

Υλικά Ι

Ενότητα 1: Εισαγωγή

Ύλη του μαθήματος

Ιστορική Αναδρομή

Παραδείγματα Υλικών/ Εφαρμογές

Καταστάσεις ύλης

Μια πρώτη γνωριμία: μέταλλα, κεραμικά, πολυμερή, βιο-υλικά, ημιαγωγοί, σύνθετα υλικά

Βασικά στοιχεία δομής

ατομικά χαρακτηριστικά, περιοδικός πίνακας, δεσμοί, ενέργειες δεσμών, πακετάρισμα ιόντων, κρυσταλλική δομή

Βασικά στοιχεία ιδιοτήτων

μηχανικές, θερμικές, ηλεκτρικές
Μέταλλα, κεραμικά, πλαστικά

Βιβλιογραφία

Σημειώσεις μαθήματος: www.materials.uoc.gr

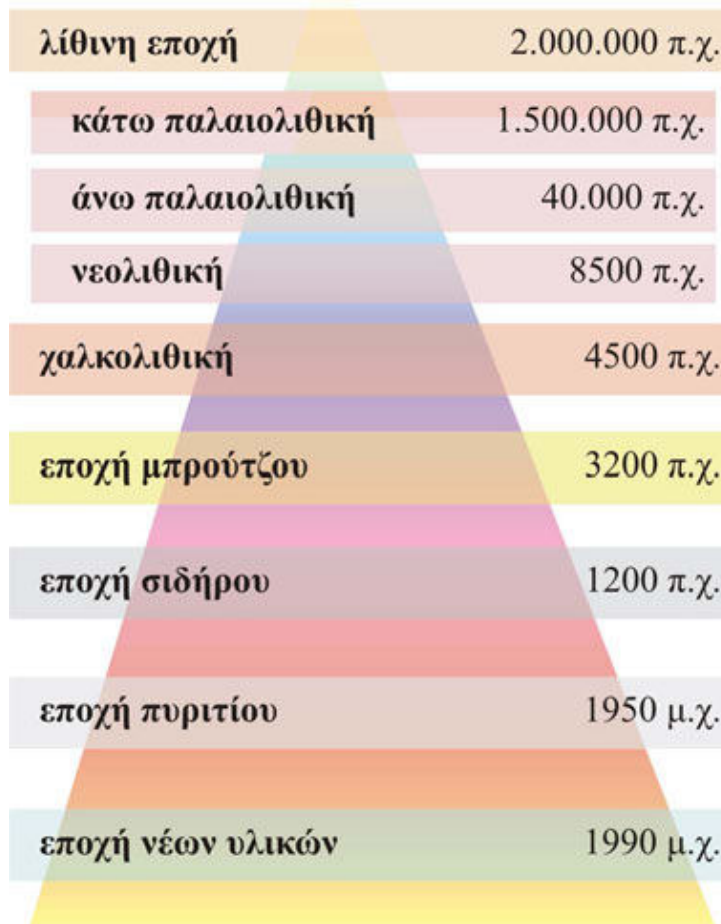
W. D. Callister, "Materials Science and Engineering", Wiley (2001)

1

Ιστορική εισαγωγή



Εποχές των υλικών



Υλικά Ι, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Διδάσκων: Δημήτρης Παπάζογλου

Εποχές των υλικών

Αρχή των κεραμικών

Πυρόλιθος, η μαγική πέτρα
σμιλεύεται εύκολα



Πυρόλιθος,
V. Mourre/ CC-BY-SA-3.0

~300.000 π.Χ.

Εισαγωγή των μετάλλων

Ακατέργαστος χρυσός και
χαλκός χρησιμοποιούνται για
πρώτη φορά



Χρυσός,
Didier Descouens/ CC-BY-SA-3.0



Χαλκός,
© User:Jurii / Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

~5500 π.Χ.

Σφυρηλάτηση και φωτιά

Πρώτη επεξεργασία του
χαλκού με χρήση φωτιάς και
σφυρηλάτησης



Χάλκινα εργαλεία (Γκίζα),
Einsamer Schütze / CC-BY-SA-3.0

~5000 π.Χ.

Επεξεργασία υλικών

Λιώσιμο και χύσιμο μετάλλων
Ξεκίνημα επεξεργασίας και
διαμόρφωσης υλικών



Μινωικό κόσμημα,
© User:Apeto / Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

~4000 π.Χ.

Αρχή της μεταλλουργίας

Αναγωγή χαλκού από
μεταλλεύματα χαλκού



Χάλκινο Ειδώλιο (Λευκωσία),
Gerhard Haubold / CC-BY-SA-3.0

~3500 π.Χ.

Παρασκευή κραμάτων

Χρήση του Μπρούτζου.
Παρασκευή κραμάτων για
βελτίωση ιδιοτήτων των
μετάλλων



Μπρούτζινο αμασιδίο (Κύπρος)
© User:Udimu / Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

~3000 π.Χ.

Αρχή χρήσης σιδήρου

Εμφάνιση και επεξεργασία
του σιδήρου



Κράνος
© User:Rama / Wikimedia Commons, Cc-by-sa-2.0-fr

~1450 π.Χ.

Υλικά Ι, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Διδάσκων: Δημήτρης Παπάζογλου

Παραγωγή ατσαλιού

Πατέντα του Sir Henry Bessemer κάνει
την παραγωγή ατσαλιού σε μεγάλη
κλίμακα πολύ φθηνότερη



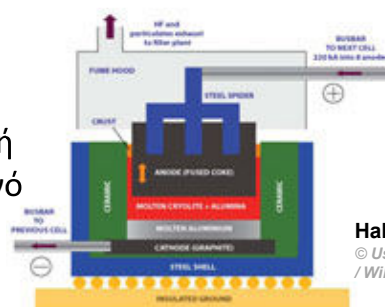
Μετατροπέας Bessemer

1855 μ.Χ.

Sir Henry Bessemer

Παραγωγή αλουμινίου

Η μέθοδος του Hall για την παραγωγή
αλουμινίου έκανε το αλουμίνιο φθινό
κατασκευαστικό υλικό



Hall-Héroult industrial cell
© User: User:Kashkhan
/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

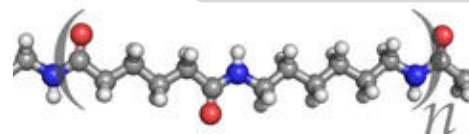
1886 μ.Χ.

Παραγωγή Nylon

Παραγωγή του Nylon.
Σταθμός στην ιστορία των
πλαστικών



Wallace Hume Carothers



Nylon 6,6 3D structure
© User:YassineMrabet
/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

1939 μ.Χ.

Πυρίτιο

Μικροηλεκτρονική



Κομμάτι καθαρού Πυριτίου

© User: Jurii

/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

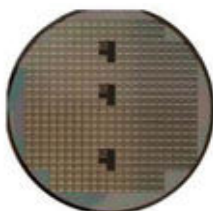


Μονοκρύσταλλος Πυριτίου

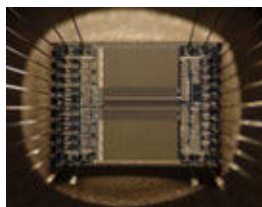
Massimiliano Lincetto / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



Clean room



silicon wafer



Μνήμη EPROM

© User: Zephyris

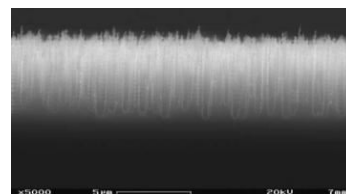
/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

1950 μ.Χ.



Φωτοβολταικά με πολύκρυσταλλικο πυρίτιο

Georg Slickers / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

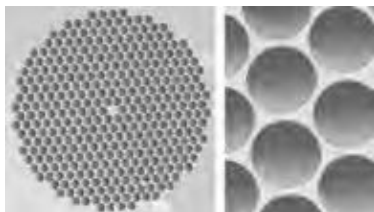


«Μαύρο» Πυρίτιο

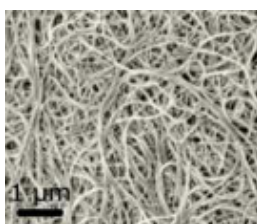
Christoph Kubasch / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Νέα υλικά

Νανοτεχνολογία, Φωτονικά υλικά, Μετα-υλικά



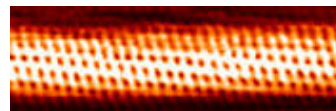
Οπτική ίνα φωτονικών κρυστάλλων
(left) The diameter of the solid core at the center of the fiber is 5 μm ,
(right) the diameter of the holes is 4 μm
(US NRL.)



Εικόνα SEM νανοσωλήνων άνθρακα

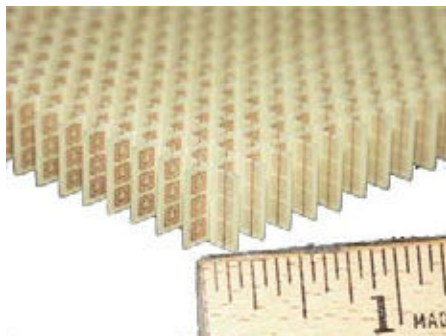
User: MaterialsScientist

/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



Εικόνα STM ενός νανοσωλήνα άνθρακα

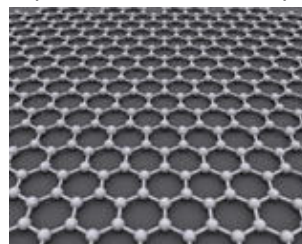
Taner Yildirim (NIST)



left-handed metamaterial array configuration
NASA Glenn Research

Γραφένιο (Graphene)

(Nobel Price 2010)



Κρυσταλλική δομή του Γραφενίου

User: AlexanderAIUS / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Σήμερα

2

Τι είναι ύλη;

Καταστάσεις της ύλης

Στερεά

Υγρά

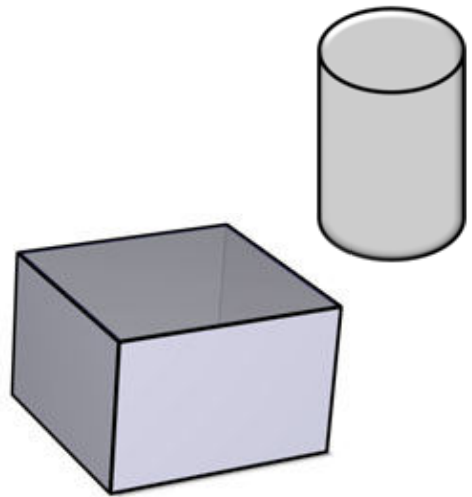
Αέρια

Στερεά

Έχουν συγκεκριμένο:

Σχήμα

όγκο



Δεν συμπιέζονται εύκολα

Μοντέλο Στερεών

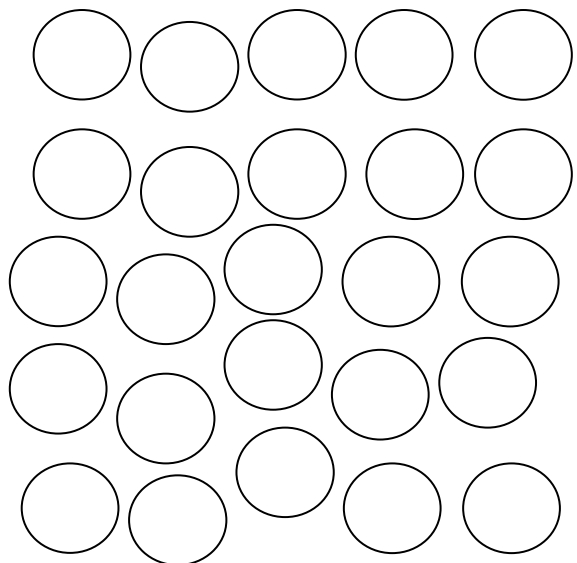
Τα σωματίδια:

Βρίσκονται πολύ κοντά
μεταξύ τους

Ασκούν ισχυρές
αμοιβαίες δυνάμεις

Δεν μετακινούνται
ελεύθερα από το ένα
σημείο στο άλλο

Δονούνται σε
καθορισμένες θέσεις

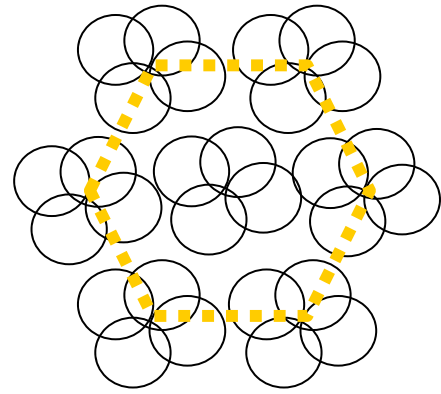


Κατηγορίες Στερεών

Στερεά

Κρυσταλλικά

Περιοδικά
επαναλαμβανόμενη
δομή σε τρεις
διαστάσεις από την
μία άκρη του στερεού
ως την άλλη



Δομή κρυσταλλικού SiO_2



Χαλαζίας (κρυσταλλικό SiO_2)

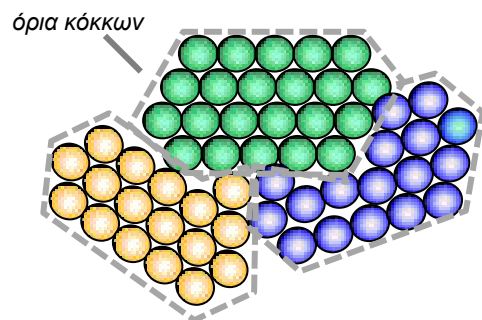
Didier Descouens / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Κατηγορίες Στερεών

Στερεά

Πολυκρυσταλλικά

Πολλές κρυσταλλικές
περιοχές (κόκκοι)
τυχαία τοποθετημένες



Δομή πολυκρυσταλλικού υλικού



Πολυκρυσταλλικό κράμα Fe-Si

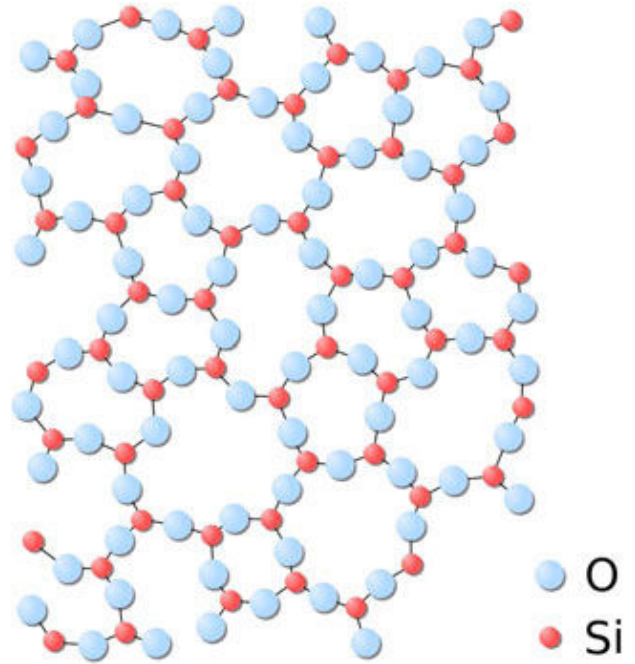
User:Zureks / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Κατηγορίες Στερεών

Στερεά

Άμορφα

Τυχαία δομή χωρίς
καμιάς μορφής «τάξη»
σε ευρεία κλίμακα



Δομή άμορφου SiO_2 (γυαλί)
User:Jdrewitt / Wikipedia:Public domain

Υγρά

Έχουν συγκεκριμένο:

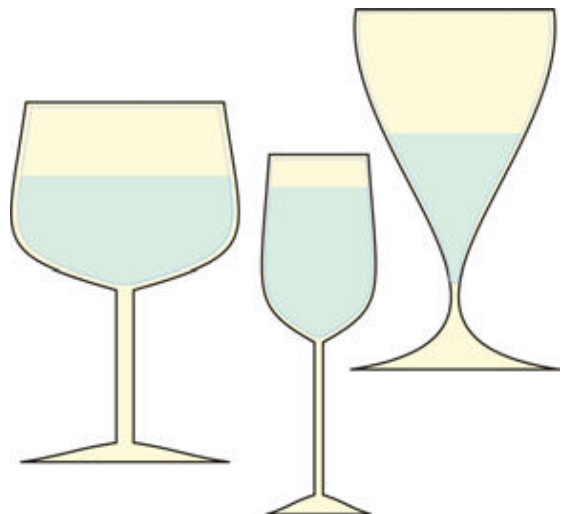
όγκο

Έχουν μεταβλητό:

σχήμα

Ρέουν

Δεν συμπιέζονται εύκολα



Μοντέλο Υγρών

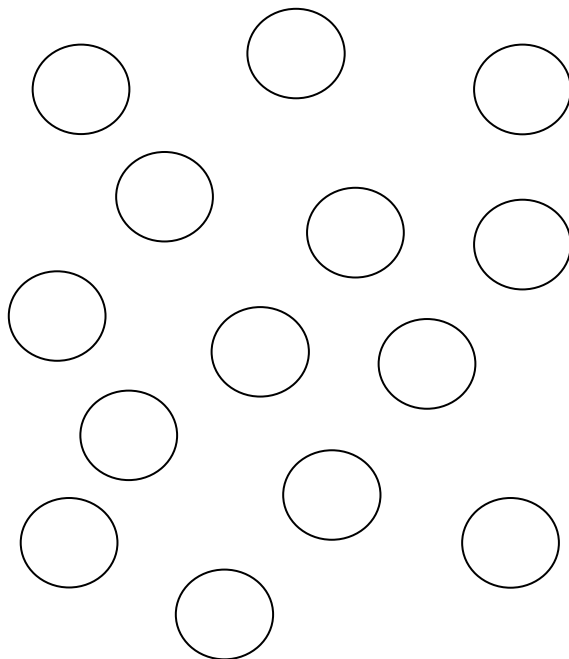
Υγρά

Τα σωματίδια:

Βρίσκονται κοντά
μεταξύ τους
(όχι όσο στα στερεά)

Μετακινούνται
ελεύθερα από το ένα
σημείο στο άλλο

Δονούνται,
περιστρέφονται
ελεύθερα



Αέρια

Έχουν μεταβλητό :

όγκο

σχήμα

Ρέουν

Συμπιέζονται εύκολα



Διαχεόμενος καπνός σε αέρα
User:Macluskie / Wikipedia:Public domain

Μοντέλο Αερίων

Αέρια

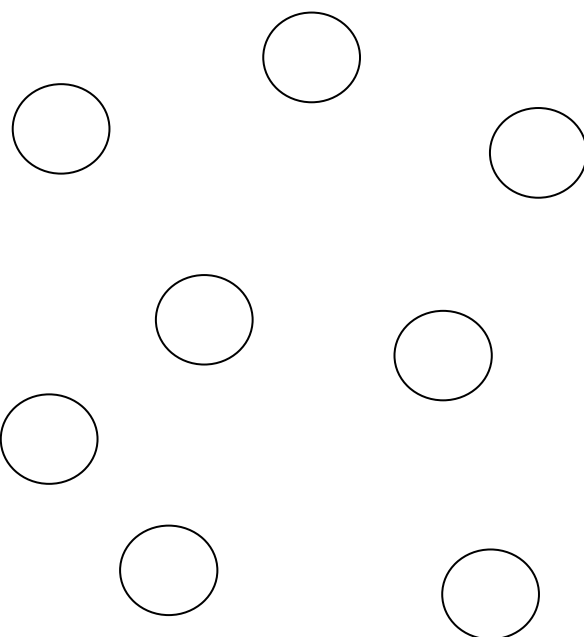
Τα σωματίδια:

Βρίσκονται πού μακριά το ένα από το άλλο

Μετακινούνται ελεύθερα από το ένα σημείο στο άλλο

Δονούνται, περιστρέφονται ελεύθερα

Δεν υπάρχει καμιά μορφή οργάνωσης



Βασικά μεγέθη

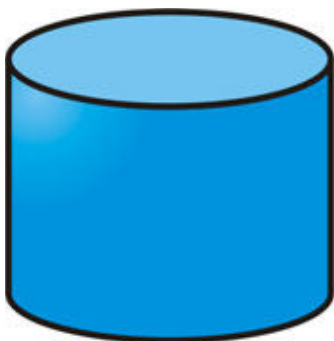
Πυκνότητα:

μάζα

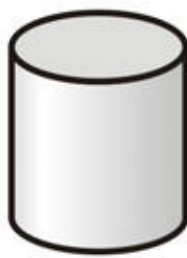
όγκος

πως τα μετράμε;

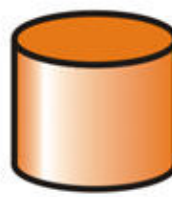
1 kg



νερό



αλουμίνιο



χαλκός

Τυπικές τιμές

Στερεά – Υγρά - Αέρια

Πυκνότητα (gr/cm³)

Πυκνότητα

Στοιχείο		Στερεό	Υγρό	Αέριο
Αργό	Ar	1.65	1.40	0.001784
Άζωτο	N ₂	1.026	0.8081	0.00125
Οξυγόνο	O ₂	1.426	1.149	0.001429

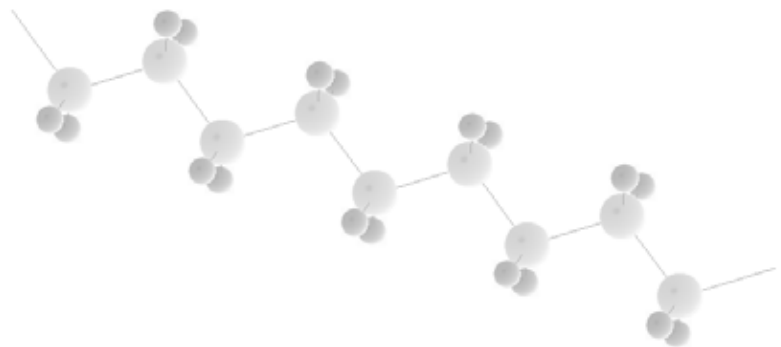


Ενότητα 2: Κατηγορίες Υλικών - Εφαρμογές - Παραδείγματα



2

Κατηγορίες Υλικών



Παραδείγματα

Οικοδομικά υλικά

Γυαλί(κεραμικό)
Ατσάλι (μέταλλο)
Ξύλο (πολυμερές)
Τσιμέντο (σύνθετο υλικό)

Υλικά αεροναυπηγικής

Άνθρακας- σύνθετα υλικά άνθρακα
Κράματα αλουμινίου- λιθίου
Κεραμικά πλακίδια διαστημοπλοίων
Ηλεκτρονικά με βάση το πυρίτιο

Το πεντάγωνο των υλικών

Κατηγορίες υλικών



Ορυκτά

Υλικά που βγαίνουν από τη γη με εξόρυξη ή σκάψιμο ή γεώτρηση.

Είναι ανόργανα υλικά, κρυσταλλικά και καθορισμένης σύστασης.



Φυσικές πηγές

Πετρώματα

Η μάζα που αποτελεί τον φλοιό της γης. Είναι μίγματα δύο ή περισσότερων ορυκτών και δεν είναι απαραίτητα κρυσταλλικά ή καθορισμένης χημικής σύστασης.

Ορυκτά καύσιμα

Άνθρακες, πετρέλαιο ή φυσικό αέριο που προέρχονται από την αποσύνθεση οργανικής ύλης.

Μέταλλα



Μεταλλικά χημικά στοιχεία (όπως χρυσός, άργυρος, σίδηρος, αλουμίνιο) και οι συνδυασμοί τους.

Τα μέταλλα έχουν λεία επιφάνεια, **μεταλλική λάμψη**, είναι **καλοί αγωγοί θερμότητας** και **ηλεκτρισμού**.

*Τα μίγματα μετάλλων λέγονται **κράματα**.*



Πυρακτωμένα μέταλλα σε σιδηρουργείο
Fir0002/Flagstaffotos/ Wikimedia Commons, CC-BY-NC-3.0

Χαρακτηριστικά



Τα πιο πολλά στοιχεία είναι μεταλλικά

Τα μέταλλα έχουν **υψηλά σημεία τήξης** και είναι στερεά σε θερμοκρασία δωματίου.

Είναι αδιαφανή, έχουν μεταλλική λάμψη

Είναι σχετικά σκληρά και ανθεκτικά

Είναι ελατά και όλκιμα

Μόνο 3 κοινά μέταλλα είναι **μαγνητικά** (σίδηρος, νικέλιο, κοβάλτιο)

Είναι **σφυρηλατήσιμα**

Μπορούν να κοπούν ομαλά

Είναι **καλοί αγωγοί θερμότητας** και **ηλεκτρισμού**.

Είναι **κρυσταλλικά** (εκτός από ειδικές περιπτώσεις)

*Τα πιο πολλά μέταλλα που χρησιμοποιούμε είναι **κράματα μετάλλων** (χρυσά κοσμήματα) ή **μίγματα μετάλλων με αμέταλλα στοιχεία** (ανοξείδωτο ατσάλι)*

Εφαρμογές



Ηλεκτρικά καλώδια

Κατασκευές

(κτήρια, γέφυρες κ.ά.)

Αυτοκίνητα

(αμάξωμα, μηχανή κ.ά.)

Αεροπλάνα

(τμήματα μηχανής, άτρακτοι κ.ά.)

Τρένα

(αμάξωμα, τμήματα μηχανής, τροχοί, ράγες κ.ά.)



ατσάλινα σύρματα

Johannes 'volty' Hemmerlein/
Wikimedia Commons, CC-BY-NC-3.0

Εργαλεία

(κατσαβίδια, σφυριά, πριόνια κ.ά.)

Μαγνήτες

Καταλύτες

Παραδείγματα

Μεταλλικά στοιχεία:

Fe, Cu, Ni, Au, Ag κ.ά.

Κράματα -μίγματα:

Fe-C (ατσάλι),

Cu - Zn (Ορείχαλκος)

Κεραμικά



Μη-μεταλλικά, ανόργανα υλικά.

Μοντέρνα κεραμικά είναι τα καρβίδια, βορίδια κ.ά.
ή βασίζονται σε αμέταλλα στοιχεία

π.χ. C , γυαλιά είναι άμορφα κεραμικά υλικά..



κεραμικοί κύλινδροι

© User: Chemical Engineer
/Wikimedia Commons, Public domain



σφαιρίδια Si₃N₄ (Silicon Nitride)

© User: Lucasbosch
Wikimedia Commons, CC-BY-NC-3.0



Δίσκοι κοπής SiC (Silicon Carbide)

© User: Albert
Wikimedia Commons, CC-BY-NC-3.0

Κατηγορίες



Γυαλιά

βασίζονται κυρίως σε πυριτία (silica, SiO_2)

Υαλώδη κεραμικά

αποτελούνται από κρυσταλλικές φάσεις (κυρίως πυριτικές) σε υαλώδη φάση

Κεραμικά υψηλών αποδόσεων

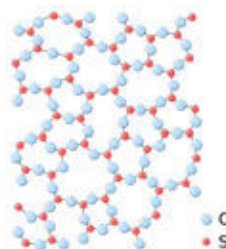
χρησιμοποιούνται όταν χρειάζεται υψηλή αντοχή σε θερμοκρασίες και τριβές (βορίδια, νιτρίδια, καρβίδια, SiC , οξείδια Al_2O_3)

Τσιμέντο και σκυρόδεμα

βασικά κατασκευαστικά υλικά

(παράδειγμα τσιμέντου είναι μίγμα CaO , SiO_2 , Al_2O_3 που «πήζει» με προσθήκη νερού)

Φυσικά κεραμικά όπως ασβεστόλιθος, γρανίτης κ.ά.



