

ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ



**ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ**

**Μελέτη της δομής νανοσωματιδίων
κυβικού κρυσταλλικού πλέγματος**

**Σπυρίδων Καρύδης
Διπλωματική Εργασία**

Επιβλέπων Κωνσταντίνος Σιμσερίδης

ΑΘΗΝΑ 2015

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1^ο :

Θεωρία	2
Στερεό, Πλέγμα, Βάση	2
Είδη πλεγμάτων Bravais σε 3Δ	5
Θεμελιώδης κυψελίδα Wigner-Seitz σε 3 διαστάσεις	7
Κλάσμα πυκνής διατάξεως (atomic packing factor, APF)	7
Διεύθυνση πλεγματικών ευθειών	7

Κεφάλαιο 2^ο :

Πρόγραμμα	9
Πρόγραμμα fortran εντοπισμού γειτόνων οιασδήποτε τάξεως σε κάθε ένα εκ των τριών κυβικών πλεγμάτων Bravais	9
Σχολιασμός του προγράμματος	14

Κεφάλαιο 3^ο :

Συμπεράσματα και διαγράμματα για κάθε ένα από τα τρία κυβικά πλέγματα Bravais	23
Απλό κυβικό πλέγμα (simple cubic lattice - sc)	23
Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (face-centered cubic lattice - fcc)	36
Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (body-centered cubic lattice - bcc)	52
Βιβλιογραφία	69

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1^ο : Θεωρία

Εκτεταμένα στοιχεία θεωρίας μπορεί να βρει ο αναγνώστης σε ένα βιβλίο φυσικής στερεάς καταστάσεως [1,2,3].

Στερεό, Πλέγμα, Βάση [4]

Ακολουθώς, παρατίθενται ορισμένες βασικές έννοιες από την αναφορά [4]. 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), **fractals** (μορφοκλάσματα), που χαρακτηρίζονται από **self-similarity** (αυτο-ομοιότητα).
- **άμορφα ή μη κρυσταλλικά στερεά ή υάλια** (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.

Η διαφορά μεταξύ περιοδικών κρυστάλλων και απεριοδικών κρυστάλλων εντοπίζεται στην ύπαρξη συμμετρίας μετατόπισης 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 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$,

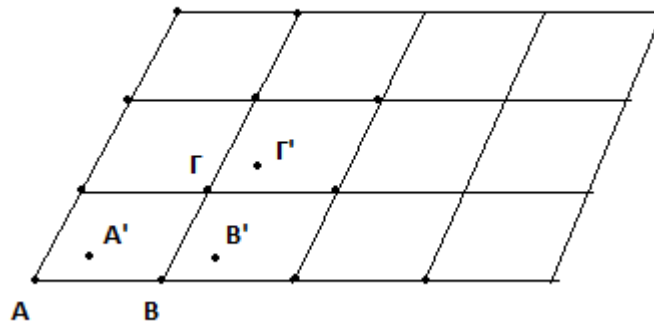
$$\mathbf{r} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3. \quad (1)$$

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. Δείτε για παράδειγμα την επόμενη Εικόνα. 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 ΘΚ με την βοήθεια των ΘΑΜ 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 αν και η εκλογή της δεν είναι μοναδική**. Δηλαδή μπορεί να υπάρχει και άλλη θεμελιώδης κυψελίδα ΘΚ' 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 πλεγμικά σημεία, έχει μεγαλύτερο όγκο (3Δ) ή εμβαδό (2Δ) ή μήκος (1Δ) από μια θεμελιώδη κυψελίδα. Δηλαδή η ΘΚ 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 πλεγμικά σημεία είναι ισοδύναμα, ενώ σε ένα πλέγμα που δεν είναι Bravais μερικά από τα πλεγμικά 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:

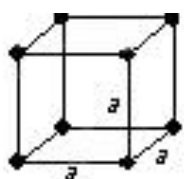


Εικόνα 1. Τα πλεγμικά σημεία A, B, Γ ανήκουν σε ένα πλέγμα Bravais και τα σημεία A', B', Γ' ανήκουν σε ένα άλλο πλέγμα Bravais.

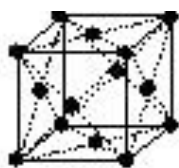
Είδη πλεγμάτων Bravais σε 3Δ [4]

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. 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.

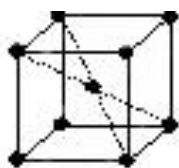
1. Κυβικό σύστημα



ΑΠΛΟ (sc)



ΕΔΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (fcc)

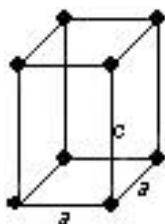


ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (bcc)

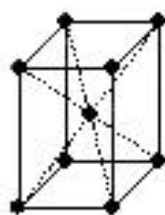
$$a=b=c$$

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

2. Τετραγωνικό σύστημα



ΑΠΛΟ (P)

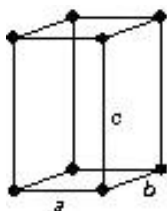


ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (I)

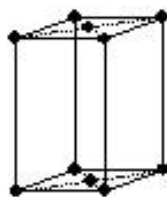
$$a = b \neq c$$

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

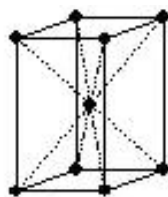
3. Ορθορομβικό σύστημα



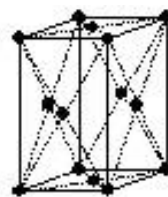
ΑΠΛΟ (P)



ΒΑΣΗΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (C)



ΧΩΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (I)

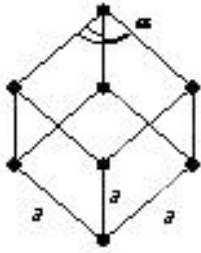


ΕΔΡΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (F)

$$a \neq b \neq c$$

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

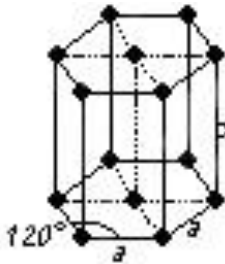
4. Ρομβοεδρικό σύστημα



$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

ΡΟΜΒΟΕΔΡΙΚΟ

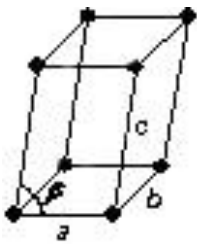
5. Εξαγωνικό σύστημα



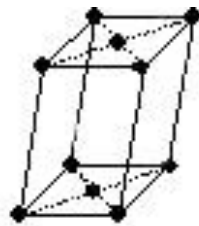
$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$

ΕΞΑΓΩΝΙΚΟ (P)

6. Μονοκλινές σύστημα



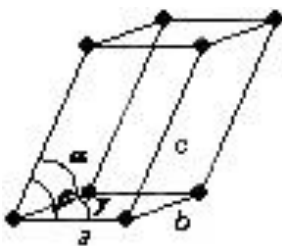
ΑΠΛΟ (P)



ΒΑΣΗΚΕΝΤΡΩΜΕΝΟ (C)

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$

7. Τρικλινές σύστημα

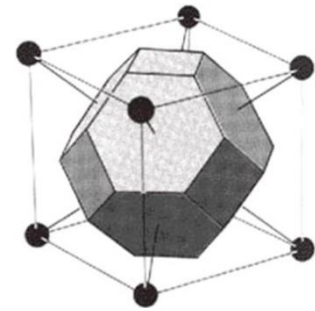


ΤΡΙΚΛΙΝΕΣ (P)

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$

Θεμελιώδης κυψελίδα Wigner-Seitz σε 3 διαστάσεις

Ως θεμελιώδη κυψελίδα Wigner-Seitz ορίζουμε τον χώρο που βρίσκεται πλησιέστερα σε ένα δεδομένο πλεγματοτικό σημείο σε σχέση με οποιοδήποτε άλλο πλεγματοτικό σημείο. Ως θεμελιώδης κυψελίδα περιέχει ένα μόνο πλεγματοτικό σημείο δηλαδή ο όγκος της θεμελιώδους κυψελίδας Wigner-Seitz είναι ίσος με τον όγκο της θεμελιώδους κυψελίδας όπως ορίστηκε παραπάνω. Για να σχηματίσουμε τη θεμελιώδη κυψελίδα Wigner-Seitz γύρω από κάποιο πλεγματοτικό σημείο, το ενώνουμε με όλα τα γειτονικά του



Εικόνα 2. Η θεμελιώδης κυψελίδα Wigner-Seitz στο πλέγμα bcc.

πλεγματοτικά σημεία και φέρνουμε το μεσοκάθετο επίπεδο σε κάθε ευθύγραμμο τμήμα.

Κλάσμα πυκνής διατάξεως (atomic packing factor, APF)

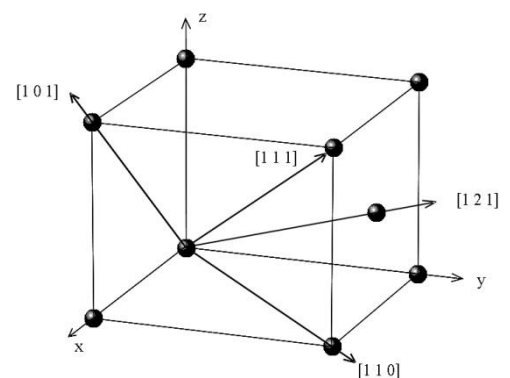
Διογκώνουμε τα πλεγματοτικά σημεία -που γίνονται έτσι σφαίρες- έως ότου ακουμπήσουν, οπότε δεν επιτρέπεται περαιτέρω διόγκωση. Αν ονομάσουμε D τη διάμετρο των «σκληρών» (δηλαδή μη δυνάμενων να διογκωθούν περαιτέρω) σφαιρών, τότε υπολογίζεται ο λόγος του όγκου της κατειλημμένης από τις σκληρές σφαίρες κυψελίδας προς τον όγκο όλης της κυψελίδας. Ο λόγος αυτός ονομάζεται κλάσμα πυκνής διατάξεως (atomic packing factor, APF):

$$APF = \frac{V_{\text{καταλημμενης κυψελίδας}}}{V_{\text{κυψελίδας}}}$$

Διεύθυνση πλεγματοτικών ευθειών [1]

(Ακολουθείται πιστά το εδάφιο 1.7 σ.σ. 33-34. Έχει διαφοροποιηθεί το σχήμα σε σχέση με το πρωτότυπο για τις ανάγκες της παρούσης εργασίας.)

Αποδεικνύεται ότι, όταν μία ευθεία περιέχει δύο τουλάχιστον πλεγματοτικά σημεία, τότε περιέχει άπειρα πλεγματοτικά σημεία. Η ευθεία αυτή λέγεται **πλεγματοτική 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 πλεγματοτικών ευθειών.

Ας υποθέσουμε ότι η πλεγματική ευθεία δε διέρχεται από την αρχή των αξόνων. 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 \vec{OA} προφανώς γράφεται $\vec{OA} = \ell_1 \vec{a} + \ell_2 \vec{b} + \ell_3 \vec{c}$ (τα $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα της συμβατικής κυψελίδας, δηλαδή τα $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ 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 σμήγος 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 [1 0 0], [0 1 0] και [0 0 1] (που είναι διευθύνσεις ακμών) είναι ισοδύναμες. Σε αυτή την περίπτωση συμβολίζουμε όλες μαζί τις ισοδύναμες αυτές διευθύνσεις με το σύμβολο <u v w>. Δηλαδή το σύμβολο <1 0 0> στο κυβικό σύστημα υποδεικνύει όλες τις εξής έξι (6) διευθύνσεις: [1 0 0], [0 1 0], [0 0 1], [$\bar{1}$ 0 0], [0 $\bar{1}$ 0], [0 0 $\bar{1}$] (που είναι οι διευθύνσεις των ακμών). Επίσης το σύμβολο <1 1 1> αναφέρεται σε όλες τις διαγωνίους (χώρου) του κύβου. Βεβαίως οι «διευθύνσεις» <1 0 0> και <1 1 1> δεν είναι ισοδύναμες.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2^ο : πρόγραμμα

Πρόγραμμα fortran εντοπισμού γειτόνων οιασδήποτε τάξεως σε κάθε ένα εκ των τριών κυβικών πλεγμάτων

Σε αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με το πρόγραμμα, το οποίο παραθέτουμε πιο κάτω. Θα εξηγήσουμε τη λειτουργία του δηλαδή το πως υπολογίζουμε τον αριθμό, την απόσταση, αλλά και τα σύνολα πλεγματικών διευθύνσεων των γειτόνων οιασδήποτε τάξεως ενός πλεγματικού σημείου, για όποιο πλέγμα και εάν έχουμε. Το πρόγραμμα δημιούργησε ο επιβλέπων καθηγητής Κωνσταντίνος Σιμσερίδης. Οι 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 εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (face-centered cubic lattice - fcc).

```
program fcc

implicit none

! Declarations...
integer upto, dimk
parameter (upto=34, dimk=7)

integer k1, k2, k3, i, j, l, sum, newsum, metrisis, nos, metrima
integer count(upto)
integer lhelp, l1, l2, l3
real*8 mikro, step
real*8 distance, D
real*8 r(upto)
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
integer gcd, gcdthree

! Executable Statements...
! Here I take lattice parameter = 1
nos=(2*dimk+1)**3 ! number of lattice sites
mikro=1.0d-6

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

write(*,*) 'distances of neighbors given by r(l) i.e. upto'
D=dsqrt(2.0d0)/2
write(*,1212) D
1212 format('diameter of hard spheres,
& D = lattice parameter (taken sqrt(2)/2 here) = ', f12.5)
```

```

do l=1,uptonn
  if (l.le.13) then
    r(l)=D*dsqrt(dfloat(l))
!   Den yparxoyn geitones se apostash dsqrt(28)/2
  else if (l.ge.14.AND.l.le.28) then
    r(l)=D*dsqrt(dfloat(l)+1)
!   Den yparxoun geitones se apostash dsqrt(60)/2
  else if (l.ge.29.AND.l.le.34) then
    r(l)=D*dsqrt(dfloat(l)+2)
  endif
enddo

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

open(unit=1,file="primitive_vectors_fcc")
write(1,*) 'face centered cubic 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
      a(i,j)=0.0d0
    else
      a(i,j)=0.5d0
    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
do i=1,3
  ar(k1,k2,k3,i)=0.0d0
enddo
enddo; enddo ; enddo

open(unit=33,file="ar_fcc")
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk
write(33,*) 'k1,k2,k3',k1,k2,k3
do i=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_fcc")
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_fcc")
write(7,*) 'arn given by r(1) i.e. uptonn for fcc lattice'
sum=0
do l=1,uptonn
distance=r(1)
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)
do i=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 fcc lattice
l1=k2+k3
l2=k1+k3
l3=k1+k2
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_fcc")
write(9,*) 'arn_inside_investigation_shell_fcc'
write(*,*) 'arn_inside_investigation_shell_fcc'
metrima=0
step=0.1d0
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)

return
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)
if (c == 0) then
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
integer  a,b,c,d ! local variables
integer  gcd

a=x
b=y
c=z

gcdthree=0      ! initialization

d=gcd(a,b)
gcdthree=gcd(c,d)
return
end

```

Σχολιασμός του προγράμματος

Στην αρχή δηλώνουμε το όνομα του προγράμματος με την εντολή `program fcc`. Η εντολή `implicit none` μας υποχρεώνει να δηλώσουμε όλες τις σταθερές, μεταβλητές και παραμέτρους του προγράμματος, πράγμα που εξασφαλίζει πληρέστερο έλεγχο του.

Κατόπιν μετά τη γραμμή σχόλιο

```
!      Declarations...
```

δηλώνουμε όλες τις παραμέτρους, σταθερές και μεταβλητές τις οποίες θα χρησιμοποιήσουμε στο πρόγραμμά μας. Πρώτα δηλώνονται οι παράμετροι με τις γραμμές

```
integer upto, dimk  
parameter (upto=34, dimk=7)
```

Το `upto` μας δείχνει την τάξη των γειτόνων μέχρι τους οποίους έχουμε διερευνήσει το πλέγμα, δηλαδή μέχρι εκεί όπου γνωρίζουμε ήδη τον αριθμό και την απόσταση των γειτόνων είτε από τη θεωρία είτε από τα μέχρι εκείνη τη στιγμή τρεξίματα του προγράμματος. Το `dimk` δείχνει τις τιμές που παίρνουν οι ακέραιοι στην εξίσωση (1), συγκεκριμένα παίρνουν τις τιμές $[-dimk, -dimk+1, \dots, dimk-1, dimk]$. Επομένως, ο αριθμός των πλεγματικών σημείων είναι $nos = (2 * dimk + 1) ** 3$. Έπειτα δηλώνουμε όλες τις υπόλοιπες σταθερές και μεταβλητές:

```
integer k1, k2, k3, i, j, l, sum, newsum, metrisis, nos, metrima
```

είναι διάφορες ακέραιες μεταβλητές.

```
integer count(upto)
```

μετρά τον αριθμό των `l` τάξεως γειτόνων.

```
integer lhelp, l1, l2, l3
```

είναι μεταβλητές που χρησιμοποιούνται στον υπολογισμό των πλεγματικών ευθειών.

```
real*8 mikro, step  
real*8 distance, D
```

είναι πραγματικές σταθερές των οποίων η σημασία θα φανεί παρακάτω.

```
real*8 r(upto)
```

είναι οι αποστάσεις των ήδη διερευνημένων γειτόνων.

```
real*8 a(3,3)
```

είναι τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως.

```
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)
```

είναι το διάνυσμα θέσεως του πλεγματικού σημείου, το μέτρο του και το τετράγωνο του μέτρου του αντιστοίχως.

Στη συνέχεια δηλώνονται οι εξωτερικές ακέραιες συναρτήσεις gcd και gcdthree οι οποίες χρησιμοποιούνται στον υπολογισμό του μέγιστου κοινού διαιρέτη (ΜΚΔ).

```
!      External functions
      integer gcd,gcdthree
```

Μετά τη γραμμή σχόλιο

```
!      Executable Statements...
```

ξεκινούν οι εκτελέσιμες προτάσεις του προγράμματος.

Στο κυβικό πλέγμα λαμβάνουμε την ακμή του κύβου ή πλεγματική σταθερά ως μονάδα μετρήσεως, πράγμα που δηλώνεται στη γραμμή σχόλιο

```
!      Here I take lattice parameter = 1
```

Ακολουθεί ο αριθμός των πλεγματικών σημείων που είναι βεβαίως

```
      nos=(2*dimk+1)**3 ! number of lattice sites
```

Ακόμα ορίζουμε μια μικρή ποσότητα

```
      mikro=1.0d-6
```

Έπειτα μηδενίζουμε τον μετρητή μας με τις εντολές

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

για να είναι σίγουρο ότι ξεκινάμε την αρίθμηση εξ αρχής.

Στο κομμάτι

```
      write(*,*) 'distances of neighbors given by r(l) i.e. uptonn'
      D=dsqrt(2.0d0)/2
      write(*,1212) D
1212  format('diameter of hard spheres,
      & D = lattice parameter (sqrt(2)/2) = ',f12.5)
```

ορίζουμε τη διάμετρο σκληρών σφαιρών D ως σταθερά. Στο fcc οι σκληρές σφαίρες έχουν διάμετρο

$D = (\sqrt{2}/2) \cdot a = \sqrt{2}/2$, το οποίο και δηλώνεται παραπάνω.

Στο κομμάτι

```
      do l=1,uptonn
      if (l.le.13) then
      r(l)=D*dsqrt(dfloat(l))
!      Den yparxoun geitones se apostash dsqrt(28)/2
      else if (l.ge.14.AND.l.le.28) then
      r(l)=D*dsqrt(dfloat(l)+1)
!      Den yparxoun geitones se apostash dsqrt(60)/2
      else if (l.ge.29.AND.l.le.34) then
      r(l)=D*dsqrt(dfloat(l)+2)
      endif
      enddo

      do l=1,uptonn
```



```

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

```

ορίζουμε τις αποστάσεις $r(1)$ των l τάξεως γειτόνων που γνωρίζουμε ήδη είτε από τη θεωρία είτε από προηγούμενα τρεξίματα του προγράμματος. Κατόπιν τις τυπώνουμε στην οθόνη.

Στη συνέχεια στο κομμάτι

```

open(unit=1,file="primitive_vectors_fcc")
write(1,*) 'face centered cubic 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
a(i,j)=0.0d0
else
a(i,j)=0.5d0
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)

```

ορίζονται τα ΘΑΜ του εδροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος $\bar{a}_1 = \frac{a}{2}\hat{j} + \frac{a}{2}\hat{k}$, $\bar{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{k} + \frac{a}{2}\hat{i}$ και

$\bar{a}_3 = \frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}$. Στη συνέχεια μηδενίζουμε τα διανύσματα θέσεως των πλεγματικών σημείων για να

είμαστε σίγουροι ότι τα αντιμετωπίζουμε εξ αρχής

```

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

```

και έπειτα τα ορίζουμε σύμφωνα με τη σχέση (1) όπου οι ακέραιοι n_1, n_2, n_3 ονομάζονται στο πρόγραμμα k_1, k_2, k_3

```

open(unit=33,file="ar_fcc")
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
do k3=-dimk,dimk
write(33,*) 'k1,k2,k3',k1,k2,k3
do i=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)
enddo

```

```

enddo
enddo
close (unit=33)

```

Κατόπιν στο κομμάτι

```

open (unit=4, file="arn2+arn_fcc")
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)

```

ορίζουμε τα μέτρα των διανυσμάτων θέσεως των πλεγματικών σημείων και τα τετράγωνά τους. Μετά αναζητούμε γείτονες σε απόσταση $distance=r(1)$. Η αναζήτηση γίνεται μέσω της διαφοράς $abs(arn(k1, k2, k3)-distance)$ για να αποφευχθεί η επίδραση αριθμητικών μικροδιαφορών. Επειδή η πλεγματική σταθερά είναι 1.0 το $mikro = 1.0d-6$ είναι πράγματι πολύ μικρό. Το πλήθος των γειτόνων σε απόσταση $r(1)$ καταγράφεται στο $count(1)$. Επίσης ορίζουμε τους ακεραίους $l1, l2, l3$ οι οποίοι είναι οι συντεταγμένες του διανύσματος θέσης στο τρισσορθόγωνιο σύστημα αξόνων και σε κάθε περίπτωση πλέγματος είναι διαφορετικοί λόγω του διαφορετικού ορισμού του διανύσματος θέσης και τη βοηθητική μεταβλητή $lhelp$ μέσω των οποίων υπολογίζουμε τις διευθύνσεις των πλεγματικών ευθειών (καλώντας και την εξωτερική συνάρτηση $gcdthree$). Στην περίπτωση όπου οι αριθμοί στις διευθύνσεις των πλεγματικών ευθειών είναι πολλαπλάσια του 2, εφαρμόζεται η συνθήκη απλοποίησης, ώστε να έχουμε την απλούστερη δυνατή πλεγματική ευθεία. Λεπτομέρειες για τον τρόπο υπολογισμού των διευθύνσεων πλεγματικών ευθειών δίνονται για κάθε πλέγμα ξεχωριστά.

```

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

if (abs(arn(k1, k2, k3)-distance).lt.mikro) then
count(1)=count(1)+1

```

```

write(7,*) 'k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)', k1,k2,k3,arn(k1,k2,k3)
do i=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 fcc lattice
l1=k2+k3
l2=k1+k3
l3=k1+k2
lhelp=gcdthree(abs(l1),abs(l2),abs(l3))
l1=l1/lhelp; l2=l2/lhelp; l3=l3/lhelp

! Syn8hkh aplopoihshs
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)

```

Έτσι

l=1 είναι οι πρώτοι γείτονες

l=2 είναι οι δεύτεροι γείτονες

l=3 είναι οι τρίτοι γείτονες

κ.ο.κ.

Στο κομμάτι

```

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(*,*) ''

```

μετράμε τα πλεγματικά σημεία που δεν αντιστοιχούν σε ήδη καταγεγραμμένους-κατηγοριοποιημένους σε τάξη γείτονες. Το πλήθος τους αποθηκεύεται στο `metrasis`. Μετά ελέγχουμε αν το πλεγματικό σημείο του οποίου ψάχνουμε τους γείτονες μαζί με τους ήδη γνωστούς-κατηγοριοποιημένους σε τάξη γείτονες και τους μη ακόμα καταγεγραμμένους-κατηγοριοποιημένους σε τάξη γείτονες μας κάνει τον συνολικό αριθμό των πλεγματικών σημείων που δημιουργήσαμε στην αρχή. Αν ναι, τυπώνεται στην οθόνη το καθησυχαστικό μήνυμα 'Summations are correct!'.

