2 + (2.5*aa)**2 + (0.5*c)**2)$
 $r(22) = 3*aa$
 $r(23) = \text{dsqrt}(2*(2*aa)**2 + c**2)$
 $r(24) = \text{dsqrt}(2*(0.5*aa)**2 + (2.5*c)**2)$
 $r(25) = \text{dsqrt}((0.5*aa)**2 + (2.5*aa)**2 + (1.5*c)**2)$
 $r(26) = \text{dsqrt}((2*aa)**2 + (2*c)**2)$
 $r(27) = \text{dsqrt}(aa**2 + (3*aa)**2)$
 $r(28) = \text{dsqrt}((3*aa)**2 + c**2)$
 $r(29) = \text{dsqrt}(aa**2 + (2*aa)**2 + (2*c)**2)$
 $r(30) = \text{dsqrt}(aa**2 + (3*aa)**2 + c**2)$

Χωροκεντρομένο τετραγωνικό πλέγμα bct1			
ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ	ΣΥΝΟΛΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΩΝ ΔΙΕΥΘΥΝΣΕΩΝ
1 ⁿ	8	0.92736	<1 1 1>
2 ⁿ	4	1.00000	{1 0, 0}
3 ⁿ	2	1.20000	{0 0, 1}
4 ⁿ	4	1.41421	{1 1, 0}
5 ⁿ	8	1.56205	{1 0, 1}
6 ⁿ	16	1.69115	{3 1, 1}
7 ⁿ	8	1.85472	<1 1 1>
8 ⁿ	8	1.93391	{1 1, 3}
9 ⁿ	4	2.00000	{1 0, 0}
10 ⁿ	8	2.20454	{3 3, 1}
11 ⁿ	8	2.23607	{2 1, 0}
12 ⁿ	8	2.33238	{2 0, 1}
13 ⁿ	16	2.39583	{3 1, 3}
14 ⁿ	2	2.39999	{0 0, 1}
15 ⁿ	16	2.53772	{2 1, 1}
16 ⁿ	8	2.60000	{1 0, 2}
17 ⁿ	16	2.61916	{5 1, 1}
18 ⁿ	8	2.78209	<1 1 1>
19 ⁿ	8	2.78568	{1 1, 2}


20 ^η	4	2.82843	{1 1, 0}
21 ^η	16	2.97658	{5 3, 1}
22 ^η	4	3.00000	{1 0, 0}
23 ^η	8	3.07246	{2 2, 1}
24 ^η	8	3.08221	{1 1, 5}
25 ^η	16	3.12090	{5 1, 3}
26 ^η	8	3.12410	{1 0, 1}
27 ^η	8	3.16228	{3 1, 0}
28 ^η	8	3.23110	{3 0, 1}
29 ^η	16	3.28024	{2 1, 2}
30 ^η	16	3.38231	{3 1, 1}

Επεξήγηση χρωμάτων

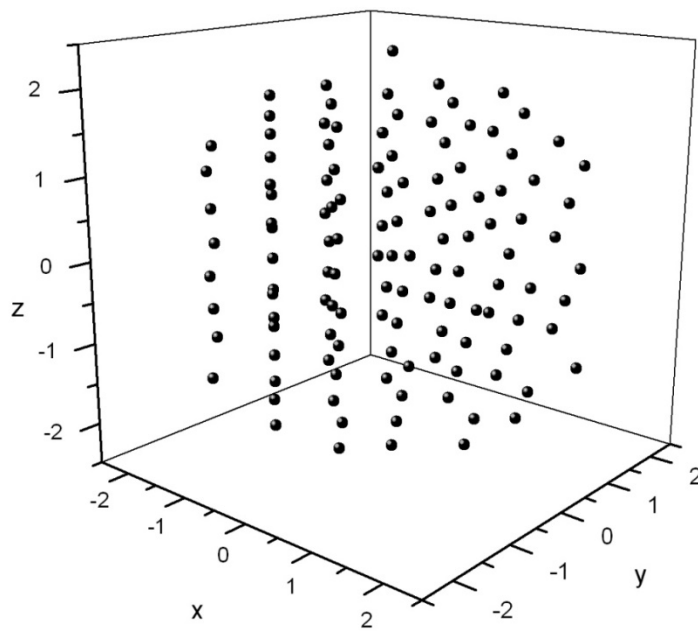
 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <100>, δηλαδή στις ακμές κύβων.

 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <110>, δηλαδή στις διαγωνίους εδρών.

 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <111>, δηλαδή στις διαγωνίους κύβων.

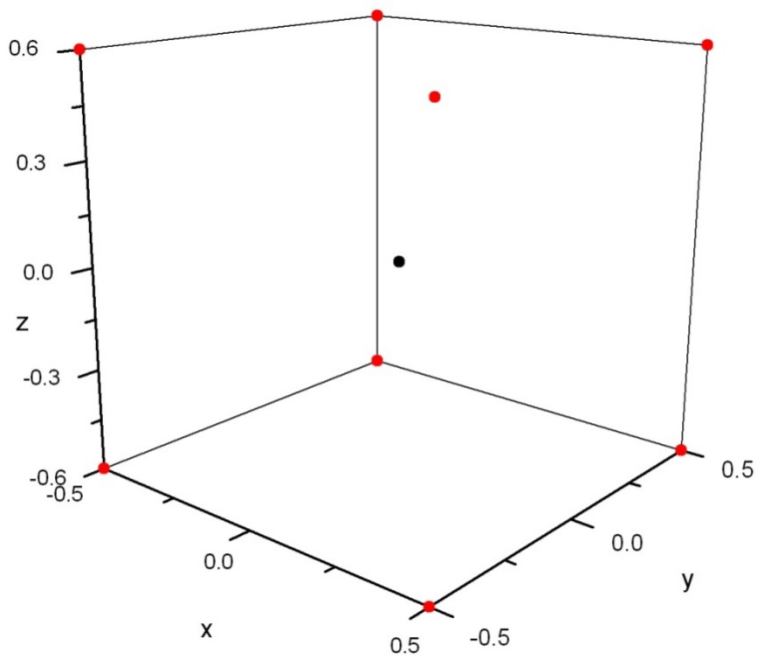
 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <211>, δηλαδή στις ευθείες που διέρχονται από τα κέντρα εδρών.