Δομή άμορφου SiO_2 (γυαλί)
User:Jdrewitt / Wikipedia: Public domain

Χαρακτηριστικά



Τα πιο πολλά είναι **κρυσταλλικά**
(εξαίρεση: γυαλιά)

Αποτελούνται από **μεταλλικά** και **αμέταλλα** άτομα

Έχουν μικρότερη πυκνότητα από τα περισσότερα μέταλλα

Ψαθυρά

Μικρή πλαστικότητα

Κακοί αγωγοί θερμότητας
και **ηλεκτρισμού**

Πολύ **υψηλά** σημεία τήξεως

Σκληρά και **ανθεκτικά**

Διαφανή όταν είναι μονοκρυσταλλικά

Μερικά είναι μαγνητικά

Εφαρμογές



Γυάλινα σκεύη,
κεραμίδια,
κεραμικά πλακίδια

Ηλεκτρικοί μονωτές

Λειαντικά

Θερμικοί μονωτές
και επιχρίσματα

Παράθυρα,
οθόνες τηλεόρασης,
οπτικές ίνες



Οδοντική πορσελάνη
© User: Wagoner/
Wikimedia Commons, CC-BY-NC-3.0

Βιοσυμβατά επιχρίσματα,
βιοκεραμικά εμφυτεύματα,
οδοντιατρική αποκατάσταση

Μαγνητικά υλικά
(σκληροί δίσκοι,
βιντεοκασσέτες, κασσέτες)

Δρόμοι, οικοδομές
(σκυρόδεμα)

Ηλεκτρικές συσκευές
(πυκνωτές κ.ά.)

Αυτοκίνητα
(μπουζί, καταλύτες)

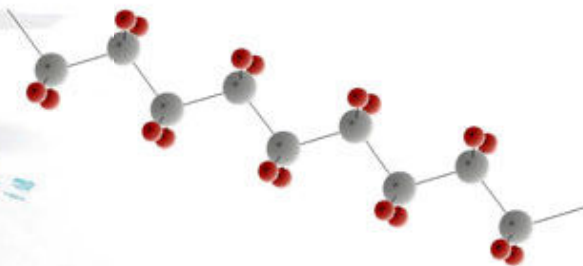


Οικοδομικά κεραμικά
© User: Tasja/
Wikimedia Commons, public domain

Πολυμερή



Πλαστικές ταινίες
© User: Novacel/
Wikimedia Commons, CC-BY-NC-3.0



Οργανικά υλικά που αποτελούνται από πολλά απλά
μόρια συνδεδεμένα μεταξύ τους, τα μονομερή.

Χαρακτηριστικά



Αποτελούνται κυρίως από **C** και **H**.

Χαμηλά σημεία τήξης.

Μερικά είναι κρυσταλλικά, πολλά όχι.

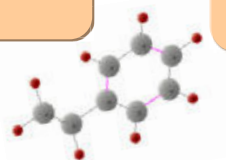
Μερικά είναι **φυσικής προέλευσης**, άλλα **συνθετικά**.

Τα πιο πολλά είναι **κακοί αγωγοί θερμότητας και ηλεκτρισμού**.

Μερικά είναι **διαφανή** μερικά όχι.

Πολλά έχουν μεγάλη **πλαστικότητα**.

Πολλά έχουν μεγάλη **ελαστικότητα**.



Εφαρμογές



Συγκολλητικές ύλες, κόλλες

Συσκευασίες

Πλαστικά χρώματα

Υγροί κρύσταλλοι

Ρούχα

Υλικά μικρής τριβής (Teflon)



Πλαστικά δοχεία φυγοκέντρησης
© User: Nadine90
Wikimedia Commons, CC-BY-NC-3.0

Σαπούνια και τασενεργά

Λάστιχα

«Πλαστικά»

Συνθετικά λίπη και έλαια

Βιοϋλικά

Ημιαγωγοί



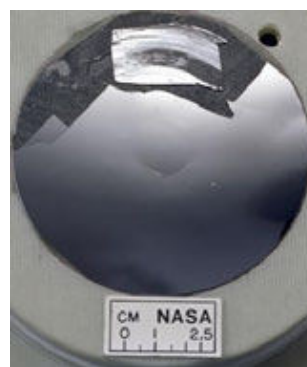
Υλικά όπως **Si** και **Ge** που έχουν τιμές ηλεκτρικής αγωγιμότητας ανάμεσα στα μέταλλα και στα κεραμικά



Πυρίτιο σε σκόνη

© User: Silane

Wikimedia Commons, CC-BY-NC-3.0



Γυαλισμένο δισκίο πυριτίου

NASA Glenn Research Center

Wikimedia Commons, public domain

Χαρακτηριστικά



Αποτελούνται κυρίως από στοιχεία όπως

Si, Ge

και ενώσεις όπως

GaAs

Κρυσταλλικά

Υψηλά ελεγχόμενης χημικής καθαρότητας

Ρυθμιζόμενη θερμική και ηλεκτρική αγωγιμότητα

Γυαλιστερή εμφάνιση

Αδιαφανή

Μερικά έχουν πλαστικότητα, άλλα είναι αρκετά εύθραυστα

Μερικά έχουν ηλεκτρικές ιδιότητες μεταβαλλόμενες με το φως



Μονοκρύσταλλος Πυριτίου

Massimiliano Lincetto / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Εφαρμογές



Υπολογιστές

Ηλεκτρικά στοιχεία
(transistors, δίοδοι κ.ά.)

Φωτοβολταϊκά κύτταρα

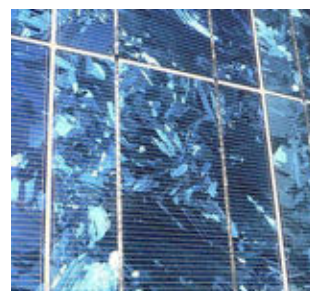
Μικροηλεκτρονική

Lasers στερεάς
κατάστασης

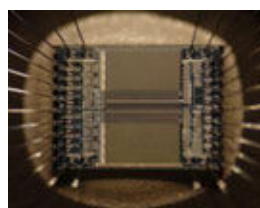
Ανιχνευτές ακτινοβολίας



Clean room



Φωτοβολταϊκά με
πολύκρυσταλλικό πυρίτιο
Georg Slickers / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



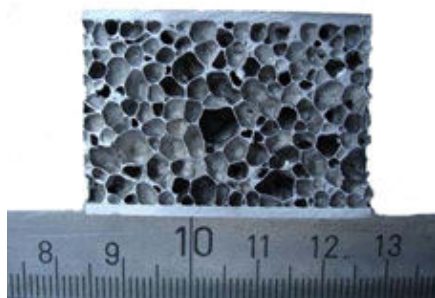
Μνήμη EPROM
© User: Zephyris / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Σύνθετα υλικά

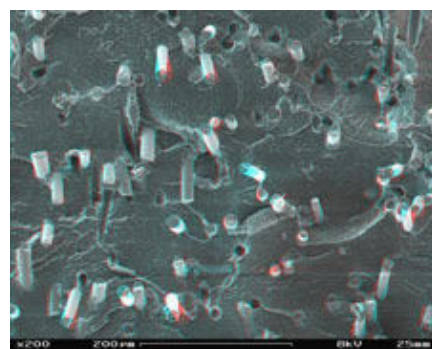


Υλικά που αποτελούνται από διάφορα μέρη, μίγματα δύο ή περισσότερων υλικών.

Το ξύλο είναι φυσικό σύνθετο υλικό
ενώ το τσιμέντο είναι τεχνητό



“αφρός» αλουμινίου
User: Metalfoam / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



fiber glass (στερεοσκοπική εικόνα SEM)
© User::SecretDisc / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Χαρακτηριστικά



Αποτελούνται από
δύο ή περισσότερα
διαφορετικά υλικά
(π.χ. μέταλλο / κεραμικό,
πολυμερές / πολυμερές)

Ιδιότητες που εξαρτώνται από το
ποσοστό και την κατανομή κάθε
υλικού

Συλλογικές ιδιότητες βελτιωμένες
σε σχέση με τις δυνατότητες κάθε
υλικού χωριστά



Ανθρακονήματα (carbon fiber)

© User: : Cjp24

/ Wikimedia Commons, Public Domain

Εφαρμογές



Υλικά αεροναυπηγικής

Θερμικές μονώσεις

Σκυρόδεμα

«Εξυπνα» υλικά
(ανίχνευσης /ανταπόκρισης)

Βαφές
(κεραμικά υλικά σε latex)

Fiberglass
(ίνες γυαλιού σε πολυμερές)



Ανθρακονήματα στην αυτοκινητοβιομηχανία (Stohr DSR)

© User: : Rhots

/ Wikimedia Commons, Public Domain



αεροπλάνο κατασκευασμένο από fiber glass

© User: guillom

/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



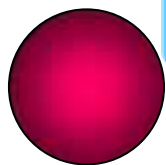
Ενότητα 3: Ατομική δομή

3

Ατομική δομή



Άτομο

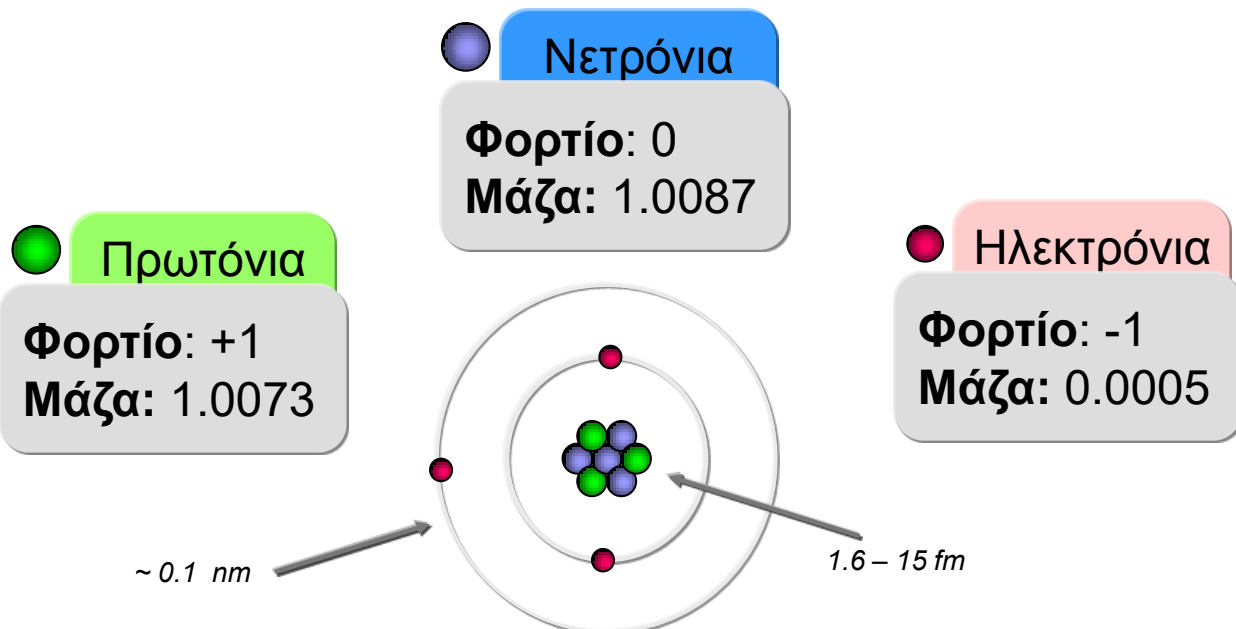


Τα άτομα είναι οι βασικές δομικές μονάδες της ύλης

Σ' ένα ηλεκτρικά ουδέτερο άτομο το θετικό φορτίο του πυρήνα (που οφείλεται στα πρωτόνια) εξουδετερώνεται από το αρνητικό φορτίο των ηλεκτρονίων

Όλα τα στοιχεία εκτός του Υδρογόνου έχουν τουλάχιστον τόσα **νετρόνια** στον πυρήνα τους όσα και **πρωτόνια**.

Δομή - συστατικά



Άτομο

Πρωτόνια

Νετρόνια

Ηλεκτρόνια

Φορτίο (C): $+1.60 \cdot 10^{-19}$

0

$-1.60 \cdot 10^{-19}$

Μάζα (Kg): $1.67 \cdot 10^{-27}$

$\sim 1.67 \cdot 10^{-27}$

$9.11 \cdot 10^{-31}$

Ατομικός – Μαζικός αριθμός



Άτομο

Μαζικός αριθμός

Αριθμός
πρωτονίων
+
νετρονίων

Ατομικό βάρος

Σταθμισμένη
μέση τιμή
των ατομικών μαζών
των φυσικών
ισοτόπων του

1 a.m.u. = 1/12 ^{12}C

12
6
C

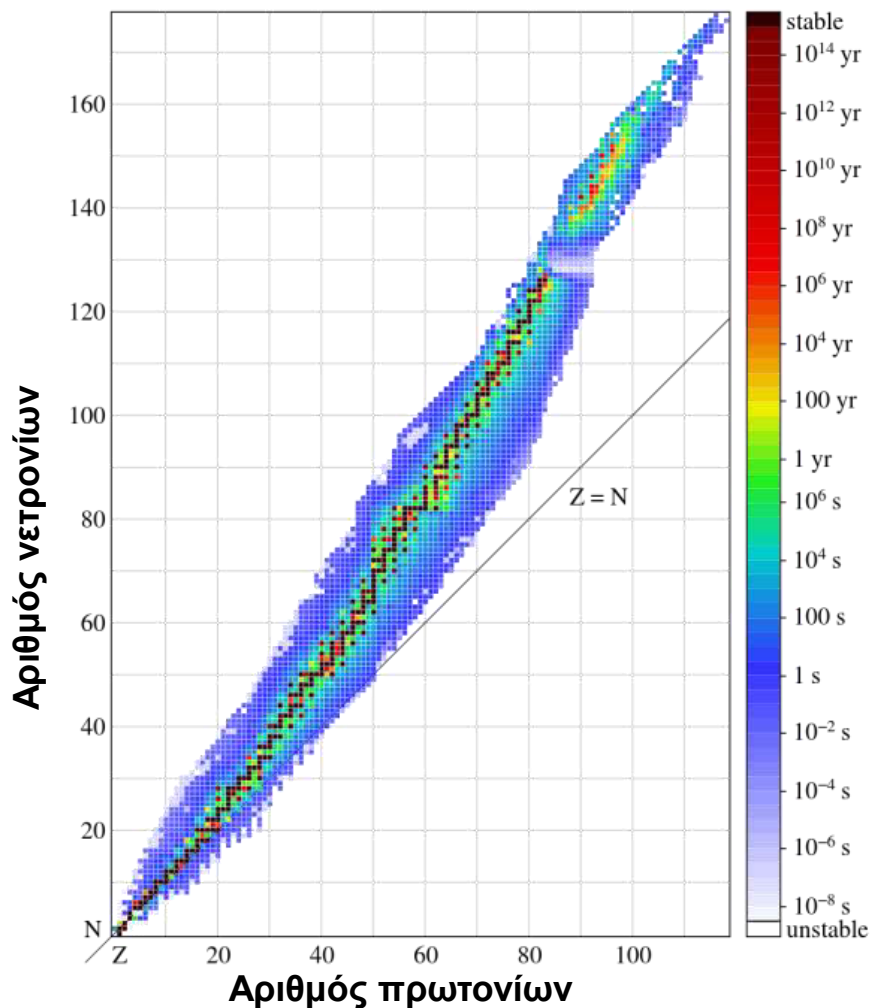
Ατομικός αριθμός

Z

Αριθμός πρωτονίων

Αριθμός ηλεκτρονίων = Αριθμός πρωτονίων

Άτομο



Διάγραμμα ατομικών ισοτόπων
χρωματισμένων με τον χρόνο ημιζωής
(User: BenRG /Wikimedia Commons,
Public domain)

Ιδιότητες υλικών



Άτομο

Πυρήνας

Ατομική μάζα

Πυκνότητα

Σκεδασμός νετρονίων

Ηλεκτρόνια

Δεσμοί

Χημικές Ιδιότητες

Μηχανικές Ιδιότητες

Ηλεκτρικές Ιδιότητες

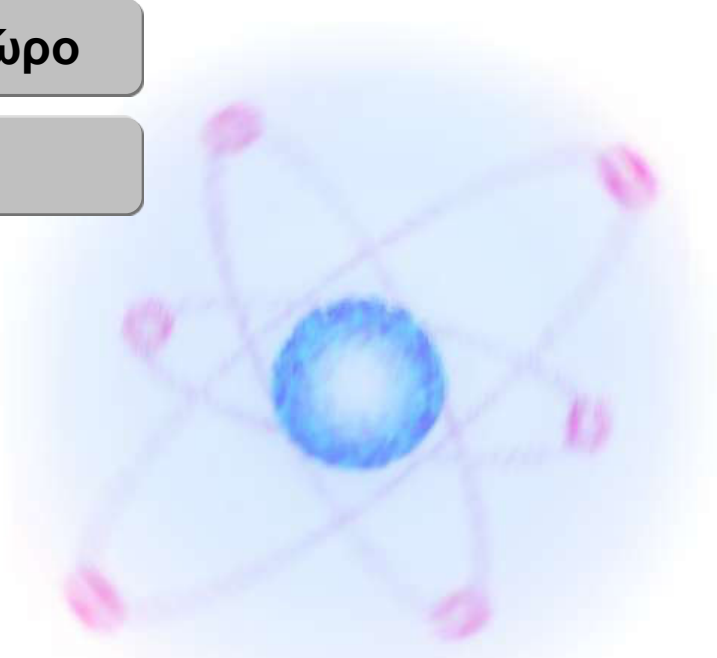
Θερμικές Ιδιότητες

Ηλεκτρονικό νέφος

Κατανομή στον χώρο

Ενέργεια

Άτομο



Το ηλεκτρονικό νέφος γύρω από τον πυρήνα, καθορίζει την ικανότητα του ατόμου να προσλαμβάνει ή να χάνει ηλεκτρόνια δηλαδή να **ιονίζεται**

Δημόκριτος , Άβδηρα Θράκη 400 π.χ.

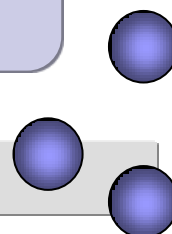


Απεικόνιση του Δημόκριτου από τον Rubens (1788)
(User:Dmitrimirnov/Wikimedia, Public domain)

Η υποδιαίρεση της ύλης δεν μπορεί να είναι ατελείωτη !

Υπάρχει μόνο το κενό και τα αιώνια, αναλείωτα άτομα σε αέναη κίνηση

Άτομο = δεν τέμνεται $\Leftrightarrow$ σκληρή σφαίρα



Dalton , ~1805 μ.Χ.



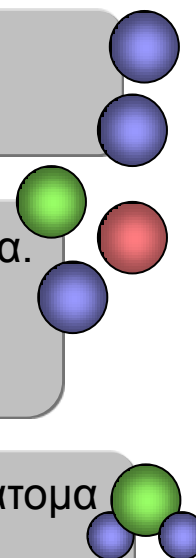
Απεικόνιση του J. Dalton από τον C. Turner
(Library of Congress/Wikimedia, Public domain)

Η ύλη αποτελείται από μικρά αόρατα σωματίδια, τα άτομα

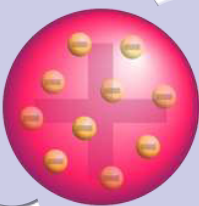
Όλα τα άτομα του ίδιου στοιχείου είναι ίδια.
Άτομα διαφορετικών στοιχείων είναι διαφορετικά

Χημικές ενώσεις δημιουργούνται όταν διαφορετικά άτομα συνδυάζονται σε διάφορες αναλογίες

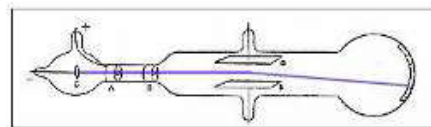
Τα άτομα δεν δημιουργούνται, αλλοιώνονται ή καταστρέφονται κατά τις χημικές αντιδράσεις



Thomson , 1879. Μοντέλο σταφιδόψωμου



Οι καθοδικές ακτίνες είναι
φορτισμένα σωματίδια
με αναλογία μάζας/φορτίου 1000 φορές
μικρότερη από αυτή του φορτισμένου
ατόμου υδρογόνου



Καθοδικός σωλήνας
(JJ Thomson's original publication //Wikimedia,
Public domain)

Τα σωματίδια αυτά είναι
υποδιαιρέσεις του ατόμου,
είναι μοναδικά και ίδια για όλα τα άτομα !

J.J. Thomson
(Public domain)

το άτομο τέμνεται !

The Nobel Prize in Physics 1906

*"In recognition of the great merits of his
theoretical and experimental investigations on
the conduction of electricity by gases"*



J.J. Thomson (Public domain)

Sir Joseph John Thomson

Great Britain

Cambridge University

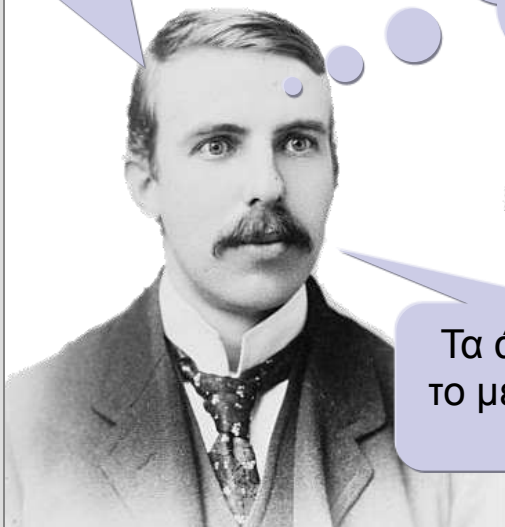
Cambridge, Great Britain

1856 - 1940

Rutherford (1908) : Μοντέλο μικρού ηλιακού συστήματος

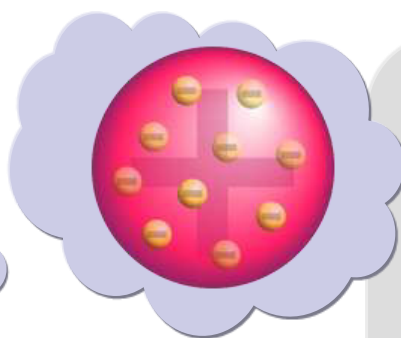


Το μοντέλο του Thomson δεν είναι σωστό !

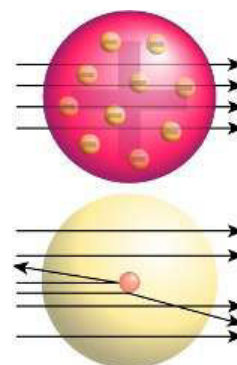


Ernest Rutherford
(Library of Congress/Wikimedia, Public domain)

Τα άτομα είναι κατά το μεγαλύτερο μέρος άδεια!



Τα άτομα έχουν ένα **συμπαγή, βαρύ, θετικά φορτισμένο** πυρήνα και τα αρνητικά φορτισμένα ηλεκτρόνια περιφέρονται γύρω του!



Πείραμα Geiger-Marsden
(User:Fastfission/Wikimedia, Public domain)

The Nobel Prize in Chemistry 1908

"for his investigations into the disintegration of the elements, and the chemistry of radioactive substances"



Ernest Rutherford
(Wikimedia, Public domain)

Ernest Rutherford

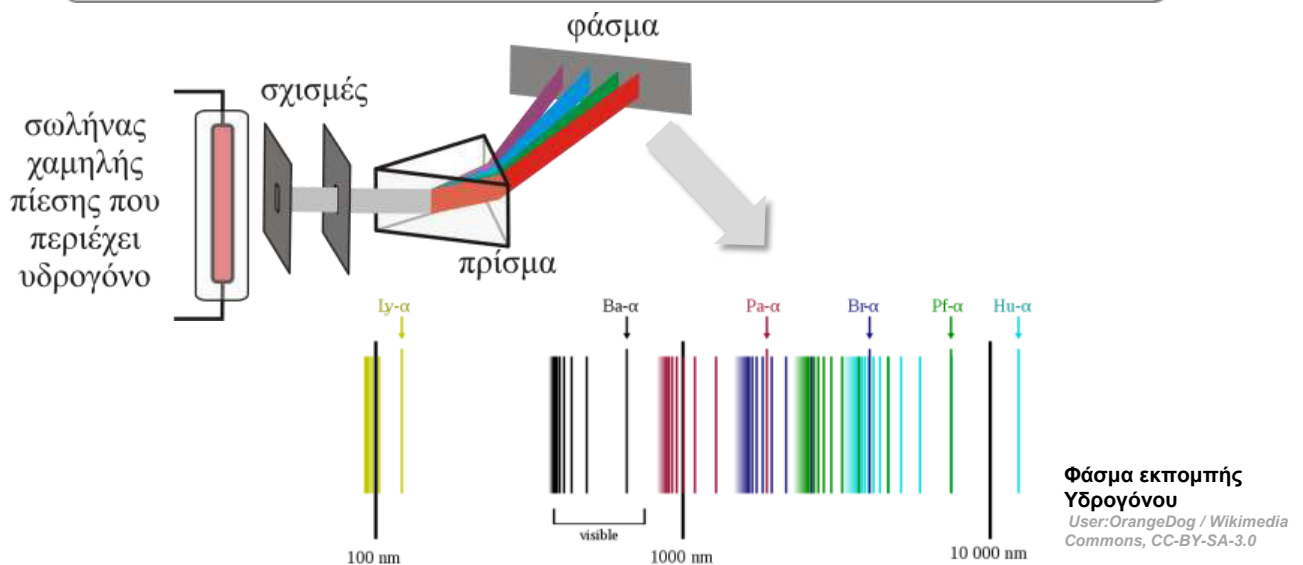
Great Britain

Victoria University

Manchester, Great Britain

1871 - 1937

Φάσμα εκπομπής του H



$$\frac{1}{\lambda} = R \cdot \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Σταθερά

Ακέραιοι αριθμοί

Εμπειρική σχέση
Rydberg

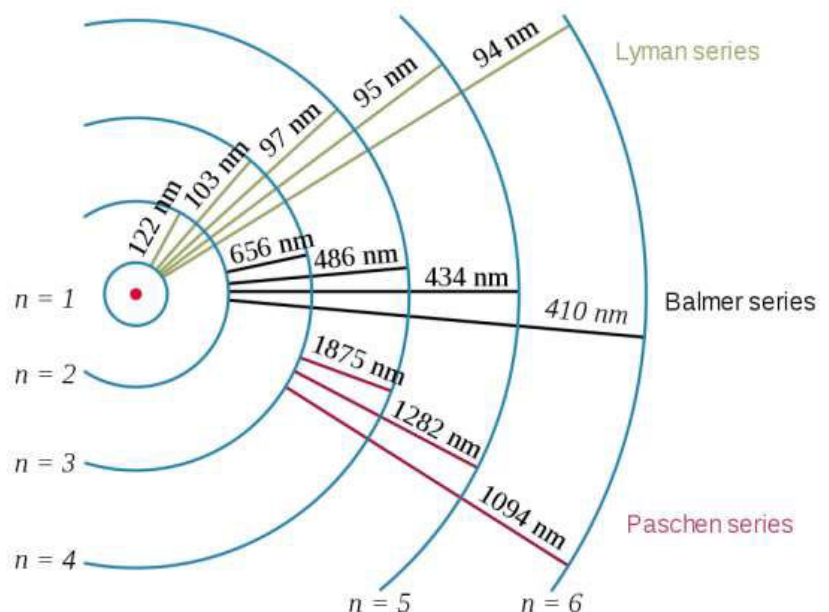
Bohr (1913)

Τα ηλεκτρόνια βρίσκονται σε συγκεκριμένα τροχιακά με ορισμένη ενέργεια!