Μετά ψάχνουμε τους αμέσως επόμενους από τους ήδη καταγεγραμμένους-κατηγοριοποιημένους σε τάξη γείτονες οι οποίοι βρίσκονται σε ένα φλοιό αμέσως μετά τη σφαίρα των ήδη καταγεγραμμένων-κατηγοριοποιημένων σε τάξη γείτονες. Το εύρος του φλοιού καθορίζεται από τη μεταβλητή `step`. Αν αυτή είναι πολύ μεγάλη, τότε καταγράφονται πολλών τάξεων επόμενοι γείτονες, αν είναι αρκετά μικρή μόνο μίας τάξεως επόμενοι γείτονες.

```

open(unit=9,file="arn_inside_investigation_shell_fcc")
write(9,*) 'arn_inside_investigation_shell_fcc'
write(*,*) 'arn_inside_investigation_shell_fcc'
metrima=0
step=0.1d0
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)

```

Και τέλος το πρόγραμμα τελειώνει.

```

return
end

```

Εκτός του κυρίως προγράμματος ορίζονται οι συναρτήσεις gcd και gcdthree, οι οποίες χρησιμοποιούνται για την εύρεση του μέγιστου κοινού διαιρέτη των τριών ακεραίων 11, 12 και 13, όπως αυτοί ορίζονται παραπάνω. Η διαδικασία αυτή είναι απαραίτητη για τον υπολογισμό των δεικτών διεύθυνσης των πλεγματικών ευθειών, όπως έχει αναφερθεί στη θεωρία.

```

!      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)
if (c == 0) then
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
integer a,b,c,d ! local variables
integer gcd

a=x
b=y
c=z

gcdthree=0 ! initialization

d=gcd(a,b)
gcdthree=gcd(c,d)
return
end

```

Η συνάρτηση gcd είναι η αλγοριθμική διατύπωση της απλής διαδικασίας εύρεσης του μέγιστου κοινού διαιρέτη (ΜΚΔ) δύο θετικών ακέραιων αριθμών a και b. Αρχικά μηδενίζουμε την gcd

```
gcd=0 ! initialization
```

και στη συνέχεια συγκρίνουμε τους αριθμούς a και b. Εάν ο a είναι μικρότερος από τον b, τότε τους εναλλάσσουμε και ο a παίρνει τη μεγαλύτερη τιμή.

```

if (a<b) then
c=a
a=b
b=c
endif

```

Εάν και οι δύο αριθμοί είναι μηδέν, τότε τυπώνεται το μήνυμα function gcd: there is no gcd

```

if ((a.eq.0).AND.(b.eq.0)) then
write(*,*) 'function gcd: there is no gcd'
endif

```

Εάν ο b είναι μηδέν, τότε ο ΜΚΔ είναι ο a

```

if ((a.ne.0).AND.(b.eq.0)) then
gcd=a
endif

```

Εάν και οι δύο αριθμοί είναι διάφοροι του μηδενός, τότε κάνουμε τη διαίρεση $\frac{a}{b}$ και εάν το αποτέλεσμα δίνει υπόλοιπο μηδέν, τότε ο a είναι πολλαπλάσιο του b και ο b είναι ο ΜΚΔ, ενώ εάν το αποτέλεσμα δίνει υπόλοιπο διάφορο του μηδενός δηλαδή οι a και b δεν διαιρούνται ακριβώς, τότε ο ΜΚΔ είναι ο 1.

```
if ((a.ne.0).AND.(b.ne.0)) then
  c = mod(a, b)
  if (c == 0) then
    gcd=b
  else
    gcd=1
  endif
endif
```

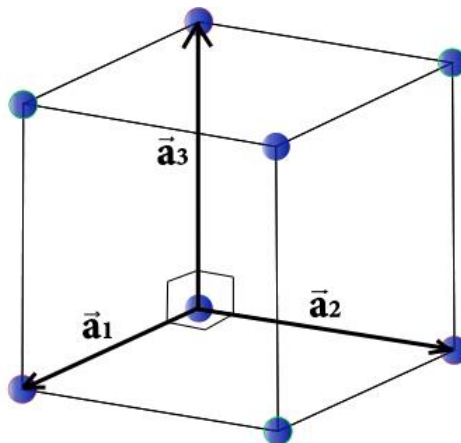
Η συνάρτηση `gcdthree` είναι μία διπλή κλήση της συνάρτησης `gcd`, ώστε να βρούμε το ΜΚΔ τριών ακέραιων θετικών αριθμών a, b και c . Σε αυτή την περίπτωση ονομάζουμε d το ΜΚΔ των δύο ακεραίων a και b και ύστερα βρίσκουμε το ΜΚΔ των αριθμών d και c .

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3ο :

Συμπεράσματα και διαγράμματα για κάθε ένα από τα τρία κυβικά πλέγματα

Απλό κυβικό πλέγμα (simple cubic lattice - sc)

Το απλό κυβικό πλέγμα (sc) λαμβάνεται όταν, για τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (Θ.Α.Μ.) $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, ισχύει ότι τα μέτρα τους είναι ίσα και ότι οι γωνίες που σχηματίζουν μεταξύ τους ανά δύο, είναι ορθές, δηλαδή $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3| = a$ και $(\vec{a}_1, \hat{\vec{a}}_2) = (\vec{a}_2, \hat{\vec{a}}_3) = (\vec{a}_3, \hat{\vec{a}}_1) = 90^\circ$. 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.



Εικόνα 4. Τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (Θ.Α.Μ.) του απλού κυβικού πλέγματος.

```
open(unit=1, file="primitive_vectors_sc")
write(1, *) 'simple cubic 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
a(i,j)=1.0d0
else
a(i,j)=0.0d0
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 πλεγματοικό σημείο δίνεται παρακάτω:

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



```

write(*,*) 'distances of neighbors given by r(1) i.e. uptoonn'
D=1.0d0
write(*,1212) D
1212 format('diameter of hard spheres,
& D = lattice parameter (taken 1 here) = ',f12.5)
do l=1,uptonn
if (l.le.6) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l))
elseif ((l.ge.7).and.(l.le.13)) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+1))
elseif ((l.ge.14).and.(l.le.20)) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+2))
elseif ((l.ge.21).and.(l.le.24)) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+3))
elseif ((l.ge.25).and.(l.le.26)) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+4))
elseif ((l.ge.27).and.(l.le.33)) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+5))
elseif (l.eq.34) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+6))
endif