Παρακάτω παρουσιάζονται η γενική άποψη του χωροκεντρωμένου τετραγωνικού πλέγματος (Εικόνα 13), οι διατάξεις των γειτόνων 1^{ης} έως 4^{ης} τάξεως ξεχωριστά (Εικόνες 14, 15, 16, 17) και έπειτα οι ομαδοποιημένες διατάξεις των γειτόνων τάξεως 5 έως 11, 12 έως 18, 19 έως 25 και 26 έως 30. (Εικόνες 18, 19, 20, 21).



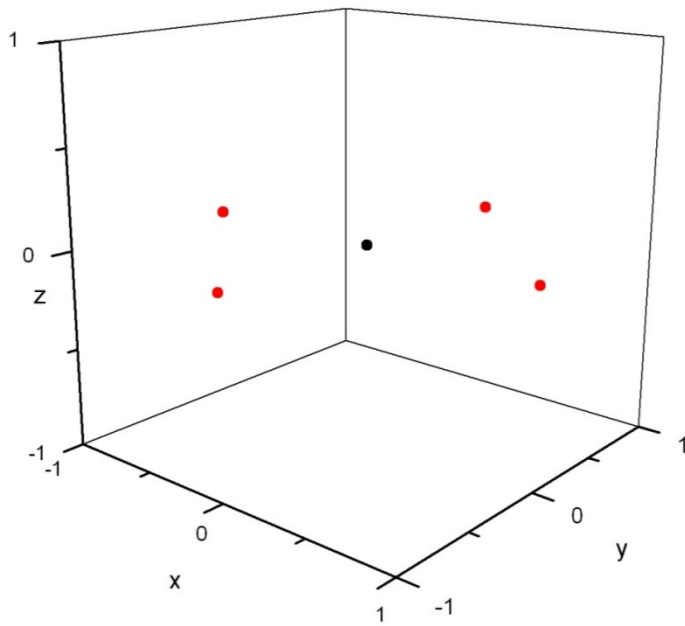
Εικόνα 13.

Γενική άποψη του χωροκεντρωμένου τετραγωνικού πλέγματος (bct1).

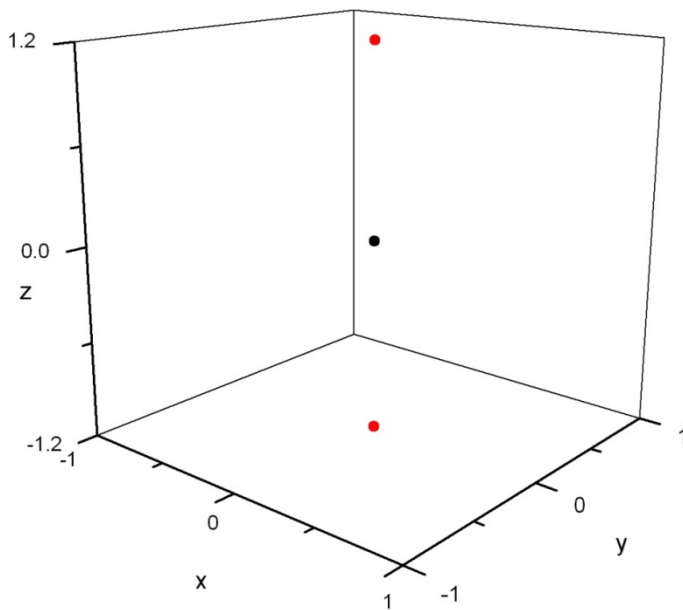


Εικόνα 14.

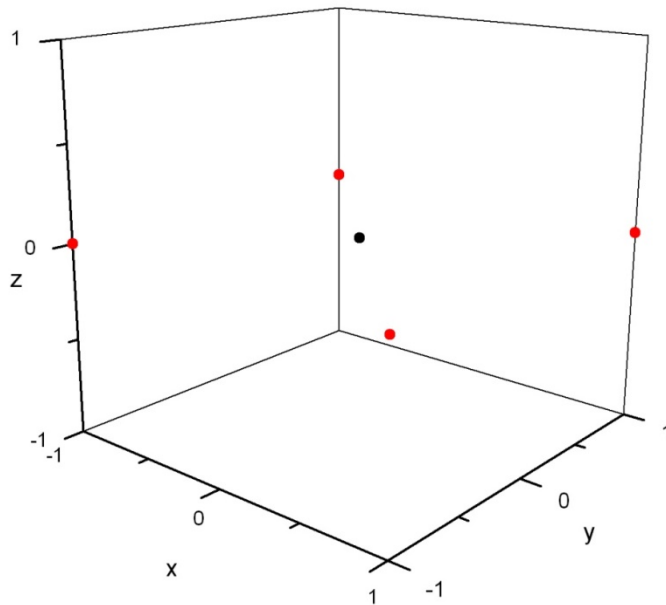
Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 1^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που έχει τοποθετηθεί στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



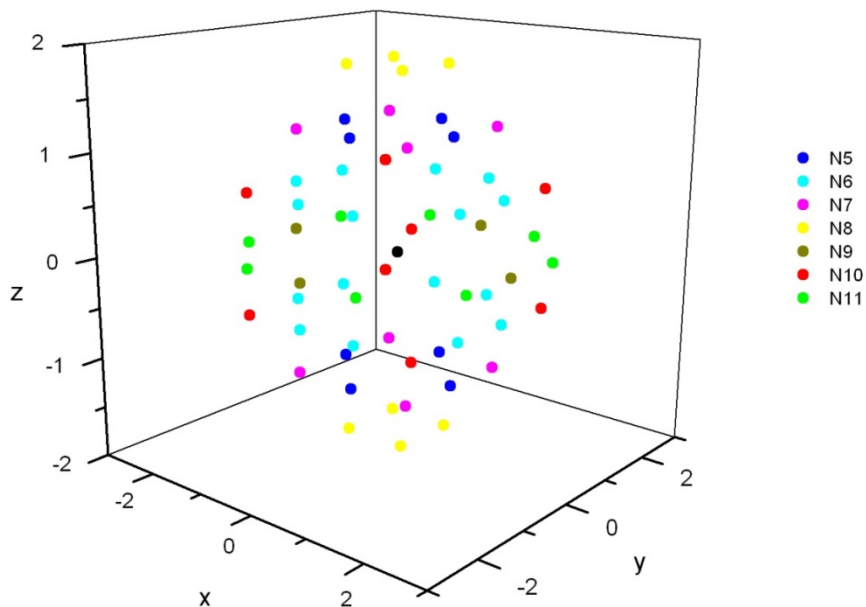
Εικόνα 15. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 2^{ας} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