Niels Bohr
(Wikimedia, Public domain)

Εκπομπή ακτινοβολίας μόνο με κβαντικό άλμα από την μια στάθμη στην άλλη!



Ηλεκτρονιακές μεταβάσεις μεταξύ ενεργειακών σταθμών στο άτομο του υδρογόνου
 User: Szdori / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

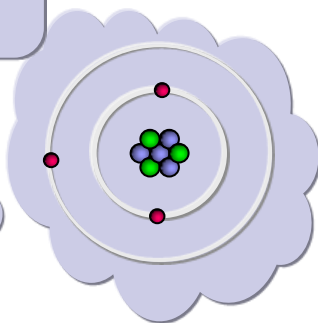
Bohr (1913)



Τα ηλεκτρόνια βρίσκονται σε συγκεκριμένα τροχιακά με ορισμένη ενέργεια!



Niels Bohr
(Wikimedia, Public domain)

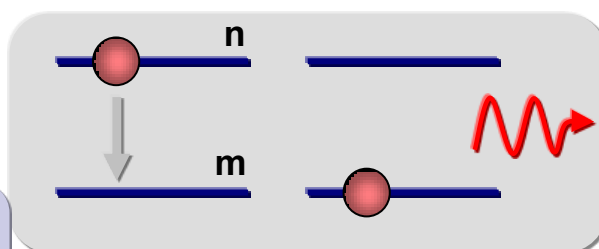


$$E_n = -\frac{Z^2 R_E}{n^2}^*$$

Εσωτερικά τροχιακά: χαμηλή ενέργεια

Εξωτερικά τροχιακά: υψηλή ενέργεια

$$^*E_n = -\frac{(Z-1)^2 R_E}{n^2}, \forall Z > 1$$



$$\hbar\omega = E_n - E_m$$

Εκπομπή ακτινοβολίας μόνο με κβαντικό άλμα από την μια στάθμη στην άλλη!

$$h = 6.626\,068\,96(33) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 4.135\,667\,33(10) \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} \quad R_E \sim 13.6 \text{ eV}$$

The Nobel Prize in Physics 1922

"for his services in the investigation of the structure of atoms and of the radiation emanating from them"



Niels Bohr
(Wikimedia, Public domain)

Niels Henrik David Bohr

Denmark

Copenhagen University

Copenhagen, Denmark

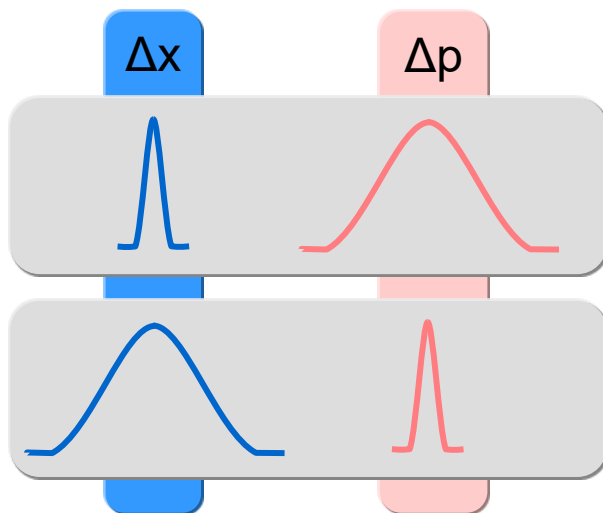
1885 - 1962

Heisenberg (1927): Αρχή της αβεβαιότητας



Όσο **ακριβέστερα** καθορίζεται η θέση, τόσο πιο **αβέβαια** γίνεται η ορμή την ίδια στιγμή, και αντιστρόφως!

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$



Werner Karl Heisenberg
(Wikimedia, Public domain)

The Nobel Prize in Physics 1932

"for the creation of quantum mechanics, the application of which has, inter alia, led to the discovery of the allotropic forms of hydrogen"



Werner Karl Heisenberg
(Nobel Foundation/ Wikimedia, Public domain)

Werner Karl Heisenberg

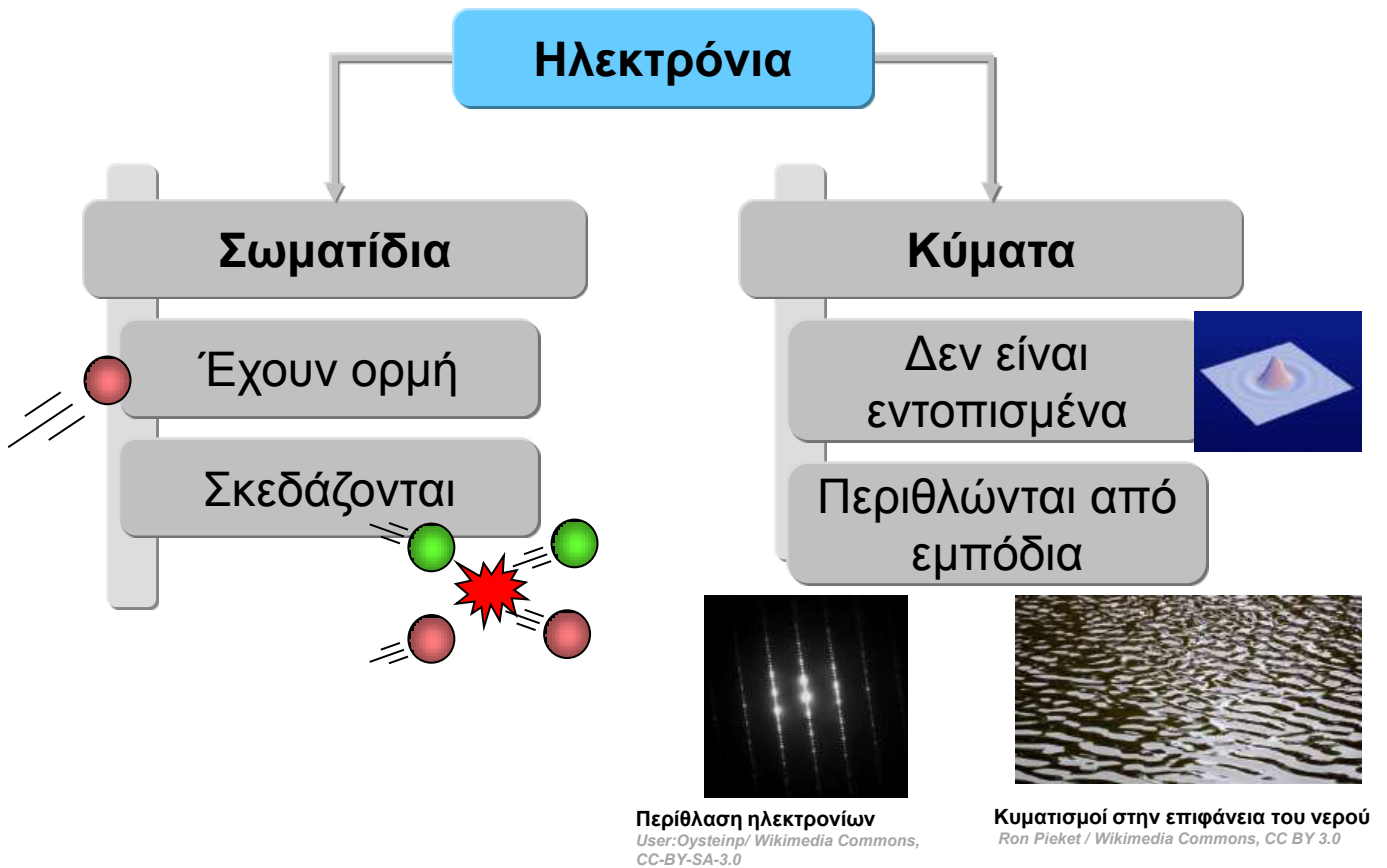
Germany

Leipzig University

Leipzig, Germany

1901 - 1976

Κύματα ή σωματίδια;



Κβαντομηχανική (Quantum mechanics)

Εξίσωση Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Κυματοσυνάρτηση
(wave function)

Δυναμικό
(potential)

$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ Πυκνότητα πιθανότητας να βρούμε το σωματίδιο στην θέση $\mathbf{r}$

$$E = \hbar \omega$$

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$$

Τα ηλεκτρόνια που περιβάλλουν τον πυρήνα μπορούν να περιγραφούν σαν **ενεργειακά κύματα** με συγκεκριμένο **πλάτος** και **μήκος κύματος**.

Τα χαρακτηριστικά των ηλεκτρονικών κυμάτων δίνονται από τη λύση της **εξίσωσης Schrödinger**.

Για τα ηλεκτρόνια του ατόμου μόνο συγκεκριμένα **μήκη κύματος, ενέργειες και πλάτη** ικανοποιούν την εξίσωση Schrödinger

Οι έγκυρες λύσεις της εξίσωσης **Schrödinger** ταξινομούνται με βάση **3 ακέραιους αριθμούς** και έναν ακόμη αριθμό που μπορεί να είναι ή $-1/2$ ή $+1/2$

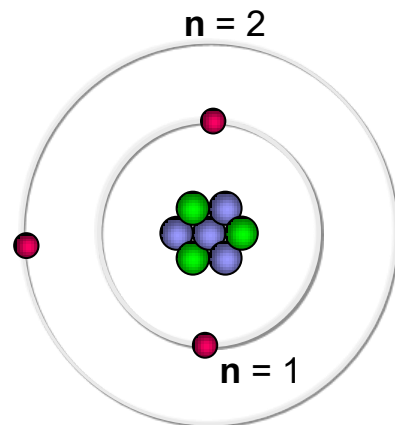
Οι αριθμοί αυτοί είναι οι **κβαντικοί αριθμοί** του ηλεκτρονίου, που λέγονται **n , l , m** , και **spin**.

Κύριος κβαντικός αριθμός

n : 1, 2, 3 ...

Ενέργεια του ηλεκτρονίου

Απόσταση από τον πυρήνα



Μοντέλο Bohr: $E_n = -\frac{Z^2 R_E}{n^2}^*$

$^*E_n = -\frac{(Z-1)^2 R_E}{n^2}, \forall Z > 1$

1	K
2	L
3	M
4	N
5	O

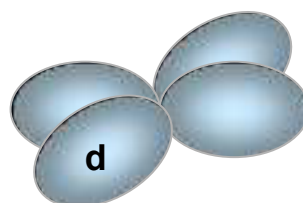
Ονομάζεται και ηλεκτρονική στοιβάδα

Κβαντικός αριθμός στροφορμής

$$\ell : 0, 1, 2 \dots, (n-1)$$

Στροφορμή του ηλεκτρονίου

Σχήμα του ηλεκτρονικού νέφους



0

1

2

3

4

5

Ιστορικά προέκυψαν από την φασματοσκοπία

s (sharp)

p (principal)

d (diffuse)

f (fundamental)

g

h

Μαγνητικός κβαντικός αριθμός

$$m: -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$$

Ενεργειακές στάθμες της υποστοιβάδας

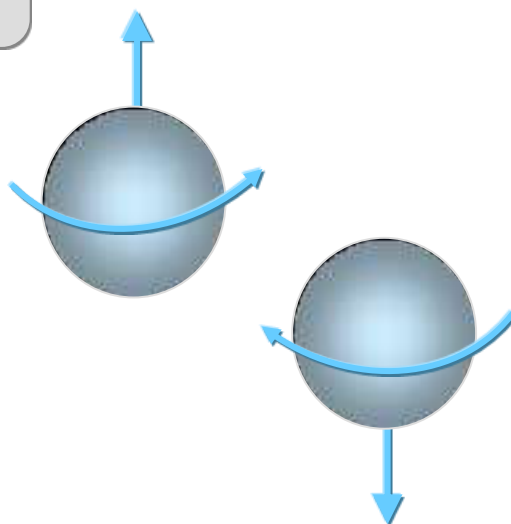
Σχέση μεταξύ κβαντικών αριθμών

Τροχιακό	Τιμές	Αριθμός τιμών για το m
s	$\ell=0, m=0$	1
p	$\ell=1, m=-1, 0, +1$	3
d	$\ell=2, m=-2, -1, 0, +1, +2$	5
f	$\ell=3, m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$	7
g	$\ell=4, m = -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, +4$	9

Απουσία μαγνητικού πεδίου οι στάθμες δεν διαχωρίζονται

Spin (Ιδιοστροφομή)

$$s: -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$



Τροχιακά

	s ($l=0$)	p ($l=1$)	d ($l=2$)	f ($l=3$)
$n=1$				
$n=2$		  		
$n=3$		  	    	
$n=4$		  	    	      
$n=5$		  	    	
$n=6$		  		
$n=7$				

Ατομικά τροχιακά

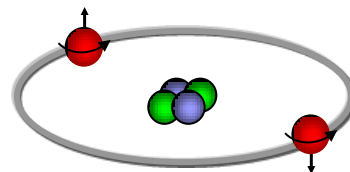
User: DLMacks / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Πώς γίνεται η πλήρωση των ηλεκτρονικών στοιβάδων ;

Απαγορευτική αρχή του Pauli

Στο ίδιο άτομο δεν μπορούν να υπάρξουν 2 ηλεκτρόνια με κοινούς και τους 4 κβαντικούς αριθμούς.

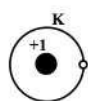
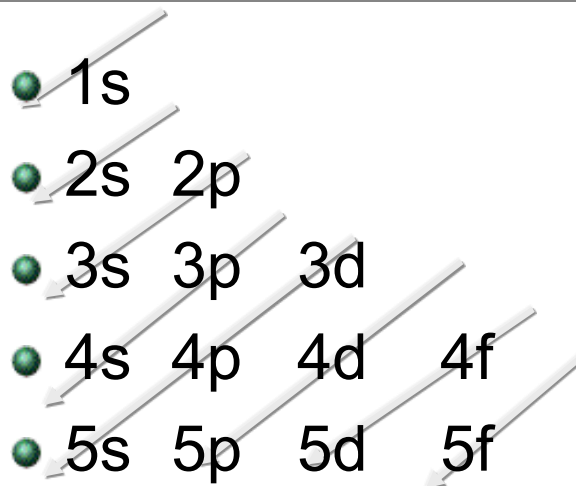
Διαθέσιμες στάθμες	
spin	1
m	2
ℓ	$2(2\ell + 1)$
n	$2n^2$



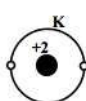
He

Πλήρωση ηλεκτρονικών στιβάδων

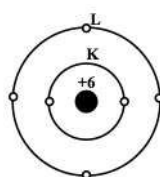
Οι στιβάδες και τροχιακά χαμηλότερης ενέργειας συμπληρώνονται πρώτα



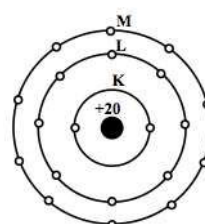
Hydrogen



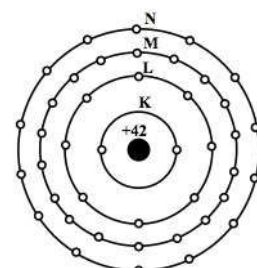
Helium



Carbon



Calcium



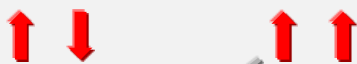
Molybdenum

Ενέργειες τροχιακών (ακριβέστερη περιγραφή)

Στα άτομα με πολλά ηλεκτρόνια οι ενέργειες των τροχιακών επηρεάζονται από τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων

«Θωράκιση» του φορτίου του πυρήνα από τα «εσωτερικά» ηλεκτρόνια

Spin-Spin

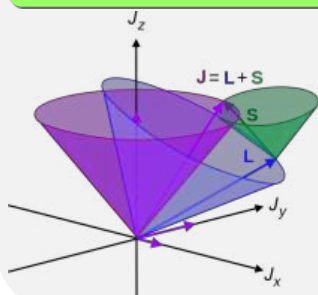


μικρότερη πιθανότητα να βρίσκονται κοντά $\Rightarrow$ Χαμηλότερη ενέργεια

1^{ος} κανόνας Hund

Ο συνδυασμός με την μέγιστη συνολική **ιδιοστροφορμή** έχει χαμηλότερη ενέργεια

Orbit - Orbit



Σχηματική απεικόνιση συνολικής στροφορμής
(user:Maschen /Wikimedia, Public domain)

2^{ος} κανόνας Hund

Ο συνδυασμός με την μέγιστη συνολική **στροφορμή** έχει χαμηλότερη ενέργεια

Θεμελιώδης κατάσταση των 10 πρώτων ατόμων

	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z	3s	3p _x	3p _y	3p _z
H	↑								
He	↑↓								
Li	↑↓	↑							
Be	↑↓	↑↓							
B	↑↓	↑↓	↑						
C	↑↓	↑↓	↑	↑					
N	↑↓	↑↓	↑	↑	↑				
O	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑				
F	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑				
Ne	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓				

Ηλεκτρόνια σθένους

Τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής στιβάδας κάθε ατόμου λέγονται ηλεκτρόνια σθένους
Με αυτά τα ηλεκτρόνια αλληλεπιδρά το άτομο με το περιβάλλον του.

Ιονισμός

προσθήκη ή αφαίρεση ηλεκτρονίων σθένους.

Οι **δεσμοί** μεταξύ ατόμων γίνονται με αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων σθένους

Η ηλεκτρική και θερμική αγωγιμότητα των μετάλλων οφείλεται στα ηλεκτρόνια σθένους

Διαμορφώσεις

Ευγενών αερίων

Τα **s**, **p** τροχιακά της εξωτερικής στιβάδας είναι συμπληρωμένα, ενώ τα τροχιακά όλων των μικρότερων στιβάδων είναι συμπληρωμένα

Συμπληρωμένα d τροχιακά

Συμπληρωμένα τα **d** τροχιακά ενώ τα **s**, **p** τροχιακά της αμέσως επόμενης στιβάδας είναι κενά

[Sn]⁺⁴: [Kr] 4d¹⁰ πιο σταθερό από **[Sn]⁺²: [Kr] 4d¹⁰ 5s²**

Διαμορφώσεις

Ημισυμπληρωμένα d ή p τροχιακά

5 ηλεκτρόνια σε d τροχιακά ή 3 ηλεκτρόνια σε p τροχιακά

$[\text{Fe}]^{+3}: [\text{Ar}] 3d^5$ ΠΙΟ ΣΤΑΘΕΡΟ ΑΠΟ $[\text{Fe}]^{+2}: [\text{Ar}] 3d^6$

Συμπληρωμένα s τροχιακά

Συμπληρωμένο το τροχιακό s

Περιοδικός πίνακας των στοιχείων

	I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII	
1	1 H																		2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo	
8	119 Uun																		
* Lanthanides			57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
** Actinides			89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

οι ρωμαϊκοί αριθμοί δίνουν το σθένος

Περιοδικός Πίνακας στοιχείων

User: Armtuk / Wikimedia Commons
CC-BY-SA-3.0

Περιοδικός Πίνακας των στοιχείων
User: Armtuk / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Alkali metals	Alkaline earth metals	Lanthanides	Actinides	Transition metals
Poor metals	Metalloids	Nonmetals	Halogens	Noble gases

State at standard temperature and pressure

Atomic number in red: gas

Atomic number in blue: liquid

Atomic number in black: solid

solid border: at least one isotope is older than the Earth (Primordial elements)

dashed border: at least one isotope naturally arise from decay of other chemical elements and no isotopes are older than the earth

dotted border: only artificially made isotopes (synthetic elements)

no border: undiscovered

Στοιχεία της ίδιας στήλης (ομάδας ή οικογένειας) έχουν τον ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων σθένους

Τα ηλεκτρόνια σθένους είναι τα ηλεκτρόνια που αλληλεπιδρούν με τον «έξω κόσμος»

Τα στοιχεία της ίδιας ομάδας έχουν παρόμοιες ιδιότητες !

Υλικά Ι, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Διδάσκων: Δημήτρης Παπάζογλου

Εξωτερικά τροχιακά στον περιοδικό πίνακα

s-block												p-block					8A
1A	2A	Transition elements										3A	4A	5A	6A	7A	1s
←1s→		d-block										2p					
←2s→												3p					
←3s→	3B	4B	5B	6B	7B	8B	1B	2B				4p					
←4s→						3d						5p					
←5s→						4d						6p					
←6s→						5d											
←7s→						6d											
Inner-transition elements																	
f-block																	

Εξωτερικά τροχιακά στον Περιοδικό Πίνακα των στοιχείων
User: Sch0013r / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Εξωτερικά τροχιακά

Αμέταλλα

κυρίως p

Μέταλλα

κυρίως s, d, ή f (λανθανίδες-ακτινίδες)

Ηλεκτρονική δομή αλογόνων (ομάδα VII)

	VIIA	2
9	F	10
17	Cl	18
35	Br	36
53	I	54
85	At	86

1	2	3	4	5	6	n
2	7					
2	8	7				
2	8	18	7			
2	8	18	18	7		
2	8	18	32	18	7	

Έχουν 7 ηλεκτρόνια σθένους

Δέκτες ηλεκτρονίων

Αμέταλλα

Ηλεκτρονική δομή αλκαλικών μετάλλων (ομάδα I)

	I	2
3	Li	4
11	Na	12
19	K	20
37	Rb	38
55	Cs	56
87	Fr	88

1	2	3	4	5	6	7	n
2	1						
2	8	1					
2	8	8	1				
2	8	18	8	1			
2	8	18	18	8	1		
2	8	18	32	18	8	1	

Έχουν 1 ηλεκτρόνιο σθένους

Δότες ηλεκτρονίων

Μέταλλα

Ηλεκτρονική δομή ευγενών αερίων (ομάδα VIII)

	1	2	3	4	5	6	n
2 He	2	8					
10 Ne	2	8	8				
18 Ar	2	8	18	8			
36 Kr	2	8	18	18	8		
54 Xe	2	8	18	18	18	8	
86 Rn	2	8	18	32	18	8	

Αδρανή στοιχεία

Συμπληρωμένη εξωτερική στοιβάδα



Ενότητα 4: Δεσμοί

4

Δεσμοί

Χημικοί δεσμοί μεταξύ ατόμων γίνονται με τα **ηλεκτρόνια σθένους** κατά τέτοιο τρόπο ώστε να **ελαττώνεται** η συνολική ενέργεια του συστήματος



Η ελάχιστη συνολική ενέργεια επιτυγχάνεται όταν κάθε άτομο έχει οκτώ ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στιβάδα

Πρωτεύοντες δεσμοί

Ιοντικός δεσμός

Τα άτομα ανταλλάσσουν ηλεκτρόνια σθένους

Ομοιοπολικός δεσμός

Τα άτομα μοιράζονται ηλεκτρόνια σθένους

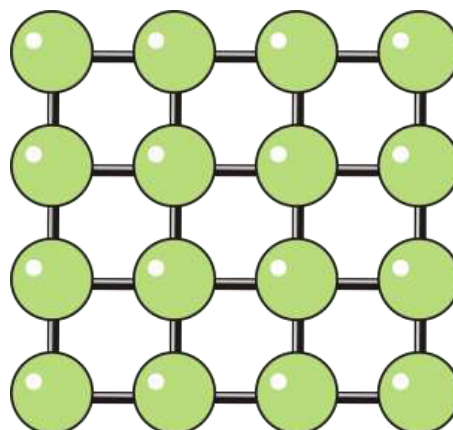
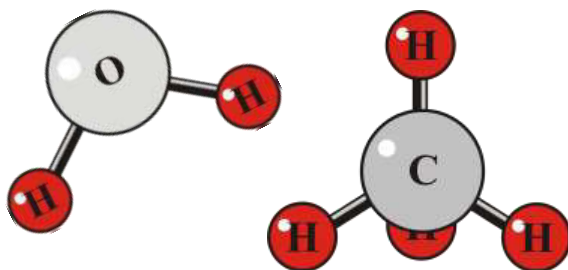
Μεταλλικός δεσμός

Τα ηλεκτρόνια σθένους είναι κοινά για όλα τα άτομα

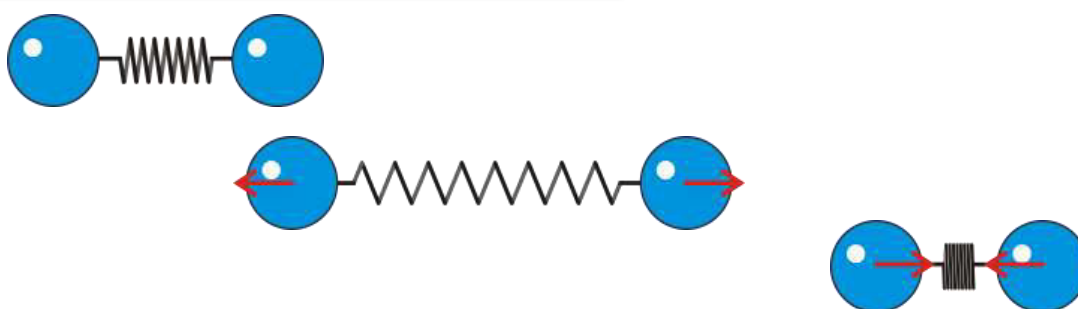
Μηχανικά ανάλογα



Οι δεσμοί ως «συμπαγείς» ράβδοι



Οι δεσμοί ως «ελατήρια»