enddo

```

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_sc")
write(7,*) 'arn given by r(1) i.e. uptoonn for sc 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)
do i=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
lhelp=gcdthree(abs(l1),abs(l2),abs(l3))
l1=l1/lhelp; l2=l2/lhelp; l3=l3/lhelp
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





Στην περίπτωση του απλού κυβικού πλέγματος τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως ταυτίζονται με τα μοναδιαία ανύσματα των αξόνων x,y,z οπότε οι αριθμοί 11, 12 και 13 είναι ακέραιοι.

Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του προγράμματος, έως και την 34^η τάξη γειτόνων, για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξης ενός πλεγματοκού σημείου, την απόστασή τους από το πλεγματοκού σημείο, καθώς και τα σύνολα πλεγματοκών διευθύνσεων των γειτόνων κάθε τάξης.

απλό κυβικό πλέγμα			
ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ	ΣΥΝΟΛΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΩΝ ΔΙΕΥΘΥΝΣΕΩΝ
1 ^η	6	$\sqrt{1} = 1.00000$	<1 0 0>
2 ^η	12	$\sqrt{2} \approx 1.41421$	<1 1 0>
3 ^η	8	$\sqrt{3} \approx 1.73205$	<1 1 1>
4 ^η	6	$\sqrt{4} = 2.00000$	<1 0 0>
5 ^η	24	$\sqrt{5} \approx 2.23607$	<2 1 0>
6 ^η	24	$\sqrt{6} \approx 2.44949$	<2 1 1>
7 ^η	12	$\sqrt{8} \approx 2.82843$	<1 1 0>
8 ^η	30	$\sqrt{9} = 3.00000$	<1 0 0> : 6 γείτονες <2 2 1> : 24 γείτονες
9 ^η	24	$\sqrt{10} \approx 3.16228$	<3 1 0>
10 ^η	24	$\sqrt{11} \approx 3.31662$	<3 1 1>
11 ^η	8	$\sqrt{12} \approx 3.46410$	<1 1 1>
12 ^η	24	$\sqrt{13} \approx 3.60555$	<3 2 0>
13 ^η	48	$\sqrt{14} \approx 3.74166$	<3 2 1>
14 ^η	6	$\sqrt{16} = 4.00000$	<1 0 0>
15 ^η	48	$\sqrt{17} \approx 4.12311$	<3 2 2> : 24 γείτονες <4 1 0> : 24 γείτονες
16 ^η	36	$\sqrt{18} \approx 4.24264$	<1 1 0> : 12 γείτονες <4 1 1> : 24 γείτονες
17 ^η	24	$\sqrt{19} \approx 4.35890$	<3 3 1>
18 ^η	24	$\sqrt{20} \approx 4.47214$	<2 1 0>
19 ^η	48	$\sqrt{21} \approx 4.58258$	<4 2 1>
20 ^η	24	$\sqrt{22} \approx 4.69042$	<3 3 2>
21 ^η	24	$\sqrt{24} \approx 4.89898$	<2 1 1>
22 ^η	30	$\sqrt{25} = 5.00000$	<1 0 0> : 6 γείτονες <4 3 0> : 24 γείτονες
23 ^η	72	$\sqrt{26} \approx 5.09902$	<4 3 1> : 48 γείτονες <5 1 0> : 24 γείτονες

24 ⁿ	32	$\sqrt{27} \approx 5.19615$	<1 1 1> : 8 γείτονες <5 1 1> : 24 γείτονες
25 ⁿ	72	$\sqrt{29} \approx 5.38516$	<4 3 2> : 48 γείτονες <5 2 0> : 24 γείτονες
26 ⁿ	48	$\sqrt{30} \approx 5.47723$	<5 2 1>
27 ⁿ	12	$\sqrt{32} \approx 5.65685$	<1 1 0>
28 ⁿ	48	$\sqrt{33} \approx 5.74456$	<4 4 1> : 24 γείτονες <5 2 2> : 24 γείτονες
29 ⁿ	48	$\sqrt{34} \approx 5.83095$	<4 3 3> : 24 γείτονες <5 3 0> : 24 γείτονες
30 ⁿ	48	$\sqrt{35} \approx 5.91608$	<5 3 1>
31 ⁿ	30	$\sqrt{36} = 6.00000$	<1 0 0> : 6 γείτονες <2 2 1> : 24 γείτονες
32 ⁿ	24	$\sqrt{37} \approx 6.08276$	<6 1 0>
33 ⁿ	72	$\sqrt{38} \approx 6.16441$	<5 3 2> : 48 γείτονες <6 1 1> : 24 γείτονες
34 ⁿ	24	$\sqrt{40} \approx 6.32456$	<3 1 0>

Επεξήγηση χρωμάτων

-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <1 0 0>, δηλαδή στις ακμές κύβων.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <1 1 0>, δηλαδή στις διαγωνίους εδρών.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <1 1 1>, δηλαδή στις διαγωνίους κύβων.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <2 1 1>, δηλαδή στις ευθείες που διέρχονται από τα κέντρα εδρών.

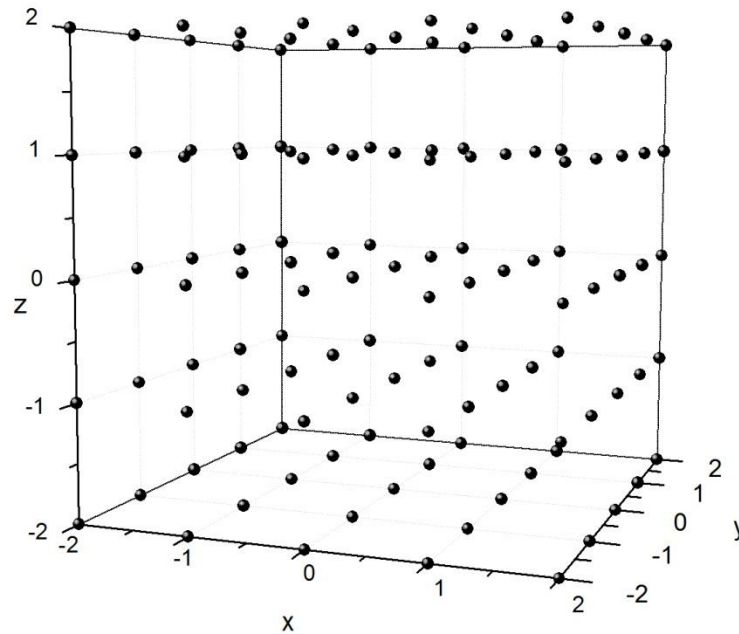
Παρατηρούμε ότι, ενώ υπάρχει μία συνέχεια στις αποστάσεις των γειτόνων από το πλεγματικό σημείο ($\sqrt{1} \rightarrow \sqrt{2} \rightarrow \sqrt{3}$ κλπ), σε ορισμένες περιπτώσεις έχουμε ασυνέχεια. Συγκεκριμένα διαπιστώθηκε ότι δεν υπάρχουν γείτονες στις αποστάσεις: $\sqrt{7}, \sqrt{15}, \sqrt{23}, \sqrt{28}, \sqrt{31}, \sqrt{39}$.

Αυτό οφείλεται στον τρόπο με τον οποίο υπολογίζεται το διάνυσμα θέσης οποιουδήποτε πλεγματικού σημείου. Εάν τα θεμελιώδη ανύσματα μετατόπισης (Θ.Α.Μ.) είναι τα $\vec{a}_1 = (1,0,0)a$, $\vec{a}_2 = (0,1,0)a$ και $\vec{a}_3 = (0,0,1)a$, όπου a η πλεγματική σταθερά και k_1, k_2, k_3 είναι ακέραιοι αριθμοί, τότε το τυχαίο διάνυσμα μετατόπισης \vec{r} μπορεί να γραφεί $\vec{r} = k_1\vec{a}_1 + k_2\vec{a}_2 + k_3\vec{a}_3$. Το τετράγωνο του διανύσματος θέσης θα είναι $r^2 = (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) \cdot a^2$, ενώ εάν θέσουμε $D = a = 1$, τότε το μέτρο του διανύσματος θέσης θα είναι $r = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$. Παρατηρούμε εδώ ότι το άθροισμα $k_1^2 + k_2^2 + k_3^2$ δεν μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή (π.χ. 7, 15, 23 κλπ).

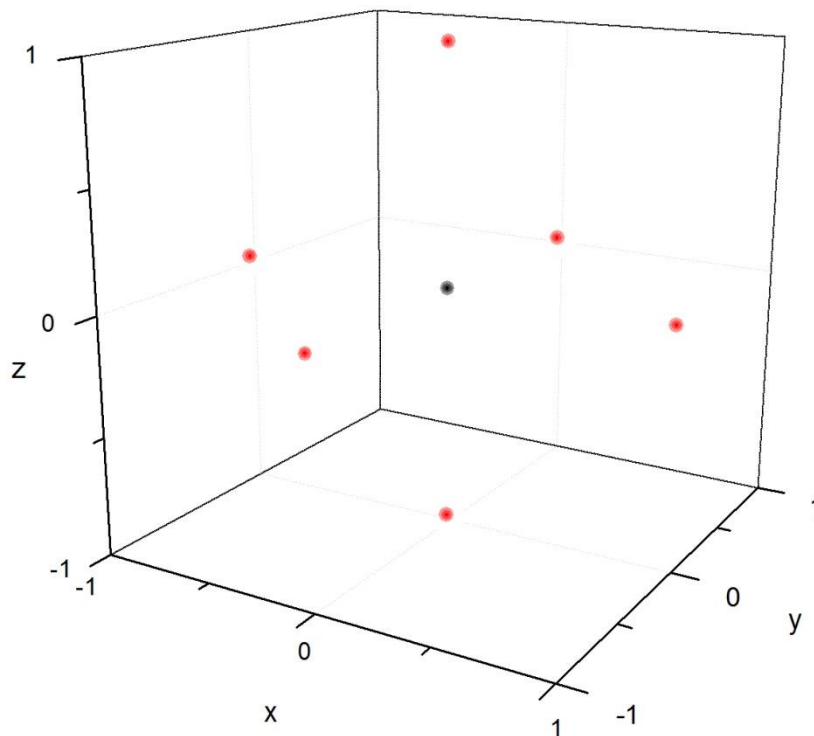
Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται, έως και την 4^η τάξη γειτόνων, τα μέτρα των διανυσμάτων θέσης, οι πλεγματικές ευθείες και το σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων για κάθε τριάδα των ακεραίων k_1, k_2, k_3 .

απλό κυβικό πλέγμα						
k_1	k_2	k_3	r	Πλεγματική ευθεία	Σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων	
1	0	0	$\sqrt{1}$	[1 0 0]	<1 0 0>	1 ^η τάξη γειτόνων 6 γείτονες
0	1	0		[0 1 0]		
0	0	1		[0 0 1]		
-1	0	0		$[\bar{1} 0 0]$		
0	-1	0		$[0 \bar{1} 0]$		
0	0	-1		$[0 0 \bar{1}]$		
1	1	0	$\sqrt{2}$	[1 1 0]	<1 1 0>	2 ^η τάξη γειτόνων 12 γείτονες
1	0	1		[1 0 1]		
0	1	1		[0 1 1]		
-1	-1	0		$[\bar{1} \bar{1} 0]$		
-1	0	-1		$[\bar{1} 0 \bar{1}]$		
0	-1	-1		$[0 \bar{1} \bar{1}]$		
1	-1	0		$[1 \bar{1} 0]$		
1	0	-1		$[1 0 \bar{1}]$		
0	1	-1		$[0 1 \bar{1}]$		
-1	1	0		$[\bar{1} 1 0]$		
-1	0	1		$[\bar{1} 0 1]$		
0	-1	1		$[0 \bar{1} 1]$		
1	1	1	$\sqrt{3}$	[1 1 1]	<1 1 1>	3 ^η τάξη γειτόνων 8 γείτονες
1	1	-1		$[1 1 \bar{1}]$		
1	-1	1		$[1 \bar{1} 1]$		
1	-1	-1		$[1 \bar{1} \bar{1}]$		
-1	1	1		$[\bar{1} 1 1]$		
-1	-1	1		$[\bar{1} \bar{1} 1]$		
-1	1	-1		$[\bar{1} 1 \bar{1}]$		
-1	-1	-1		$[\bar{1} \bar{1} \bar{1}]$		
2	0	0	$\sqrt{4}$	[100]	<1 0 0>	4 ^η τάξη γειτόνων 6 γείτονες
0	2	0		[0 1 0]		
0	0	2		[0 0 1]		
-2	0	0		$[\bar{1} 0 0]$		
0	-2	0		$[0 \bar{1} 0]$		
0	0	-2		$[0 0 \bar{1}]$		

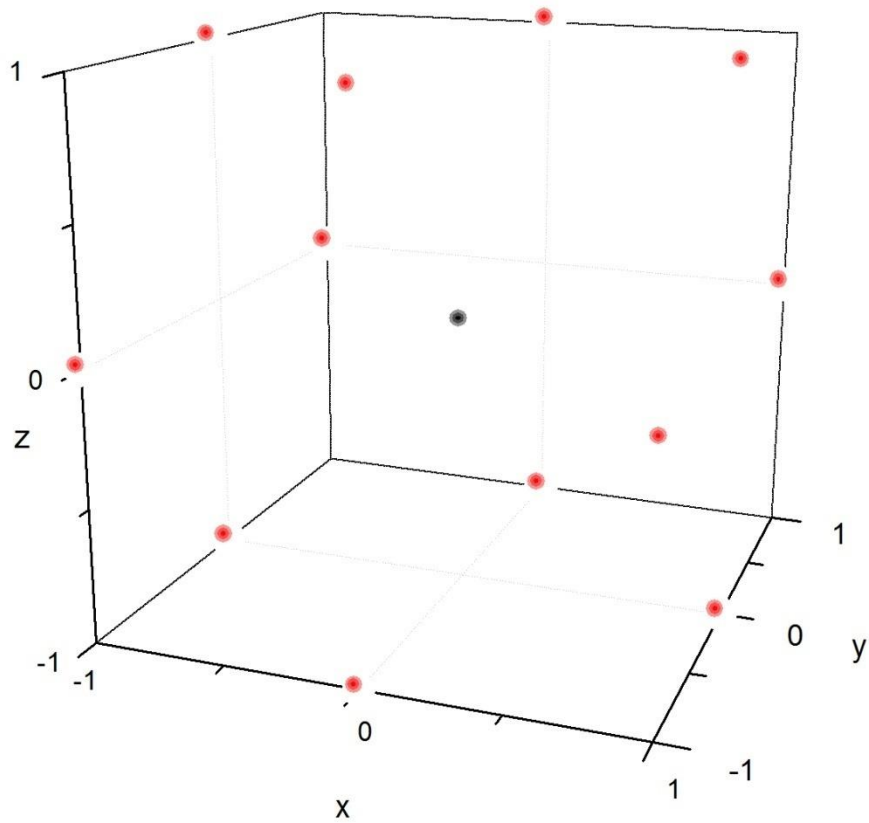
Παρακάτω παρουσιάζονται η γραφική απεικόνιση του απλού κυβικού πλέγματος (Εικόνα 5), η διάταξη των γειτόνων της 1^{ης} έως την 4^η τάξη ξεχωριστά (Εικόνες 6, 7, 8, 9) και έπειτα οι ομαδοποιημένες διατάξεις των γειτόνων τάξεως 5 έως 10, 11 έως 20, 21 έως 27 και 28 έως 34 (Εικόνες 10, 11, 12, 13).



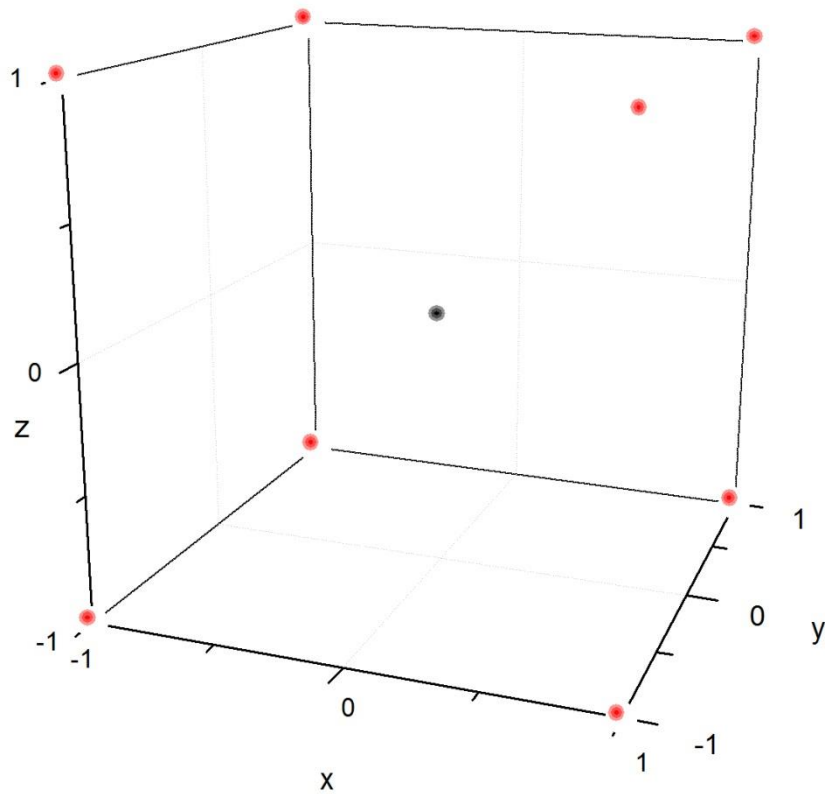
Εικόνα 5. Γενική άποψη του απλού κυβικού πλέγματος (simple cubic lattice, sc).



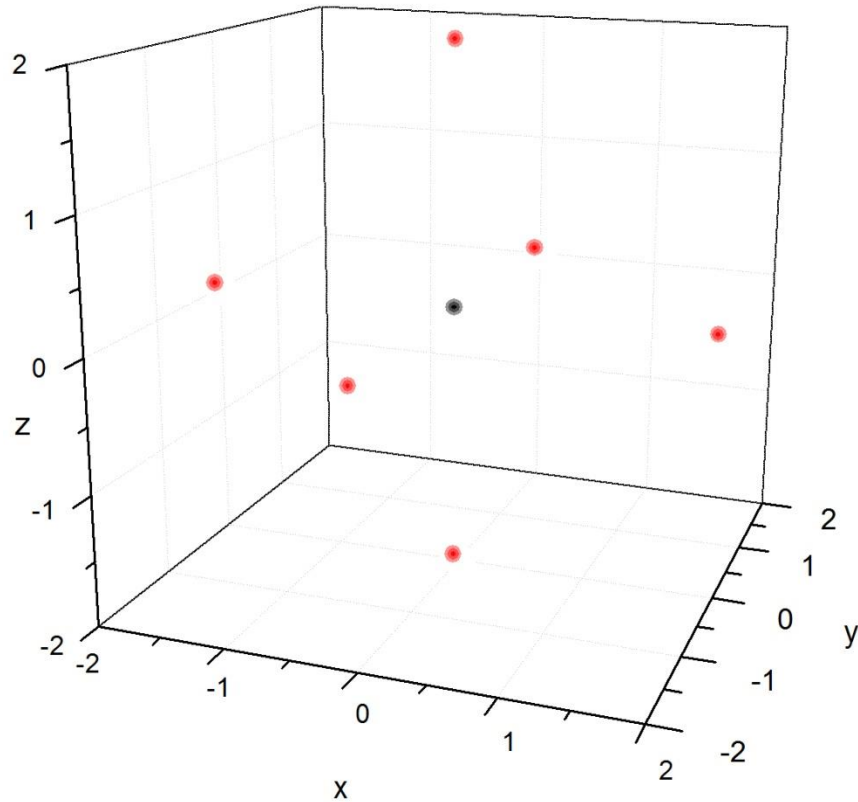
Εικόνα 6. Απλό κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 1^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



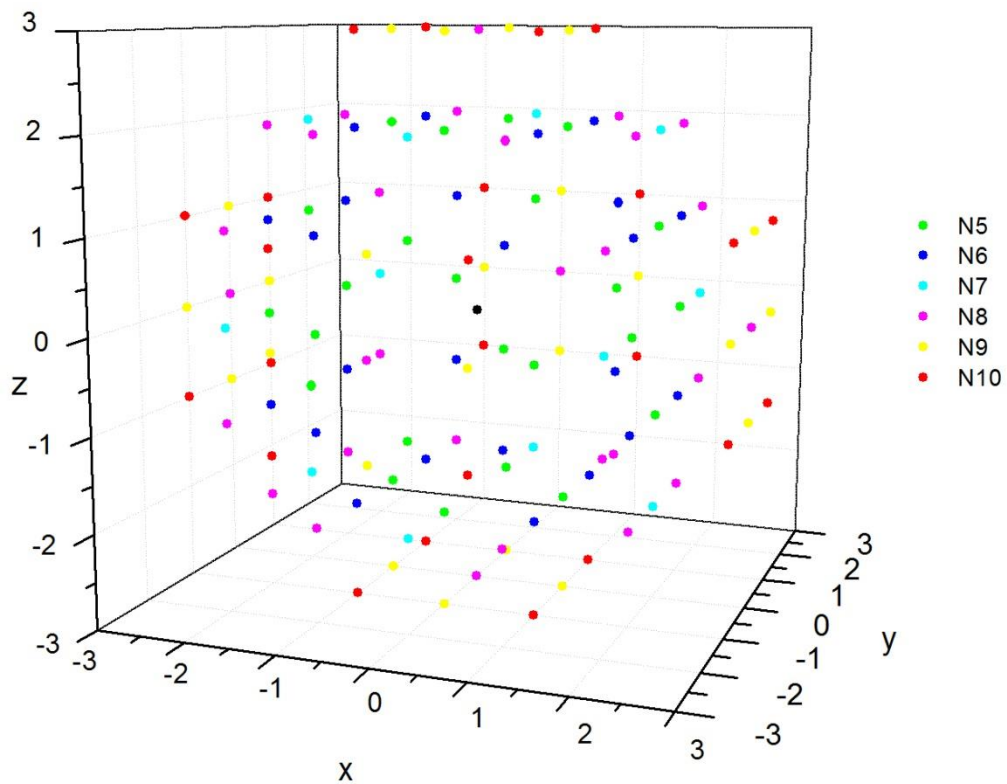
Εικόνα 7. Απλό κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 2^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



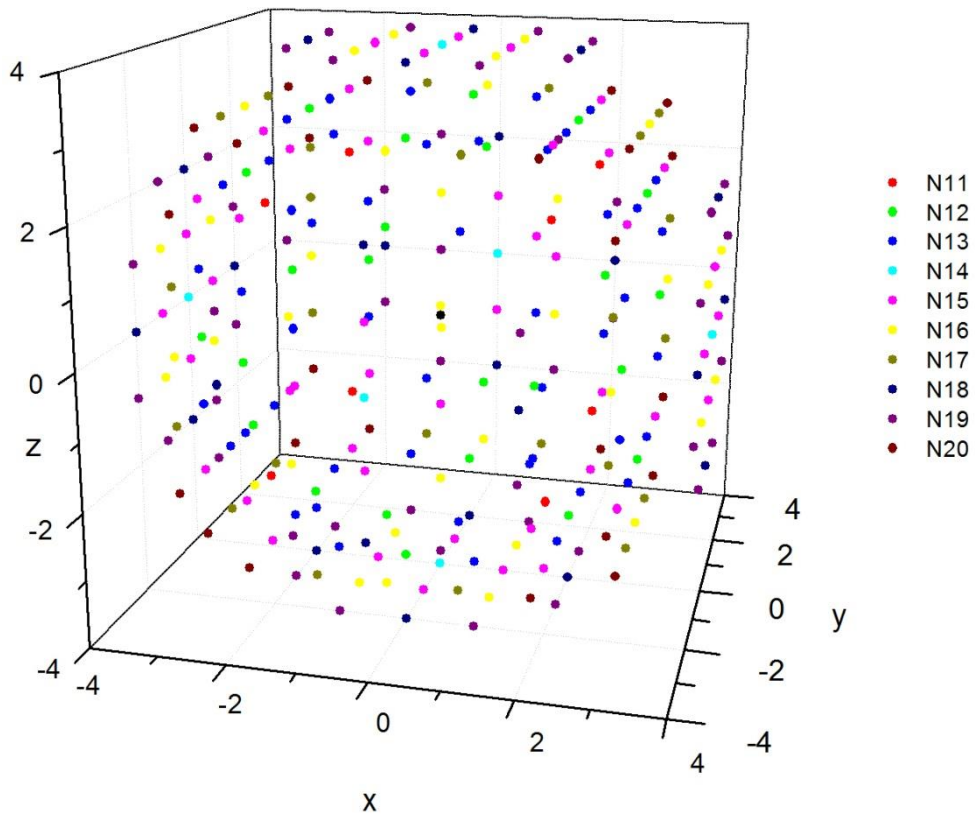
Εικόνα 8. Απλό κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 3^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



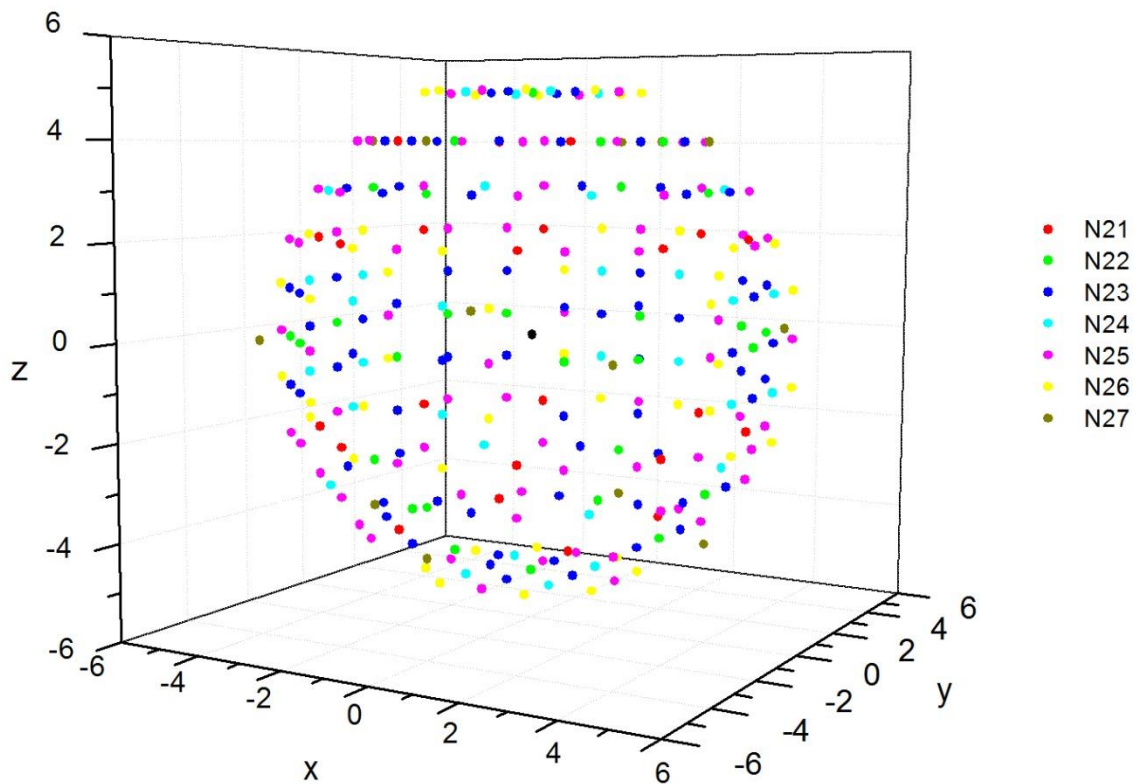
Εικόνα 9. Απλό κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 4^{ης} τάξης γύρω από πλεγματοεικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



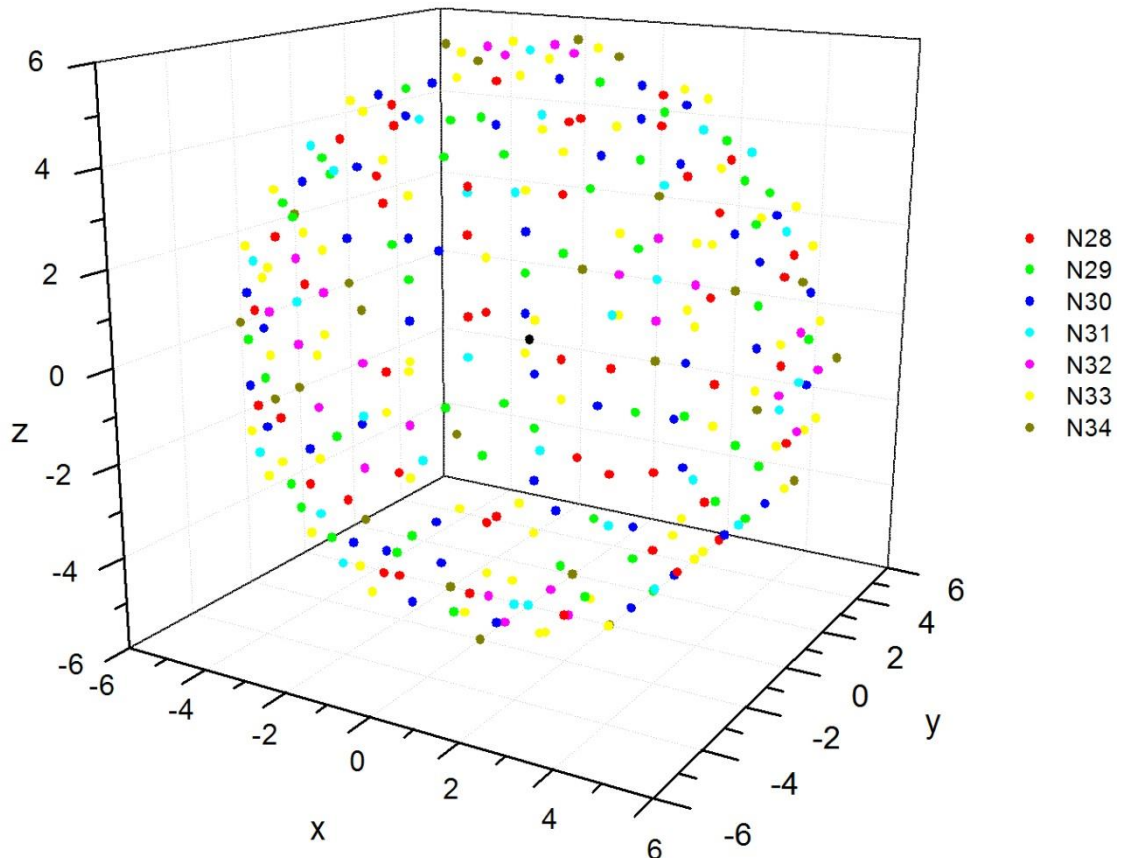
Εικόνα 10. Απλό κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 5^{ης} έως 10^{ης} τάξης γύρω από πλεγματοεικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



Εικόνα 11. Απλό κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 11^{ης} έως 20^{ης} τάξης γύρω από ένα πλεγματοεικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

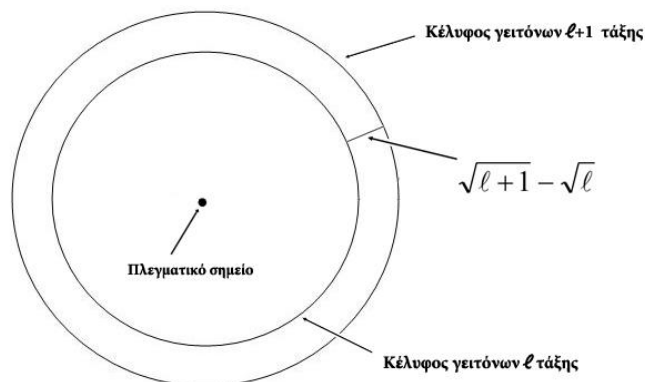


Εικόνα 12. Απλό κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 21^{ης} έως 27^{ης} τάξης γύρω από πλεγματοεικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



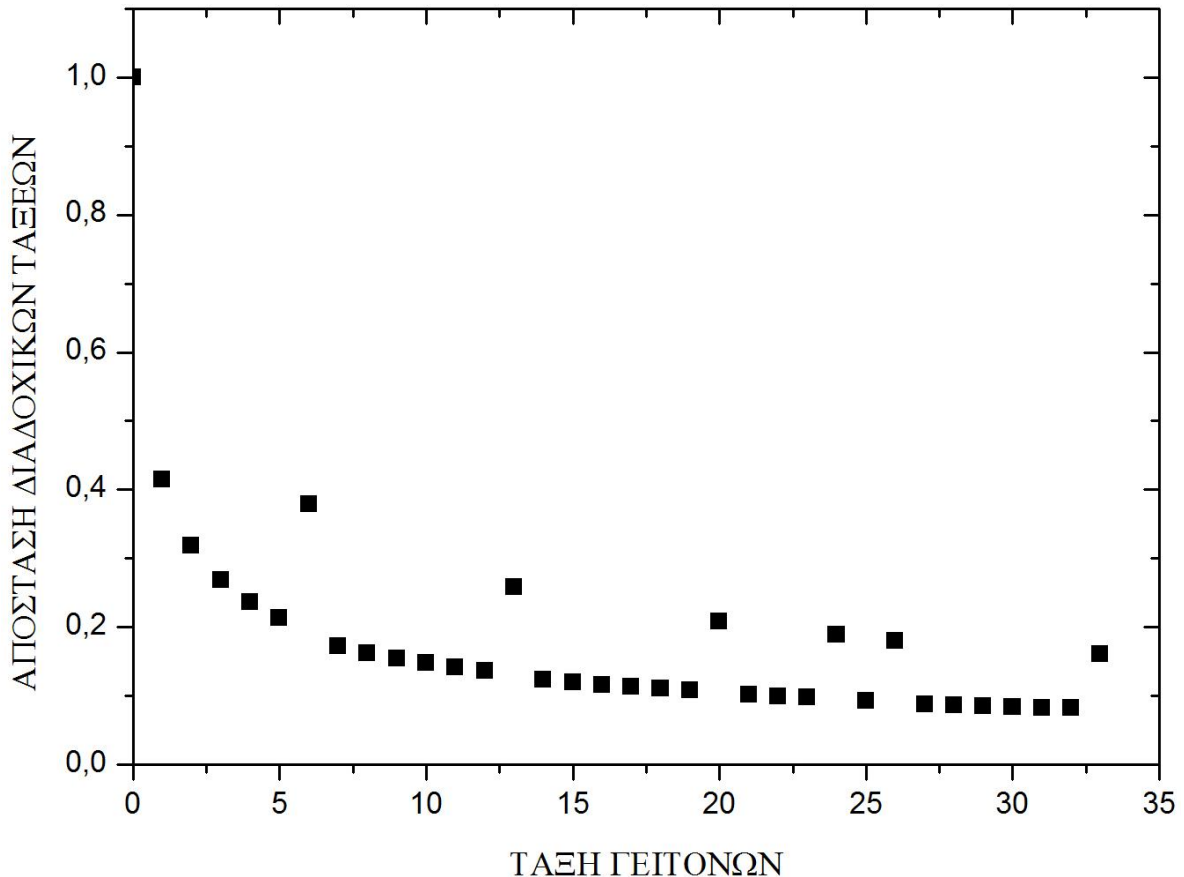
Εικόνα 13. Απλό κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 28^{ης} έως 34^{ης} τάξης γύρω από ένα πλεγματοκό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

Στο σημείο αυτό να παρατηρήσουμε ότι όσο μεγαλύτερη είναι η τάξη γειτόνων, τόσο μικρότερη είναι η απόσταση μεταξύ των σφαιρικών κελυφών δύο διαδοχικών τάξεων. Παρατηρούμε, για παράδειγμα, ότι η απόσταση του κελύφους των 3^{ης} τάξης γειτόνων από το κέλυφος των 2^{ης} τάξης γειτόνων ($\sqrt{3} - \sqrt{2} \approx 1.73205 - 1.41421 = 0.31784$) είναι μικρότερη από την απόσταση του κελύφους των 2^{ης} τάξης γειτόνων από το κέλυφος των 1^{ης} τάξης γειτόνων ($\sqrt{2} - \sqrt{1} \approx 1.41421 - 1 = 0.41421$).



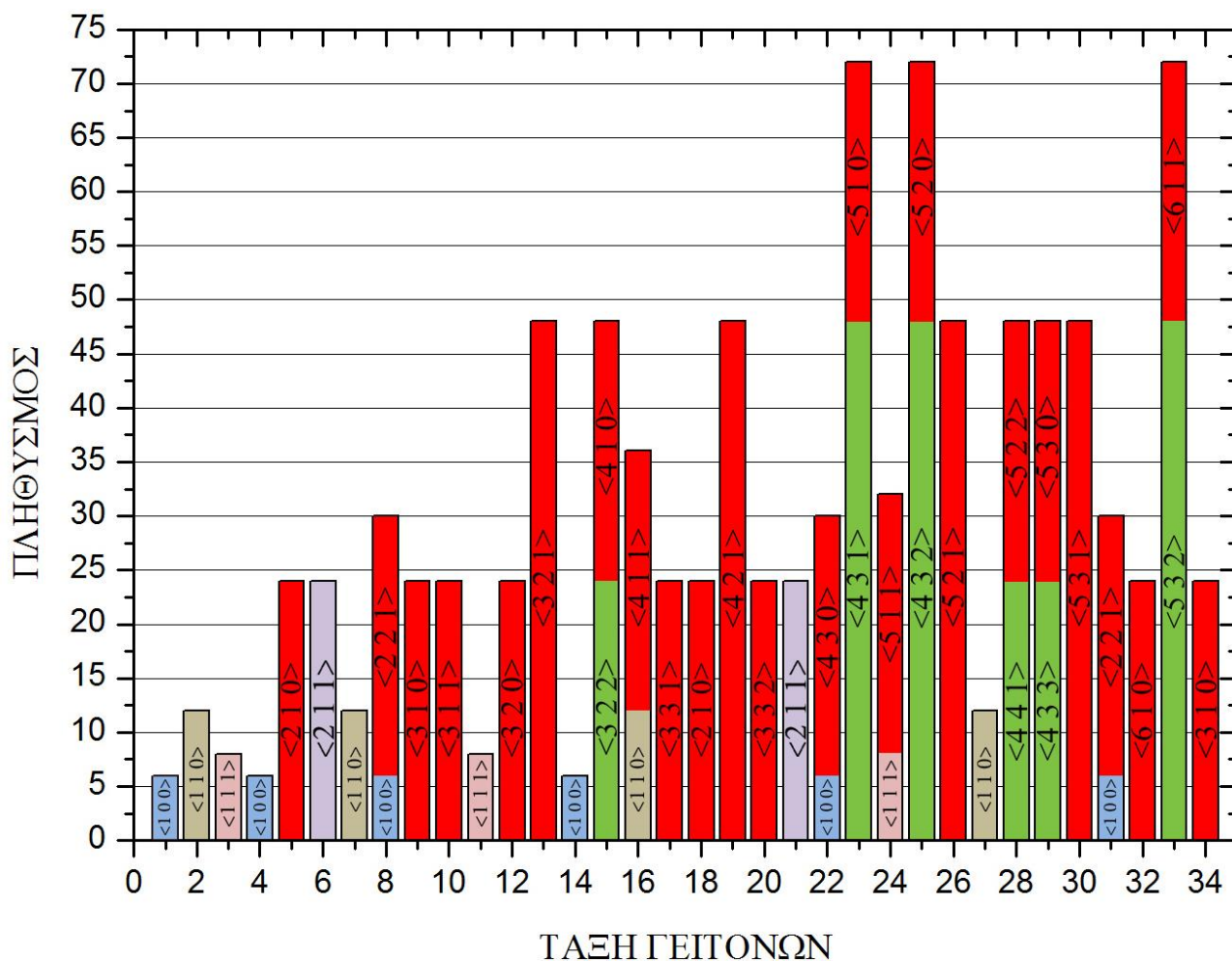
Εικόνα 14. Απλό κυβικό πλέγμα. Σχηματική αναπαράσταση σφαιρικών κελυφών γειτόνων l και $l+1$ τάξης.

Αυτό μπορεί να γενικευθεί, ορίζοντας την απόσταση μεταξύ των σφαιρικών κελύφων δύο διαδοχικών τάξεων ως την συνάρτηση $f(l) = \sqrt{l+1} - \sqrt{l}$, $l \in \mathbb{N}$ όπου για $l=0$ παίρνουμε το πλεγματο σημείο το οποίο θεωρούμε σημείο αναφοράς. Διευκρινίζεται ότι η παραπάνω συνάρτηση υπολογίζει την απόσταση μεταξύ του κελύφους μιας τάξης και του κελύφους της αμέσως επόμενης τάξης γειτόνων. Επειδή $\frac{df}{dl} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{l+1}} - \frac{1}{\sqrt{l}} \right) < 0, \forall l \in \mathbb{N}^*$ η συνάρτηση f θα είναι γνησίως φθίνουσα και η γραφική της παράσταση φαίνεται παρακάτω:

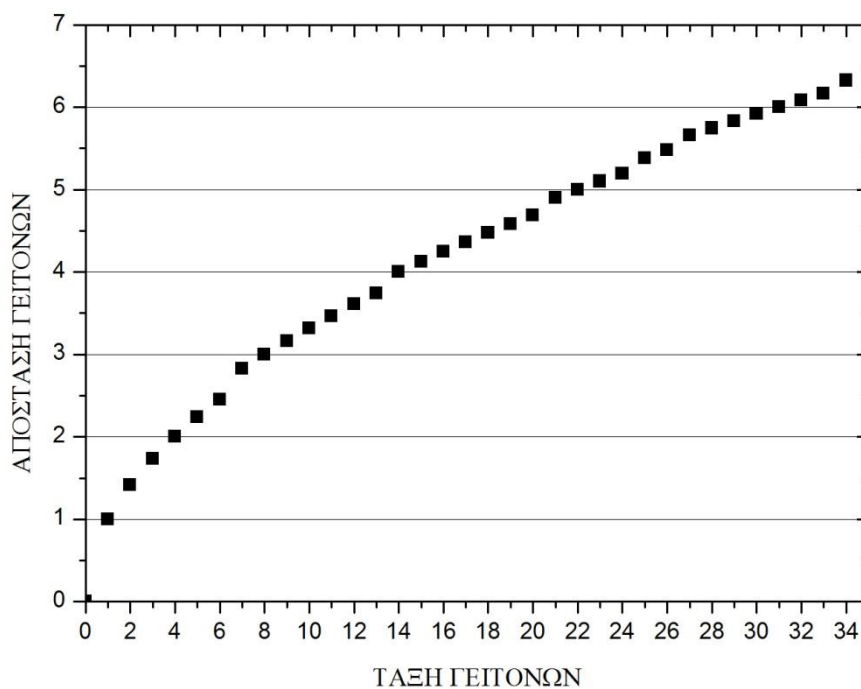


Εικόνα 15. Απλό κυβικό πλέγμα. Γραφική παράσταση της απόστασης μεταξύ δύο διαδοχικών κελυφών συναρτήσει της τάξης γειτόνων. Οι κορυφές που παρατηρούνται οφείλονται στην απουσία γειτόνων στις αποστάσεις $\sqrt{7}$, $\sqrt{15}$, $\sqrt{23}$, $\sqrt{28}$, $\sqrt{31}$ και $\sqrt{39}$.

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



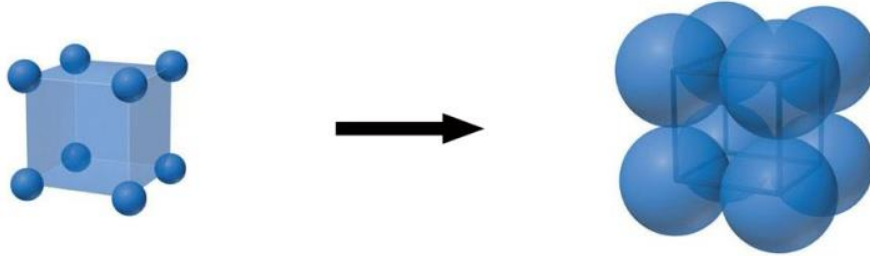
Εικόνα 16. Πληθυσμός γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο απλό κυβικό πλέγμα. Τα διαφορετικά χρώματα στις ράβδους παραπέμπουν σε γείτονες που ανήκουν σε διαφορετικό σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων.



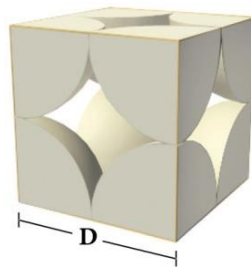
Εικόνα 17. Απόσταση γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο απλό κυβικό πλέγμα.

Κλάσμα πυκνής διατάξεως (APF) απλού κυβικού πλέγματος

Διογκώνουμε τα πλεγματικά σημεία του απλού κυβικού πλέγματος, τα οποία γίνονται σφαίρες, έως ότου ακουμπήσουν μεταξύ τους, οπότε δεν επιτρέπεται περαιτέρω διόγκωση.



Ο λόγος του κατειλημμένου από τις σκληρές σφαίρες όγκου της κυψελίδας προς τον συνολικό όγκο της ονομάζεται κλάσμα πυκνής διατάξεως, δηλαδή $APF = \frac{V_{κατ}}{V_{κυψ}}$. Παρακάτω παριστάνεται μία συμβατική κυψελίδα με τα τμήματα των σκληρών σφαιρών που βρίσκονται εντός της.

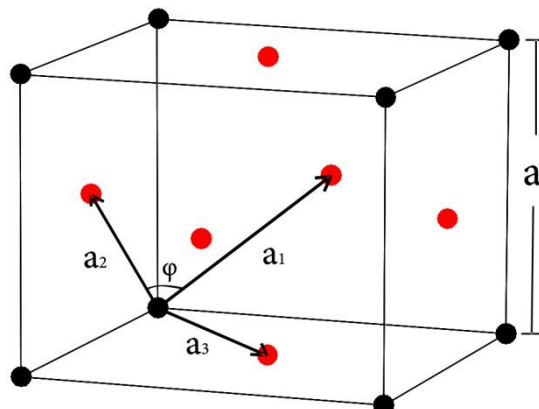


Κάθε θεμελιώδης κυψελίδα περιλαμβάνει 8 πλεγματικά σημεία, τα οποία όμως ανήκουν σε αυτήν μόνο κατά το $\frac{1}{8}$ (το $\frac{1}{8}$ κάθε σφαίρας βρίσκεται μέσα στη θεμελιώδη κυψελίδα). Εάν ονομάσουμε D τη διάμετρο των σκληρών σφαιρών (για το απλό κυβικό πλέγμα είναι $D=a=1$), τότε ο όγκος κάθε σφαίρας θα είναι $\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^3$.

$$\text{Επομένως για το απλό κυβικό πλέγμα είναι } APF_{sc} = \frac{V_{κατ}}{V_{κυψ}} = \frac{8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^3}{D^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0.52.$$

Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (face-centered cubic lattice - fcc)

Το εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc) λαμβάνεται όταν, εκτός από τα πλεγματικά σημεία στις κορυφές της θεμελιώδους κυψελίδας (μαύρες σφαίρες), η οποία φαίνεται στο διπλανό σχήμα, έχουμε πλεγματικά σημεία και στα κέντρα των εδρών (κόκκινες σφαίρες). Τα θεμελιώδη διανύσματα λαμβάνονται εάν ενώσουμε ένα πλεγματικό σημείο με τα κέντρα των προσκείμενων εδρών, οπότε εάν θέσουμε την πλεγματική σταθερά, δηλαδή την ακμή της κυβικής κυψελίδας, ίση με 1 ($a=1$), τότε τα θεμελιώδη διανύσματα θα έχουν μέτρο



Εικόνα 18. Τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (Θ.Α.Μ.) του εδροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος.

$\frac{\sqrt{2}}{2}$ και οι γωνίες που θα σχηματίζουν μεταξύ τους ανά δύο θα είναι 60° . Επομένως θα ισχύει:

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3| = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot a = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \text{και} \quad \varphi = (\hat{\vec{a}}_1, \hat{\vec{a}}_2) = (\hat{\vec{a}}_2, \hat{\vec{a}}_3) = (\hat{\vec{a}}_3, \hat{\vec{a}}_1) = 60^\circ.$$

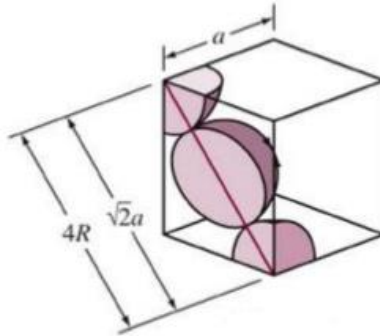
Παραθέτουμε αμέσως μετά το κομμάτι του προγράμματος στο οποίο ορίζονται τα Θ.Α.Μ., από τα οποία το πρώτο έχει μόνο yz-συνιστώσες, το δεύτερο μόνο xz-συνιστώσες και το τρίτο μόνο xy-συνιστώσες:

```

open(unit=1,file="primitive_vectors_fcc")
write(1,*) 'face centered cubic 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
a(i,j)=0.0d0
else
a(i,j)=0.5d0
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)

```

Για να δώσει το πρόγραμμα σωστά αποτελέσματα, θα πρέπει να κάνουμε και άλλη μία αλλαγή όσον αφορά τη διάμετρο σκληρών σφαιρών D . Στην περίπτωση του απλού κυβικού πλέγματος (sc), η διάμετρος σκληρών σφαιρών D ήταν ίση με την πλεγματική σταθερά a , κάτι το οποίο δεν συμβαίνει εδώ. Εάν διογκώσουμε τα πλεγματικά σημεία (σκληρές σφαίρες) έως ότου αυτές ακουμπήσουν μεταξύ τους, τότε έχουμε την παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 19. Τα πλεγματικά σημεία του πλέγματος fcc ως σκληρές σφαίρες.

Παρατηρούμε ότι $4R = \sqrt{2} \cdot a$, επομένως $D = 2R = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot a \Rightarrow D = \frac{\sqrt{2}}{2}$. Η απαραίτητη αλλαγή στο πρόγραμμα δίνεται παρακάτω:

```

write(*,*) 'distances of neighbors given by r(1) i.e. upto'
D=dsqrt(2.0d0)/2
write(*,1212) D
1212 format('diameter of hard spheres,
& D = lattice parameter (taken sqrt(2)/2 here) = ',f12.5)

```

Στη συνέχεια παρατίθεται το κομμάτι του προγράμματος, το οποίο καταγράφει τις γνωστές αποστάσεις των γειτόνων από το πλεγματικό σημείο ανά τάξη έως τους γείτονες 34^{ης} τάξης:

```

do l=1,uptonn
if (l.le.13) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l))
! Den yparxoyn geitones se apostash sqrt(28)/2
else if (l.ge.14.AND.l.le.28) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l)+1)
! Den yparxoun geitones se apostash sqrt(60)/2
else if (l.ge.29.AND.l.le.34) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l)+2)

```

```
endif
enddo
```

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_fcc")
write(7,*) 'arn given by r(1) i.e. uptonn for fcc lattice'
sum=0
do l=1,uptonn
distance=r(1)
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)
do i=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 fcc lattice
l1=k2+k3
l2=k1+k3
l3=k1+k2
lhelp=gcdthree(abs(l1),abs(l2),abs(l3))
l1=l1/lhelp; l2=l2/lhelp; l3=l3/lhelp
! Syn8hkh aplopoihshs
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

```

Δείκτες διεύθυνσης στο fcc

Στο πλέγμα fcc παρουσιάζεται ένα πρόβλημα, το οποίο δεν είχαμε συναντήσει στο απλό κυβικό πλέγμα. Στο πλέγμα sc τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως και τα μοναδιαία ανύσματα της συμβατικής κυψελίδας ταυτίζονταν, δηλαδή $l_1=k_1$, $l_2=k_2$ και $l_3=k_3$, επομένως οι αριθμοί l_1 , l_2 και l_3 ήταν εξ αρχής ακέραιοι. Στο πλέγμα fcc, όμως, το διάνυσμα θέσης είναι

$$\vec{r} = \left(\frac{k_2 + k_3}{2}, \frac{k_1 + k_3}{2}, \frac{k_1 + k_2}{2} \right)$$

όπως αναλυτικά φαίνεται παρακάτω, οπότε $l_1 = \frac{k_2 + k_3}{2}$, $l_2 = \frac{k_1 + k_3}{2}$ και $l_3 = \frac{k_1 + k_2}{2}$.

Παρατηρούμε ότι για ορισμένες τιμές των k_1, k_2, k_3 οι l_1, l_2, l_3 μπορούν να πάρουν και ημιακέραιες τιμές, γεγονός που δεν επιτρέπει τον υπολογισμό του ΜΚΔ. Γνωρίζουμε όμως ότι οι δείκτες διεύθυνσης μιας πλεγματικής ευθείας δεν μας δείχνουν τις συντεταγμένες του υπό διερεύνηση πλεγματικού σημείου, αλλά την **αναλογία** μεταξύ των συντεταγμένων. Αυτό σημαίνει

για παράδειγμα ότι η ευθεία $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$ ταυτίζεται με την ευθεία $[1 \ 1 \ 1]$. Επομένως μπορούμε να

πάρουμε $l_1 = 2 \cdot \frac{k_2 + k_3}{2} = k_2 + k_3$, $l_2 = 2 \cdot \frac{k_1 + k_3}{2} = k_1 + k_3$ και $l_3 = 2 \cdot \frac{k_1 + k_2}{2} = k_1 + k_2$,

διατηρώντας τις ίδιες σχέσεις μεταξύ των l_1, l_2, l_3 (δηλαδή έχουμε την ίδια ευθεία), αλλά με το πλεονέκτημα ότι τώρα οι l_1, l_2, l_3 είναι ακέραιοι. Τέλος, ο διπλασιασμός των εξ αρχής ακεραίων

τιμών των $\frac{k_2 + k_3}{2}$, $\frac{k_1 + k_3}{2}$ και $\frac{k_1 + k_2}{2}$ διορθώνεται με τη συνθήκη απλοποίησης

```

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

```





Εάν δηλαδή έχουμε την ευθεία $[6 \ 4 \ 2]$, αυτή μετατρέπεται μέσω της συνθήκης απλοποίησης στην ευθεία $[3 \ 2 \ 1]$, που είναι ουσιαστικά η ίδια ευθεία με απλοποιημένους δείκτες διεύθυνσης.

Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του προγράμματος, έως και την 34^η τάξη γειτόνων, για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως, την απόστασή τους από το πλεγματοεικό σημείο, καθώς και τα σύνολα πλεγματοεικών διευθύνσεων κάθε τάξης.

εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα			
ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ ΑΠΟ ΠΛΕΓΜΑΤΟΕΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ	ΣΥΝΟΛΟ ΠΛΕΓΜΑΤΟΕΙΚΩΝ ΔΙΕΥΘΥΝΣΕΩΝ
1 ^η	12	$\sqrt{2}/2 \approx 0.70711$	<1 1 0>
2 ^η	6	$\sqrt{4}/2 = 1.00000$	<1 0 0>
3 ^η	24	$\sqrt{6}/2 \approx 1.22474$	<2 1 1>
4 ^η	12	$\sqrt{8}/2 \approx 1.41421$	<1 1 0>
5 ^η	24	$\sqrt{10}/2 \approx 1.58114$	<3 1 0>
6 ^η	8	$\sqrt{12}/2 \approx 1.73205$	<1 1 1>
7 ^η	48	$\sqrt{14}/2 \approx 1.87083$	<3 2 1>
8 ^η	6	$\sqrt{16}/2 = 2.00000$	<1 0 0>
9 ^η	36	$\sqrt{18}/2 \approx 2.12132$	<1 1 0> : 12 γείτονες <4 1 1> : 24 γείτονες
10 ^η	24	$\sqrt{20}/2 \approx 2.23607$	<2 1 0>
11 ^η	24	$\sqrt{22}/2 \approx 2.34521$	<3 3 2>
12 ^η	24	$\sqrt{24}/2 \approx 2.44949$	<2 1 1>
13 ^η	72	$\sqrt{26}/2 \approx 2.54951$	<4 3 1> : 48 γείτονες <5 1 0> : 24 γείτονες
14 ^η	48	$\sqrt{30}/2 \approx 2.73861$	<5 2 1>
15 ^η	12	$\sqrt{32}/2 \approx 2.82843$	<1 1 0>
16 ^η	48	$\sqrt{34}/2 \approx 2.91548$	<4 3 3> : 24 γείτονες <5 3 0> : 24 γείτονες
17 ^η	30	$\sqrt{36}/2 = 3.00000$	<1 0 0> : 6 γείτονες <2 2 1> : 24 γείτονες
18 ^η	72	$\sqrt{38}/2 \approx 3.08221$	<5 3 2> : 48 γείτονες <6 1 1> : 24 γείτονες
19 ^η	24	$\sqrt{40}/2 \approx 3.16228$	<3 1 0>
20 ^η	48	$\sqrt{42}/2 \approx 3.24037$	<5 4 1>
21 ^η	24	$\sqrt{44}/2 \approx 3.31662$	<3 1 1>
22 ^η	48	$\sqrt{46}/2 \approx 3.39116$	<6 3 1>
23 ^η	8	$\sqrt{48}/2 \approx 3.46410$	<1 1 1>
24 ^η	84	$\sqrt{50}/2 \approx 3.53553$	<1 1 0> : 12 γείτονες <5 4 3> : 48 γείτονες <7 1 0> : 24 γείτονες
25 ^η	24	$\sqrt{52}/2 \approx 3.60555$	<3 2 0>

26 ^η	96	$\sqrt{54}/2 \approx 3.67423$	<2 1 1> : 24 γείτονες <5 5 2> : 24 γείτονες <7 2 1> : 48 γείτονες
27 ^η	48	$\sqrt{56}/2 \approx 3.74166$	<3 2 1>
28 ^η	24	$\sqrt{58}/2 \approx 3.80789$	<7 3 0>
29 ^η	96	$\sqrt{62}/2 \approx 3.93700$	<6 5 1> : 48 γείτονες <7 3 2> : 48 γείτονες
30 ^η	6	$\sqrt{64}/2 = 4.00000$	<1 0 0>
31 ^η	96	$\sqrt{66}/2 \approx 4.06202$	<5 5 4> : 24 γείτονες <7 4 1> : 48 γείτονες <8 1 1> : 24 γείτονες
32 ^η	48	$\sqrt{68}/2 \approx 4.12311$	<3 2 2> : 24 γείτονες <4 1 0> : 24 γείτονες
33 ^η	48	$\sqrt{70}/2 \approx 4.18330$	<6 5 3>
34 ^η	36	$\sqrt{72}/2 \approx 4.24264$	<1 1 0> : 12 γείτονες <4 1 1> : 24 γείτονες

Επεξήγηση χρωμάτων

-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <1 0 0>, δηλαδή στις ακμές κύβων.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <1 1 0>, δηλαδή στις διαγωνίους εδρών.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <1 1 1>, δηλαδή στις διαγωνίους κύβων.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων <2 1 1>, δηλαδή στις ευθείες που διέρχονται από τα κέντρα εδρών.

Παρατηρούμε ότι δεν υπάρχουν γείτονες σε αποστάσεις $\frac{\sqrt{28}}{2}$ και $\frac{\sqrt{60}}{2}$. Αυτό οφείλεται στον

τρόπο υπολογισμού του διανύσματος μετατοπίσεως. Αν $\vec{a}_1 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \cdot a$, $\vec{a}_2 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) \cdot a$ και

$\vec{a}_3 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) \cdot a$ τα θεμελιώδη διανύσματα μετατοπίσεως, όπου a η πλεγματική σταθερά και

k_1, k_2, k_3 ακέραιοι αριθμοί, τότε το διάνυσμα μετατοπίσεως οποιουδήποτε πλεγματικού σημείου μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, δηλαδή

$$\begin{aligned} \vec{r} &= k_1 \cdot \vec{a}_1 + k_2 \cdot \vec{a}_2 + k_3 \cdot \vec{a}_3 = k_1 \cdot (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + k_2 \cdot (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) + k_3 \cdot (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) = \\ &= \frac{1}{2} \cdot (k_2 + k_3, k_1 + k_3, k_1 + k_2) \end{aligned}$$

Το μέτρο του διανύσματος μετατοπίσεως θα είναι τότε

$$|\vec{r}| = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{(k_2 + k_3)^2 + (k_1 + k_3)^2 + (k_1 + k_2)^2} = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 + (k_1 + k_2 + k_3)^2}$$

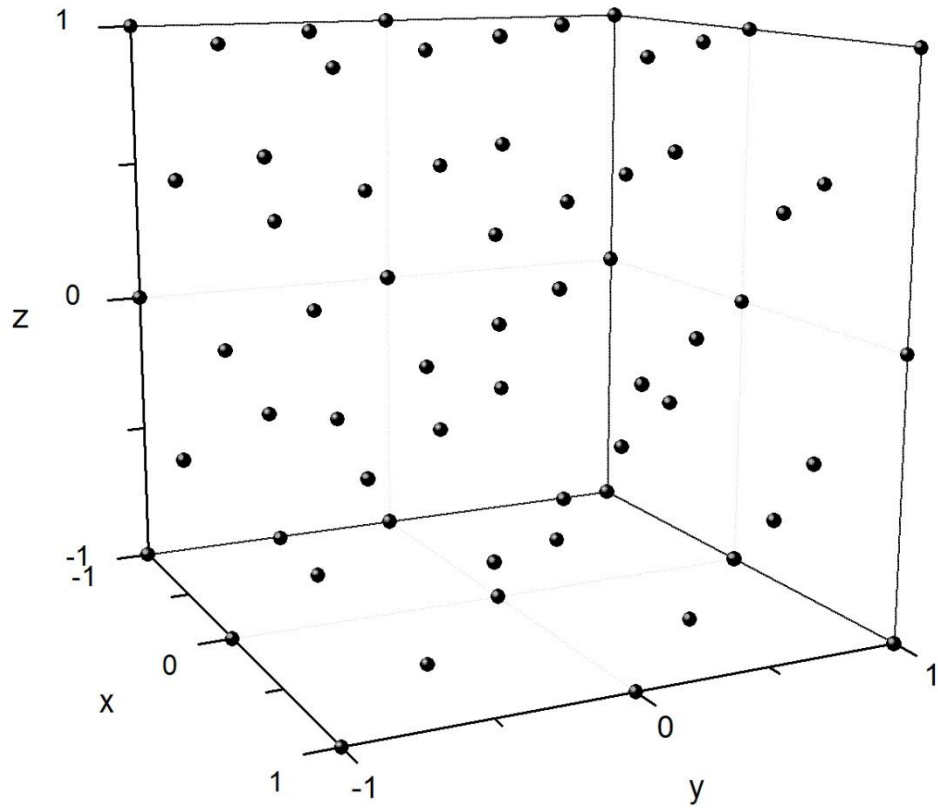
Παρατηρούμε ότι το άθροισμα $k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 + (k_1 + k_2 + k_3)^2$ δεν μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή (π.χ. 28, 60 κλπ).

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται, έως και την 4^η τάξη γειτόνων, τα μέτρα των διανυσμάτων θέσης, οι πλεγματικές ευθείες και το σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων για κάθε τριάδα των ακεραίων k_1, k_2, k_3 .