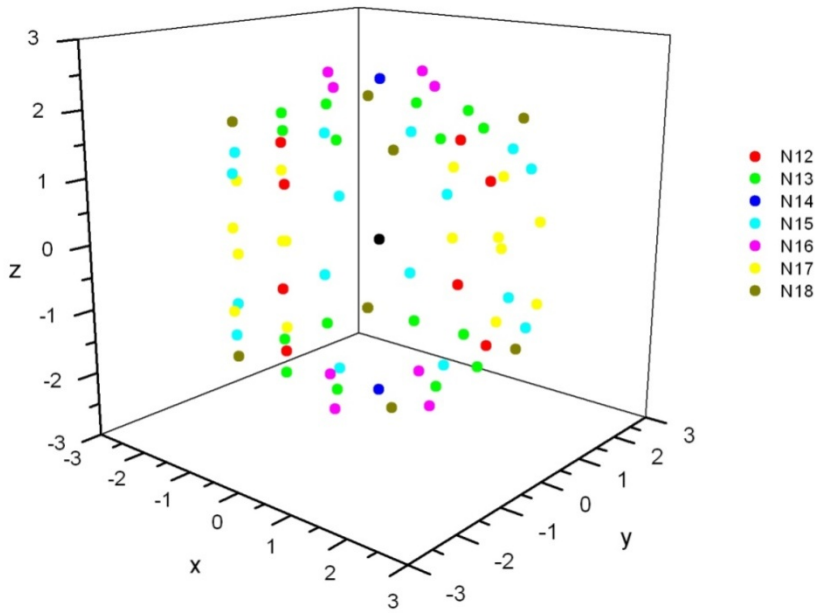
Εικόνα 16. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 3^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που έχει τοποθετηθεί στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



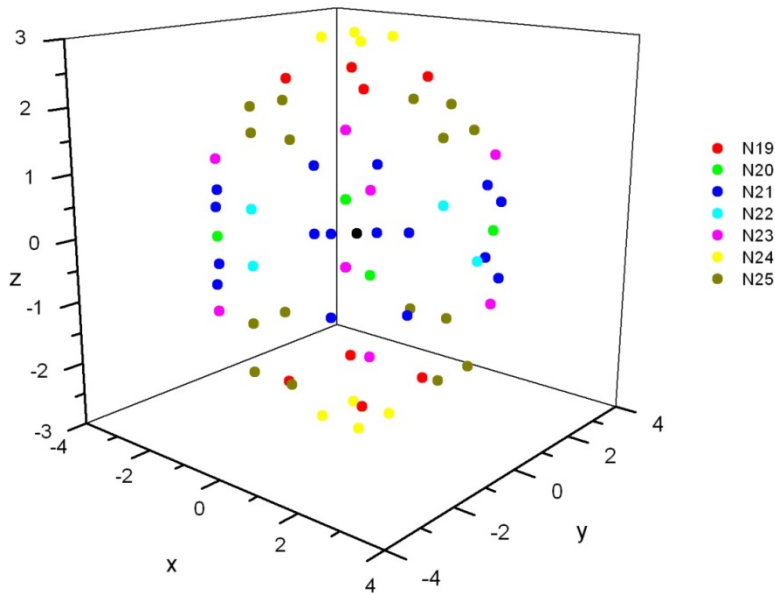
Εικόνα 17. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 4^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



Εικόνα 18. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 5^{ης} έως 11^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

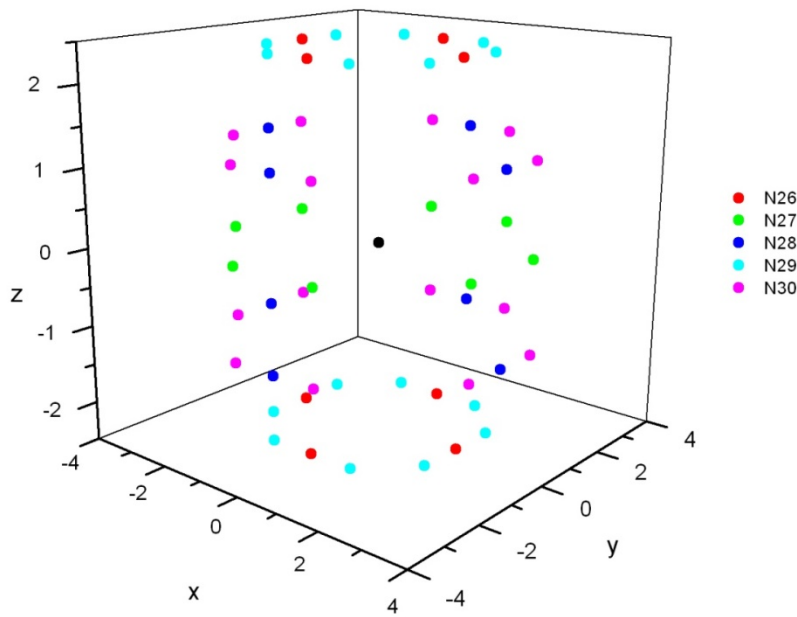


Εικόνα 19. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 12^{ης} έως 18^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