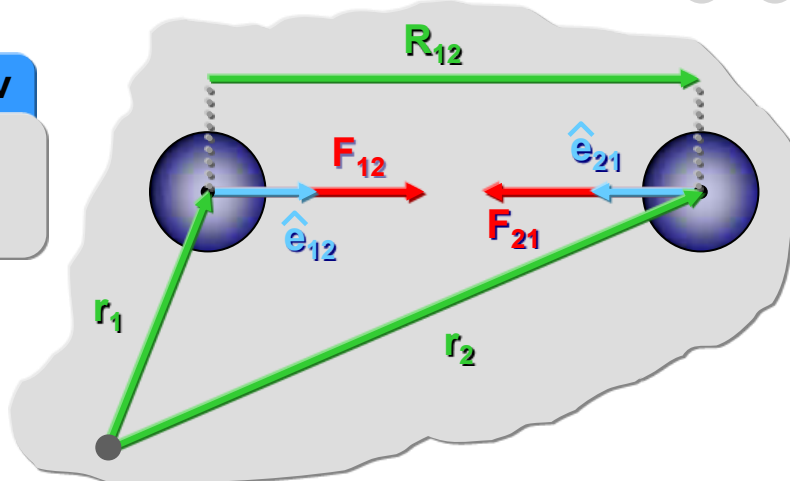


Δυνάμεις μεταξύ των ατόμων



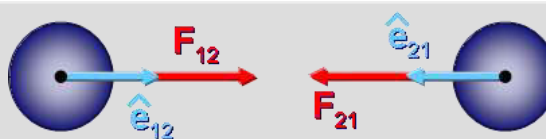
Κεντρικό πεδίο δυνάμεων

$$\mathbf{F}_{12} = f(R_{12}) \mathbf{e}_{12}$$



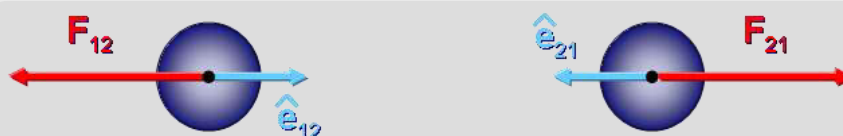
ΕΛΚΤΙΚΕΣ

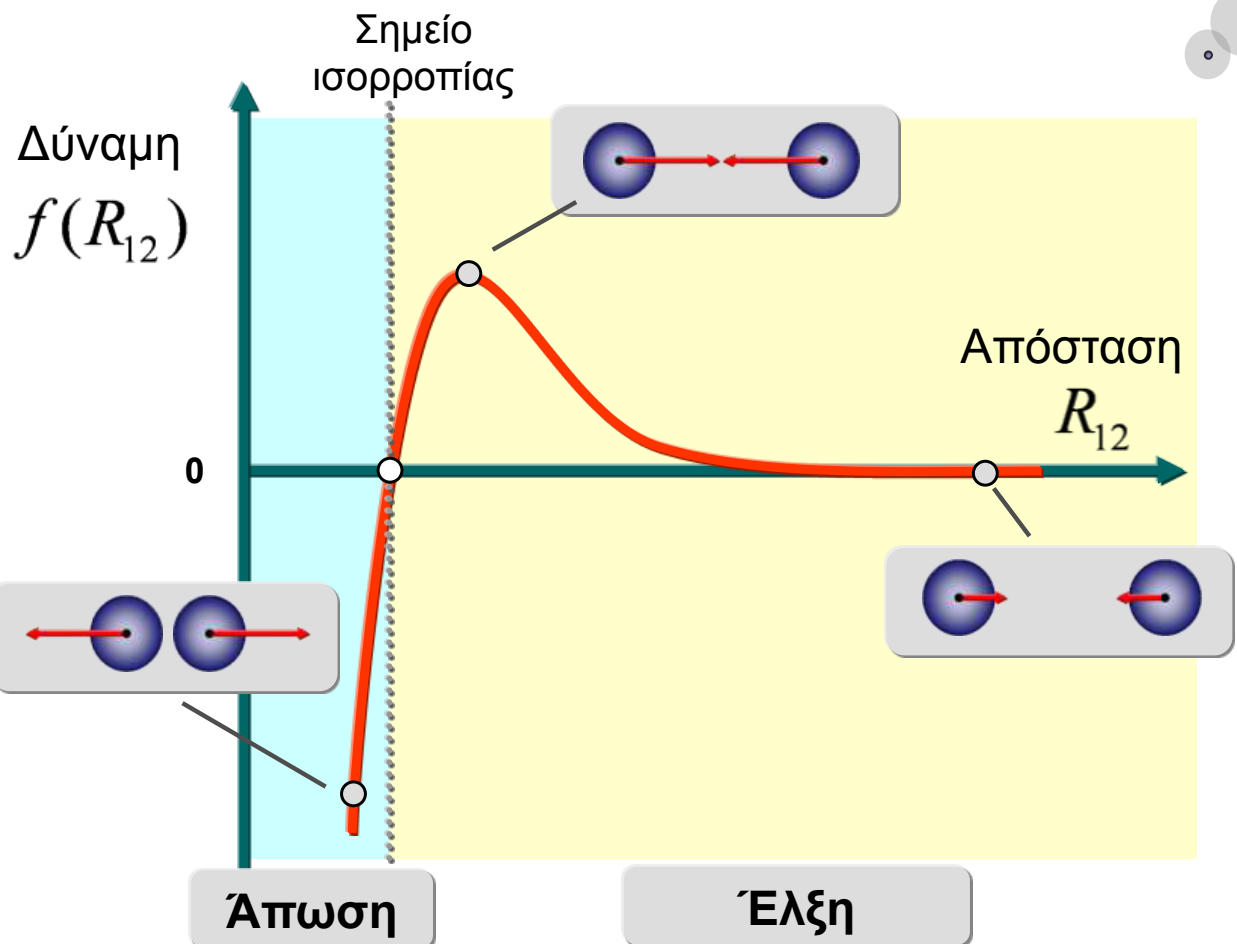
$$f(R_{12}) > 0$$



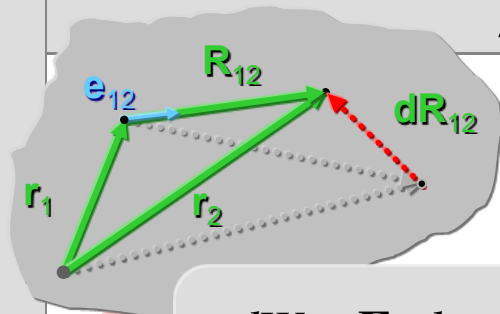
ΑΠΩΣΤΙΚΕΣ

$$f(R_{12}) < 0$$





Δυναμικό



$$\left. \begin{aligned} dW &= \mathbf{F}_{12} d\mathbf{r}_1 + \mathbf{F}_{21} d\mathbf{r}_2 = -\mathbf{F}_{12} d\mathbf{R}_{12} \\ \mathbf{F}_{12} &= f(R_{12}) \mathbf{e}_{12} \end{aligned} \right\} \Rightarrow dW = -f(R_{12}) dR_{12}$$

Έργο εσωτερικών δυνάμεων

$dW = -dE_p$

εσωτερική ενέργεια

A

B

$$E_p(B) - E_p(A) = -\int_A^B dW$$

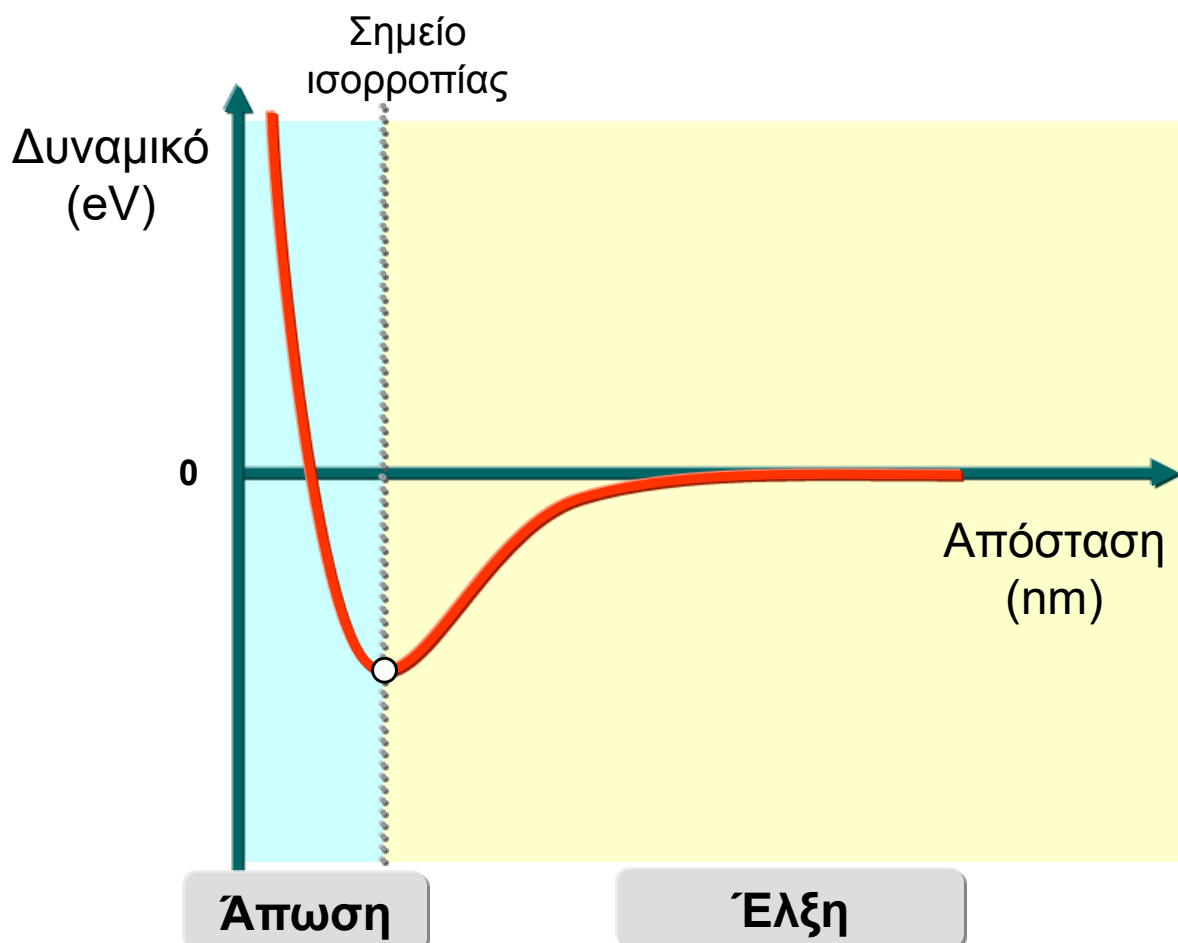
The diagram shows a path from point A to point B. A pink box contains the equation $dW = -dE_p$, where dW is labeled 'Έργο εσωτερικών δυνάμεων' (work of internal forces) and dE_p is labeled 'εσωτερική ενέργεια' (internal energy). Below this, a grey box contains the integrated equation $E_p(B) - E_p(A) = -\int_A^B dW$.

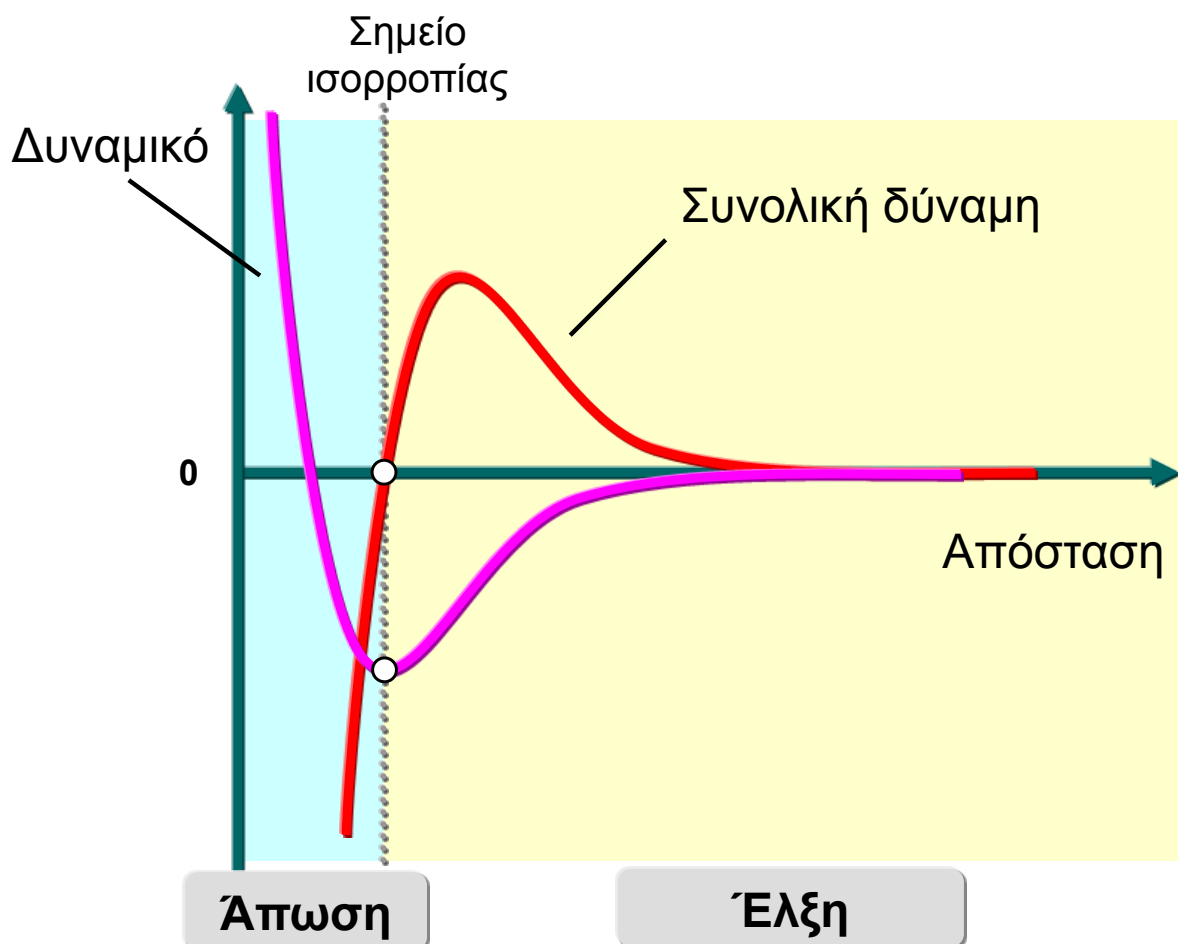
Δυναμικό

$$E_p(\infty) - E_p(A) = \int_A^{\infty} f(R_{12}) dR_{12}$$

Π.χ. για κεντρικό πεδίο δυνάμεων Coulomb:

$$\left. \begin{aligned} E_p(r_A) &= - \int_A^{\infty} f(R_{12}) dR_{12} \\ f(R_{12}) &= \frac{A}{r^2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow E_p(r_A) = - \frac{A}{r_A}$$





Ιοντικός Δεσμός



Τα άτομα ανταλλάσσουν ηλεκτρόνια σθένους

Ενέργεια που απαιτείται για το σχηματισμό του:

Ενέργεια που χρειάζεται για τη μεταφορά φορτίου

Το έργο που χρειάζεται για να υπερνικηθούν οι μικρής εμβέλειας απωστικές δυνάμεις μεταξύ ανιόντος και κατιόντος

Το έργο των ελκτικών δυνάμεων μεταξύ ανιόντος και κατιόντος

Δυναμικό Ιονισμού

απαιτούμενο έργο για την απόσπαση ηλεκτρονίου από το ηλεκτροθετικό άτομο

I_Z

Στοιχείο (eV)

Li	5.39
Na	5.14
K	4.34
Rb	4.18
Cs	3.89
Fr	3.83

Ηλεκτροσυγγένεια

απαιτούμενη ενέργεια για την πρόσληψη ηλεκτρονίου από το ηλεκτραρνητικό άτομο

A_Z

Στοιχείο (eV)

F	- 3.57
Cl	- 3.70
Br	- 3.53
I	- 3.06
O	- 1.47
S	- 2.07

Υλικά Ι, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Διδάσκων: Δημήτρης Παπάζογλου

Ηλεκτραρνητικότητα (χ)

μέτρηση της ικανότητας ενός ατόμου ή μορίου να έλκει ηλεκτρόνια στα πλαίσια ενός χημικού δεσμού

Κλίμακα Pauling

υπολόγισε την ενέργεια του δεσμού **A-B** D_{AB} που είναι κατά Δ_{AB} μεγαλύτερη του $\frac{1}{2} (D_{AA} + D_{BB})$ τελικά:
 $\Delta_{AB} \approx 23.06 (\chi_A - \chi_B)^2$

$$\chi(H) = 2.2$$

$$\chi(F) = 3.98 \text{ max}$$

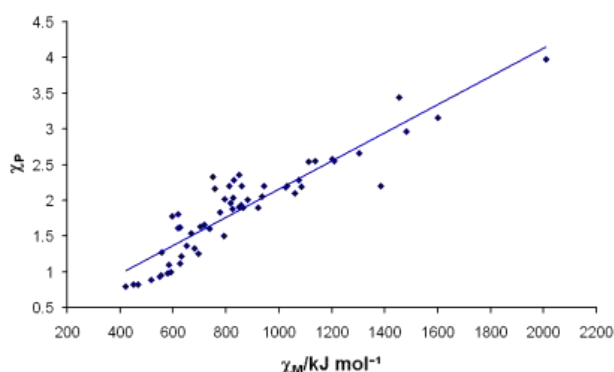
$$\chi(Fr) = 0.7 \text{ min}$$

Κλίμακα Mulliken

$$\chi_z = \frac{1}{2} (I_z + A_z)$$

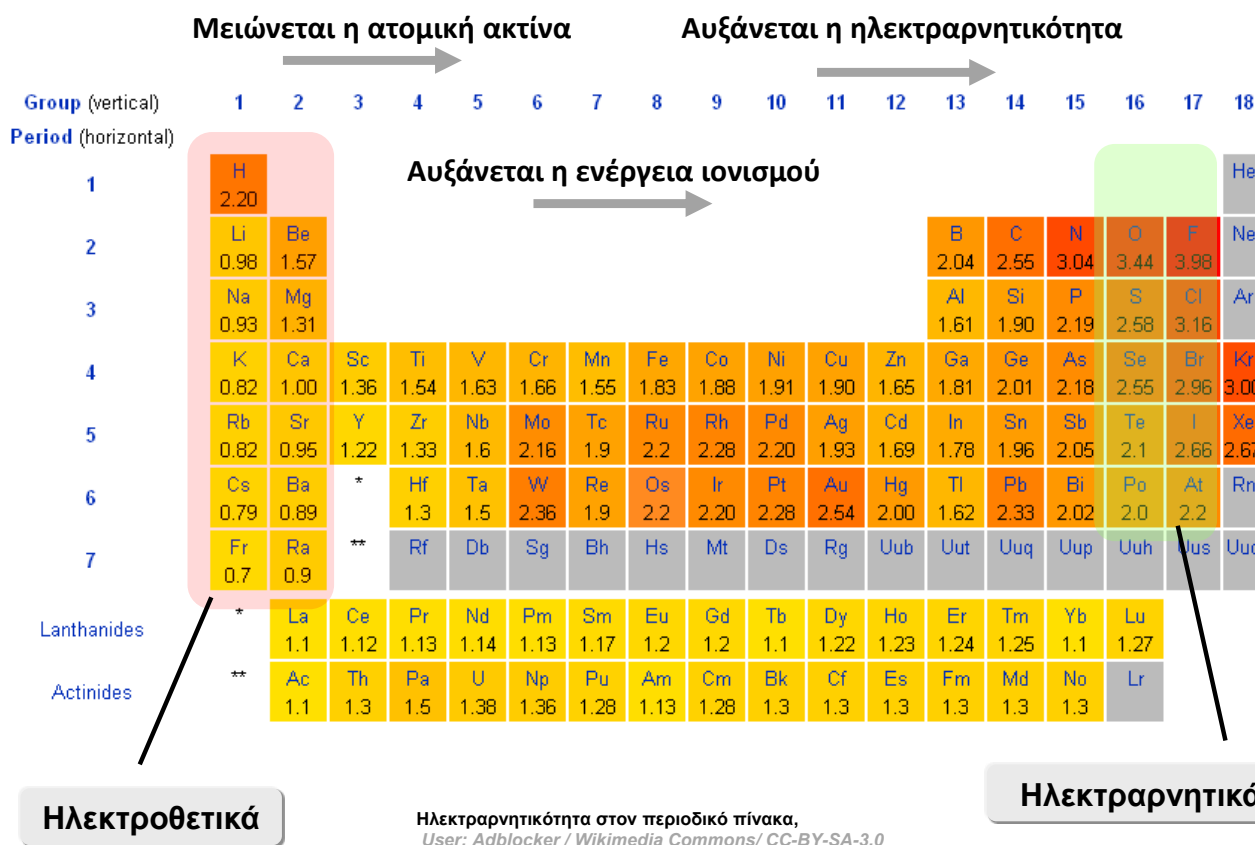
Δυναμικό ιονισμού

ηλεκτροσυγγενεια



Συσχέτιση ηλεκτραρνητικότητας κατά Pauling και Mulliken,
 User:Physchim62/ Wikimedia Commons/ CC-BY-SA-3.0

Ηλεκτραρνητικότητα (Κλίμακα Pauling)

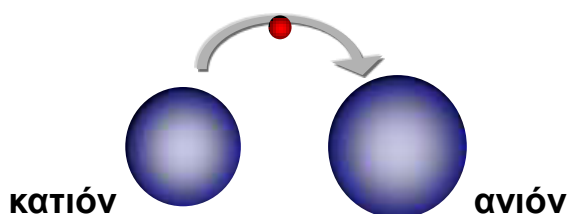


Ηλεκτραρνητικότητα και μεταφορά φορτίου



Η τάση για μεταφορά φορτίου αυξάνει με την αύξηση της διαφοράς ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ των δύο ατόμων

Όταν ένα **ηλεκτραρνητικό** και ένα **ηλεκτροθετικό** άτομο πλησιάσουν, μπορούν και τα δύο να αποκτήσουν **δομή ευγενών αερίων** μεταφέροντας ηλεκτρόνια σθένους από το ηλεκτροθετικό στο ηλεκτραρνητικό άτομο



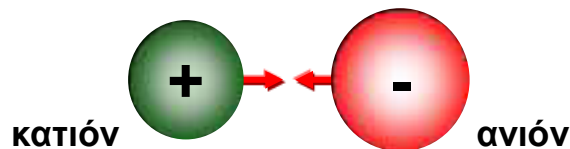
Ηλεκτραρνητικότητα και μεταφορά φορτίου



Ιοντικός Δεσμός

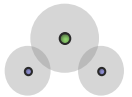
Μετά τη μεταφορά φορτίου, τα δύο άτομα είναι ηλεκτρικά φορτισμένα: το ηλεκτραρνητικό με αρνητικό φορτίο (ανιόν) και το ηλεκτροθετικό με θετικό φορτίο (κατιόν)

Τα αντίθετα φορτισμένα ιόντα έλκονται με δυνάμεις Coulomb



Δυνάμεις μεταξύ των ατόμων

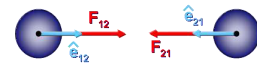
$$\mathbf{F}_{12} = f(r) \mathbf{e}_{12}$$



Ελκτικές

Δυνάμεις Coulomb

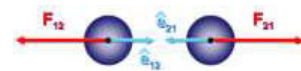
$$f_E(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2}$$



Απωστικές

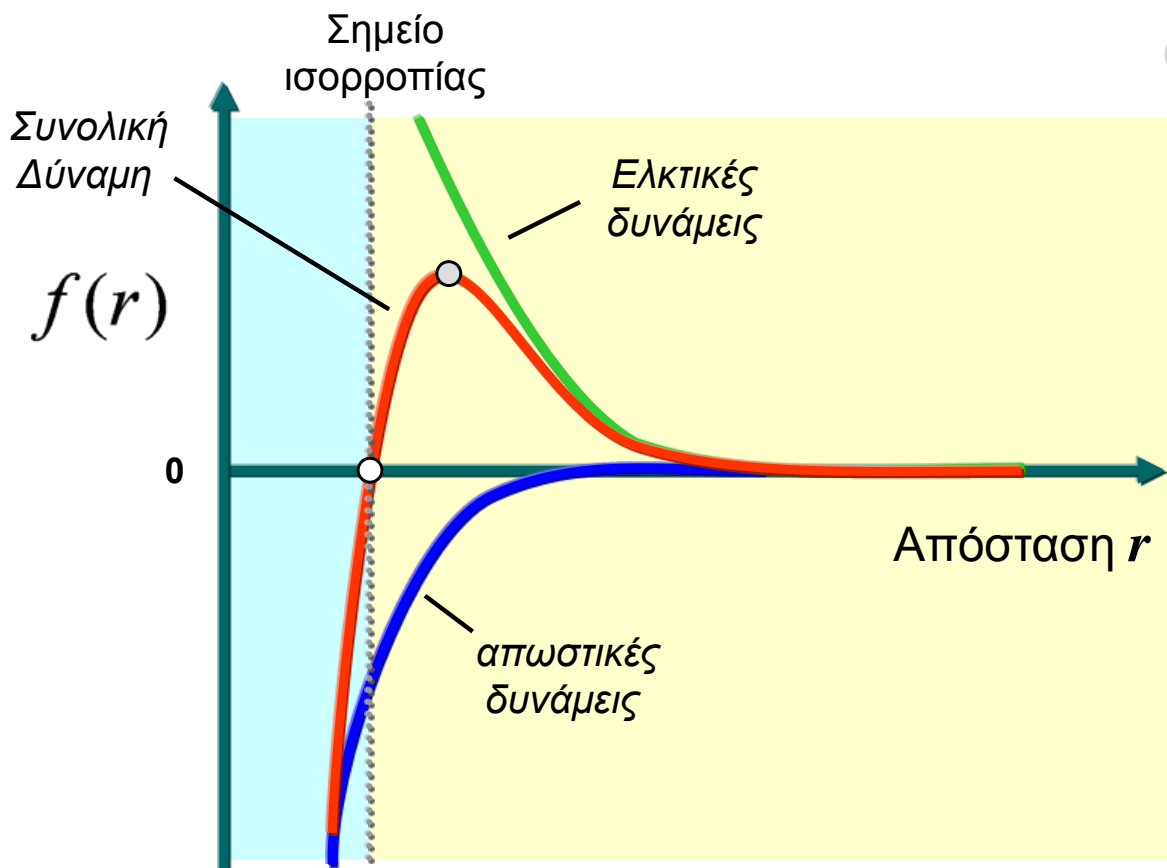
Όταν τα άτομα πλησιάζουν τα ηλεκτρονικά τους νέφη αλλά και οι πυρήνες τους απωθούνται. Οι απωστικές δυνάμεις είναι **πολύ ισχυρές** σε πολύ μικρές αποστάσεις