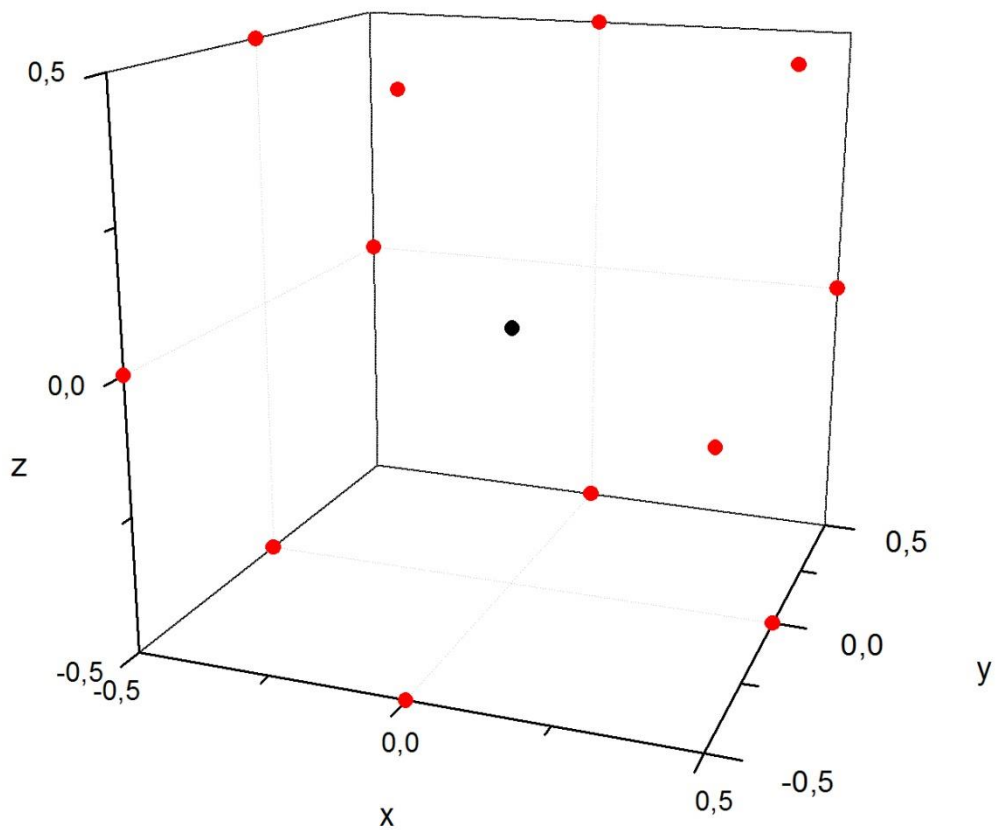
εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα						
k_1	k_2	k_3	r	Πλεγματική ευθεία	Σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων	
1	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	[0 1 1]	<1 1 0>	1 ^η τάξη γειτόνων 12 γείτονες
0	1	0		[1 0 1]		
0	0	1		[1 1 0]		
-1	0	0		[0 $\bar{1}$ $\bar{1}$]		
0	-1	0		[$\bar{1}$ 0 $\bar{1}$]		
0	0	-1		[$\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]		
1	-1	0		[$\bar{1}$ 1 0]		
1	0	-1		[$\bar{1}$ 0 1]		
0	1	-1		[0 $\bar{1}$ 1]		
0	-1	1		[0 1 $\bar{1}$]		
-1	1	0		[1 $\bar{1}$ 0]		
-1	0	1		[1 0 $\bar{1}$]		
1	1	-1	1	[0 0 1]	<1 0 0>	2 ^η τάξη γειτόνων 6 γείτονες
1	-1	1		[0 1 0]		
-1	1	1		[1 0 0]		
-1	-1	1		[0 0 $\bar{1}$]		
-1	1	-1		[0 $\bar{1}$ 0]		
1	-1	-1		[$\bar{1}$ 0 0]		
2	-1	0	$\frac{\sqrt{6}}{2}$	[$\bar{1}$ 2 1]	<2 1 1>	3 ^η τάξη γειτόνων 24 γείτονες
2	0	-1		[$\bar{1}$ 1 2]		
-1	2	0		[2 $\bar{1}$ 1]		
-1	0	2		[2 1 $\bar{1}$]		
0	2	-1		[1 $\bar{1}$ 2]		
0	-1	2		[1 2 $\bar{1}$]		
-2	1	0		[1 2 $\bar{1}$]		
-2	0	1		[1 $\bar{1}$ 2]		

0	-2	1		$[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$		
0	1	-2		$[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$		
1	-2	0		$[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$		
1	0	-2		$[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$		
2	-1	-1		$[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$		
-1	2	-1		$[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$		
-1	-1	2		$[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$		
-2	1	1		$[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$		
1	-2	1		$[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$		
1	1	-2		$[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$		
1	1	0		$[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$		
1	0	1		$[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$		
0	1	1		$[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$		
-1	-1	0		$[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$		
-1	0	-1		$[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$		
0	-1	-1		$[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$		
2	0	0	$[0\bar{1}\bar{1}]$	$\sqrt{2}$	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	4 ^η τάξη γειτόνων 12 γείτονες
0	2	0	$[1\bar{0}\bar{1}]$			
0	0	2	$[1\bar{1}\bar{0}]$			
-2	0	0	$[0\bar{1}\bar{1}]$			
0	-2	0	$[\bar{1}\bar{0}\bar{1}]$			
0	0	-2	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$			
2	-2	0	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$			
2	0	-2	$[\bar{1}\bar{0}\bar{1}]$			
-2	2	0	$[1\bar{1}\bar{0}]$			
-2	0	2	$[1\bar{0}\bar{1}]$			
0	2	-2	$[0\bar{1}\bar{1}]$			
0	-2	2	$[0\bar{1}\bar{1}]$			

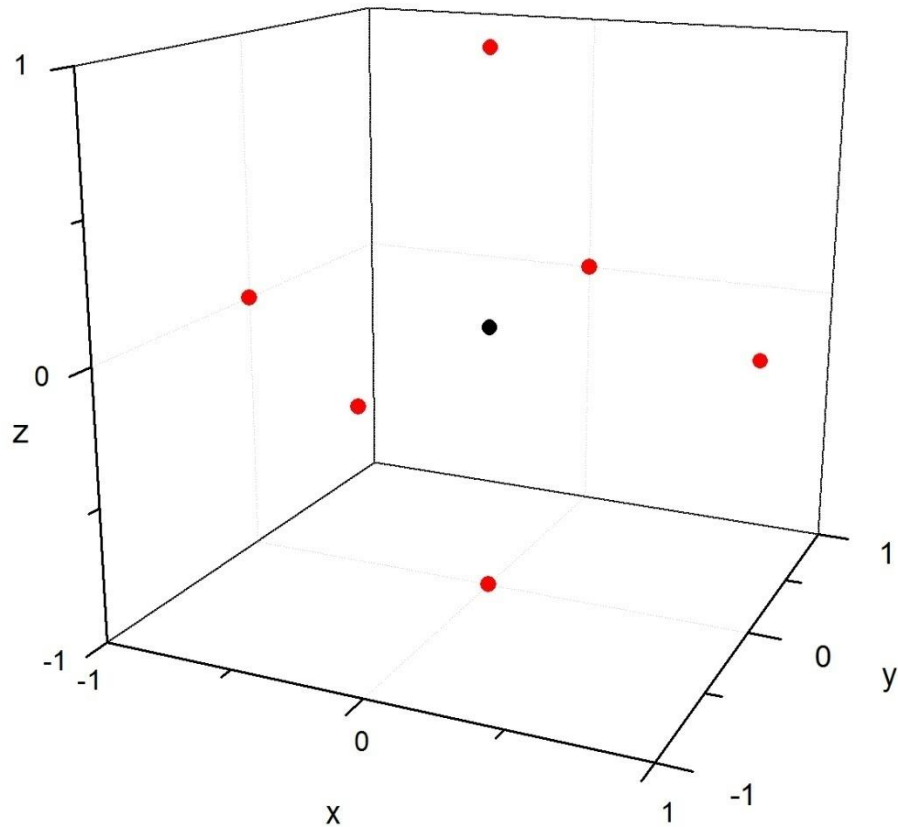
Παρακάτω παρουσιάζονται η γραφική απεικόνιση του εδροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος (Εικόνα 20), η διάταξη των γειτόνων της 1^{ης} έως την 4^η τάξη ξεχωριστά (Εικόνες 21, 22, 23, 24) και έπειτα οι ομαδοποιημένες διατάξεις των γειτόνων τάξεως 1 έως 4, 5 έως 10, 11 έως 15, 16 έως 20, 21 έως 25, 26 έως 30 και 31 έως 34 (Εικόνες 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31).



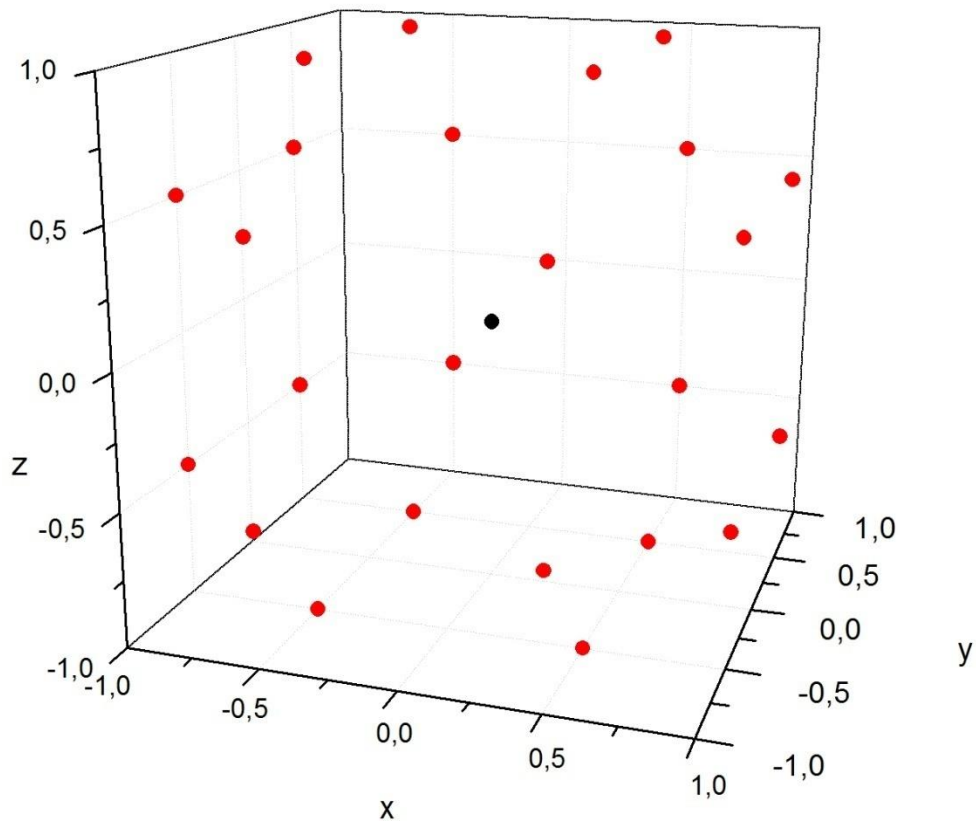
Εικόνα 20. Γενική άποψη του εδροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος (face centered cubic lattice - fcc).



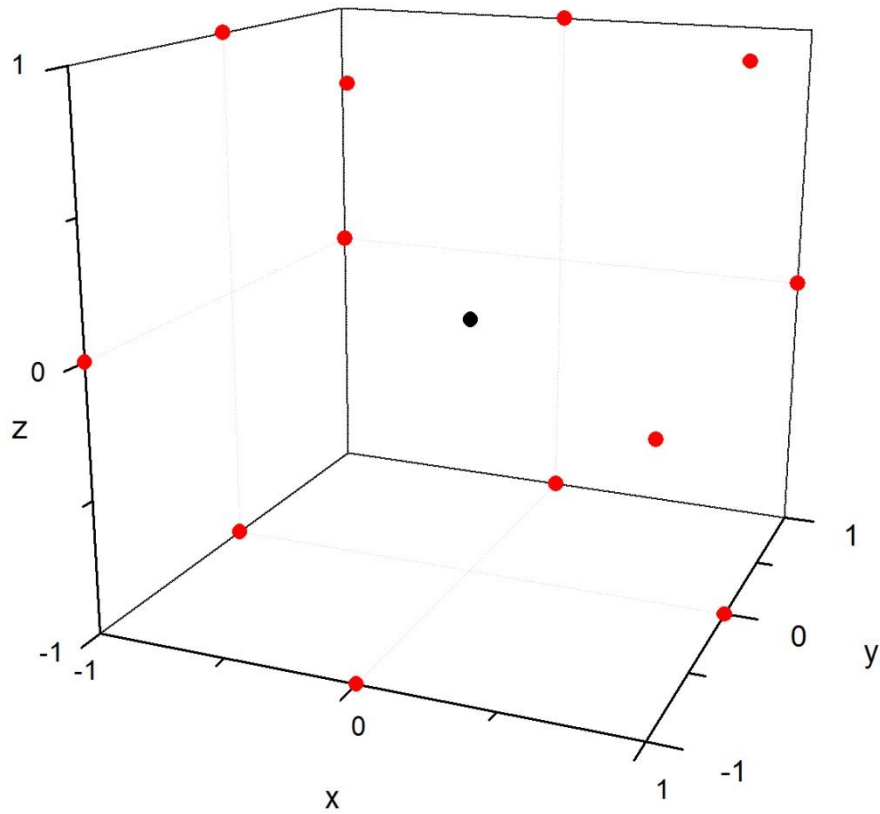
Εικόνα 21. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 1ης τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση $(0,0,0)$, δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



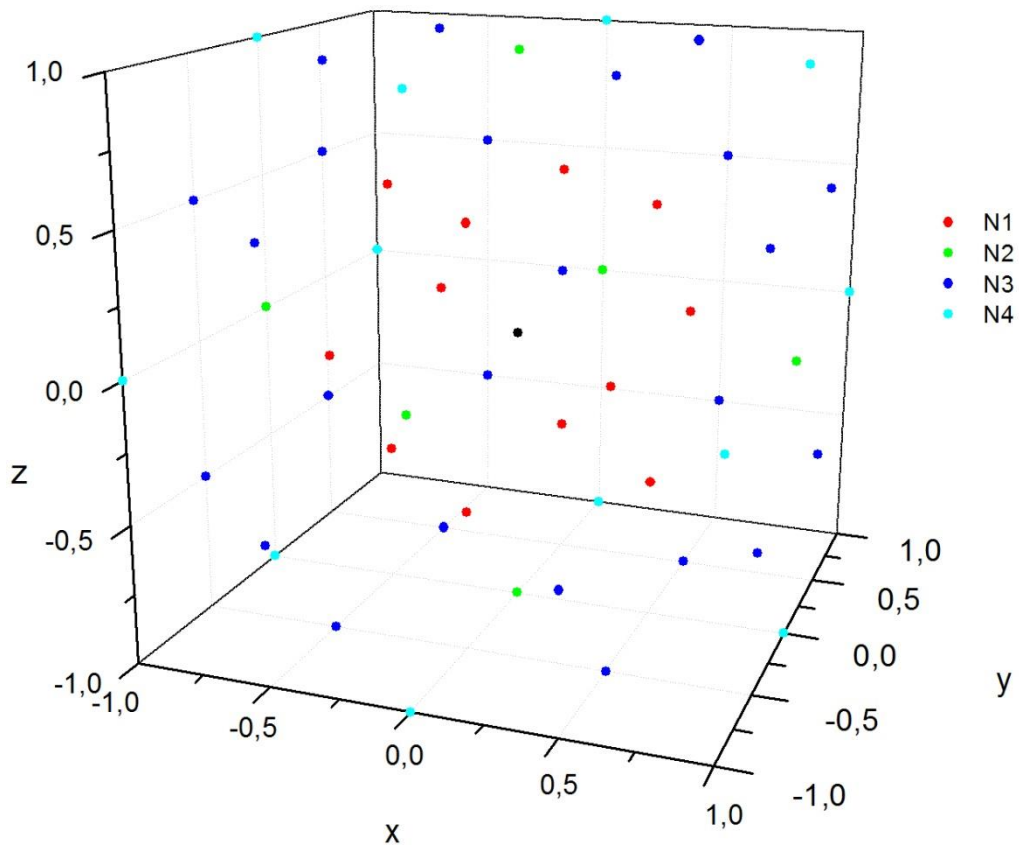
Εικόνα 22. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 2^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



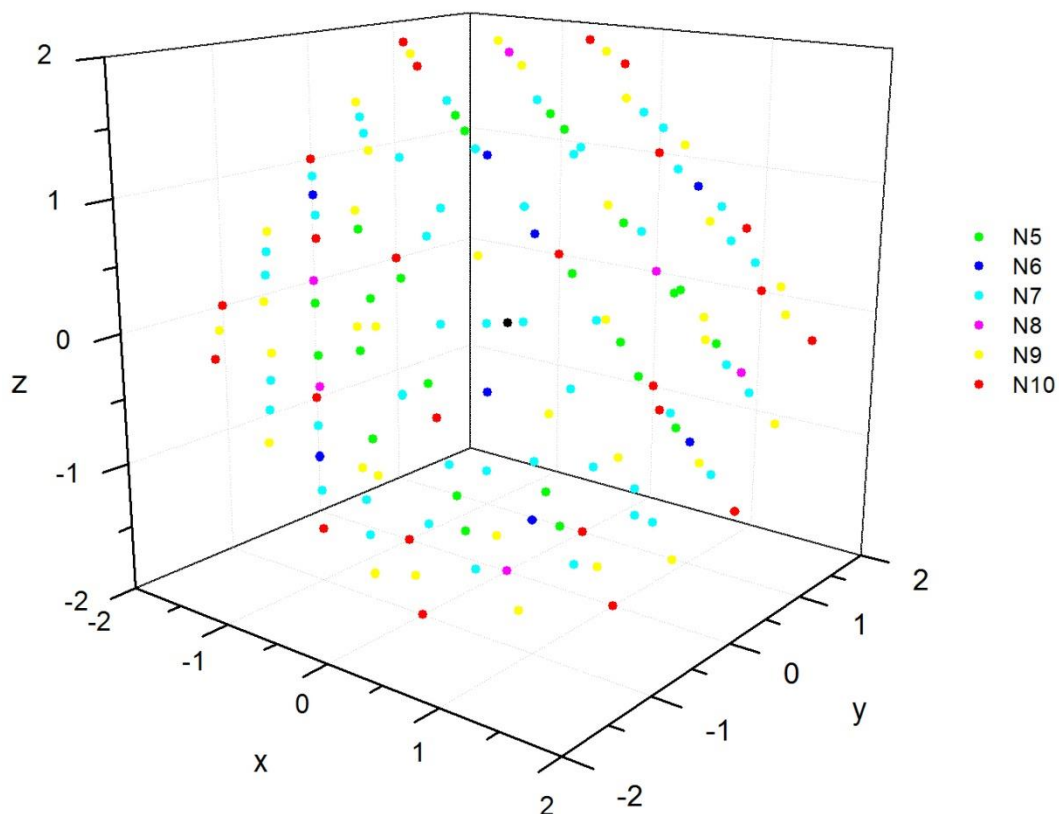
Εικόνα 23. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 3^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



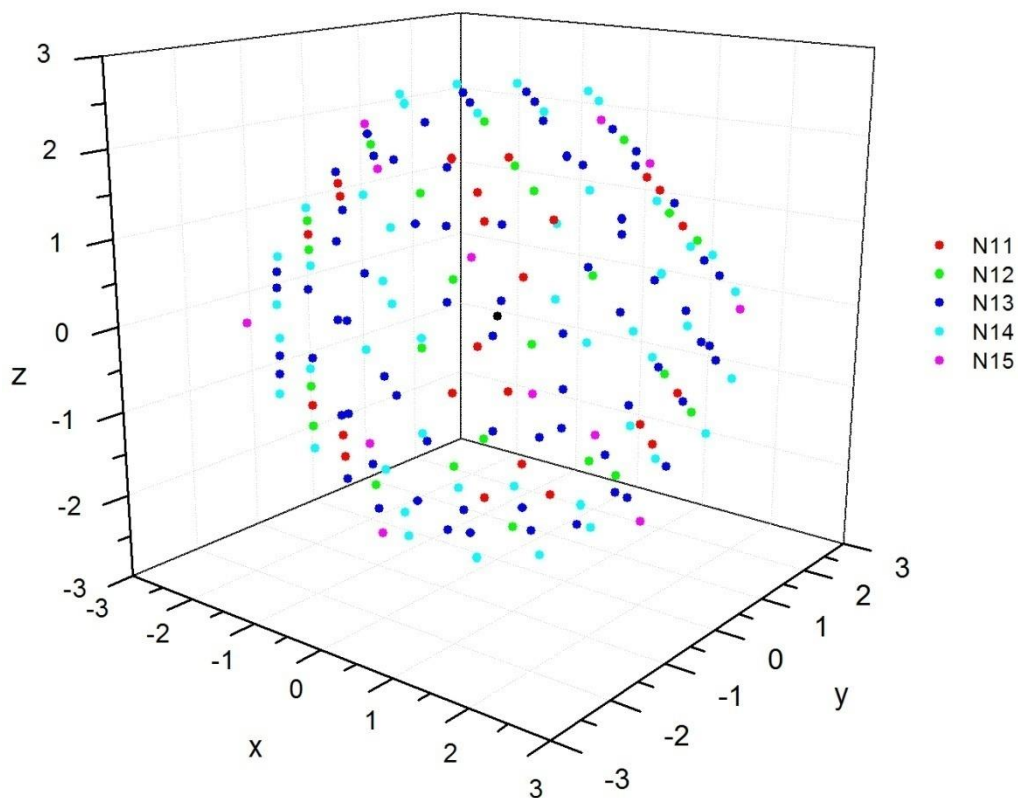
Εικόνα 24. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 4^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



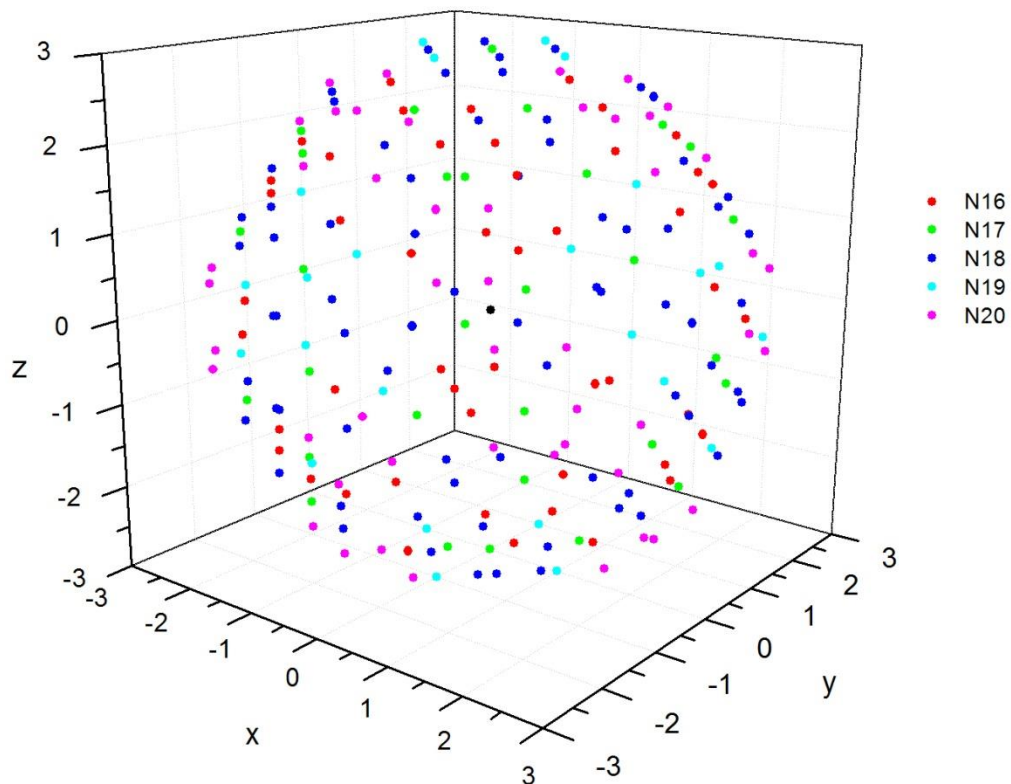
Εικόνα 25. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 1^{ης} έως 4^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



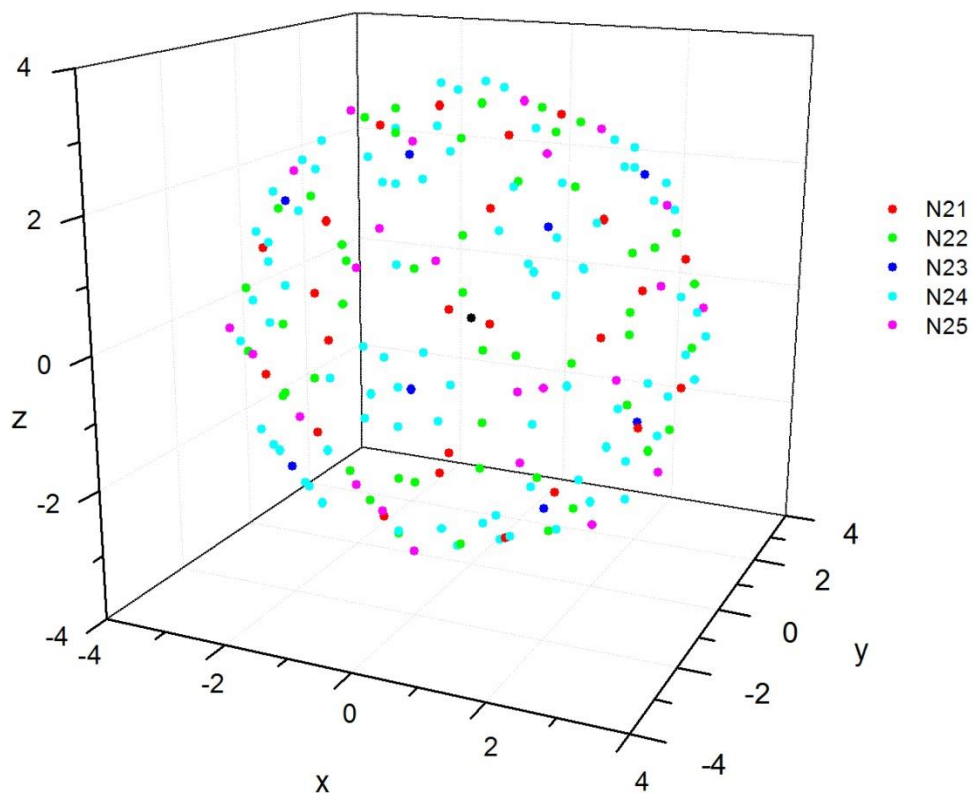
Εικόνα 26. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 5^{ης} έως 10^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