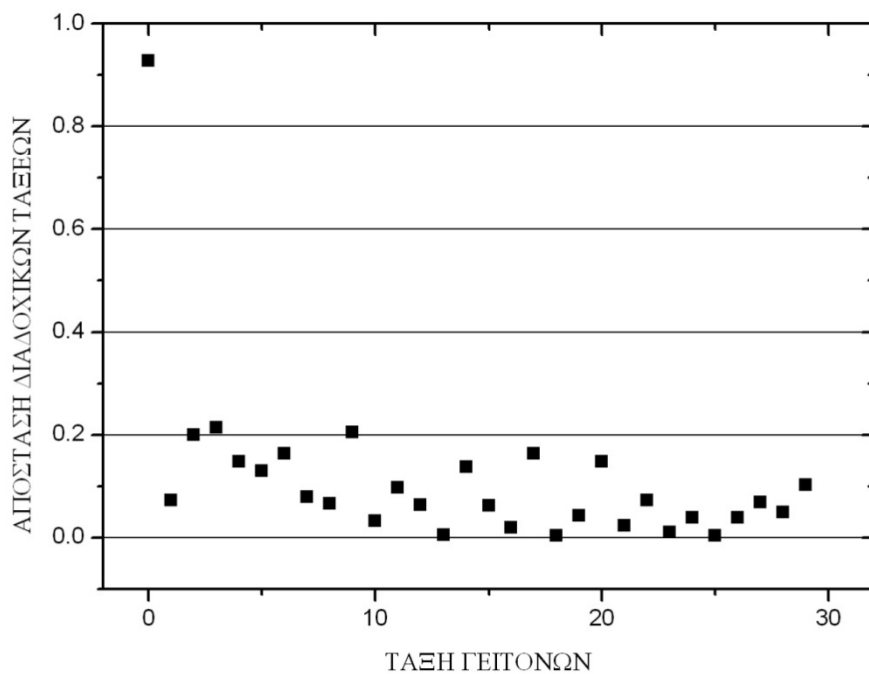


Εικόνα 20.

Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 19^{ης} έως 25^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

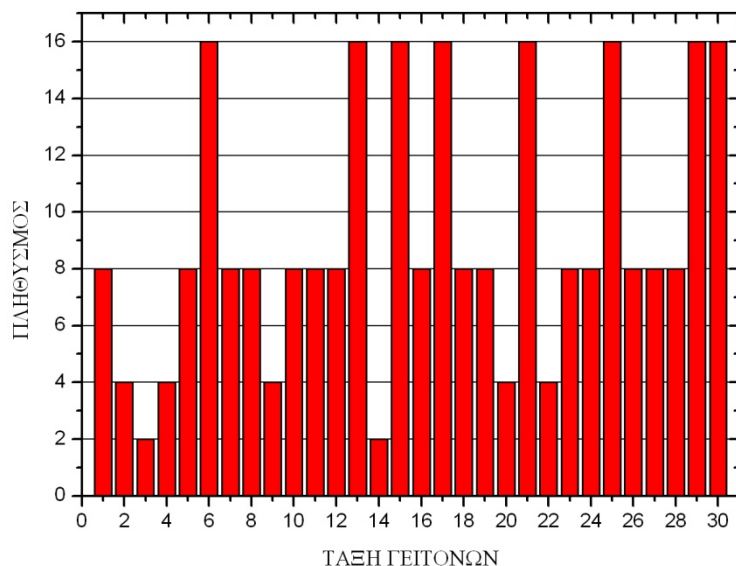


Εικόνα 21. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 26^{ης} έως 30^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



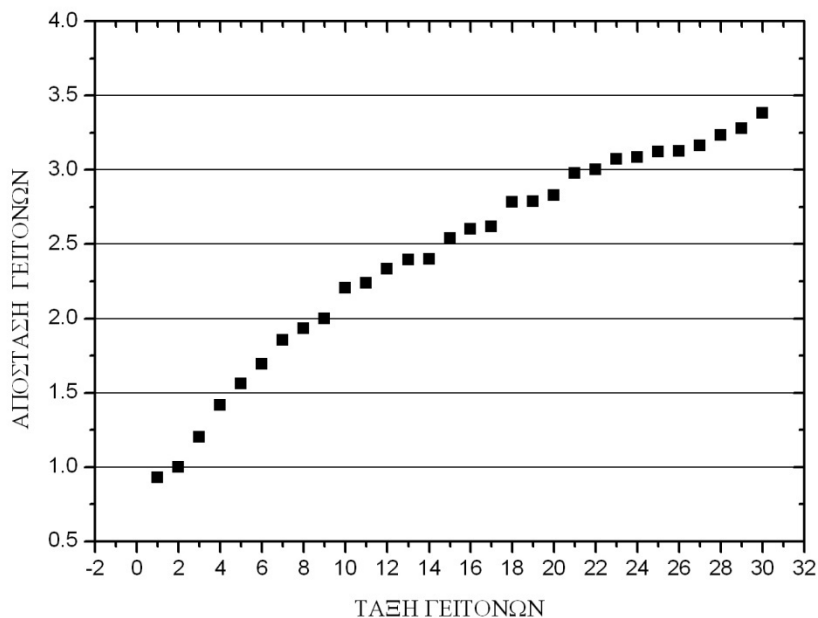
Εικόνα 22. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Γραφική παράσταση της απόστασης μεταξύ δύο διαδοχικών κελυφών συναρτήσει της τάξης γειτόνων.

Για την πληρέστερη ποιοτική ανάλυση του χωροκεντρωμένου τετραγωνικού πλέγματος, παραθέτουμε δύο διαγράμματα, τα οποία απεικονίζουν τον πληθυσμό και τις αποστάσεις γειτόνων από δεδομένο πλεγματοκό σημείο, συναρτήσει της τάξης γειτόνων.



Εικόνα 23.

Πληθυσμός γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα.



Εικόνα 24. Απόσταση γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα.