$$f_A(r) = -\frac{K}{r^m}, \quad m > 2$$



$$m \sim 12$$

Ιοντικός δεσμός



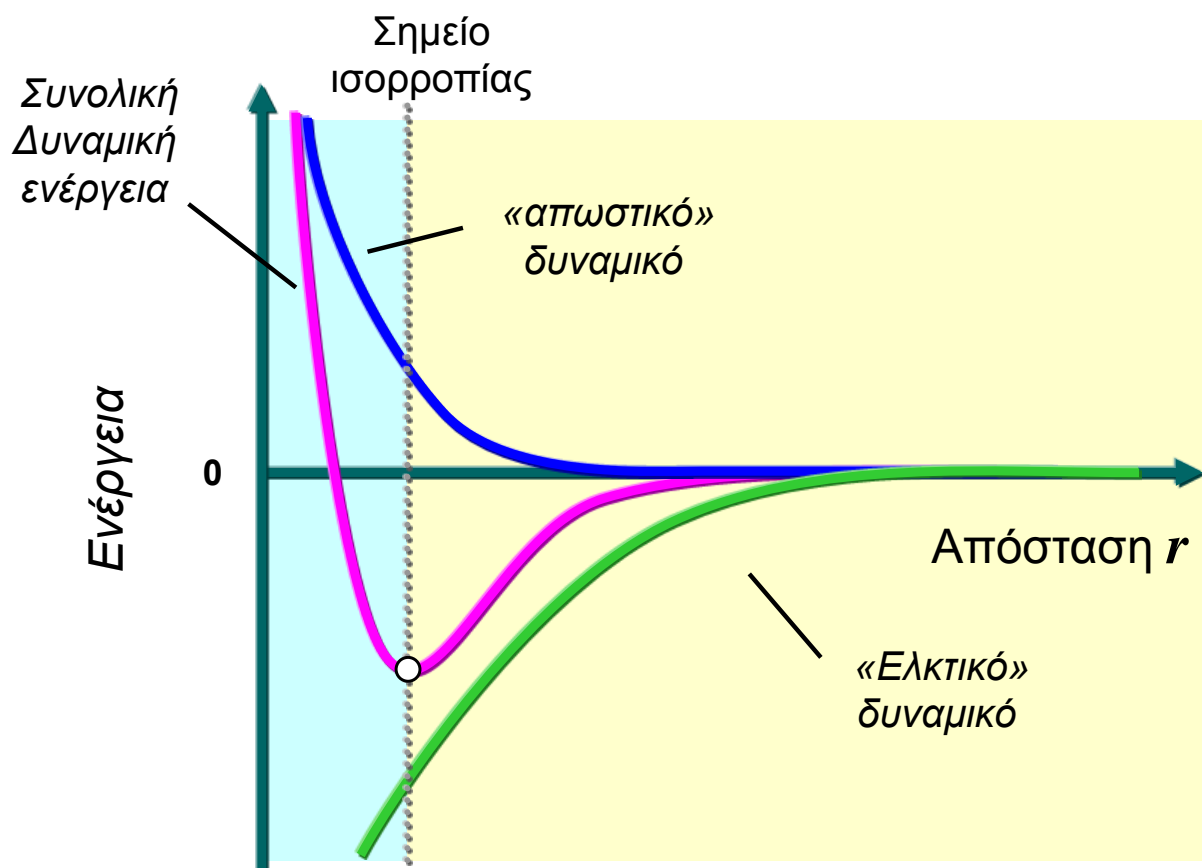
$$f(r) = f_E(r) + f_A(r)$$

Δυναμική ενέργεια

$$U(r) = -\int_r^{\infty} f(r) dr = -\left(\int_r^{\infty} \overbrace{f_A(r)}^{\text{Ελκτικές}} dr + \int_r^{\infty} \overbrace{f_E(r)}^{\text{Απωστικές}} dr \right)$$

$$U(r) = -\left(\frac{e^2 |n_1 n_2|}{4\pi \epsilon_0} \right) \cdot \frac{1}{r} + \left(\frac{K}{m-1} \right) \cdot \frac{1}{r^{m-1}}$$

e φορτίο ηλεκτρονίου, n_1, n_2 βαθμός ιονισμού ανιόντος και κατιόντος

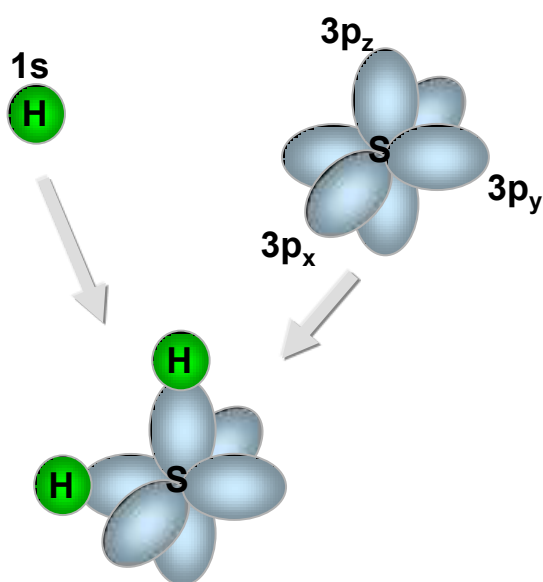


Ομοιοπολικός δεσμός



Τα άτομα αμοιβαία συνεισφέρουν ηλεκτρόνια

Τα τροχιακά αλληλεπικαλύπτονται !



Με αυτό τον τρόπο και τα δύο άτομα έχουν την εξωτερική τους στοιβάδα συμπληρωμένη με 8 ηλεκτρόνια

Υβριδισμός



Συγχώνευση διαφορετικών αλλά παρόμοιας ενέργειας τροχιακών ενός ατόμου σε ισοδύναμα φ τροχιακά

Κανόνες

Τροχιακά του ίδιου ατόμου, ίσης περίπου ενέργειας

Αριθμός υβριδίων = αριθμός συγχωνευμένων τροχιακών

Αναμιγνύονται τροχιακά και όχι ηλεκτρόνια

Σε κάθε υβρίδιο μπορούν να συνυπάρξουν 2 μόνο ηλεκτρόνια

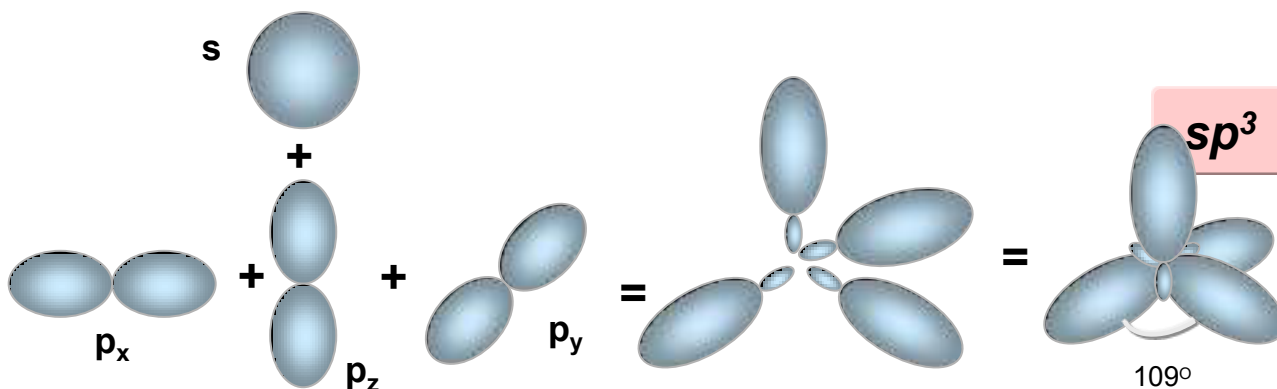
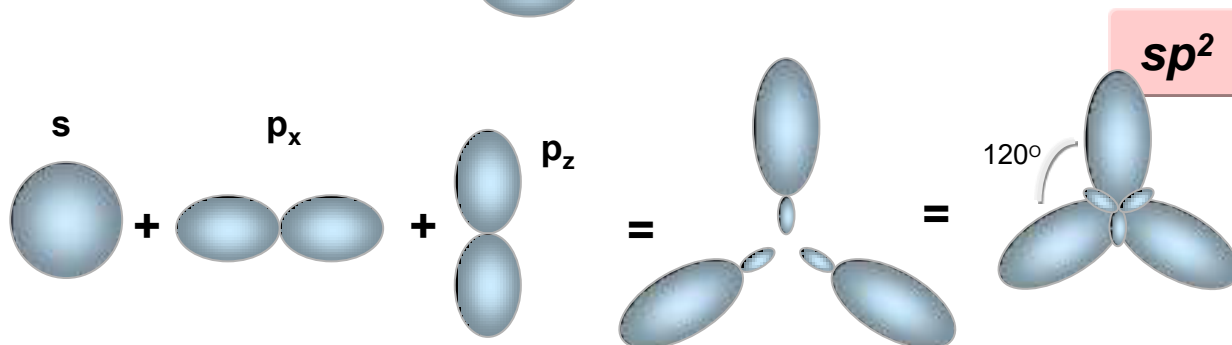
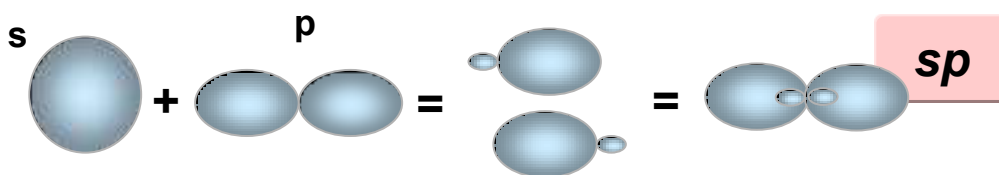
sp

sp^2

sp^3

Ομοιοπολικός δεσμός

Ομοιοπολικός δεσμός- Υβρισισμός



Μοριακά τροχιακά



Η νέα κυματοσυνάρτηση προκύπτει από το γραμμικό συνδυασμό των ατομικών κυματοσυναρτήσεων

Ομοιοπολικός δεσμός

Δεσμικό μοριακό τροχιακό
(bonding molecular orbital)

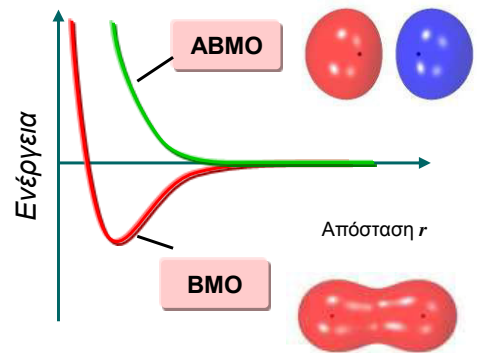
$$\psi_{\sigma} = \psi_A + \psi_B$$

BMO

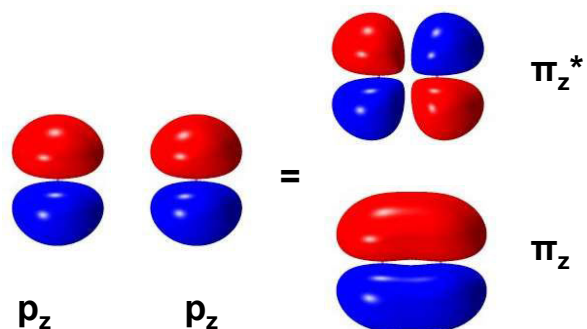
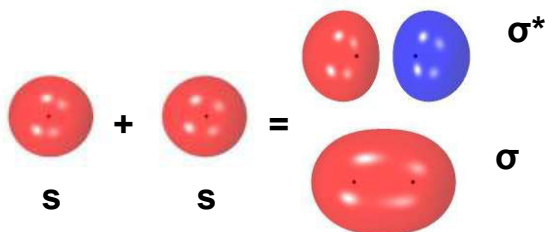
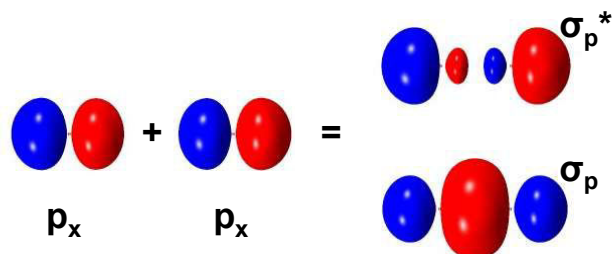
Αντι-δεσμικό μοριακό τροχιακό
(antibonding molecular orbital)

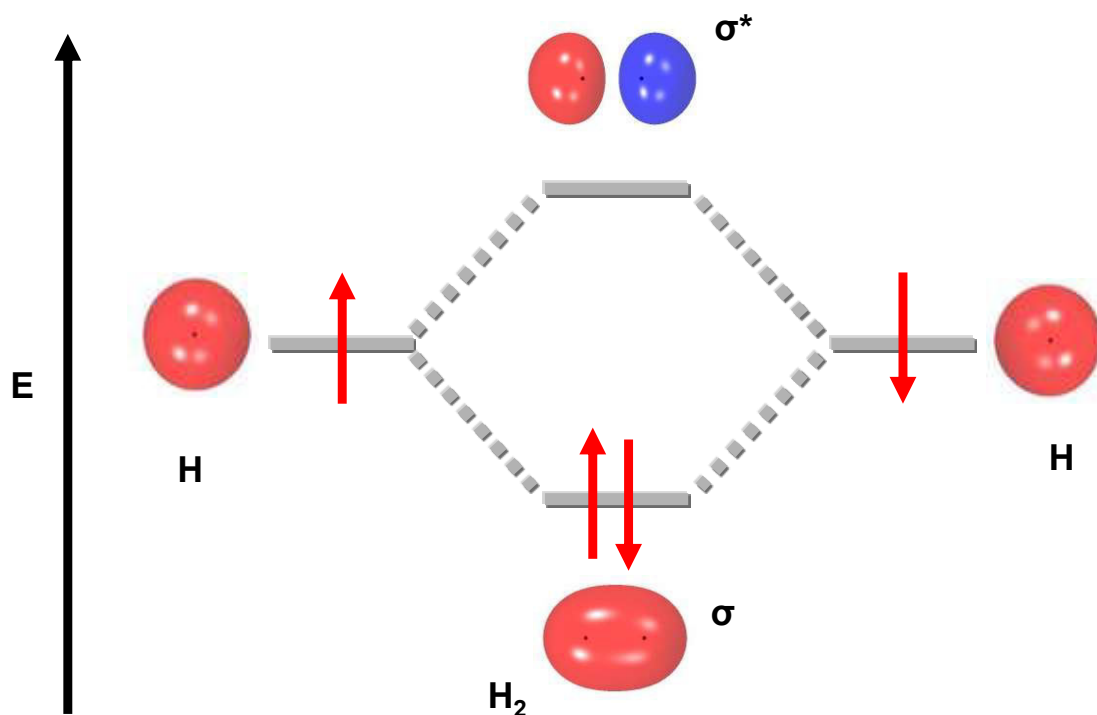
$$\psi_{\sigma^*} = \psi_A - \psi_B$$

ABMO



Ομοιοπολικός δεσμός- Μοριακά τροχιακά

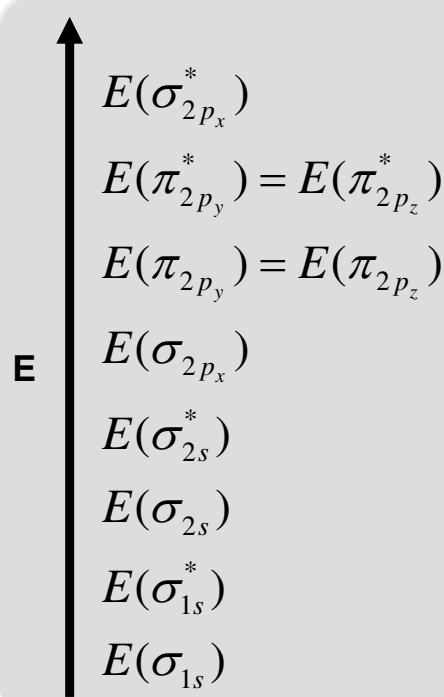
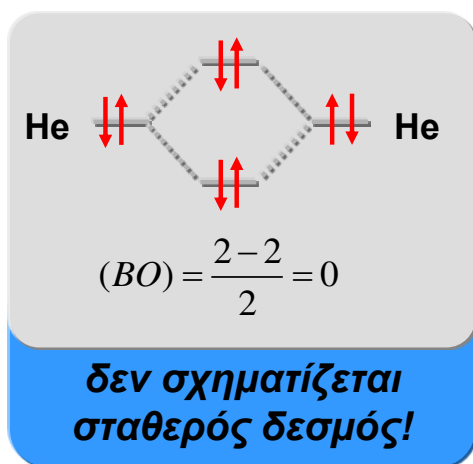




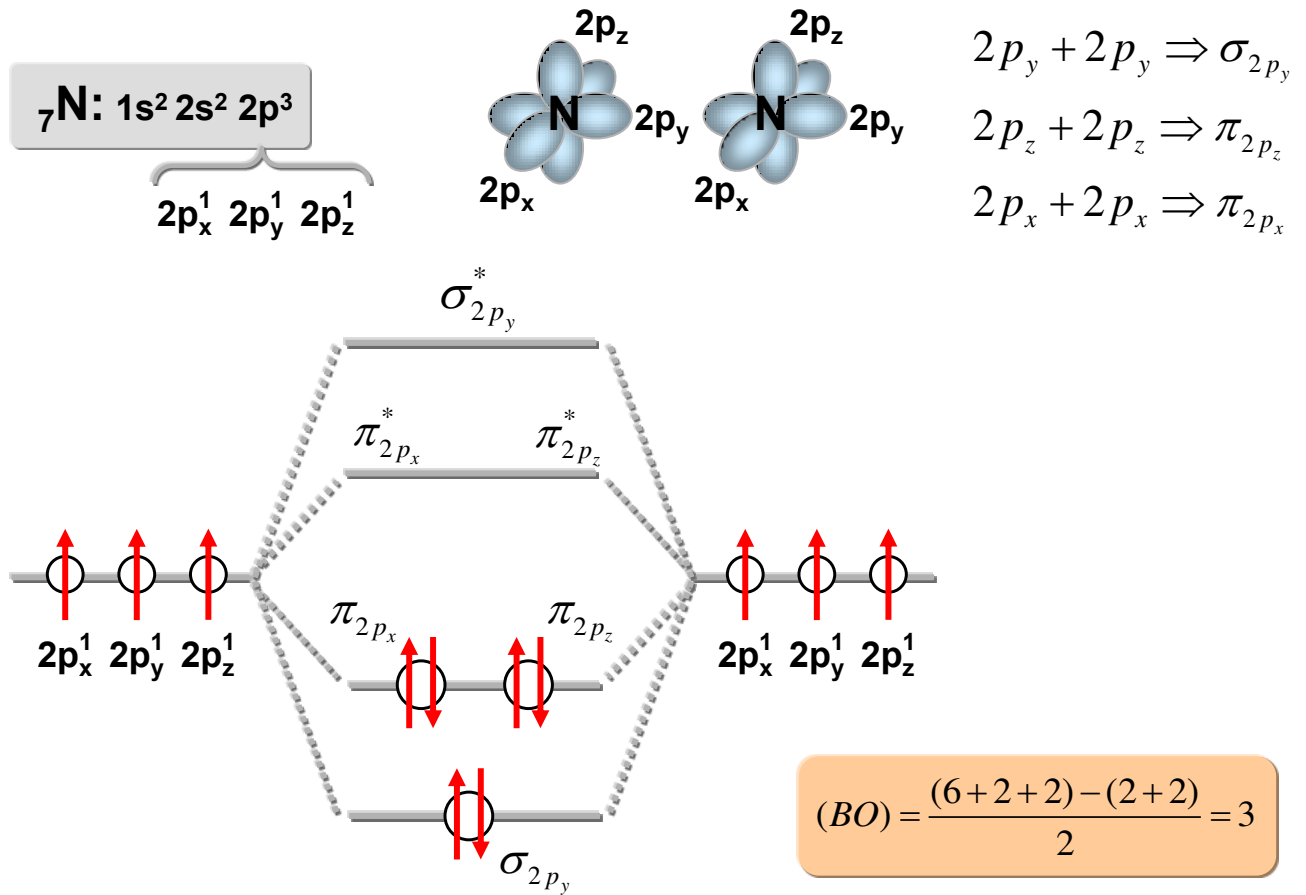
$$\text{Bond Order} = \frac{(\text{Number of electrons in BMO}) - (\text{Number of electrons in ABMO})}{2}$$

(BO)

Για να έχουμε δεσμό θα πρέπει η τάξη του δεσμού (*Bond Order*) να είναι μεγαλύτερη από μηδέν

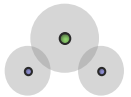


Παράδειγμα μόριο αζώτου N_2



Δυνάμεις μεταξύ των ατόμων

$$\mathbf{F}_{12} = f(r) \mathbf{e}_{12}$$



Ελκτικές

Κβαντομηχανική ερμηνεία

$$f_E(r) = \frac{A}{r^p}$$

Τα κοινά ηλεκτρόνια έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να βρεθούν ανάμεσα στους δύο πυρήνες

Οι ατομικοί πυρήνες συγκρατούνται σε απόσταση ισορροπίας με τις αμοιβαίες ελκτικές δυνάμεις που ασκούν στα κοινά ηλεκτρόνια

Δυνάμεις μεταξύ των ατόμων

$$\mathbf{F}_{12} = f(r)\mathbf{e}_{12}$$



Ομοιοπολικός δεσμός

Απωστικές

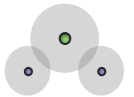
Κβαντομηχανική ερμηνεία

$$f_A(r) = -\frac{B}{r^q}$$

Τα κοινά ηλεκτρόνια σθένους έχουν όλα διαφορετικά σετ κβαντικών αριθμών, αλλά:
Τα εσωτερικά ηλεκτρονικά τροχιακά είναι συμπληρωμένα και αλληλοεπικάλυψη τους προκαλεί απώσεις (Απαγορευτική Αρχή του Pauli)

Δυνάμεις μεταξύ των ατόμων

$$\mathbf{F}_{12} = f(r)\mathbf{e}_{12}$$



Ομοιοπολικός δεσμός

Ελκτικές

$$f_E(r) = \frac{A}{r^p}$$

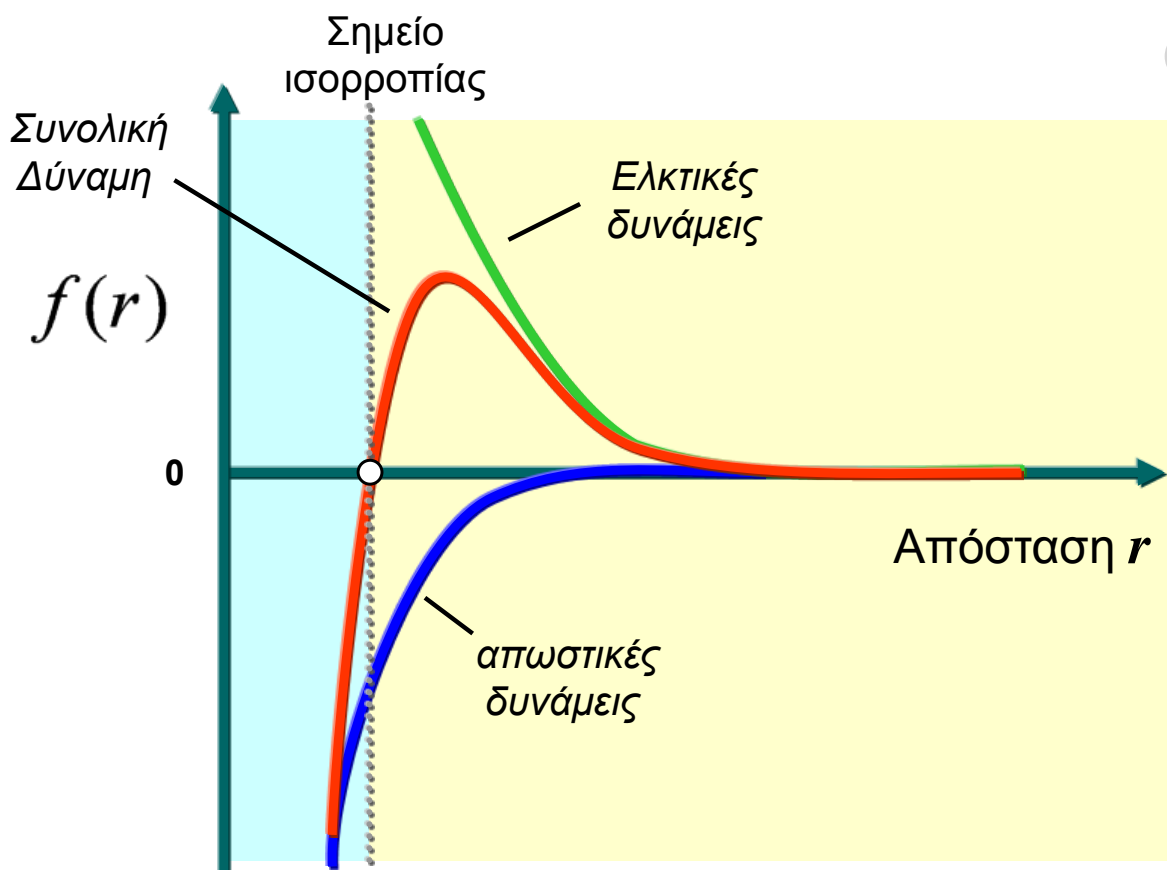
Απωστικές

$$f_A(r) = -\frac{B}{r^q}$$

$$q > p$$

Ο ομοιοπολικός δεσμός είναι κατευθυνόμενος

Υπολογίζονται αναλυτικά χρησιμοποιώντας Κβαντομηχανική

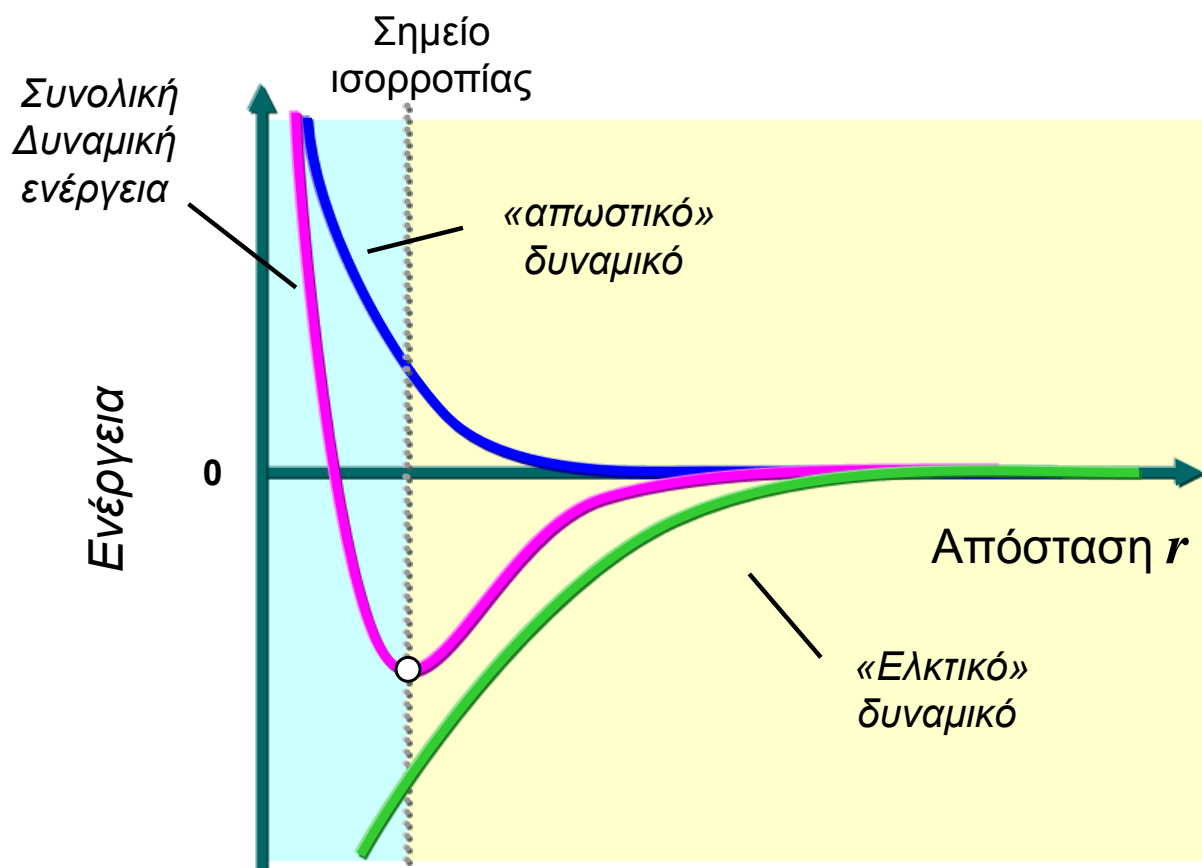


Ποιοτικά ίδιες με αυτές του ιοντικού

Δυναμική ενέργεια

$$U(r) = -\int_r^{\infty} f(r) dr = -\left(\overbrace{\int_r^{\infty} f_A(r) dr}^{\text{Ελκτικές}} + \overbrace{\int_r^{\infty} f_E(r) dr}^{\text{Απωστικές}} \right)$$

$$U(r) = -\left(\frac{A}{p-1} \right) \cdot \frac{1}{r^{p-1}} + \left(\frac{B}{q-1} \right) \cdot \frac{1}{r^{q-1}}$$



Ποιοτικά ίδιες με αυτές του ιοντικού

Ηλεκτραρνητικότητα και ιοντικός χαρακτήρας

Πότε είναι ένας δεσμός ιοντικός και πότε ομοιοπολικός ;

$$\text{Ιοντικός χαρακτήρας (\%)} = 100 \cdot \{1 - \text{Exp}[-0.25(\chi_A - \chi_B)^2]\}$$

ηλεκτραρνητικότητα

NaCl ~ 71.1%

HF ~ 55%

SiO₂ ~ 45%

H₂ = 0%

κλίμακα Pauling

H 2.20																			He
Li 0.98	Be 1.57																		Ne
Na 0.93	Mg 1.31																		Ar
K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00		
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.67		
Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn		
Fr 0.7	Ra 0.9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo		

Ηλεκτραρνητικότητα στον περιοδικό πίνακα,

User: Adblocker / Wikimedia Commons/ CC-BY-SA-3.0

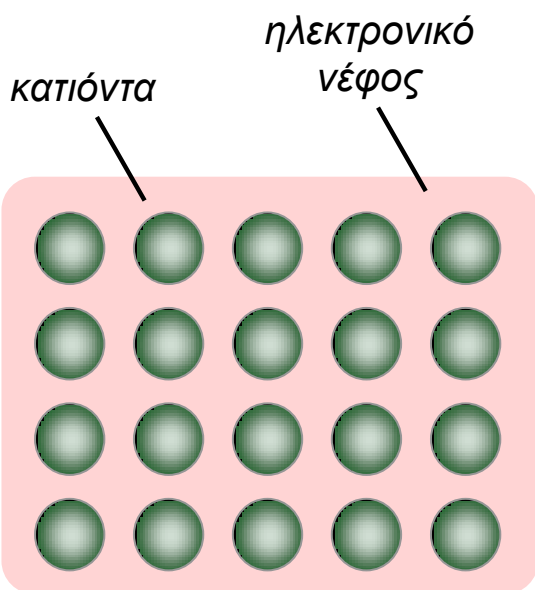
Μεταλλικός δεσμός

Όλα άτομα μοιράζονται τα ηλεκτρόνια σθένους

Τα τροχιακά τους αλληλεπικαλύπτονται !