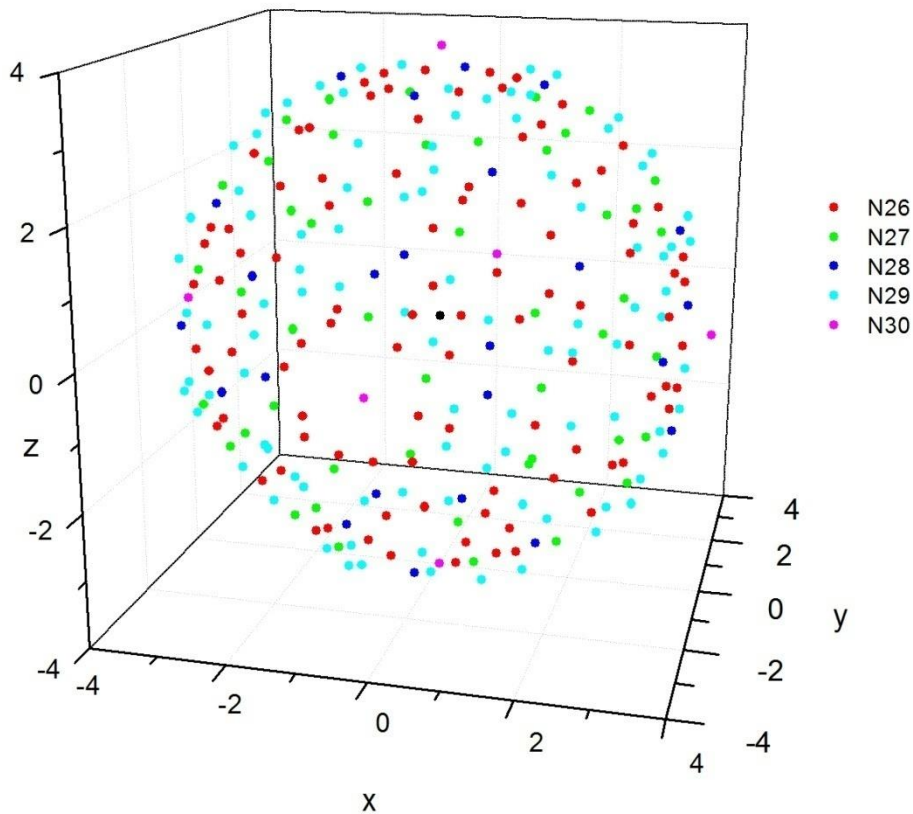
Εικόνα 27. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 11^{ης} έως 15^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



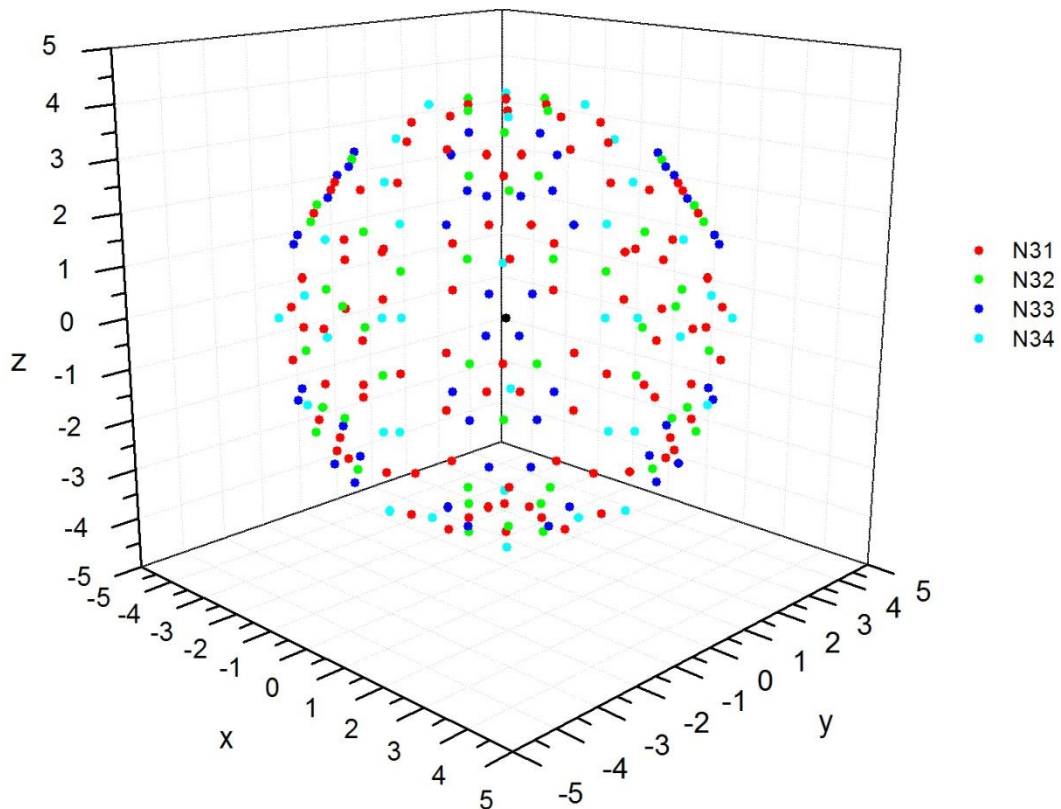
Εικόνα 28. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 16^{ης} έως 20^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



Εικόνα 29. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 21^{ης} έως 25^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

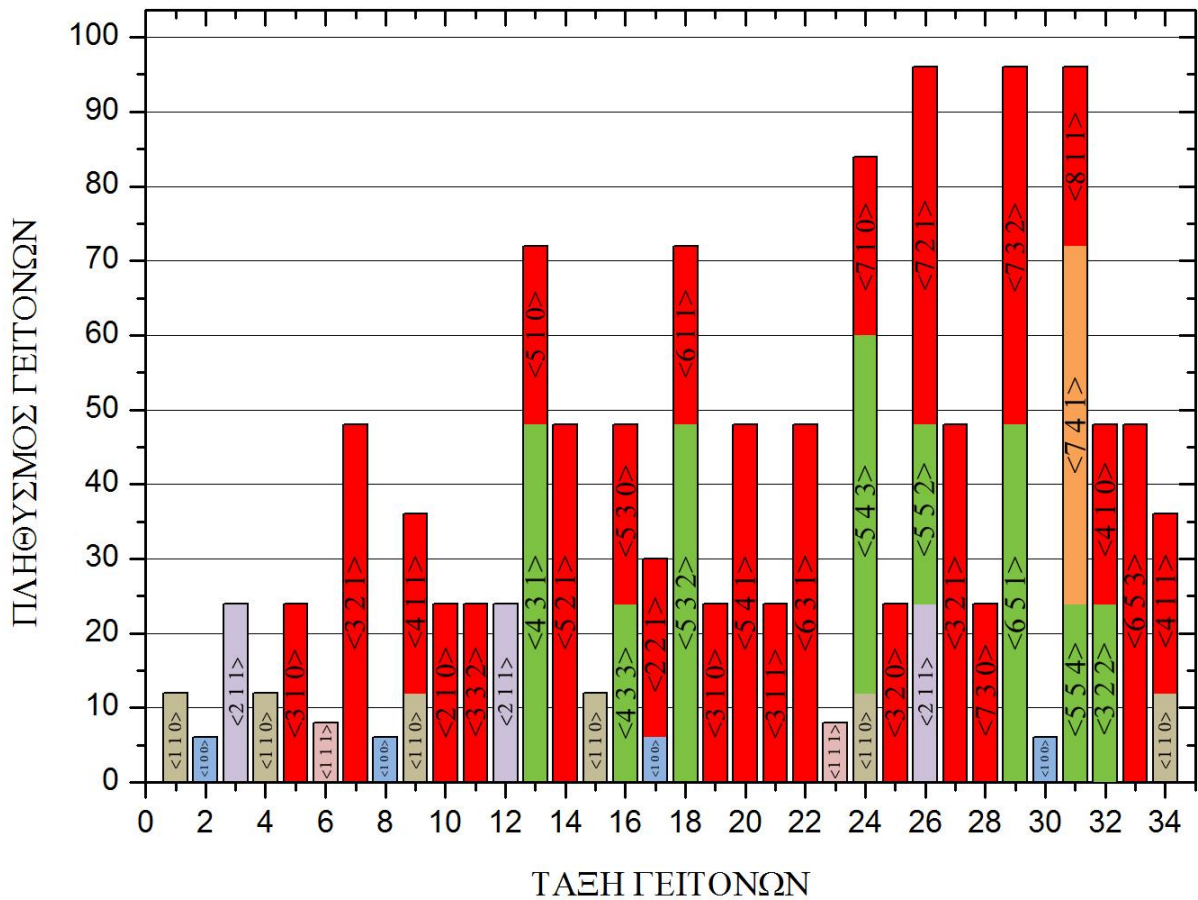


Εικόνα 30. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 26^{ης} έως 30^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

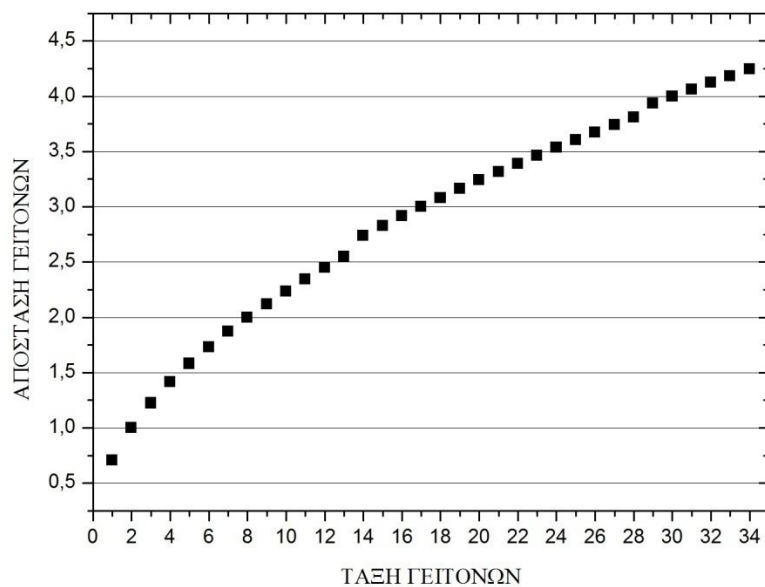


Εικόνα 31. Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 31^{ης} έως 34^{ης} τάξης γύρω από πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

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



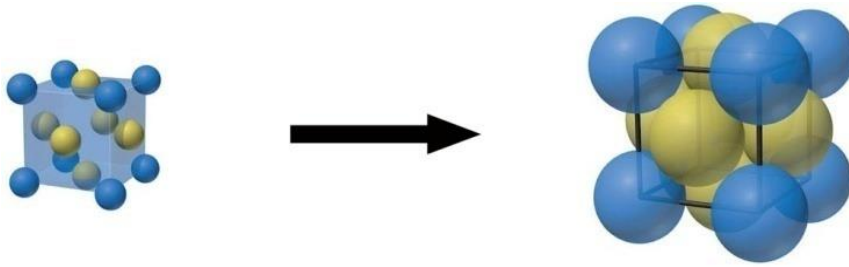
Εικόνα 32. Πληθυσμός γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Τα διαφορετικά χρώματα στις ράβδους υποδηλώνουν γείτονες που ανήκουν σε διαφορετικά σύνολα πλεγματοκών διευθύνσεων.



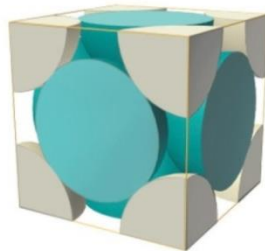
Εικόνα 33. Απόσταση γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα.

Κλάσμα πυκνής διατάξεως (APF) του εδροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος

Διογκώνουμε τα πλεγματικά σημεία του εδροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος, έως ότου ακουμπήσουν μεταξύ τους, οπότε δεν επιτρέπεται περαιτέρω διόγκωση.



Παρακάτω παριστάνεται μία θεμελιώδης κυψελίδα με τα τμήματα των σκληρών σφαιρών που βρίσκονται εντός της.



Παρατηρούμε ότι εντός της θεμελιώδους κυψελίδας υπάρχουν 8 λευκά κομμάτια, το καθένα από τα οποία αποτελεί το $\frac{1}{8}$ μιας σφαίρας, δηλαδή από τα λευκά κομμάτια έχουμε $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ σφαίρα, ενώ υπάρχουν 6 γαλάζια κομμάτια, το καθένα από τα οποία αποτελεί το $\frac{1}{2}$ μιας σφαίρας, οπότε από τα γαλάζια κομμάτια έχουμε $6 \cdot \frac{1}{2} = 3$ σφαίρες. Συνολικά μέσα στην κυψελίδα υπάρχουν 4 σφαίρες.

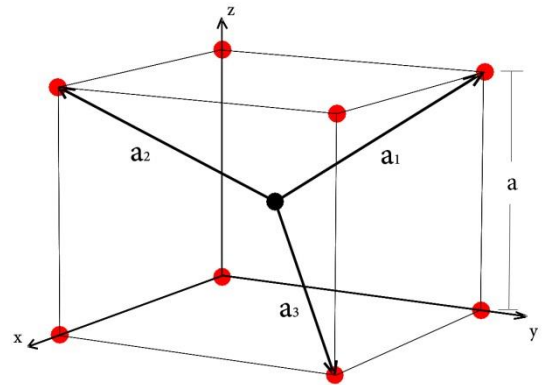
Παραπάνω έχουμε αναφέρει ότι στην περίπτωση του πλέγματος fcc η διάμετρος των σκληρών σφαιρών είναι $D = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot a$, επομένως ο όγκος κάθε σφαίρας θα είναι $V_{\sigma\phi} = \frac{4}{3} \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^3$ και το κλάσμα πυκνής διατάξεως για το fcc είναι

$$APF_{fcc} = \frac{V_{κατ}}{V_{κυψ}} = \frac{4 \cdot V_{\sigma\phi}}{V_{κυψ}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\frac{2}{3} \pi \cdot \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \cdot a\right)^3}{a^3} = \frac{(\sqrt{2})^3}{12} \cdot \pi \approx 0,74$$

Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (body-centered cubic lattice - bcc)

Το χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (bcc) λαμβάνεται όταν, εκτός από τα πλεγματικά σημεία στις κορυφές της συμβατικής κυψελίδας, έχουμε και ένα πλεγματικό σημείο στο κέντρο του κύβου (μαύρη σφαίρα).

Τα θεμελιώδη ανύσματα λαμβάνονται εάν ενώσουμε το πλεγματικό στο κέντρο του κύβου με τρία διαγώνια, ανά δύο, πλεγματικά σημεία στις κορυφές του κύβου, οπότε εάν θέσουμε την πλεγματική σταθερά, δηλαδή την ακμή της κυβικής



Εικόνα 34. Τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (Θ.Α.Μ.) του χωροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος.

κυψελίδας, ίση με 1 ($a=1$), το μέτρο του κάθε Θ.Α.Μ. θα είναι $\frac{\sqrt{3}}{2}$ και η γωνία που σχηματίζουν τα

Θ.Α.Μ. ανά δύο είναι $109^\circ 28'$. Επομένως θα ισχύει:

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3| = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad \text{και} \quad (\vec{a}_1, \vec{a}_2) = (\vec{a}_2, \vec{a}_3) = (\vec{a}_3, \vec{a}_1) = 109^\circ 28'.$$

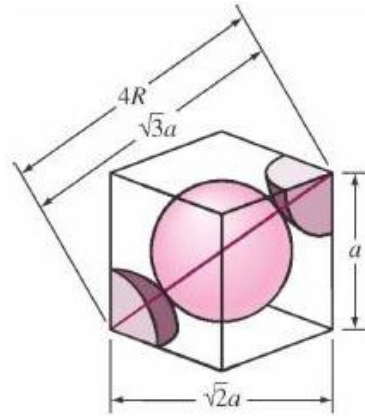
Παραθέτουμε αμέσως μετά το κομμάτι του προγράμματος στο οποίο ορίζονται τα Θ.Α.Μ.:

```

open(unit=1, file="primitive_vectors_bcc")
write(1,*) 'body centered cubic 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
a(i,j)=-0.5d0
else
a(i,j)=0.5d0
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)

```

Για τον προσδιορισμό της διαμέτρου σκληρών σφαιρών D στο bcc εργαζόμαστε όπως ακριβώς και στο πλέγμα fcc. Εάν διογκώσουμε τα πλεγματικά σημεία (σκληρές σφαίρες) έως ότου αυτές ακουμπήσουν μεταξύ τους, τότε θα έχουμε την παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 35. Τα πλεγματικά σημεία του πλέγματος bcc ως σκληρές σφαίρες.

Παρατηρούμε ότι $4R = \sqrt{3} \cdot a$, επομένως $D = 2R = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a$. Η αλλαγή του D στο πρόγραμμα

δίνεται παρακάτω:

```

write(*,*) 'distances of neighbors given by r(1) i.e. upto n'
D=dsqrt(3.0d0)/2
write(*,1212) D
1212 format('diameter of hard spheres,
& D = lattice parameter (sqrt(3)/2) = ',f12.5)

```

Στη συνέχεια παρατίθεται το κομμάτι του προγράμματος, το οποίο καταγράφει τις γνωστές αποστάσεις των γειτόνων από το πλεγματικό σημείο ανά τάξη έως τους γείτονες $34^{η}$ τάξης:

```

!      Oi apostaseis ακολουθουν τον κανονα +3-->+12-->+9-->...
r(1)=D*dsqrt(9.0d0)/3
r(2)=D*dsqrt(12.0d0)/3
r(3)=D*dsqrt(24.0d0)/3
r(4)=D*dsqrt(33.0d0)/3
r(5)=D*dsqrt(36.0d0)/3
r(6)=D*dsqrt(48.0d0)/3
r(7)=D*dsqrt(57.0d0)/3
r(8)=D*dsqrt(60.0d0)/3
r(9)=D*dsqrt(72.0d0)/3
r(10)=D*dsqrt(81.0d0)/3

```

```

! Den yparxoun geitones se apostash D*sqrt(84)/3
r(11)=D*dsqrt(96.0d0)/3
r(12)=D*dsqrt(105.0d0)/3
r(13)=D*dsqrt(108.0d0)/3
r(14)=D*dsqrt(120.0d0)/3
r(15)=D*dsqrt(129.0d0)/3
r(16)=D*dsqrt(132.0d0)/3
r(17)=D*dsqrt(144.0d0)/3
r(18)=D*dsqrt(153.0d0)/3
r(19)=D*dsqrt(156.0d0)/3
r(20)=D*dsqrt(168.0d0)/3
r(21)=D*dsqrt(177.0d0)/3
! Den yparxoun geitones se apostash D*sqrt(192)/3
r(22)=D*dsqrt(192.0d0)/3
r(23)=D*dsqrt(201.0d0)/3
r(24)=D*dsqrt(204.0d0)/3
r(25)=D*dsqrt(216.0d0)/3
r(26)=D*dsqrt(225.0d0)/3
r(27)=D*dsqrt(228.0d0)/3
r(28)=D*dsqrt(240.0d0)/3
r(29)=D*dsqrt(249.0d0)/3
r(30)=D*dsqrt(252.0d0)/3
r(31)=D*dsqrt(264.0d0)/3
r(32)=D*dsqrt(273.0d0)/3
! Den yparxoun geitones se apostash D*sqrt(276)/3
r(33)=D*dsqrt(288.0d0)/3
r(34)=D*dsqrt(297.0d0)/3