BCT2


Παρατίθεται το κομμάτι του προγράμματος, το οποίο καταγράφει τις γνωστές αποστάσεις των γειτόνων από το πλεγματοεικό σημείο ανά τάξη έως τους γείτονες 30^{th} τάξης:

```
aa=1.0d0
c=1.6d0
if (c.lt.aa*dsqrt(2.0d0)) then
    D=dsqrt(2.0d0*aa**2+c**2)/2
else
    D=aa
endif
r(1)=aa
r(2)=dsqrt(2.0d0*aa**2+c**2)/2
r(3)=dsqrt(2*aa**2)
r(4)=c
r(5)=dsqrt((aa/2)**2+(3*aa/2)**2+(c/2)**2)
r(6)=dsqrt(aa**2+c**2)
r(7)=2*aa
r(8)=dsqrt(2*(aa**2)+c**2)
r(9)=dsqrt(aa**2+(2*aa)**2)
r(10)=dsqrt(2*(3**aa/2)**2+(c/2)**2)
r(11)=dsqrt(2*(aa/2)**2+(3*c/2)**2)
r(12)=dsqrt((2*aa)**2+c**2)
    r(13)=dsqrt((0.5*aa)**2+(2.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(14)=dsqrt(aa**2+(2*aa)**2+c**2)
r(15)=2*aa*dsqrt(2.0d0)
    r(16)=dsqrt((0.5*aa)**2+(1.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(17)=3*aa
    r(18)=dsqrt((1.5*aa)**2+(2.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(19)=dsqrt(aa**2+(3*aa)**2)
r(20)=2*c
r(21)=dsqrt(2*(1.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(22)=dsqrt(2*(2*aa)**2+c**2)
r(23)=dsqrt(aa**2+(2*c)**2)
r(24)=dsqrt((3*aa)**2+c**2)
r(25)=dsqrt(2*aa**2+(2*c)**2)
    r(26)=dsqrt((0.5*aa)**2+(2.5*aa)**2+(1.5*c)**2)
r(27)=dsqrt(aa**2+(3*aa)**2+c**2)
r(28)=dsqrt((2*aa)**2+(3*aa)**2)
    r(29)=dsqrt((0.5*aa)**2+(3.5*aa)**2+(0.5*c)**2)
r(30)=dsqrt((2*aa)**2+(2*c)**2)
```


Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα bct2			
ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ	ΣΥΝΟΛΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΩΝ ΔΙΕΥΘΥΝΣΕΩΝ
1 ^η	4	1.00000	{1 0, 0}
2 ^η	8	1.06771	<1 1 1>
3 ^η	4	1.41421	{1 1, 0}
4 ^η	2	1.60000	{0 0, 1}
5 ^η	16	1.77200	{3 1, 1}
6 ^η	8	1.88680	{1 0, 1}
7 ^η	4	2.00000	{1 0, 0}
8 ^η	8	2.13542	<1 1 1>
9 ^η	8	2.23607	{2 1, 0}
10 ^η	8	2.26716	{3 3, 1}
11 ^η	8	2.50199	{1 1, 3}
12 ^η	8	2.56125	{2 0, 1}
13 ^η	16	2.67208	{5 1, 1}
14 ^η	16	2.74955	{2 1, 1}
15 ^η	4	2.82843	{1 1, 0}
16 ^η	16	2.87402	{3 1, 3}
17 ^η	4	3.00000	{1 0, 0}
18 ^η	16	3.02324	{5 3, 1}
19 ^η	8	3.16228	{3 1, 0}
20 ^η	2	3.20000	{0 0, 1}
21 ^η	8	3.20312	<1 1 1>
22 ^η	8	3.24962	{2 2, 1}
23 ^η	8	3.35261	{1 0, 2}
24 ^η	8	3.39999	{3 0, 1}
25 ^η	8	3.49857	{1 1, 2}
26 ^η	16	3.50143	{5 1, 3}
27 ^η	16	3.54401	{3 1, 1}
28 ^η	8	3.60555	{3 2, 0}
29 ^η	24	3.62491	{7 1, 1} : 16 γείτονες {5 5, 1} : 8 γείτονες


30 ⁿ	8	3.77359	{1 0, 1}
-----------------	---	---------	----------

Επεξήγηση χρωμάτων

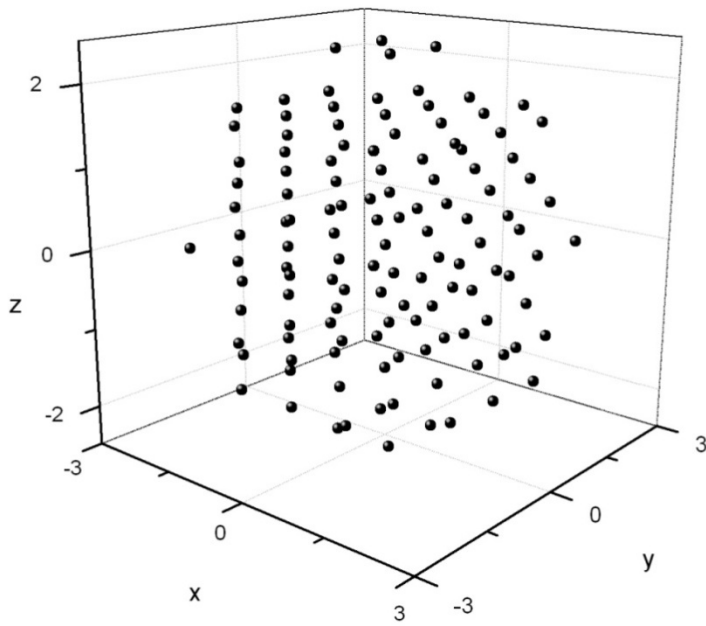
 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <100>, δηλαδή στις ακμές κύβων.

 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <110>, δηλαδή στις διαγωνίους εδρών.

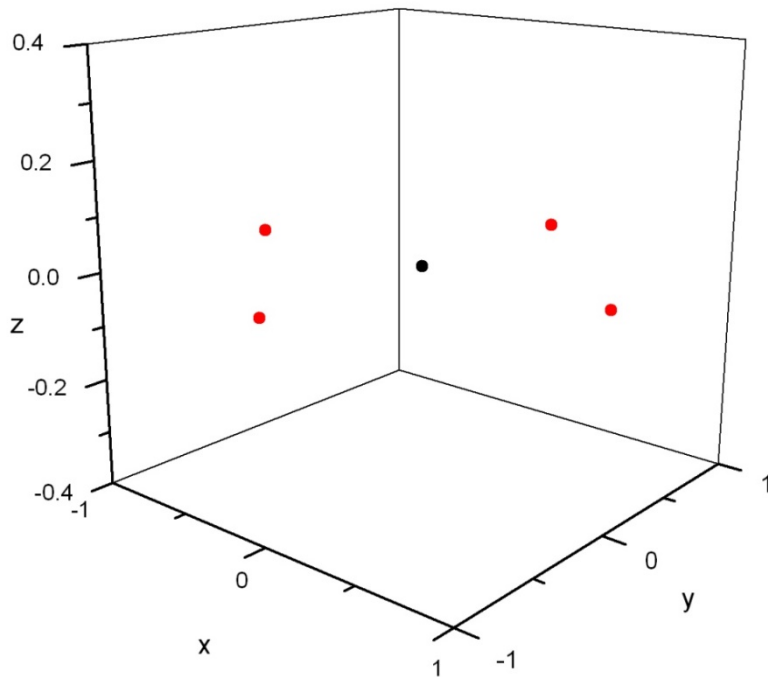
 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <111>, δηλαδή στις διαγωνίους κύβων.

 : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <211>, δηλαδή στις ευθείες που διέρχονται από τα κέντρα εδρών.

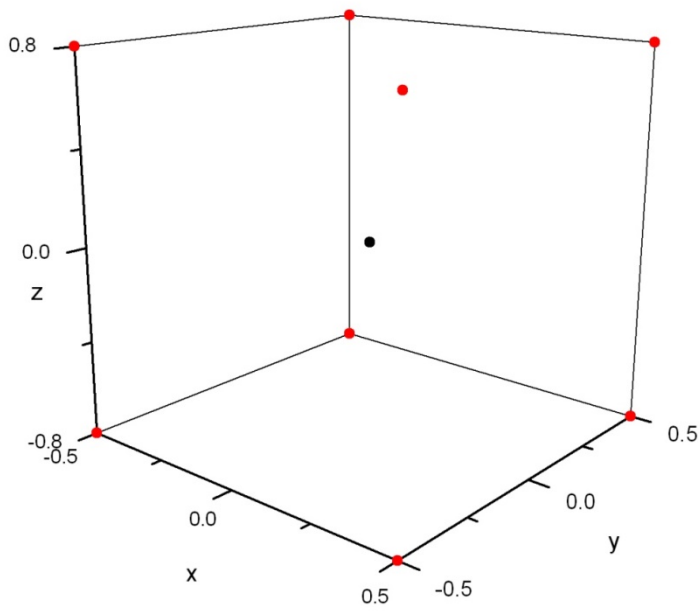
Παρακάτω παρουσιάζονται η γενική άποψη του χωροκεντρωμένου τετραγωνικού πλέγματος (Εικόνα 25), οι διατάξεις των γειτόνων 1^{ης} έως 4^{ης} τάξεως ξεχωριστά (Εικόνες 26, 27, 28, 29) και έπειτα οι ομαδοποιημένες διατάξεις των γειτόνων τάξεως 5 έως 11, 12 έως 18, 19 έως 25 και 26 έως 30. (Εικόνες 30, 31, 32, 33).



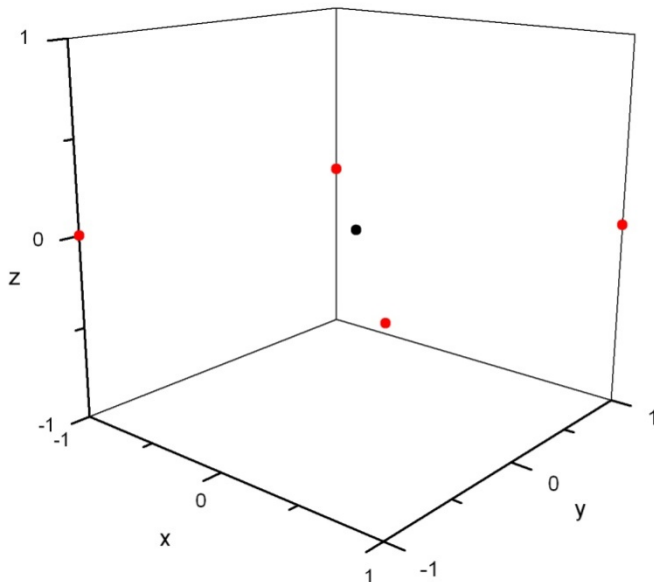
Εικόνα 25. Γενική άποψη του χωροκεντρωμένου τετραγωνικού πλέγματος (bct2).



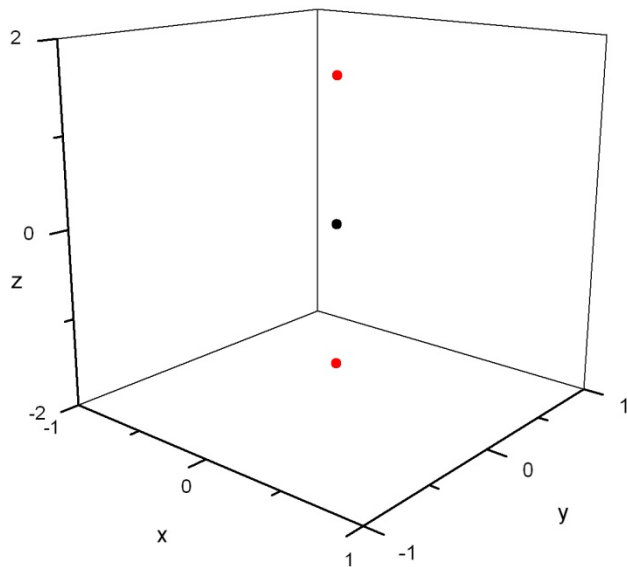
Εικόνα 26. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 1^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματοικό σημείο που έχει τοποθετηθεί στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