Συμβαίνει σε ηλεκτροθετικά υλικά (μέταλλα)

Τα ηλεκτροθετικά άτομα έχουν την τάση να χάσουν ηλεκτρόνια αλλά δεν υπάρχουν ηλεκτραρνητικά άτομα για να τα δεχτούν, έτσι τα ηλεκτρόνια σθένους κινούνται **ελεύθερα** στη μάζα του μετάλλου



Τα ηλεκτρόνια κινούνται ελεύθερα μέσα στο μέταλλο

Το ηλεκτρονικό νέφος «δένει» τα κατιόντα μεταξύ τους με δυνάμεις Coulomb

Τα μέταλλα αποκτούν μοναδικές ιδιότητες:

Μεταλλική λάμψη

Καλή θερμική και ηλεκτρική αγωγιμότητα

Είναι ελατά

Δυνάμεις μεταξύ των ατόμων

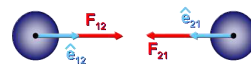
$$\mathbf{F}_{12} = f(r)\mathbf{e}_{12}$$



Ελκτικές

Δυνάμεις Coulomb
(μεταξύ κατιόντων και
ηλεκτρονικού νέφους)

$$f_E(r) = \frac{C}{r^s}$$



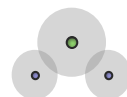
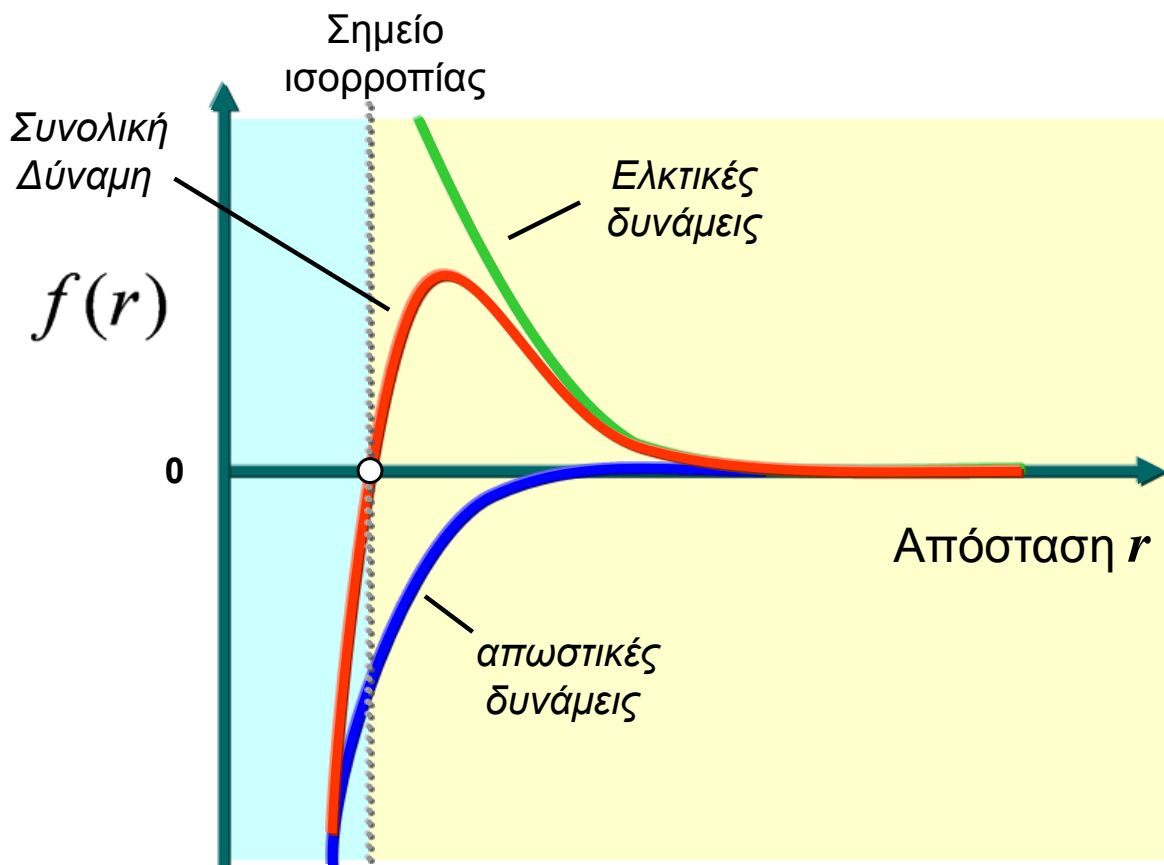
Απωστικές

Όταν τα άτομα πλησιάζουν τα
ηλεκτρονικά τους νέφη αλλά και οι
πυρήνες τους απωθούνται.
Οι απωστικές δυνάμεις είναι
πολύ ισχυρές σε πολύ μικρές
αποστάσεις

$$f_A(r) = -\frac{D}{r^t}$$

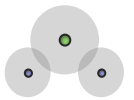


Τα κατιόντα ασκούν απωστικές
δυνάμεις Coulomb



Ποιοτικά ίδιες με αυτές του ιοντικού

Δυναμική ενέργεια

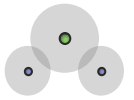
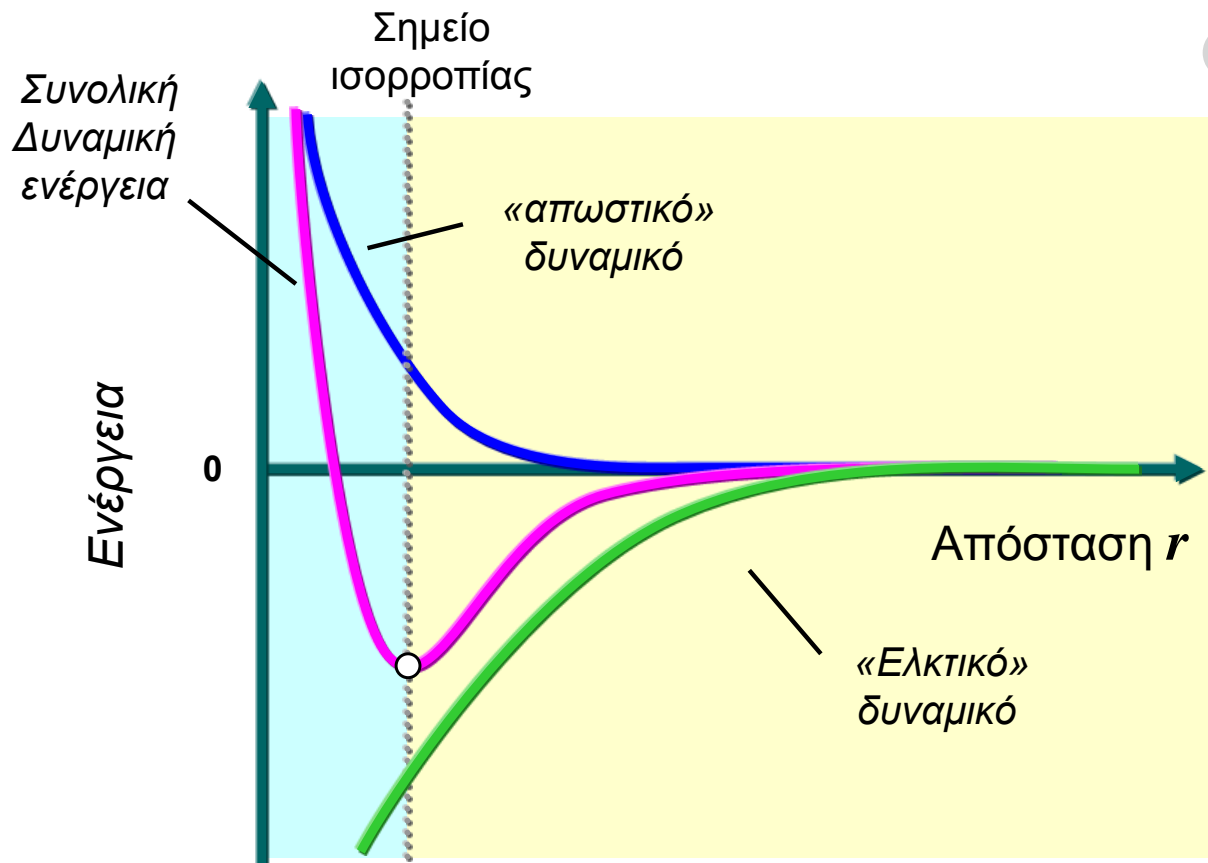


Μεταλλικός δεσμός

$$U(r) = -\int_r^{\infty} f(r)dr = -\left(\overbrace{\int_r^{\infty} f_A(r)dr}^{\text{ΕΛΚΤΙΚΕΣ}} + \overbrace{\int_r^{\infty} f_E(r)dr}^{\text{ΑΠΩΣΤΙΚΕΣ}}\right)$$

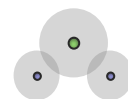
$$U(r) = -\left(\frac{C}{s-1}\right) \cdot \frac{1}{r^{s-1}} + \left(\frac{D}{t-1}\right) \cdot \frac{1}{r^{t-1}}$$

Μεταλλικός δεσμός



Ποιοτικά ίδιες με αυτές του ιοντικού

Δευτερεύοντες δεσμοί: δίπολα



Τα άτομα έλκονται εξαιτίας της διπολικής ροπής

Στιγμιαία δίπολα

Σε κάθε άτομο το ηλεκτρονικό νέφος ταλαντώνεται και παραμορφώνεται με περίοδο 1 fs.

Όταν το ηλεκτρονικό νέφος παραμορφωθεί παροδικά τα κέντρα του αρνητικού και του θετικού φορτίου δεν συμπίπτουν οπότε σχηματίζεται ένα στιγμιαίο δίπολο

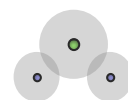
Μόνιμα δίπολα

Μόρια με ομοιοπολικούς δεσμούς

Ασύμμετρη κατανομή υδρογόνων στο μόριο

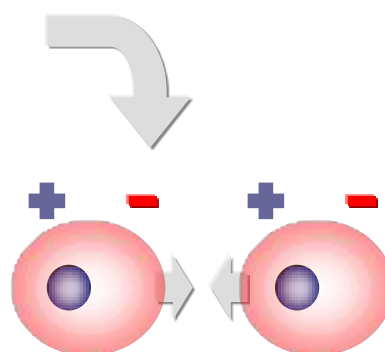
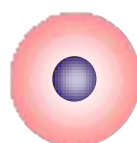
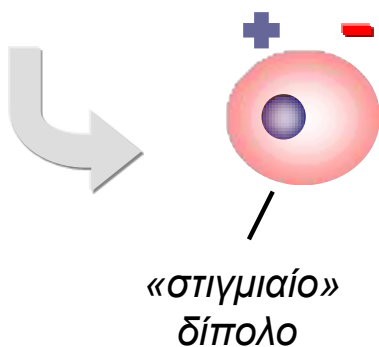
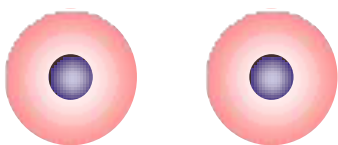
Ηλεκτρονικό νέφος μόνιμα μετατοπισμένο προς το ηλεκτραρνητικότερο άτομο

Στιγμιαία δίπολα: Δεσμός van der Waals



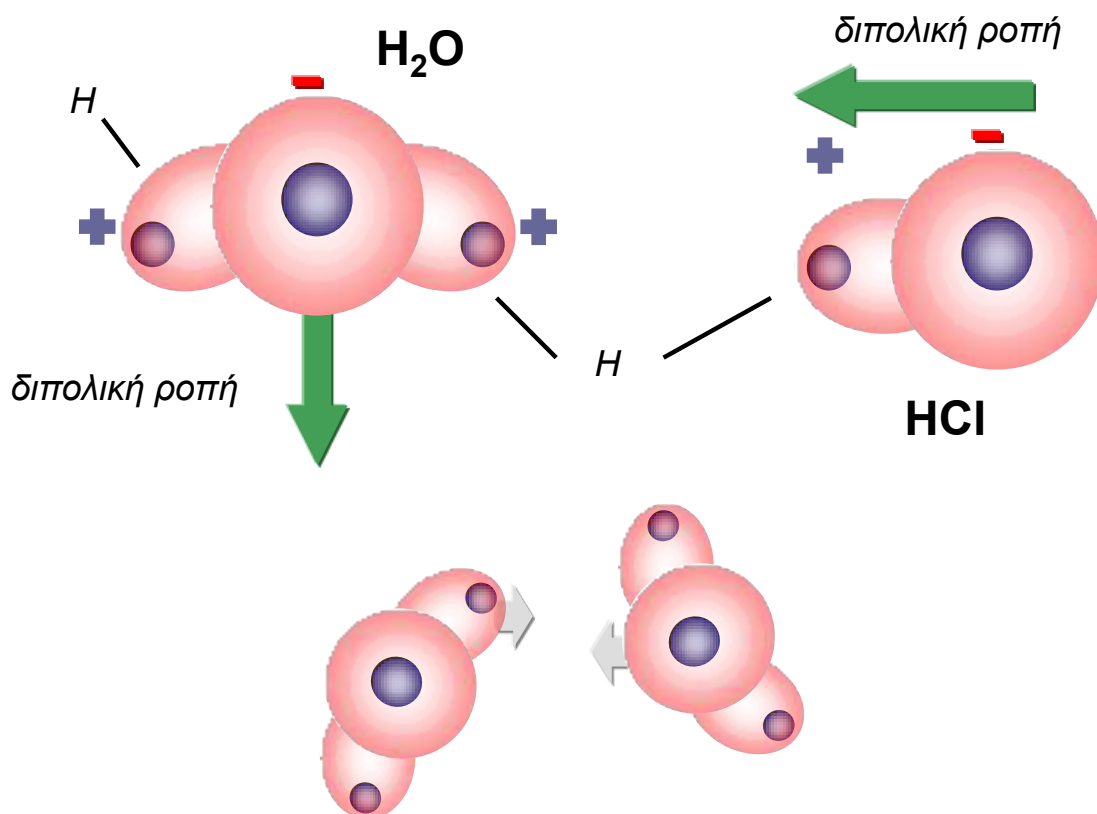
Δύο άτομα Αργού σε χαμηλή θερμοκρασία (<1K)

Το Αργό είναι ευγενές αέριο (σταθερή ηλεκτρονική δομή, αδρανές)



Δεσμός van der Waals

Μόνιμα δίπολα: Δεσμός Υδρογόνου



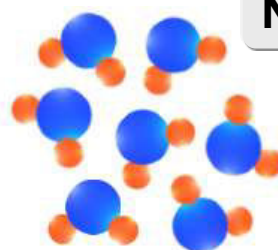
Τρεις φάσεις του νερού



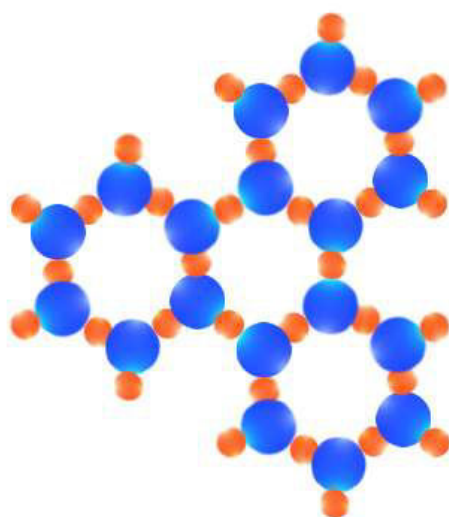
Ατμός



Νερό



Πάγος



Τυπικές Ενέργειες Δεσμών



Χημικοί δεσμοί

Τύπος δεσμού

Τυπικές ενέργειες δεσμών (eV/atom)

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	----

Ιοντικοί



Ομοιοπολικό



Μεταλλικοί



Υδρογόνου



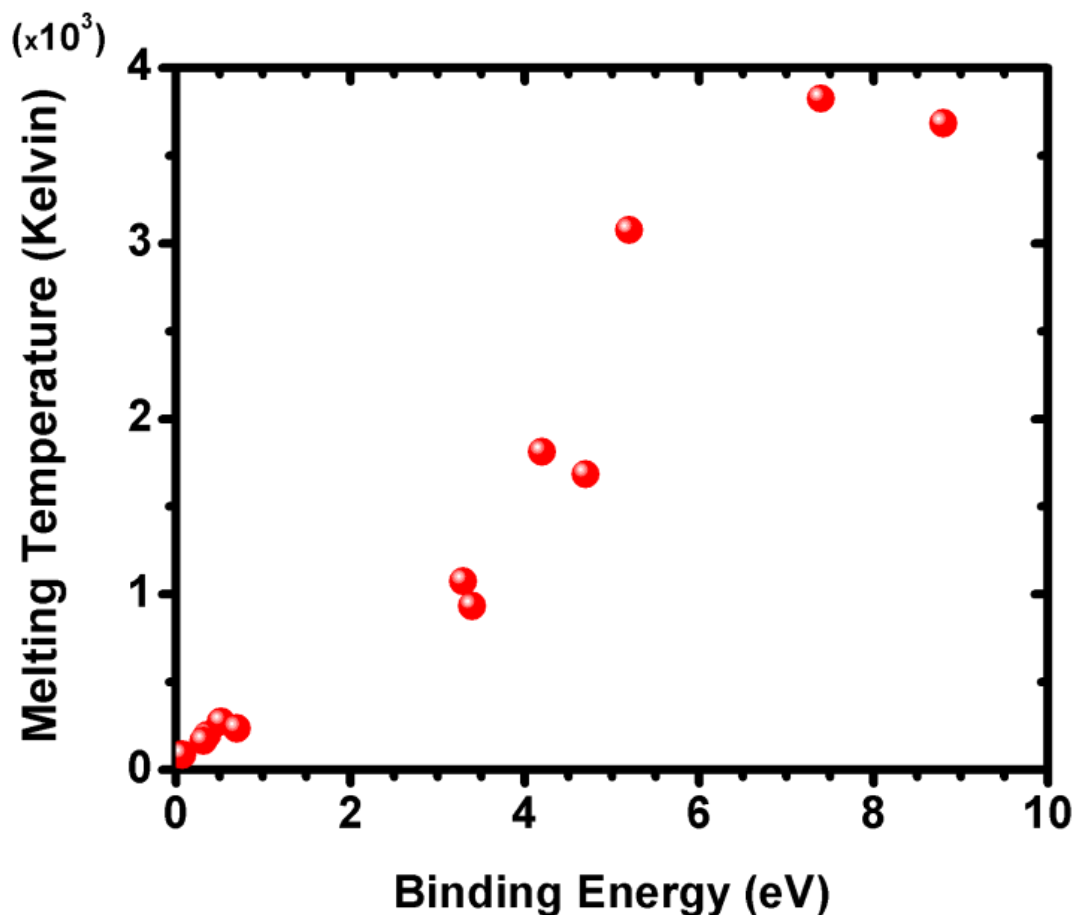
~(0.3 - 0.5) eV

Van der Waals

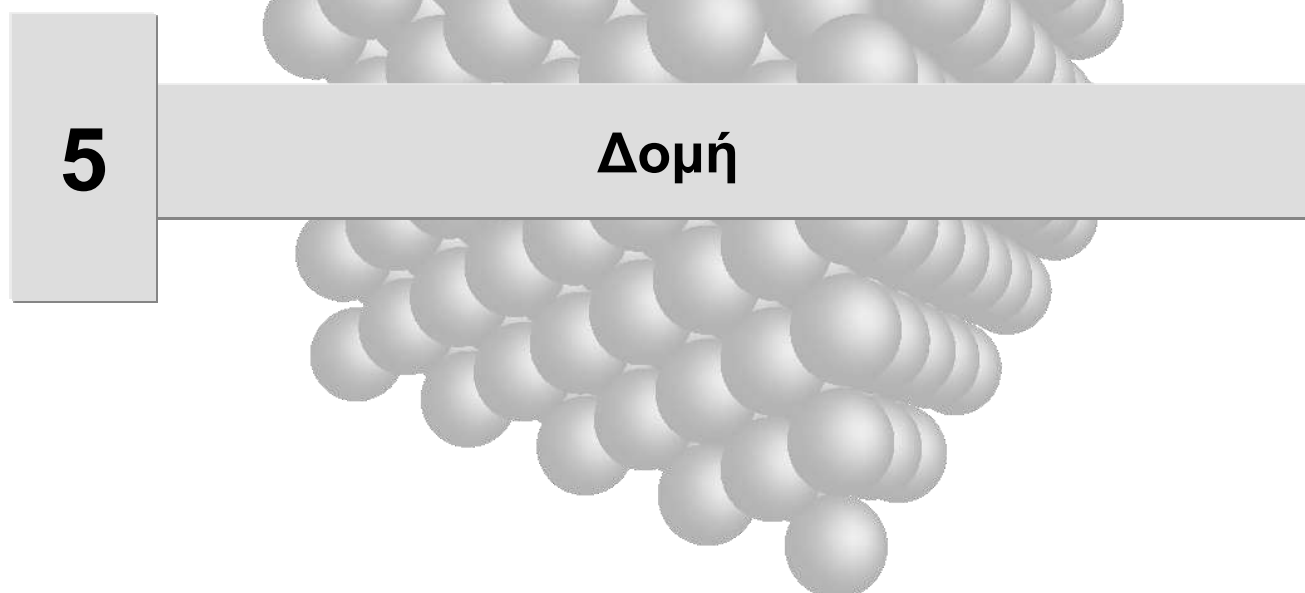


~(0.08 έως 0.3) eV

Χημικοί δεσμοί



Ενότητα 5: Δομή



Κρυσταλλικά υλικά

Περιοδικότητα σε
3-διαστάσεις

Χαμηλότερη ενέργεια,
μικρότερο μήκος δεσμού

Μέταλλα, κεραμικά,
μερικά πολυμερή

Θερμοδυναμική
σταθερότητα

Άμορφα υλικά

Τυχαία άτακτη κατανομή

Υψηλότερη ενέργεια,
μεγαλύτερο μήκος δεσμού

Σύνθετα υλικά,
απότομη ψύξη

Θερμοδυναμική αστάθεια

**Κρύσταλλος είναι ένα υλικό που παρουσιάζει
τρισδιάστατη περιοδική τάξη
ατόμων, μορίων ή ιόντων**

Μονοκρύσταλλος

Τρισδιάστατη τάξη σε όλο τον
όγκο του υλικού

Πολυκρύσταλλος

Υλικό που αποτελείται από
πολλούς μονοκρυστάλλους
(κρυσταλλίτες ή κόκκους)