```

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_fcc")
write(7,*) 'arn given by r(1) i.e. uptonn for bcc 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)
do i=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 bcc lattice
l1=-k1+k2+k3
l2=k1-k2+k3
l3=k1+k2-k3
lhelph=gcdthree(abs(l1),abs(l2),abs(l3))
l1=l1/lhelph; l2=l2/lhelph; l3=l3/lhelph
! Syn8hkh aplopoihshs
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

```

Δείκτες διεύθυνσης στο πλέγμα bcc

Επειδή στο πλέγμα bcc το διάνυσμα θέσης είναι $\vec{r} = \left(\frac{-k_1 + k_2 + k_3}{2}, \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2}, \frac{k_1 + k_2 - k_3}{2} \right)$,





όπως αναλυτικά φαίνεται παρακάτω, δημιουργείται το ίδιο πρόβλημα με τις ημιακέραιες τιμές των l_1, l_2, l_3 , όπως είδαμε και στο πλέγμα fcc. Θα εφαρμόσουμε την ίδια τεχνική, δηλαδή διπλασιασμό των τιμών, έτσι ώστε να μπορέσουμε να βρούμε τον ΜΚΔ.

Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του προγράμματος, έως και την 34^η τάξη γειτόνων, για τον αριθμό των γειτόνων, την απόστασή τους από το πλεγματοικό σημείο, καθώς και τα σύνολα πλεγματοικών διευθύνσεων των γειτόνων κάθε τάξης. Υπενθυμίζεται ότι η πλεγματοική σταθερά είναι $a=1$ και η διάμετρος σκληρών σφαιρών $D = \frac{\sqrt{3}}{2}$.

χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα			
ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ ΑΠΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ	ΣΥΝΟΛΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΩΝ ΔΙΕΥΘΥΝΣΕΩΝ
1 ^η	8	$\sqrt{3}/2 = D \cdot \sqrt{9}/3 \approx 0.86603$	<1 1 1>
2 ^η	6	$\sqrt{4}/2 = D \cdot \sqrt{12}/3 = 1.00000$	<1 0 0>
3 ^η	12	$\sqrt{8}/2 = D \cdot \sqrt{24}/3 \approx 1.41421$	<1 1 0>
4 ^η	24	$\sqrt{11}/2 = D \cdot \sqrt{33}/3 \approx 1.65831$	<3 1 1>
5 ^η	8	$\sqrt{12}/2 = D \cdot \sqrt{36}/3 \approx 1.73205$	<1 1 1>
6 ^η	6	$\sqrt{16}/2 = D \cdot \sqrt{48}/3 = 2.00000$	<1 0 0>
7 ^η	24	$\sqrt{19}/2 = D \cdot \sqrt{57}/3 \approx 2.17945$	<3 3 1>
8 ^η	24	$\sqrt{20}/2 = D \cdot \sqrt{60}/3 \approx 2.23607$	<2 1 0>
9 ^η	24	$\sqrt{24}/2 = D \cdot \sqrt{72}/3 \approx 2.44949$	<2 1 1>
10 ^η	32	$\sqrt{27}/2 = D \cdot \sqrt{81}/3 \approx 2.59808$	<1 1 1> : 8 γείτονες <5 1 1> : 24 γείτονες
11 ^η	12	$\sqrt{32}/2 = D \cdot \sqrt{96}/3 \approx 2.82843$	<1 1 0>
12 ^η	48	$\sqrt{35}/2 = D \cdot \sqrt{105}/3 \approx 2.95804$	<5 3 1>
13 ^η	30	$\sqrt{36}/2 = D \cdot \sqrt{108}/3 = 3.00000$	<1 0 0> : 6 γείτονες <2 2 1> : 24 γείτονες
14 ^η	24	$\sqrt{40}/2 = D \cdot \sqrt{120}/3 \approx 3.16228$	<3 1 0>
15 ^η	24	$\sqrt{43}/2 = D \cdot \sqrt{129}/3 \approx 3.27872$	<5 3 3>
16 ^η	24	$\sqrt{44}/2 = D \cdot \sqrt{132}/3 \approx 3.31662$	<3 1 1>
17 ^η	8	$\sqrt{48}/2 = D \cdot \sqrt{144}/3 \approx 3.46410$	<1 1 1>
18 ^η	48	$\sqrt{51}/2 = D \cdot \sqrt{153}/3 \approx 3.57071$	<5 5 1> : 24 γείτονες <7 1 1> : 24 γείτονες
19 ^η	24	$\sqrt{52}/2 = D \cdot \sqrt{156}/3 \approx 3.60555$	<3 2 0>
20 ^η	48	$\sqrt{56}/2 = D \cdot \sqrt{168}/3 \approx 3.74166$	<3 2 1>
21 ^η	72	$\sqrt{59}/2 = D \cdot \sqrt{177}/3 \approx 3.84057$	<5 5 3> : 24 γείτονες <7 3 1> : 48 γείτονες
22 ^η	6	$\sqrt{64}/2 = D \cdot \sqrt{192}/3 = 4.00000$	<1 0 0>
23 ^η	24	$\sqrt{67}/2 = D \cdot \sqrt{201}/3 \approx 4.09268$	<7 3 3>
24 ^η	48	$\sqrt{68}/2 = D \cdot \sqrt{204}/3 \approx 4.12311$	<3 2 2> : 24 γείτονες <4 1 0> : 24 γείτονες
25 ^η	36	$\sqrt{72}/2 = D \cdot \sqrt{216}/3 \approx 4.24264$	<1 1 0> : 12 γείτονες <4 1 1> : 24 γείτονες
26 ^η	56	$\sqrt{75}/2 = D \cdot \sqrt{225}/3 \approx 4.33013$	<1 1 1> : 8 γείτονες <7 5 1> : 48 γείτονες
27 ^η	24	$\sqrt{76}/2 = D \cdot \sqrt{228}/3 \approx 4.35890$	<3 3 1>
28 ^η	24	$\sqrt{80}/2 = D \cdot \sqrt{240}/3 \approx 4.47214$	<2 1 0>
29 ^η	72	$\sqrt{83}/2 = D \cdot \sqrt{249}/3 \approx 4.55522$	<7 5 3> : 48 γείτονες <9 1 1> : 24 γείτονες
30 ^η	48	$\sqrt{84}/2 = D \cdot \sqrt{252}/3 \approx 4.58258$	<4 2 1>
31 ^η	24	$\sqrt{88}/2 = D \cdot \sqrt{264}/3 \approx 4.69042$	<3 3 2>

32 ⁿ	48	$\frac{\sqrt{91}}{2} = D \cdot \frac{\sqrt{273}}{3} \approx 4.76970$	$\langle 9\ 3\ 1 \rangle$
33 ⁿ	24	$\frac{\sqrt{96}}{2} = D \cdot \frac{\sqrt{288}}{3} \approx 4.89898$	$\langle 2\ 1\ 1 \rangle$
34 ⁿ	72	$\frac{\sqrt{99}}{2} = D \cdot \frac{\sqrt{297}}{3} \approx 4.97494$	$\langle 3\ 1\ 1 \rangle$: 24 γείτονες $\langle 7\ 5\ 5 \rangle$: 24 γείτονες $\langle 7\ 7\ 1 \rangle$: 24 γείτονες

Επεξήγηση χρωμάτων

-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων $\langle 1\ 0\ 0 \rangle$, δηλαδή στις ακμές κύβων.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$, δηλαδή στις διαγωνίους εδρών.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$, δηλαδή στις διαγωνίους κύβων.
-  : Γείτονες που ανήκουν στο σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων $\langle 2\ 1\ 1 \rangle$, δηλαδή στις ευθείες που διέρχονται από τα κέντρα εδρών.

Παρατηρούμε ότι, ενώ στα πλέγματα sc και fcc η απόσταση των γειτόνων από δεδομένο πλεγματικό σημείο ήταν συνάρτηση της τάξεως, στο πλέγμα bcc δεν συμβαίνει το ίδιο. Εδώ διαπιστώνουμε μία όμορφη αλληλουχία αριθμών με τον εξής κανόνα: όσον αφορά τις αποστάσεις από πλεγματικό σημείο που δεν έχουμε εισάγει το D, οι υπόρριζες ποσότητες αυξάνονται με τον κανόνα $+1 \rightarrow +4 \rightarrow +3$, για παράδειγμα

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \xrightarrow{+1} \frac{\sqrt{4}}{2} \xrightarrow{+4} \frac{\sqrt{8}}{2} \xrightarrow{+3} \frac{\sqrt{11}}{2} \xrightarrow{+1} \frac{\sqrt{12}}{2} \xrightarrow{+4} \frac{\sqrt{16}}{2} \xrightarrow{+3} \frac{\sqrt{19}}{2} \rightarrow \dots$$

ενώ όσον αφορά τις αποστάσεις από πλεγματικό σημείο που έχουμε εισάγει το D, οι υπόρριζες ποσότητες αυξάνονται με τον κανόνα $+3 \rightarrow +12 \rightarrow +9$, για παράδειγμα

$$\frac{\sqrt{9}}{3} \xrightarrow{+3} \frac{\sqrt{12}}{3} \xrightarrow{+12} \frac{\sqrt{24}}{3} \xrightarrow{+9} \frac{\sqrt{33}}{3} \xrightarrow{+3} \frac{\sqrt{36}}{3} \xrightarrow{+12} \frac{\sqrt{48}}{3} \xrightarrow{+9} \frac{\sqrt{57}}{3} \rightarrow \dots$$

Επίσης παρατηρούμε ότι δεν υπάρχουν γείτονες στις αποστάσεις $\frac{\sqrt{28}}{2}$, $\frac{\sqrt{60}}{2}$ και $\frac{\sqrt{92}}{2}$. Αυτό

οφείλεται στον τρόπο υπολογισμού του διανύσματος μετατοπίσεως στο bcc. Αν

$$\bar{a}_1 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \cdot a, \quad \bar{a}_2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \cdot a \quad \text{και} \quad \bar{a}_3 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \cdot a$$

τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως, όπου a η πλεγματική σταθερά και k_1, k_2, k_3 ακέραιοι αριθμοί, τότε το διάνυσμα

μετατοπίσεως οποιουδήποτε πλεγματικού σημείου μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των

$\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ δηλαδή:

$$\vec{r} = k_1 \vec{a}_1 + k_2 \vec{a}_2 + k_3 \vec{a}_3 \stackrel{a=1}{=} k_1 \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) + k_2 \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) + k_3 \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) =$$

$$= \frac{1}{2} (-k_1 + k_2 + k_3, k_1 - k_2 + k_3, k_1 + k_2 - k_3)$$

Το μέτρο του διανύσματος μετατοπίσεως θα είναι τότε:

$$|\vec{r}| = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{(-k_1 + k_2 + k_3)^2 + (k_1 - k_2 + k_3)^2 + (k_1 + k_2 - k_3)^2} =$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 + (k_1 - k_2)^2 + (k_1 - k_3)^2 + (k_2 - k_3)^2}$$

Το άθροισμα $k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 + (k_1 - k_2)^2 + (k_1 - k_3)^2 + (k_2 - k_3)^2$ δεν μπορεί να πάρει τις τιμές 28, 60 και 92 για οποιεσδήποτε τιμές των k_1, k_2, k_3 .