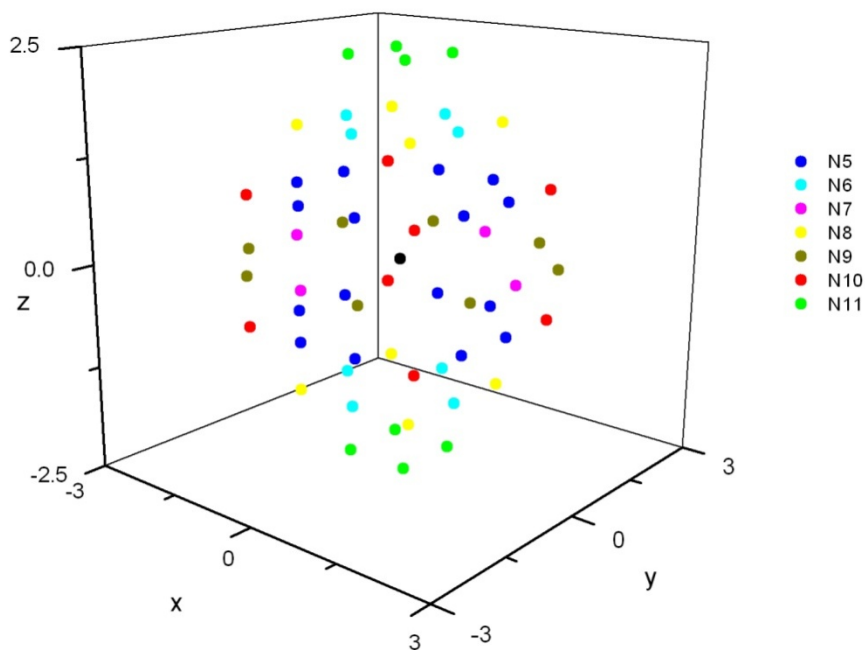
Εικόνα 27. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 2^{ας} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



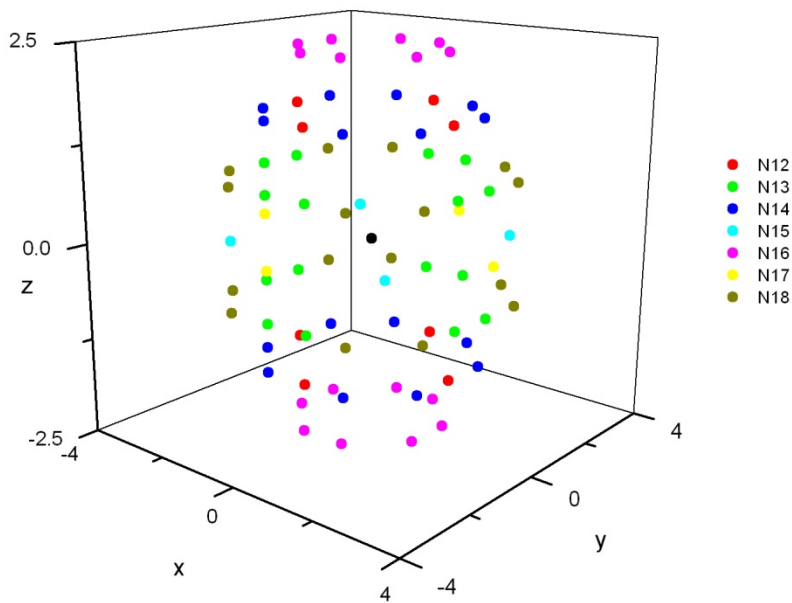
Εικόνα 28. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 3^{ας} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



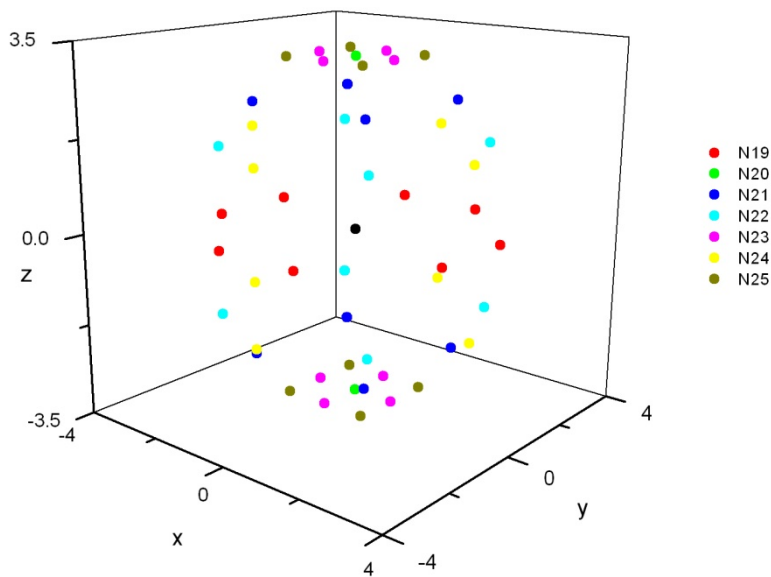
Εικόνα 29. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 4^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



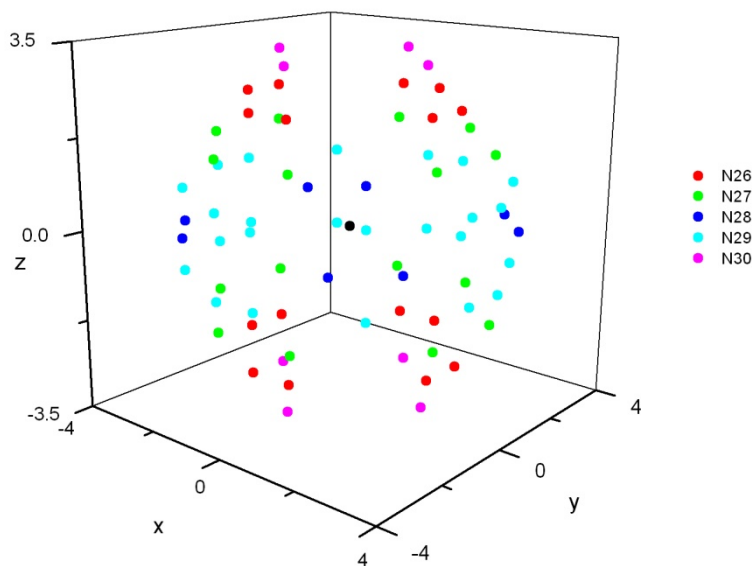
Εικόνα 30. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 5^{ης} έως 11^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