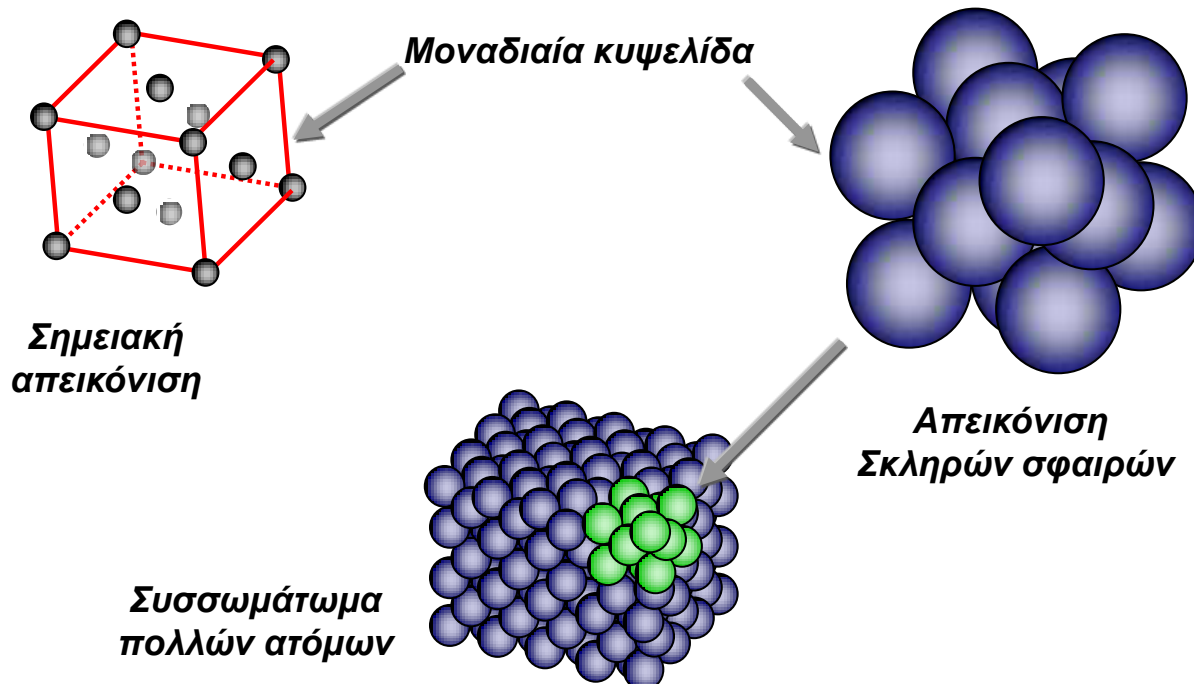
Οι κόκκοι έχουν συνήθως
διάμετρο 100 nm – 100 μm

Πολυκρυσταλλικά υλικά με
κόκκους διαμέτρου <10 nm
λέγονται **νανοκρυσταλλικά**

Μοναδιαία κυψελίδα

Βασική δομή η οποία επαναλαμβανόμενη στον χώρο δίνει τον συνολικό κρύσταλλο

Κρυσταλλική δομή



Αριθμός ατομικής πλήρωσης (APF) (Atomic packing factor)

Κρυσταλλική δομή

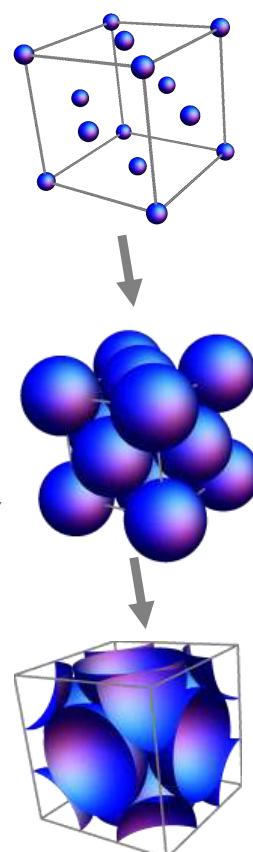
$$(APF) = \frac{\text{Όγκος ατόμων που ανήκουν στην κυψελίδα}}{\text{Όγκος της κυψελίδας}}$$

Αριθμός ατόμων
που ανήκουν
στην κυψελίδα

$$(APF) = \frac{N \frac{4}{3} \pi R^3}{V_c}$$

Ακτίνα
ατόμων / ιόντων

όγκος της
κυψελίδας



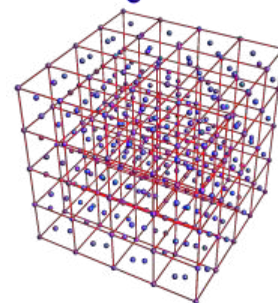
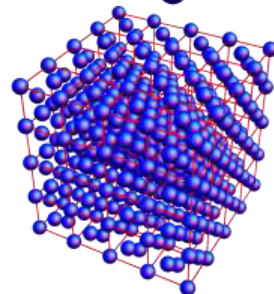
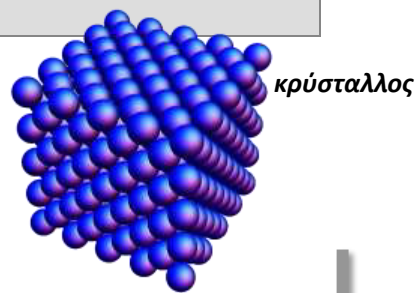
Κρυσταλλικό πλέγμα

τρισδιάστατη διάταξη άπειρων μαθηματικών σημείων

Το κρυσταλλικό πλέγμα είναι καθαρά μαθηματική έννοια

Το κρυσταλλικό πλέγμα δεν είναι κρύσταλλος

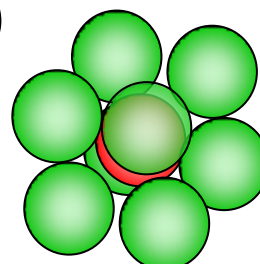
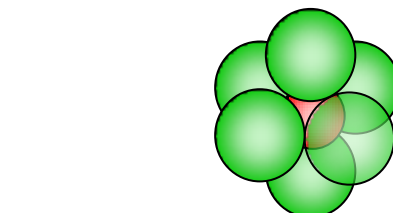
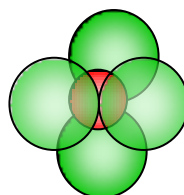
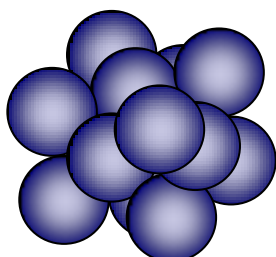
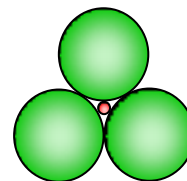
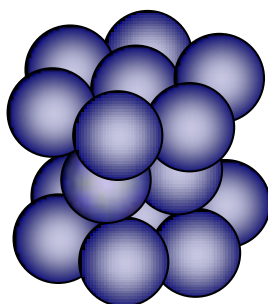
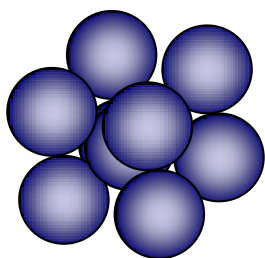
Η περιοδικότητα κάθε μονοκρυστάλλου μπορεί να περιγραφεί με βάση ένα κρυσταλλικό πλέγμα



κρυσταλλικό πλέγμα

Πακετάρισμα (packing)

Ο τρόπος με τον οποίο στοιβάζονται τα άτομα στα κρυσταλλικά υλικά



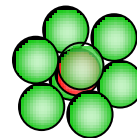
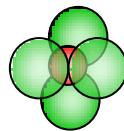
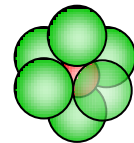
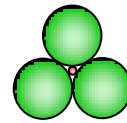
Ιοντικοί Δεσμοί

Γύρω από κάθε ανιόν/κατιόν τοποθετείται ο μέγιστος αριθμός κατιόντων/ανιόντων

Τα κατιόντα/ανιόντα τοποθετούνται όσον το δυνατόν μακρύτερα μεταξύ τους

Οι δεσμοί δεν είναι κατευθυντικοί

Ο κύριος παράγοντας που επιδρά στο πακετάρισμα είναι τα **σχετικά μεγέθη** των ιόντων



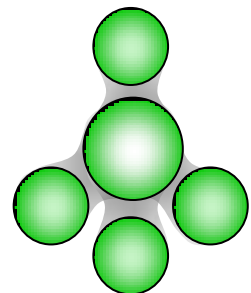
Ομοιοπολικοί δεσμοί

Οι δεσμοί είναι κατευθυντικοί

Η κατεύθυνση του δεσμού καθορίζεται από το σχήμα των ατομικών τροχιακών που συγχωνεύονται

Οι **γωνίες των δεσμών** και όχι η μεγαλύτερη πυκνότητα καθορίζουν το πακετάρισμα

Τα ομοιοπολικά στερεά έχουν την τάση να είναι λιγότερο πυκνά από τα ιοντικά



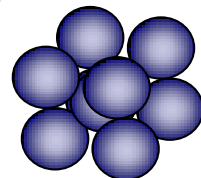
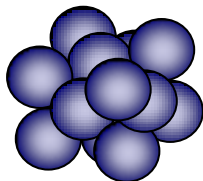
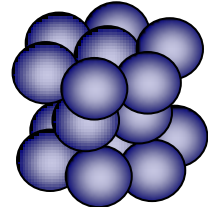
Μεταλλικοί δεσμοί

Οι δεσμοί δεν είναι κατευθυντικοί

τα κατιόντα συγκρατούνται στις θέσεις τους με
δυνάμεις Coulomb
που όλα ασκούν στο ηλεκτρονικό νέφος

τα κατιόντα διευθετούνται
όσο το δυνατόν κοντύτερα μεταξύ τους

τα μέταλλα έχουν την τάση να είναι πυκνά



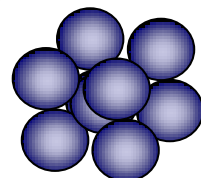
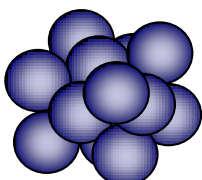
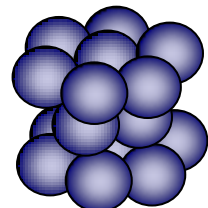
Μεταλλικοί κρύσταλλοι

Ο μεταλλικός δεσμός δεν είναι κατευθυντικός

Σε ένα καθαρό μεταλλικό στοιχείο
τα κατιόντα έχουν το ίδιο μέγεθος

Σε ένα κράμα ή μίγμα μετάλλων
τα μεγέθη των κατιόντων διαφέρουν

Στους μεταλλικούς κρυστάλλους έχουμε πυκνό
πακετάρισμα (μεγάλος αριθμός συναρμογής)



Μεταλλικοί κρύσταλλοι

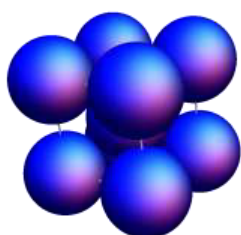
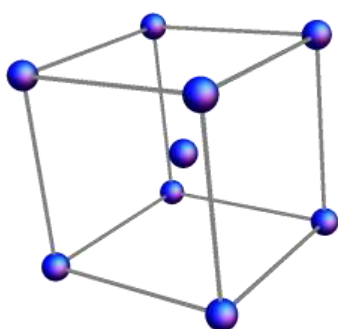
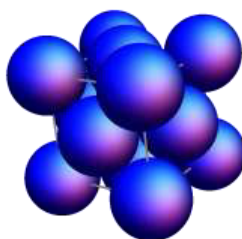
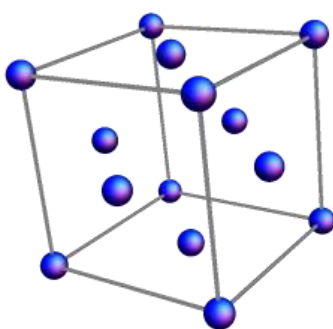
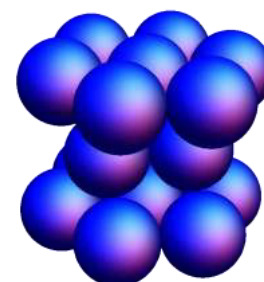
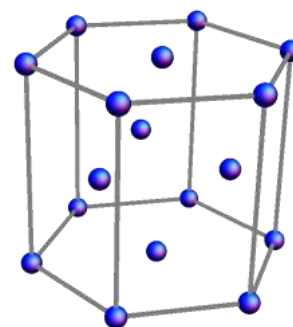
Μοντέλο

Τα κατίοντα παριστάνονται ως **σκληρές σφαίρες** που πακετάρονται πυκνά αλλά δεν αλληλεπικαλύπτονται

Γύρω από κάθε κατίον τοποθετείται ο μέγιστος αριθμός κατιόντων

	Καθαρά μεταλλικά στοιχεία	Κράματα	Μίγματα
r/R	1	~ 1	< 1
Αριθμός συναρμογής	12	8	8

Κύριες δομές κρυσταλλικών μετάλλων

**BCC***(Body centered Cubic)***FCC***(Face centered Cubic)***HCP***(Hexagonal close packed)*

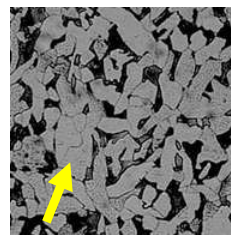
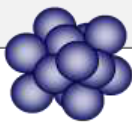
Ατομικές ακτίνες και κρυσταλλικές δομές για τυπικά μέταλλα*



Al (Αλουμίνιο),
<http://images-of-elements.com>
CC-BY-3.0

$R = 143 \text{ pm}$

FCC



κόκκοι α -Fe (Φερρίτης),
A. J. Duncan et al.
Wikimedia Commons / Public Domain

$R = 124 \text{ pm}$

BCC



Au (Χρυσός),
Didier Descouens/
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

$R = 144 \text{ pm}$

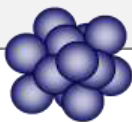
FCC



Cu (Χαλκός)
© User:Jurii / Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

$R = 128 \text{ pm}$

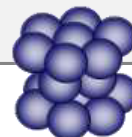
FCC



Zn (Ψευδάργυρος),
Ben Mills
Wikimedia Commons / Public Domain

$R = 133 \text{ pm}$

HCP



* Βιβλιογραφική πηγή: Wikipedia

Το εδροκεντρωμένο κυβικό (FCC)

Αριθμός
συναρμογής

12

Άτομα/
κυψελίδα

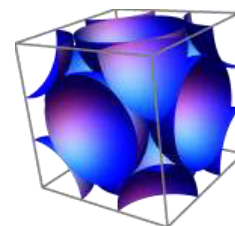
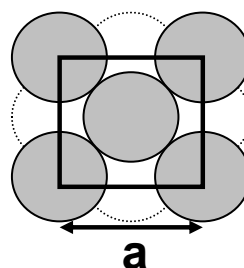
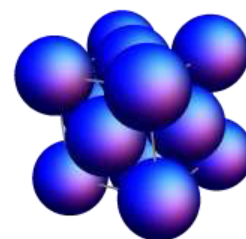
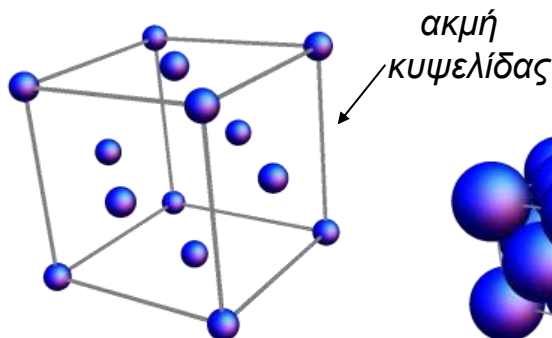
4

Ακμή
κυψελίδας

$2R\sqrt{2}$ *

APF

0.74



* R : ακτίνα κατιόντος

FCC μέταλλα: Al, Ca, Ni, Cu, Sr, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt, Au, Pb, Ce, Yt

Το χωροκεντρωμένο κυβικό (BCC)

Αριθμός
συναρμογής

8

Άτομα/
κυψελίδα

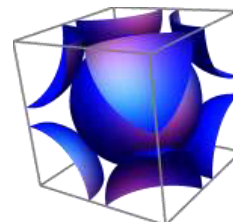
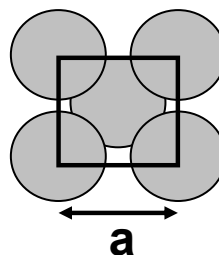
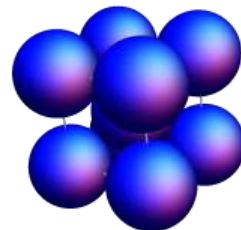
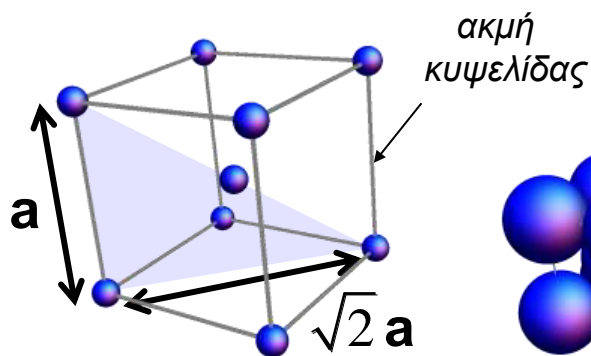
2

Ακμή
κυψελίδας

$$4R / \sqrt{3}$$

APF

0.68



BCC μέταλλα: Na, K, V, Cr, Fe, Rb, Nb, Mo, Cs, Ba, Eu, Ta, W

Πυκνή εξαγωνική διάταξη (HCP)

Αριθμός
συναρμογής

12

Άτομα/
κυψελίδα

6

Ακμή
κυψελίδας

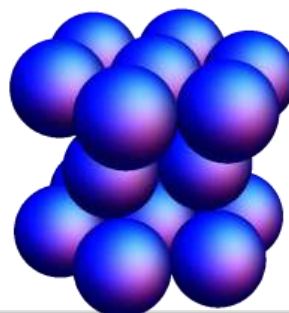
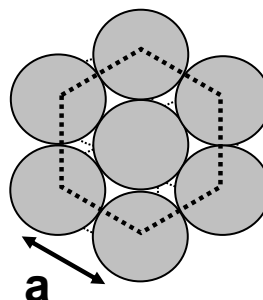
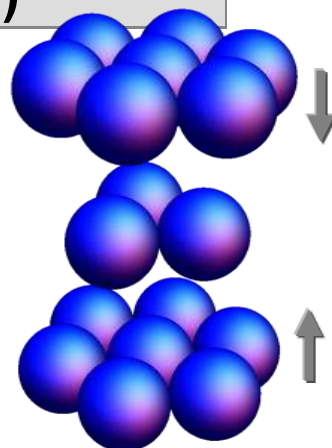
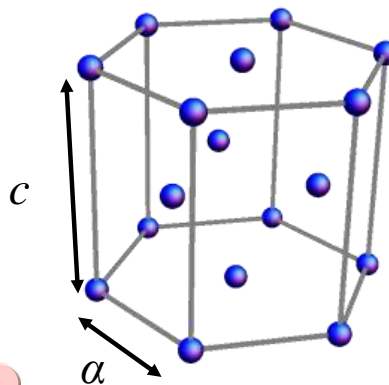
$$a = 2R$$

 c/a

1.633

APF

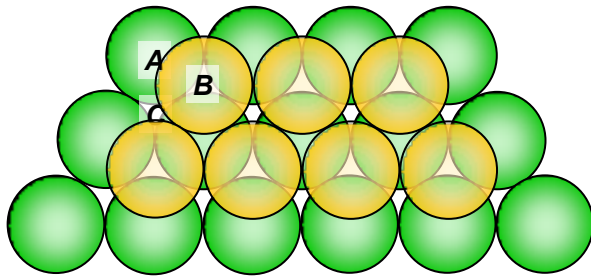
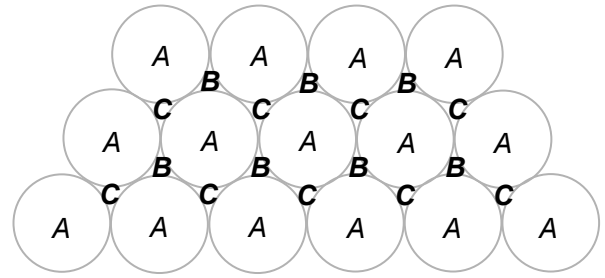
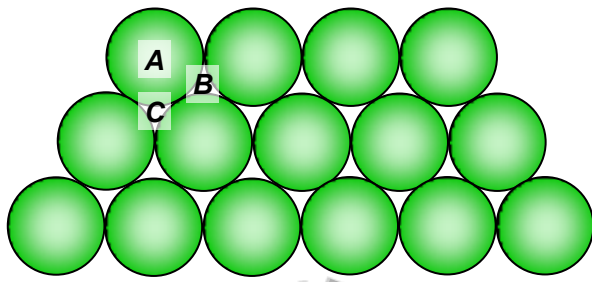
0.74



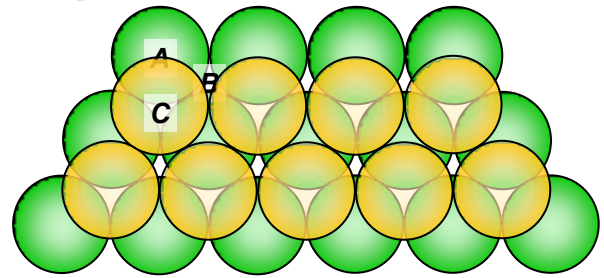
HCP μέταλλα: Be, Mg, Ti, Co, Zn, Y, Zr, Ru, Cd, Th

«Στοιβάγμα» πυκνά πακεταρισμένων κρυσταλλικών επιπέδων

Κρυσταλλική δομή



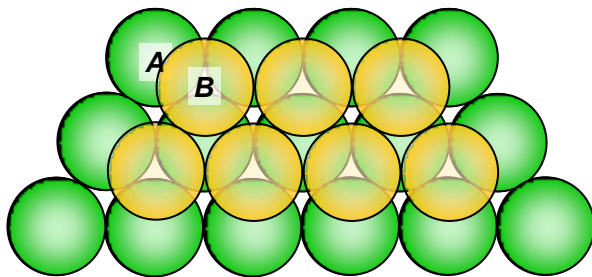
AB



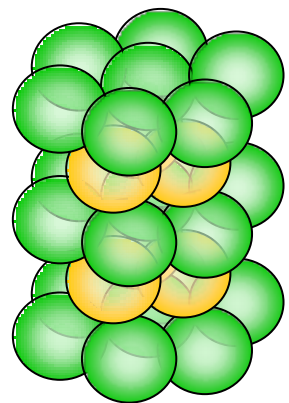
AC

Πυκνή εξαγωγική διάταξη (HCP): A B A ...

Κρυσταλλική δομή

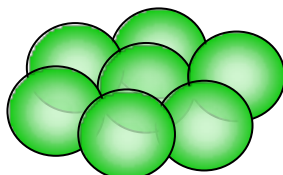


AB A

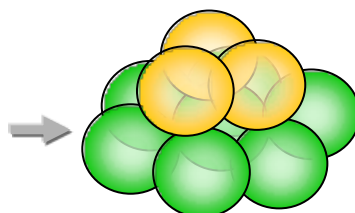


HCP

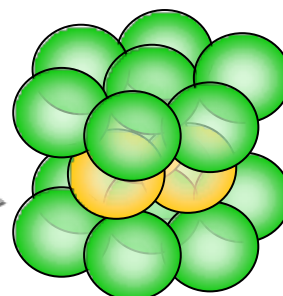
HCP



A

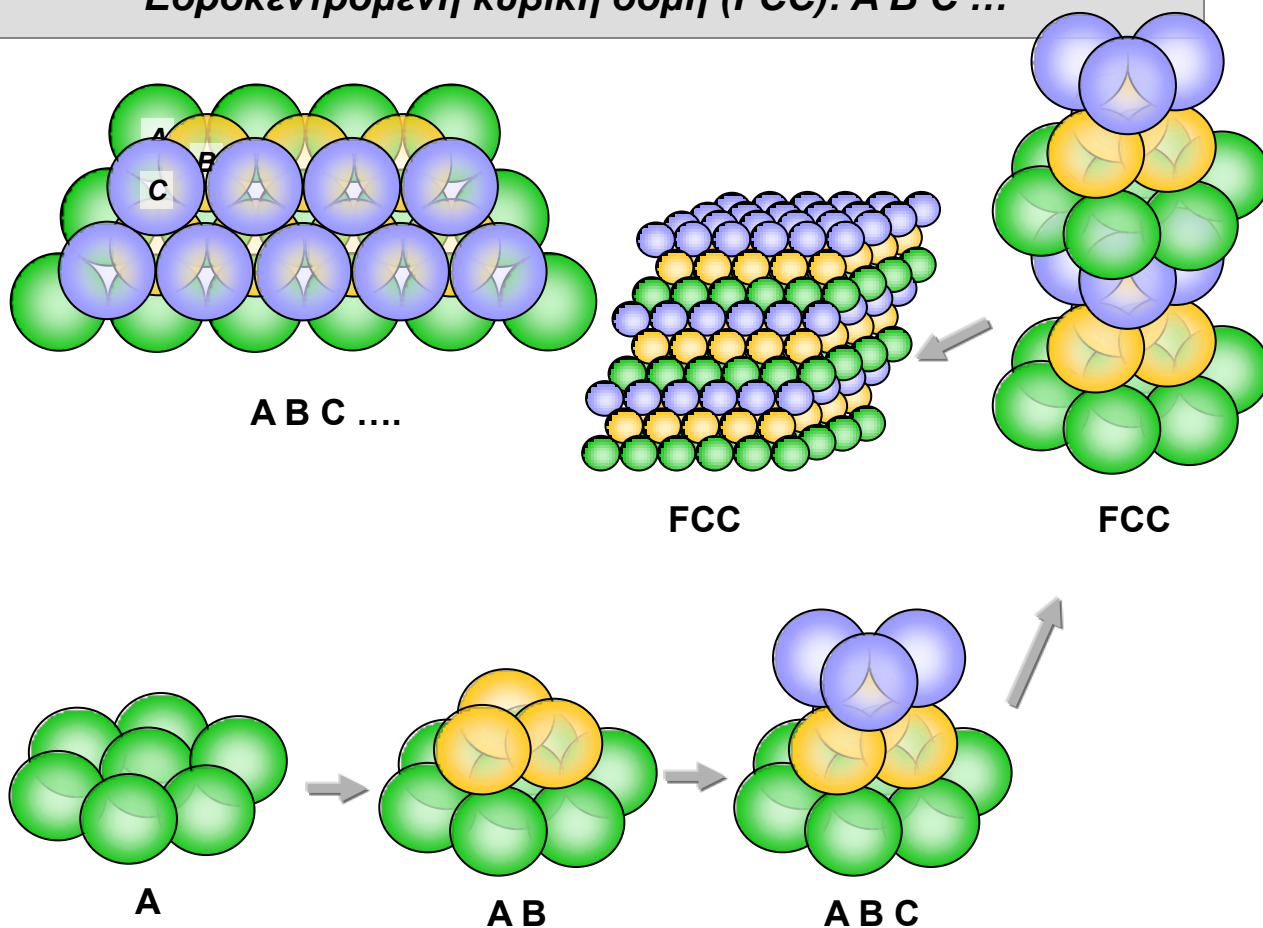


AB



ABA

Εδροκεντρομένη κυβική δομή (FCC): A B C ...