Τέλος παρατηρούμε ότι οι αποστάσεις στις οποίες έχουμε απουσία γειτόνων διαφέρουν κατά 32

στην υπόρριζη ποσότητα, δηλαδή $\frac{\sqrt{28}}{2} \rightarrow \frac{\sqrt{60}}{2} = \frac{\sqrt{28+32}}{2} \rightarrow \frac{\sqrt{92}}{2} = \frac{\sqrt{60+32}}{2}$, οπότε

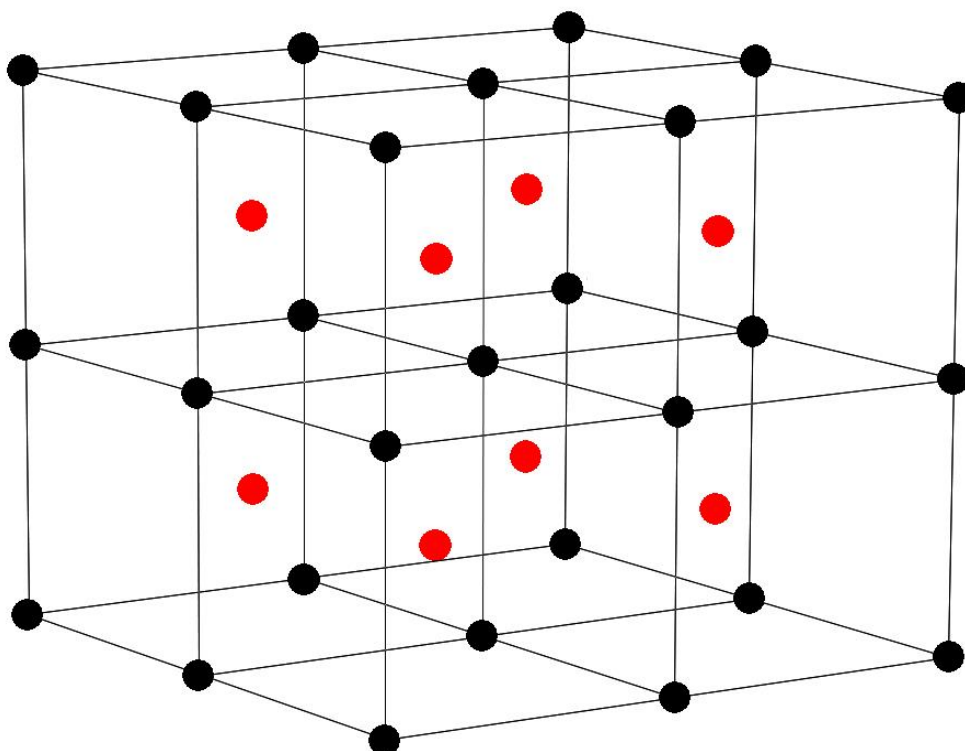
αναμένουμε να έχουμε απουσία γειτόνων στις αποστάσεις $\frac{\sqrt{124}}{2}, \frac{\sqrt{156}}{2}$ κλπ.

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται, έως και την 3^η τάξη γειτόνων, τα μέτρα των διανυσμάτων θέσης, οι πλεγματικές ευθείες και το σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων για κάθε τριάδα των ακεραίων k_1, k_2, k_3 .

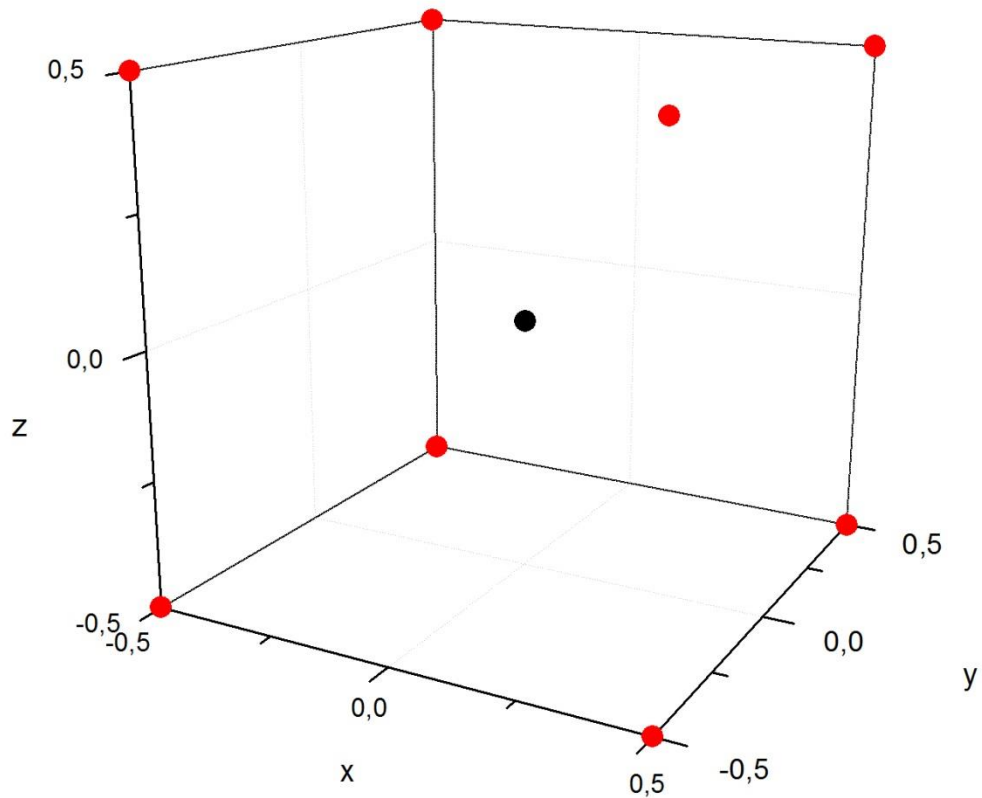
χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα						
k_1	k_2	k_3	r	Πλεγματική ευθεία	Σύνολο πλεγματικών διευθύνσεων	
1	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$[\bar{1}11]$	$\langle 111 \rangle$	1 ^η τάξη γειτόνων 8 γείτονες
0	1	0		$[1\bar{1}1]$		
0	0	1		$[11\bar{1}]$		
-1	0	0		$[1\bar{1}\bar{1}]$		
0	-1	0		$[\bar{1}1\bar{1}]$		
0	0	-1		$[\bar{1}\bar{1}1]$		
1	1	1		$[111]$		
-1	-1	-1		$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$		
1	1	0	1	$[001]$	$\langle 100 \rangle$	2 ^η τάξη γειτόνων 6 γείτονες
1	0	1		$[010]$		
0	1	1		$[100]$		
-1	-1	0		$[00\bar{1}]$		
-1	0	-1		$[0\bar{1}0]$		
0	-1	-1		$[\bar{1}00]$		

2	1	1	$\sqrt{2}$	[0 1 1]	<1 1 0>	3 ^η τάξη γειτόνων 12 γείτονες
1	2	1		[1 0 1]		
1	1	2		[1 1 0]		
-2	-1	-1		[0 $\bar{1}$ $\bar{1}$]		
-1	-2	-1		[$\bar{1}$ 0 $\bar{1}$]		
-1	-1	-2		[$\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]		
1	-1	0		[$\bar{1}$ 1 0]		
1	0	-1		[$\bar{1}$ 0 1]		
0	1	-1		[0 $\bar{1}$ 1]		
0	-1	1		[0 1 $\bar{1}$]		
-1	1	0		[1 $\bar{1}$ 0]		
-1	0	1		[1 0 $\bar{1}$]		

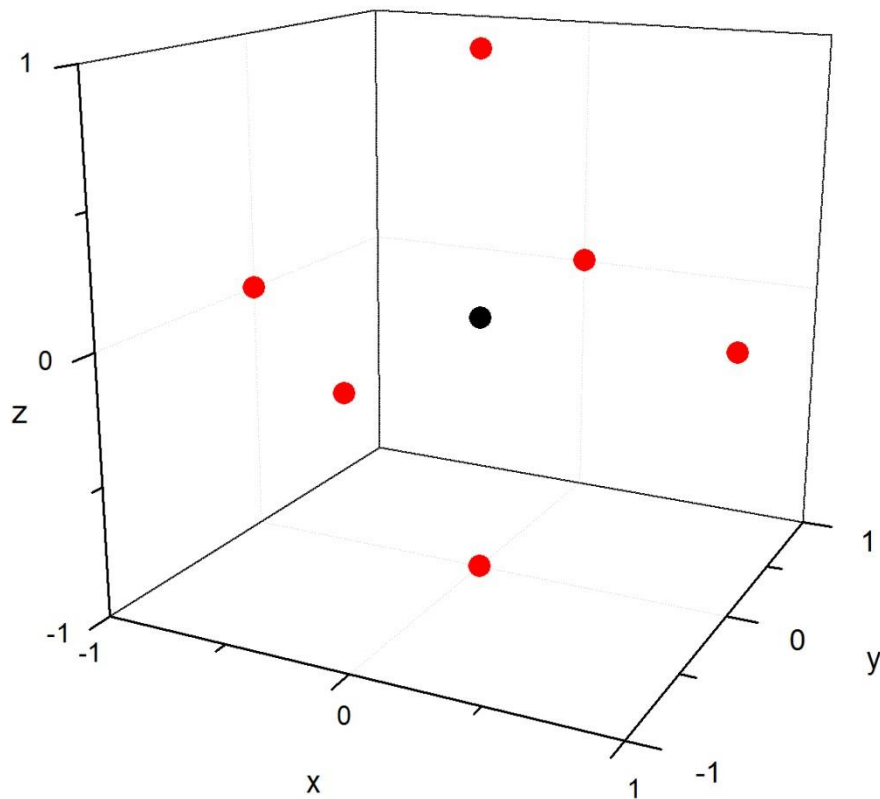
Παρακάτω παρουσιάζονται η γενική άποψη του χωροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος (Εικόνα 36), οι διατάξεις των γειτόνων 1^{ης} έως 4^{ης} τάξεως ξεχωριστά (Εικόνες 37, 38, 39, 40) και έπειτα οι ομαδοποιημένες διατάξεις των γειτόνων τάξεως 1 έως 4, 5 έως 10, 11 έως 15, 16 έως 20, 21 έως 25, 26 έως 30 και 31 έως 34 (Εικόνες 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47).



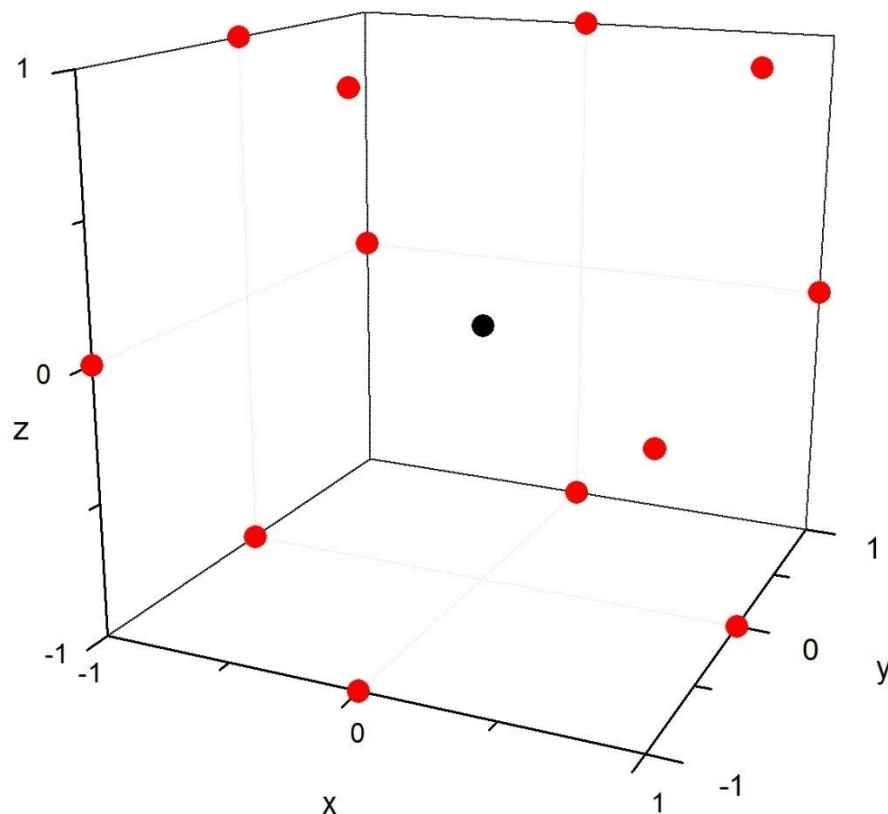
Εικόνα 36. Γενική άποψη του χωροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος (bcc). Οι κόκκινες σφαίρες απεικονίζουν τα πλεγματικά σημεία που βρίσκονται στα κέντρα των κυβικών κυψελίδων.



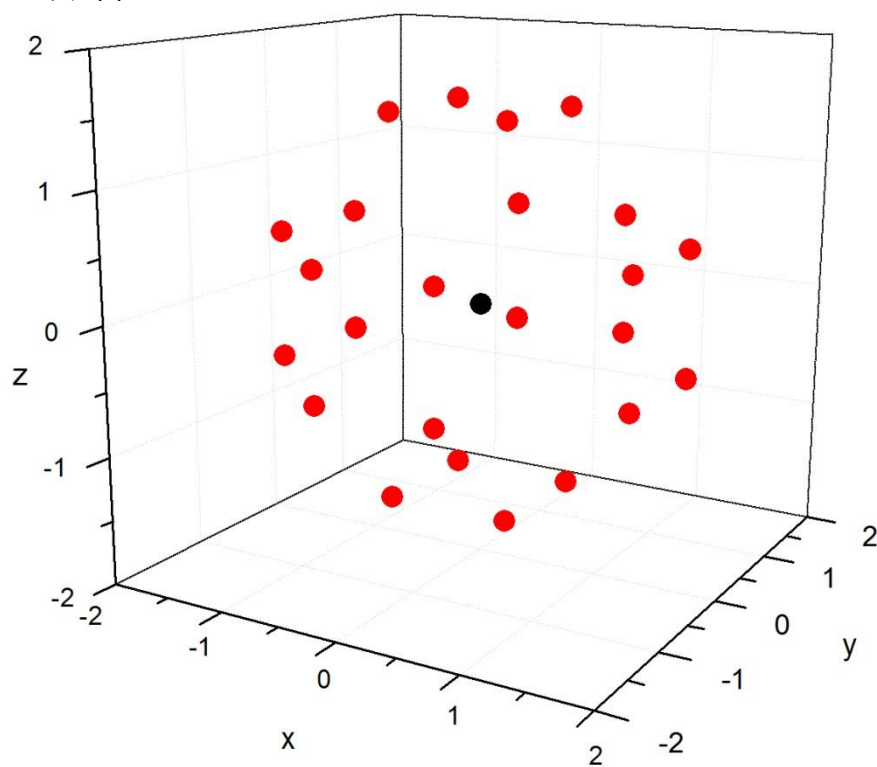
Εικόνα 37. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 1^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματοστικό σημείο που έχει τοποθετηθεί στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



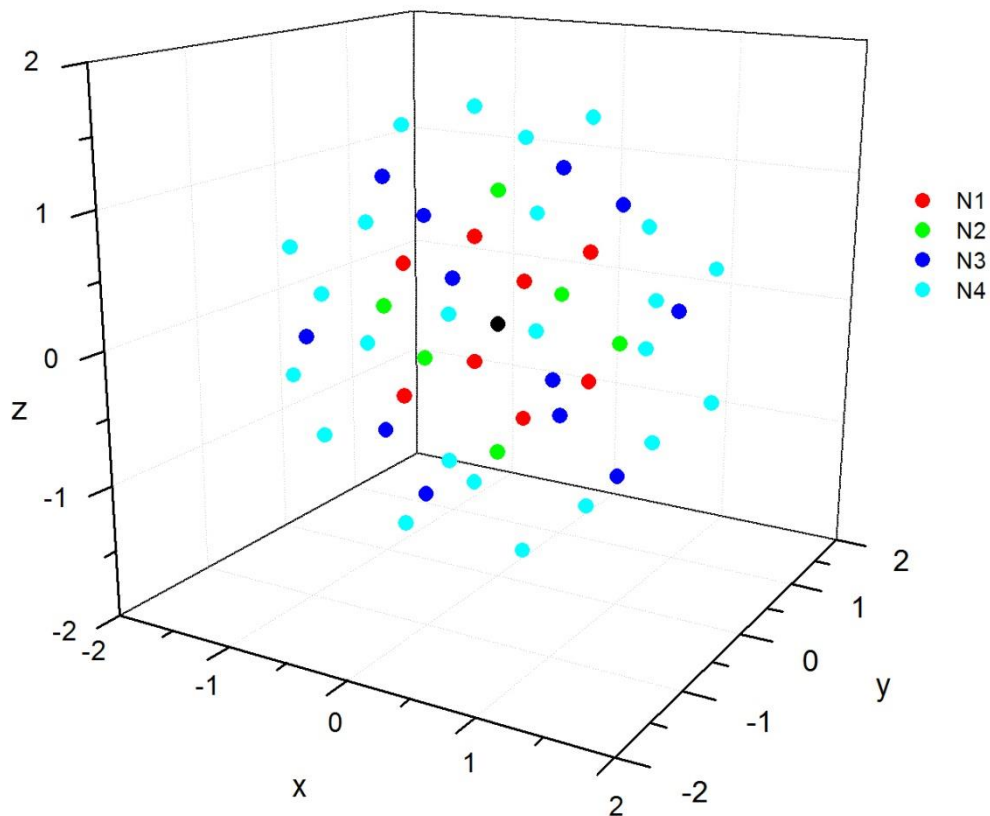
Εικόνα 38. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 2^{ας} τάξεως γύρω από ένα πλεγματοστικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



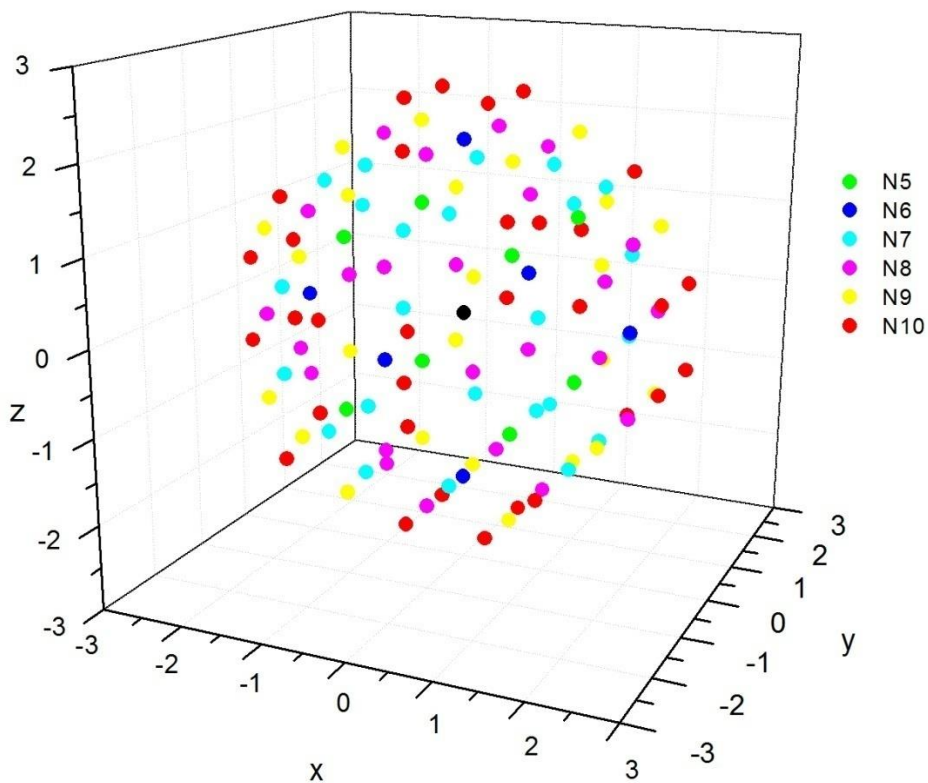
Εικόνα 39. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 3^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματοεικό σημείο που έχει τοποθετηθεί στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



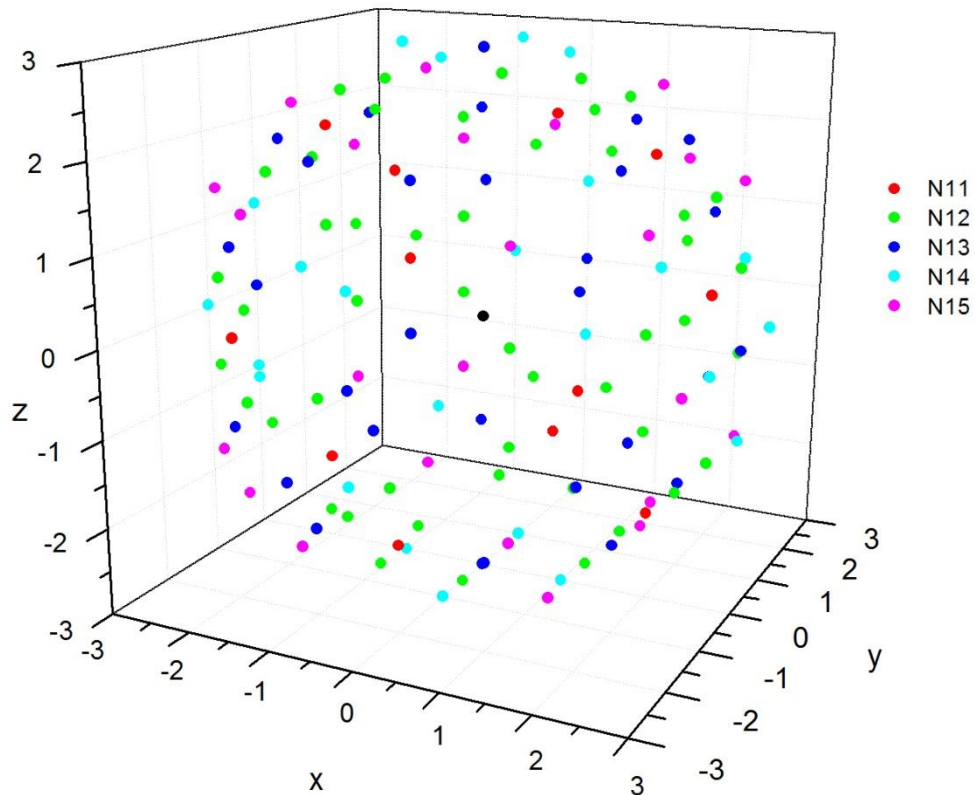
Εικόνα 40. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 4^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματοεικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



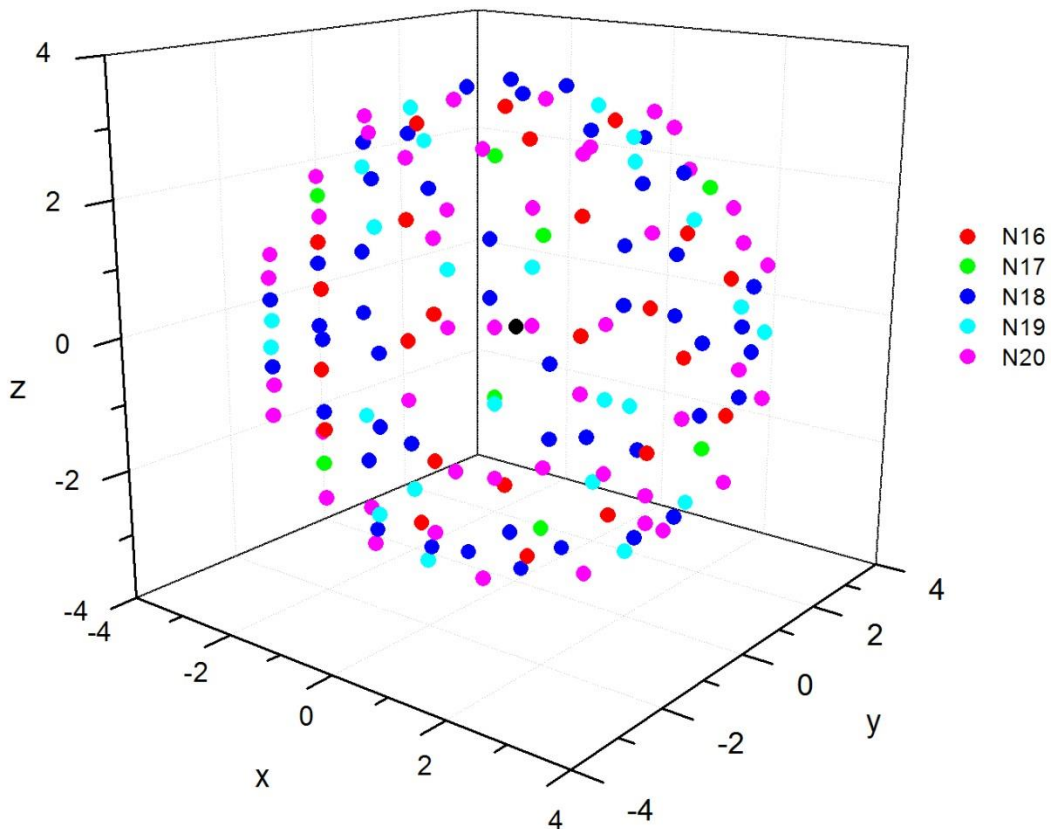
Εικόνα 41. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 1^{ης} έως 4^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



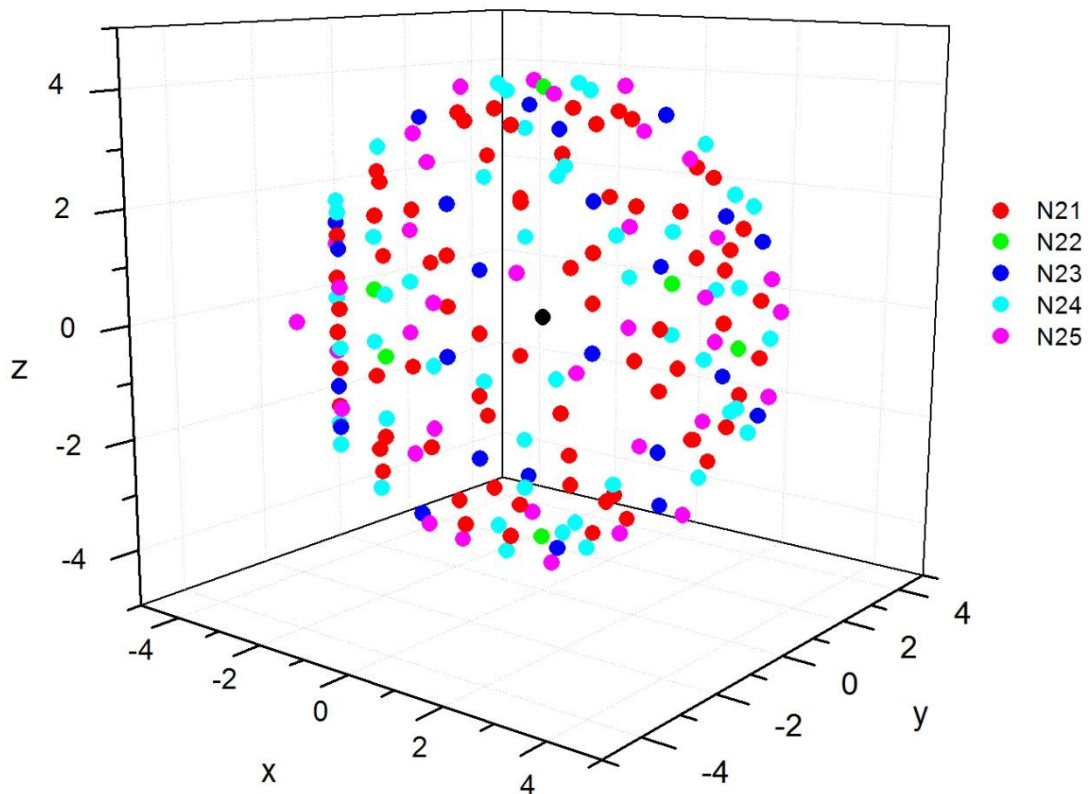
Εικόνα 42. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 5^{ης} έως 10^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



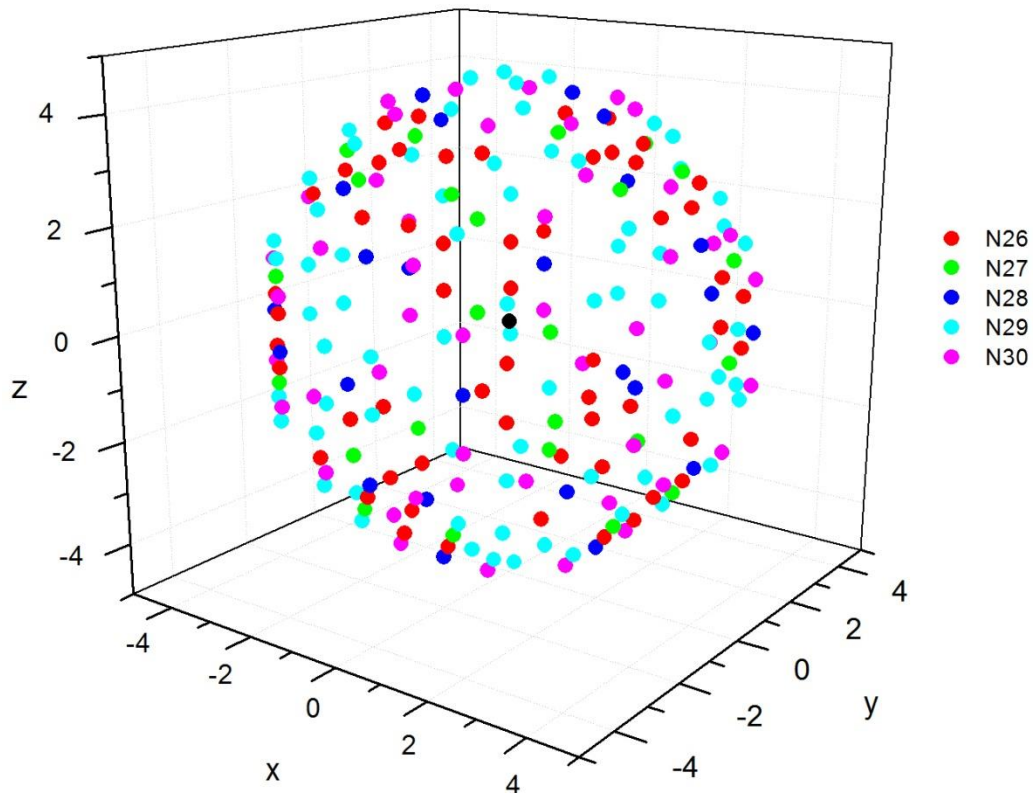
Εικόνα 43. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 11^{ης} έως 15^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



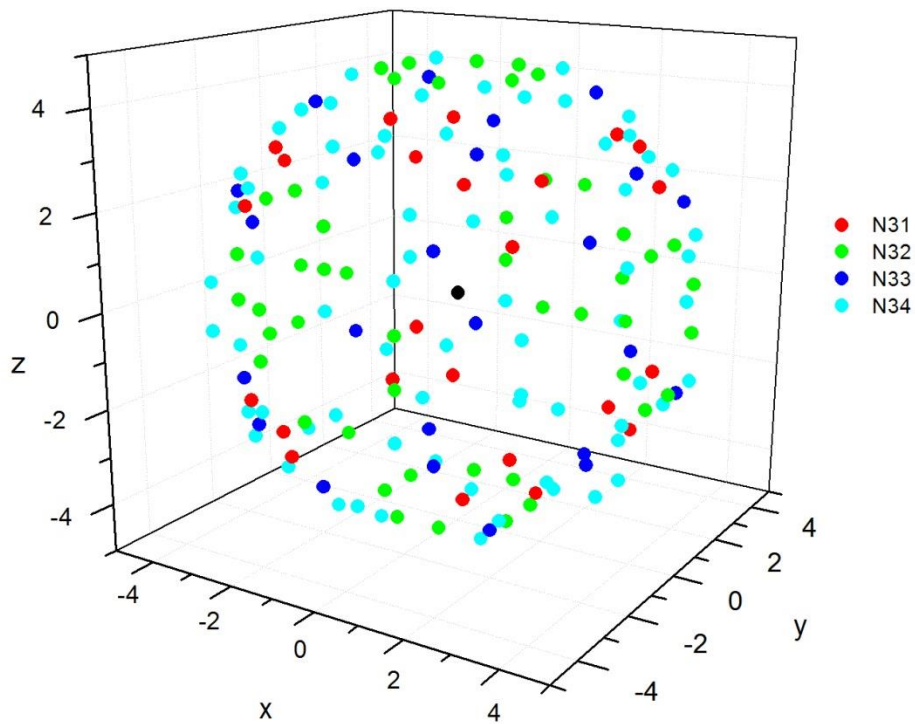
Εικόνα 44. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 16^{ης} έως 20^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που έχει τοποθετηθεί στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.



Εικόνα 45. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 21^{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.

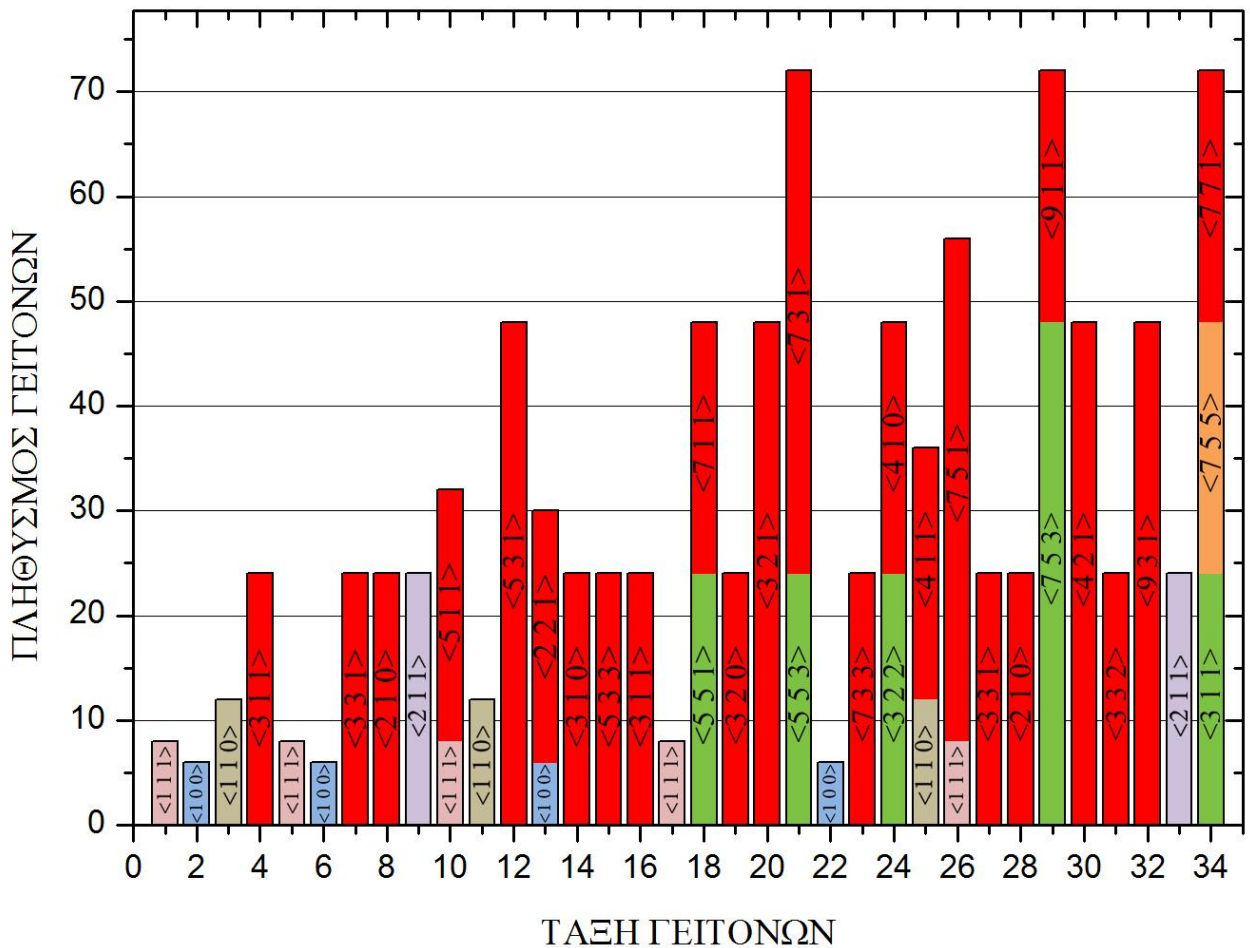


Εικόνα 46. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 26^{ης} έως 30^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

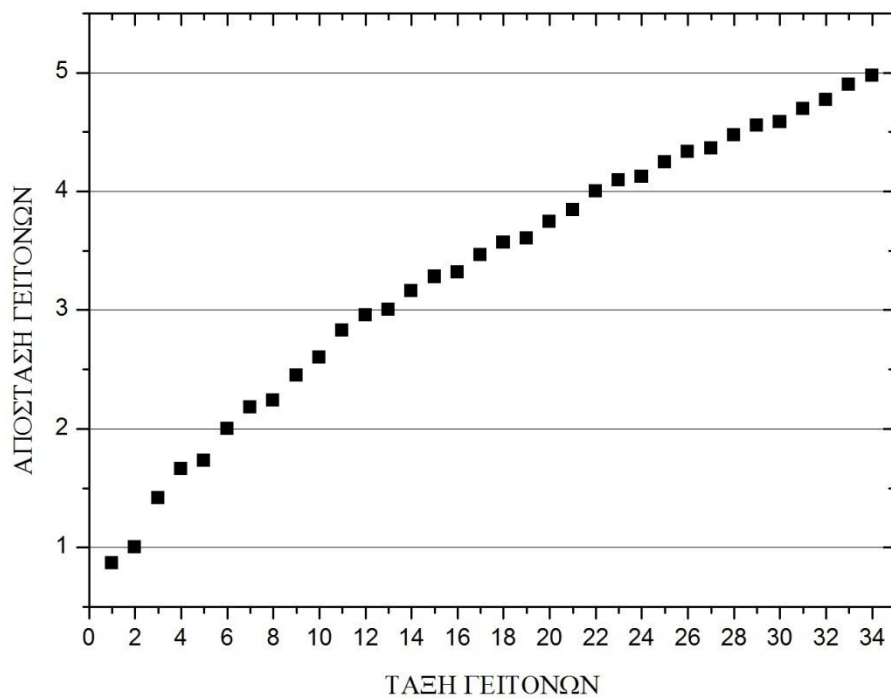


Εικόνα 47. Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Διάταξη των γειτόνων 31^{ης} έως 34^{ης} τάξεως γύρω από ένα πλεγματοτικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0,0), δηλαδή γύρω από τη μαύρη σφαίρα στο κέντρο του διαγράμματος.

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



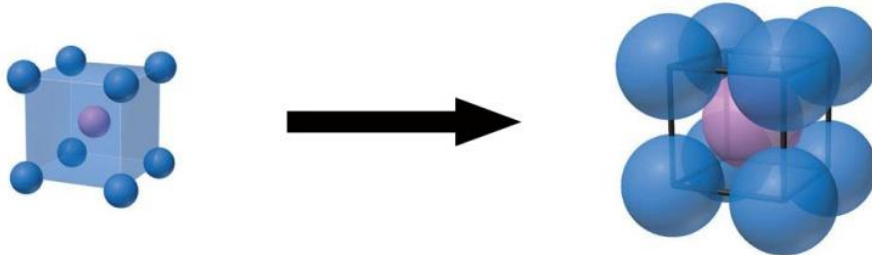
Εικόνα 48. Πληθυσμός γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα. Τα διαφορετικά χρώματα στις ράβδους υποδηλώνουν γείτονες που ανήκουν σε διαφορετικά σύνολα πλεγματικών διευθύνσεων.



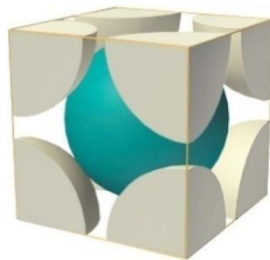
Εικόνα 49. Απόσταση γειτόνων ανά τάξη γειτόνων στο χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα.

Κλάσμα πυκνής διατάξεως (APF) του χωροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος

Διογκώνουμε τα πλεγματικά σημεία του χωροκεντρωμένου κυβικού πλέγματος έως ότου ακουμπήσουν μεταξύ τους, οπότε δεν επιτρέπεται περαιτέρω διόγκωση.



Παρακάτω παριστάνεται μία συμβατική κυψελίδα με τα τμήματα των σκληρών σφαιρών που βρίσκονται εντός της.



Παρατηρούμε ότι εντός της κυψελίδας υπάρχουν 8 λευκά κομμάτια, το καθένα από τα οποία αποτελεί το $\frac{1}{8}$ μιας σφαίρας, δηλαδή από τα λευκά κομμάτια έχουμε $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ σφαίρα, ενώ υπάρχει και μία ολόκληρη γαλάζια σφαίρα. Συνολικά, μέσα στην κυψελίδα, υπάρχουν 2 σφαίρες. Παραπάνω έχουμε αναφέρει ότι στην περίπτωση του πλέγματος bcc η διάμετρος σκληρών σφαιρών είναι $D = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot a$, επομένως ο όγκος κάθε σφαίρας θα είναι $V_{\sigma\phi} = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{D}{2}\right)^3$ και το κλάσμα πυκνής διατάξεως για το bcc είναι

$$APF_{\text{bcc}} = \frac{V_{\text{κατ}}}{V_{\text{κυψ}}} = \frac{2 \cdot V_{\sigma\phi}}{V_{\text{κυψ}}} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{D}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\frac{1}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^3 \cdot a^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{8} \pi \approx 0,68 .$$

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Παναγιώτη Α. Βαρώτσου και Καίσαρος Δ. Αλεξόπουλου, Φυσική Στερεάς Κατάστασης, Νέα Έκδοση, Εκδότης Σαββάλας, Αθήνα, 1995. Κεφάλαιο πρώτο: Δομή των κρυστάλλων.

- [2] C. Kittel, Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης, Μετάφραση: Χ. Παπαγεωργοπούλου, Εκδόσεις Α. Γ Πνευματικού, 5η έκδοση, Αθήνα, 1979. Κεφάλαιο πρώτο: Κρυσταλλική Δομή.

- [3] Harald Ibach και Hans Lüth, Φυσική Στερεάς Κατάστασης, Εισαγωγή στις Αρχές της Επιστήμης των Υλικών, Επιμέλεια: Σωτήριος Βες, Μετάφραση: Σωτήριος Βες, Ελένη Παλούρα, Αντώνης Αναγνωστόπουλος, Χαρίτων Πολάτογλου, Κεφάλαιο 2: Δομή της στερεάς ύλης. Εκδόσεις ΖΗΤΗ, 2012, Θεσσαλονίκη.

- [4] Κ. Σιμσερίδη, Σημειώσεις προπτυχιακού μαθήματος Καταστάσεις και Ιδιότητες της Ύλης, του Τμήματος Φυσικής του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών. 2014.