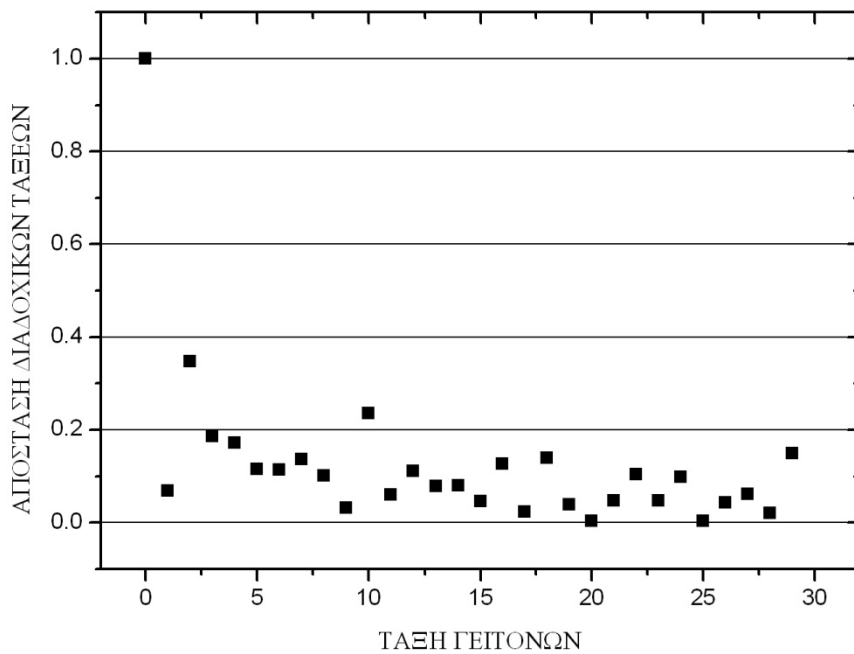
Εικόνα 31. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 12^{ης} έως 18^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματοειδές σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



Εικόνα 32. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 19^{ης} έως 25^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματοειδές σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

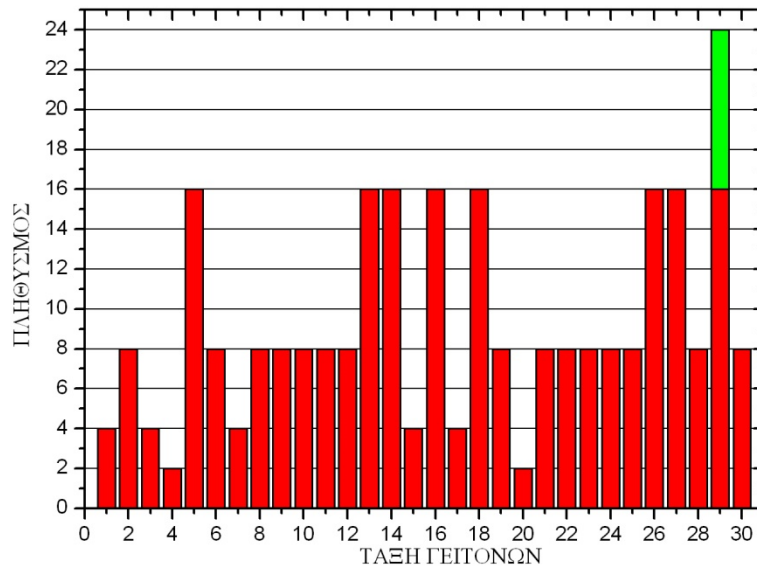


Εικόνα 33. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 26^{ης} έως 30^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

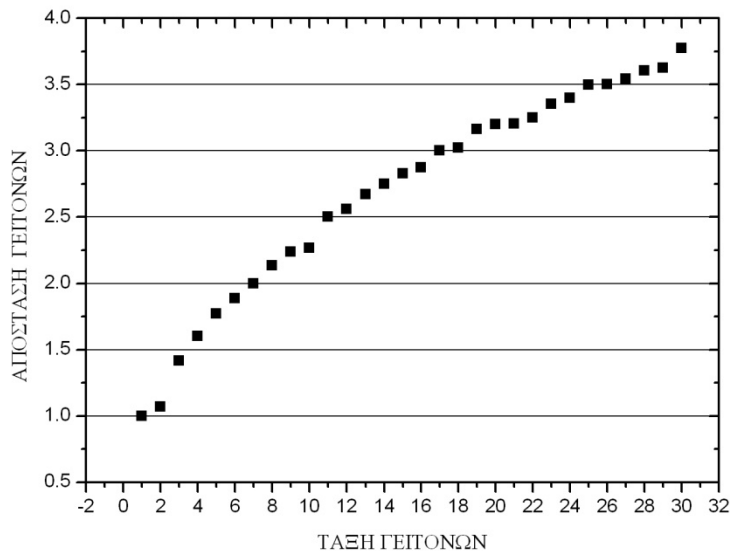


Εικόνα 34. Χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα. Γραφική παράσταση της απόστασης μεταξύ δύο διαδοχικών κελυφών συναρτήσει της τάξης γειτόνων.

Για την πληρέστερη ποιοτική ανάλυση του χωροκεντρωμένου τετραγωνικού πλέγματος, παραθέτουμε δύο διαγράμματα, τα οποία απεικονίζουν τον πληθυσμό και τις αποστάσεις γειτόνων από δεδομένο πλεγματοκό σημείο, συναρτήσει της τάξης γειτόνων.



Εικόνα 35. Πληθυσμός γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα



Εικόνα 36. Απόσταση γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο χωροκεντρωμένο τετραγωνικό πλέγμα.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1] Κωνσταντίνος Σιμσερίδης, Καταστάσεις της Ύλης, ISBN 978-960-603-289-9 (States of Matter, Constantinos Simserides) Αθήνα 2015 (Athens 2015) Σύνδεσμος Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών (Hellenic Academic Libraries Link), Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, 15780 Ζωγράφου www.kallipos.gr Creative Commons Αναφορά δημιουργού - Μη εμπορική χρήση - Όχι παράγωγα έργα (CC BY-NC-ND) 3.0. <http://repository.kallipos.gr/handle/11419/2117>

[2] Παναγιώτης Α. Βαρώτσος και Καίσαρ Δ. Αλεξόπουλος, Φυσική Στερεάς Κατάστασης, Νέα Έκδοση, Εκδότης Σαββάλας, Αθήνα, 1995. Κεφάλαιο πρώτο: Δομή των κρυστάλλων.