Ιοντικά στερεά

Μοντέλο

Τα ιόντα παριστάνονται ως **σκληρές σφαίρες** που πακετάρονται πυκνά αλλά δεν αλληλεπικαλύπτονται

Γύρω από κάθε ανιόν/κατιόν τοποθετείται ο μέγιστος αριθμός κατιόντων/ανιόντων

Τα **μεγέθη** των ιόντων καθορίζονται από την ιοντική ακτίνα

Ιοντική ακτίνα

Περιοδικός πίνακας

Η ατομική ακτίνα ελαττώνεται μέσα σε μια περίοδο (από τα αριστερά προς τα δεξιά)

Η ατομική ακτίνα αυξάνει σε μία ομάδα (από πάνω προς τα κάτω)

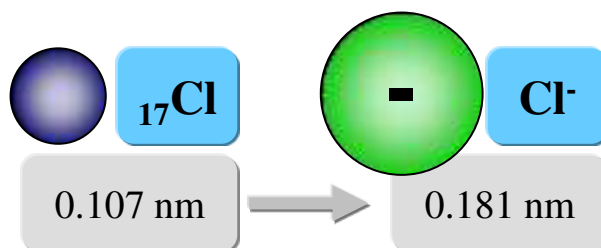
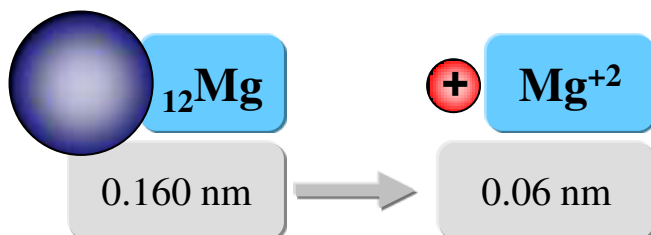
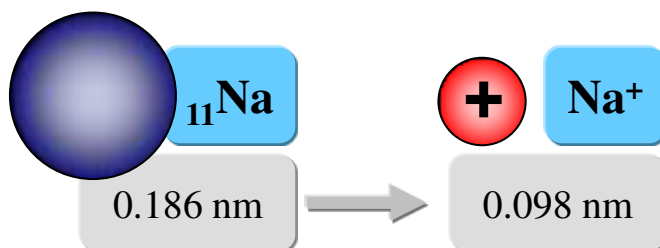
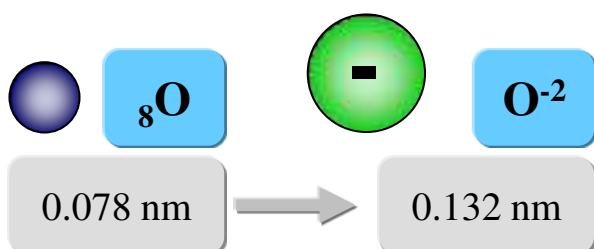
Ο ιονισμός αλλάζει την ατομική ακτίνα

Μικραίνει στα κατιόντα

Μεγαλώνει στα ανιόντα

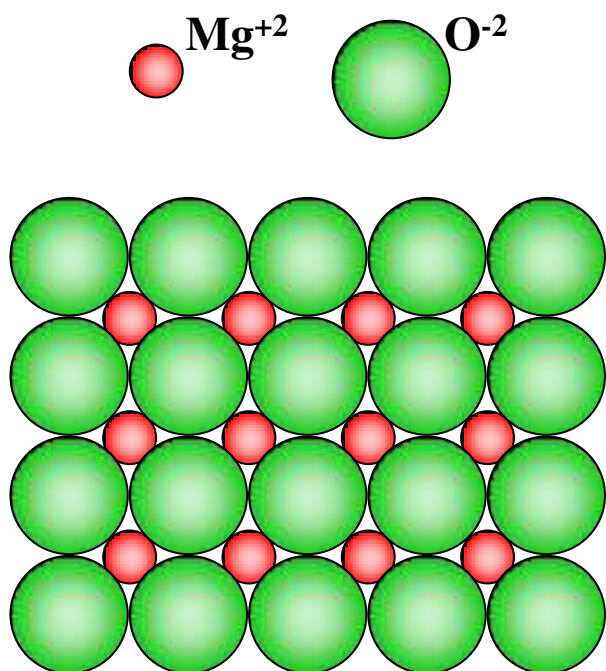
Periodic table of elements showing atomic radii trends. The table is color-coded by groups: 1 (blue), 2 (orange), 13 (green), 14 (yellow), 15 (light green), 16 (light blue), 17 (pink), 18 (light blue). The lanthanides and actinides are shown at the bottom.

Περιοδικός Πίνακας των στοιχείων
User: Armtuk / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

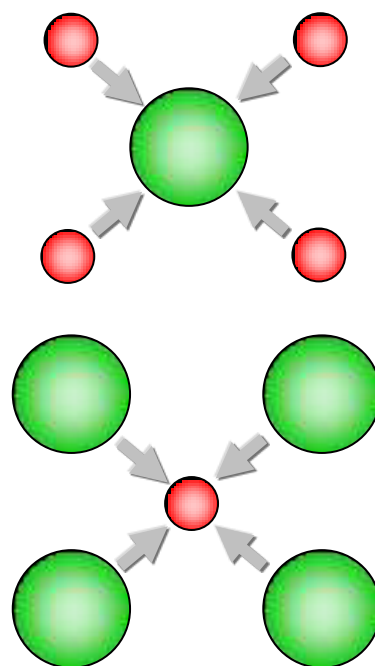


Ο μόνος περιορισμός στο πακετάρισμα στα ιοντικά στερεά είναι ο διαχωρισμός όμοιων φορτίων και η ηλεκτρική ουδετερότητα

Ιοντικά στερεά



Δυσδιάστατος κρύσταλλος MgO



Τα ιόντα του Mg²⁺ συνδέονται το ίδιο με όλα τα γειτονικά ιόντα του O²⁻

Πακετάρισμα

Ακτίνα ανιόντων (R) > ακτίνα κατιόντων (r)

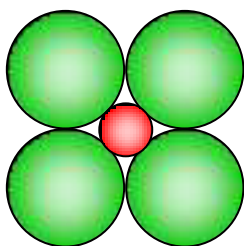
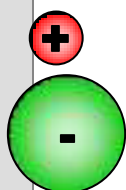
Αριθμός
συναρμογής

Ο αριθμός ανιόντων γύρω από ένα κατιόν
(καθορίζεται αποκλειστικά από τον λόγο r/R)

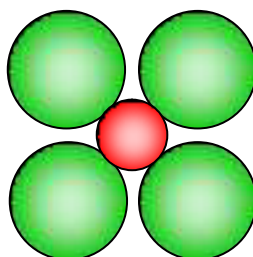
Κανόνες σταθερότητας μοντέλου σκληρών σφαιρών

Τα κατιόντα και τα ανιόντα
πρέπει να είναι σε «επαφή»

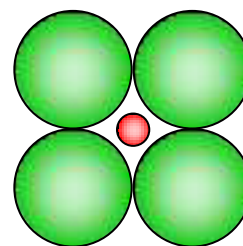
Οι σφαίρες δεν
αλληλεπικαλύπτονται



ευσταθές

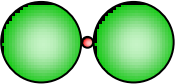
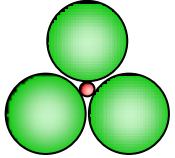
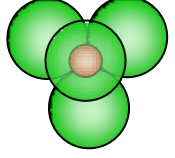
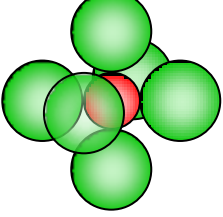
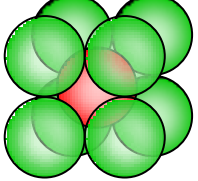


ευσταθές



ασταθές

Ιοντικά στερεά

Αριθμός συναρμογής	Λόγος ακτίνων Κατιόντος- ανιόντος	Γεωμετρία συναρμογής	όνομα
2	<0.155		γραμμικό
3	0.155 – 0.225		τριγωνικό
4	0.225 – 0.414		τετραεδρικό
6	0.414 – 0.732		οκταεδρικό
8	0.732 – 0.999..		κυβικό

Οι κρύσταλλοι τύπου A X

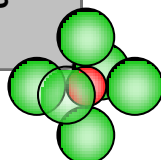
Δομή ορυκτού αλατιού

$$r/R = 0.414 - 0.732$$

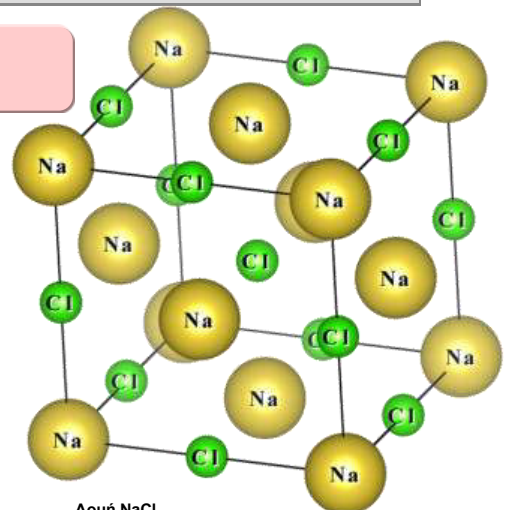
Αριθμός συναρμογής
κατιόντος

αριθμός συναρμογής
ανιόντος

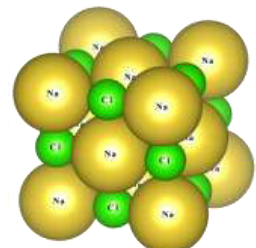
6



Ορυκτό άλας
Rob Lavinsky, iRocks.com /
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0



Δομή NaCl
American Mineralogist Crystal Structure Database/
visualised using VESTA open source software



Παραδείγματα: NaCl, MgO, LiF, MnS, FeO

Οι κρύσταλλοι τύπου A X

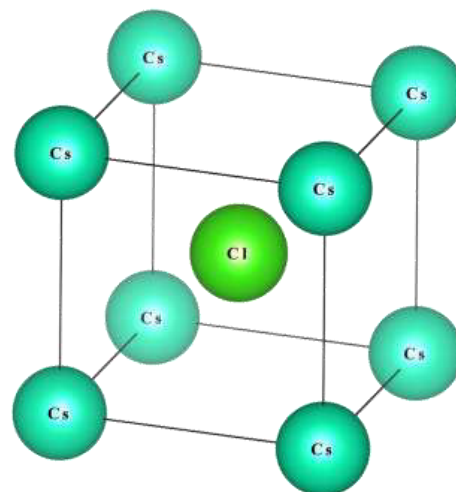
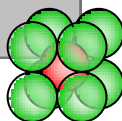
Η δομή του CsCl

$$r/R = 0.732 - 0.999$$

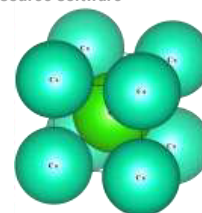
Αριθμός συναρμογής
κατιόντος

8

αριθμός συναρμογής
ανιόντος



Δομή CsCl
American Mineralogist Crystal Structure Database/
visualised using VESTA open source software



Η δομή αυτή δεν είναι BCC !

Οι κρύσταλλοι τύπου A X

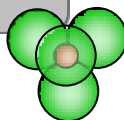
Η δομή του ZnS (σφαλερίτη)

$$r/R = 0.225 - 0.414$$

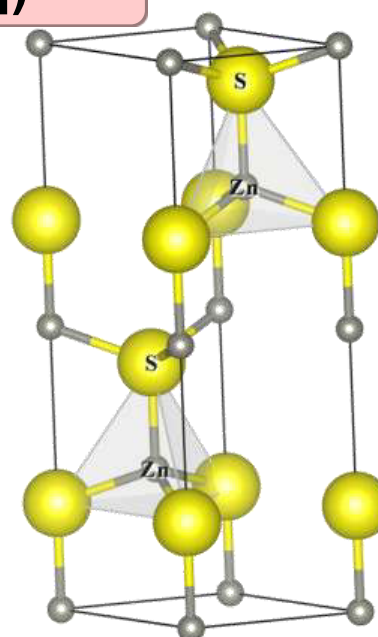
Αριθμός συναρμογής
κατιόντος

4

αριθμός συναρμογής
ανιόντος



ZnS (Σφαλερίτης),
Rob Lavinsky, iRocks.com/
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0



Δομή ZnS
American Mineralogist Crystal Structure Database/
visualised using VESTA open source software

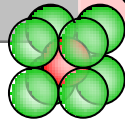
Κρύσταλλοι τύπου $A_m X_p$

η δομή του CaF_2 (φλουορίτη)

$$r/R = 0.8$$

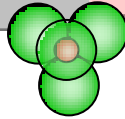
Αριθμός συναρμογής
κατιόντος

8

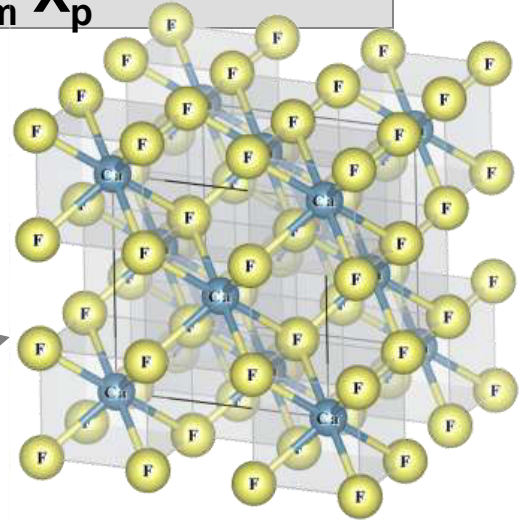


αριθμός συναρμογής
ανιόντος

4

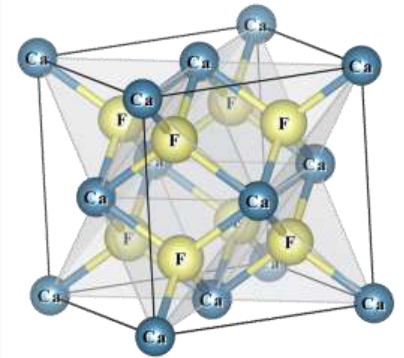


Αριθμός ανιόντων = 2 x αριθμός κατιόντων



Δομή CaF_2

American Mineralogist Crystal Structure Database/
visualised using VESTA open source software



Κρύσταλλοι τύπου $A_m B_n X_p$

$BaTiO_3$ (Η δομή του περοβσκίτη)

κατιόντα: Ti^{+4} , Ba^{+2} , ανιόν: O^{-2}

$$r/R = 0.8$$

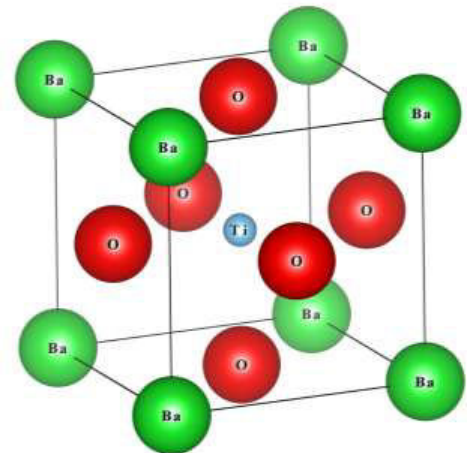
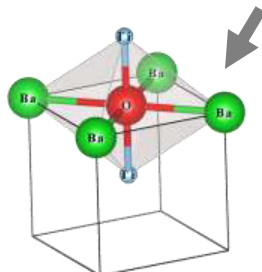
Αριθμός συναρμογής
κατιόντος

12

6

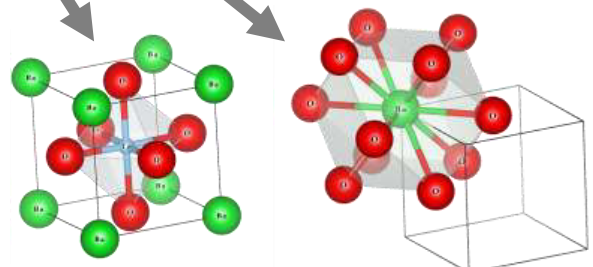
αριθμός συναρμογής
ανιόντος

6



Δομή $BaTiO_3$

American Mineralogist Crystal Structure Database/
visualised using VESTA open source software



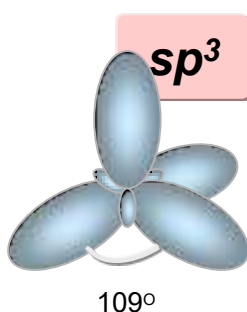
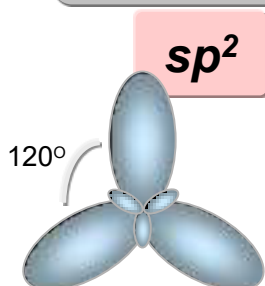
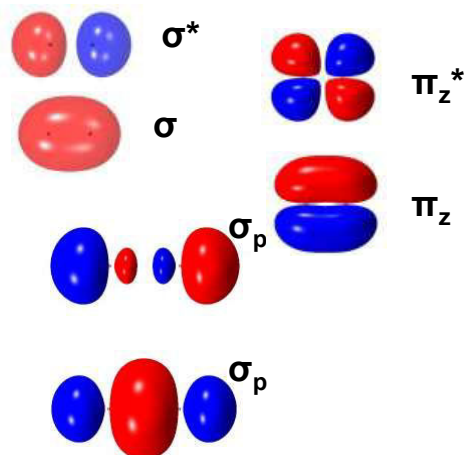
Ομοιοπολικά στερεά

Ο Αριθμός συναρμογής εξαρτάται από:

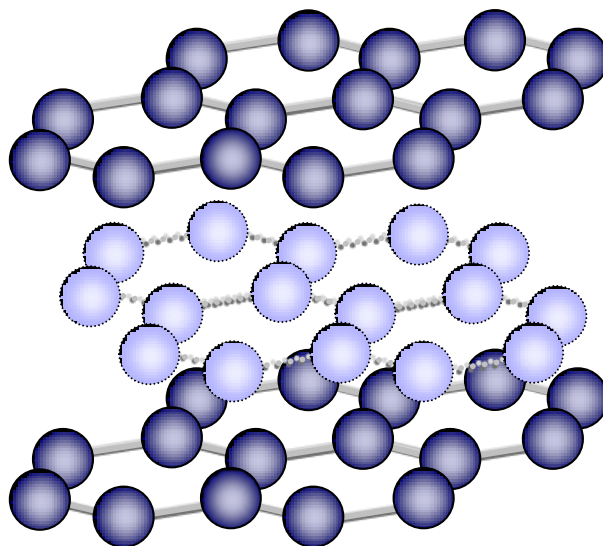
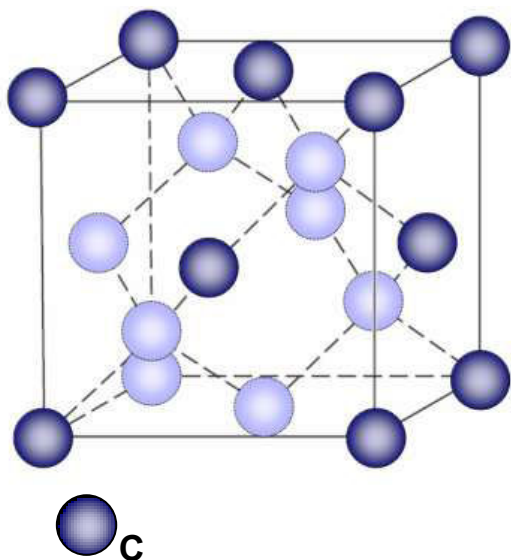
Τα ηλεκτρόνια σθένους του κάθε ατόμου

Τα μοριακά τροχιακά

Τον πιθανό υβριδισμό των ατομικών τροχιακών



Ομοιοπολικά στερεά



Διαμάντι

sp^3 υβριδισμός

Τετραεδρική δομή

Γωνίες δεσμών 109.5°

Γραφίτης

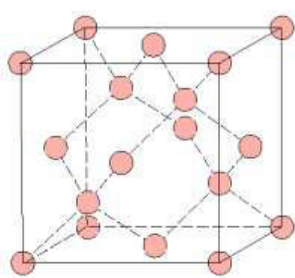
sp^2 υβριδισμός

εξαγωνική δομή

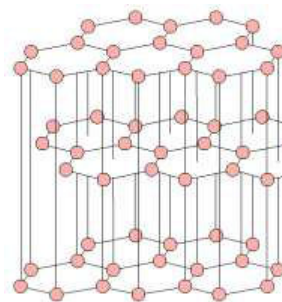
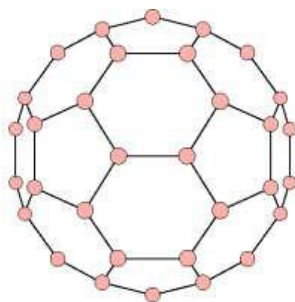
Γωνίες δεσμών 120°

Πολυμορφισμός - Αλλοτροπία

Περισσότερες από μία κρυσταλλικές δομές της ίδιας ουσίας



C



Διαμάντι

δομή ZnS

Θερμοδυναμικά
ασταθής μορφή σε
 T, P δωματίου

Φουλλερένιο

Δομή μπάλας

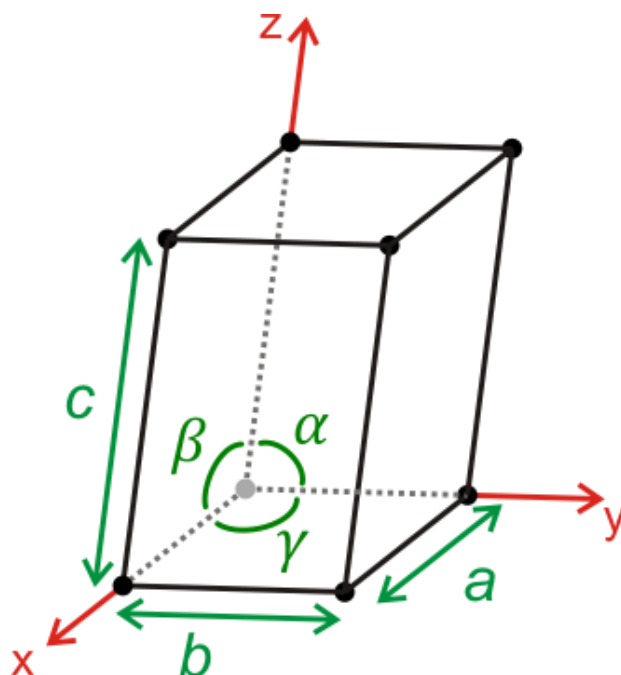
Ανακαλύφθηκε το 1985
Στερεά κατάσταση: FCC

Γραφίτης

θερμοδυναμικά
σταθερός C
Ομοιοπολικοί δεσμοί,
Δεσμοί van der Waals

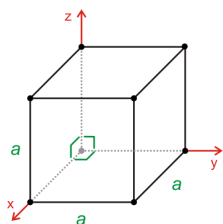
Κρυσταλλικό πλέγμα

Παράμετροι κρυσταλλικού πλέγματος

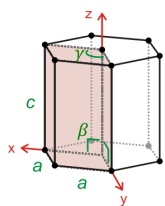


Κρυσταλλικά συστήματα

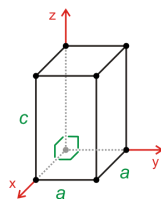
Συνολικά υπάρχουν 7 κρυσταλλικά συστήματα



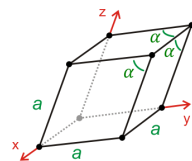
Κυβικό



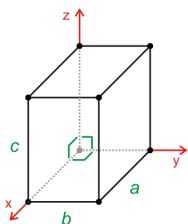
Εξαγωνικό



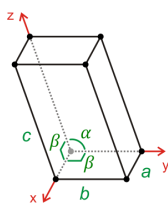
Τετραγωνικό



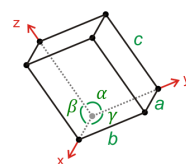
Ρομβοεδρικό



Ορθορομβικό



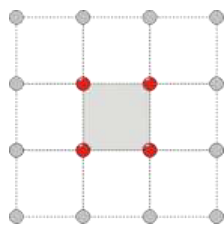
Μονοκλινές



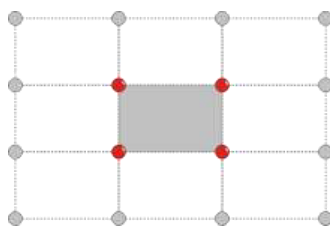
Τρικλινές

Κρυσταλλικά συστήματα σε 2 διαστάσεις

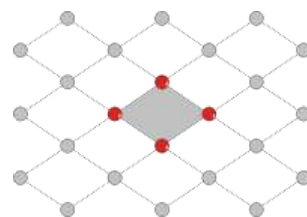
Συνολικά υπάρχουν 5 κρυσταλλικά συστήματα σε δύο διαστάσεις (ταπετσαρία)



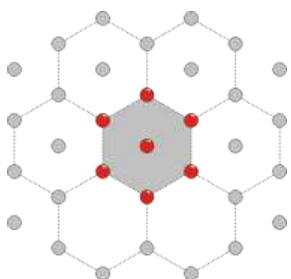
Τετραγωνικό



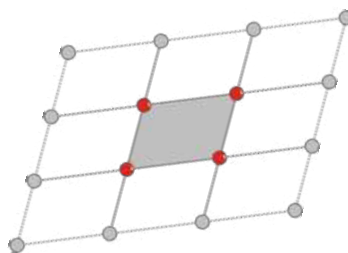
Ορθογώνιο



Ρομβικό



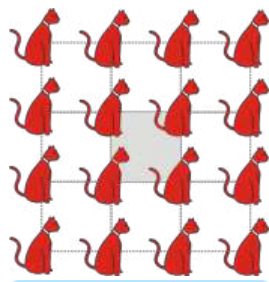
Εξαγωνικό



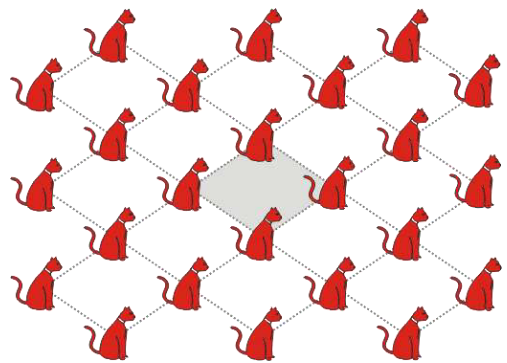
Πλάγιο

Κρυσταλλικά συστήματα σε 2 διαστάσεις

Κρυσταλλική δομή



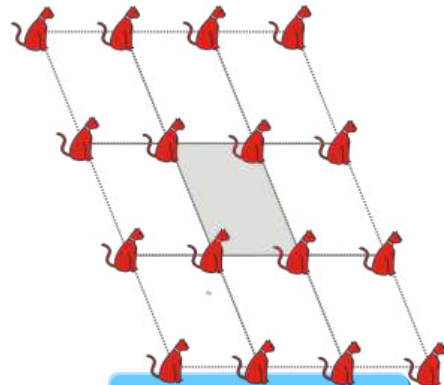
Τετραγωνικό



Ρομβικό

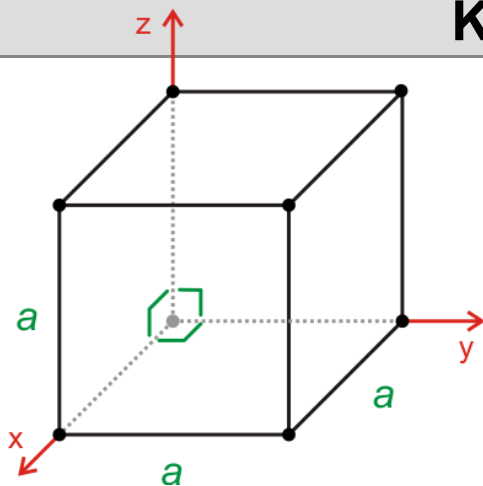


Εξαγωνικό



Πλάγιο

Κυβικό

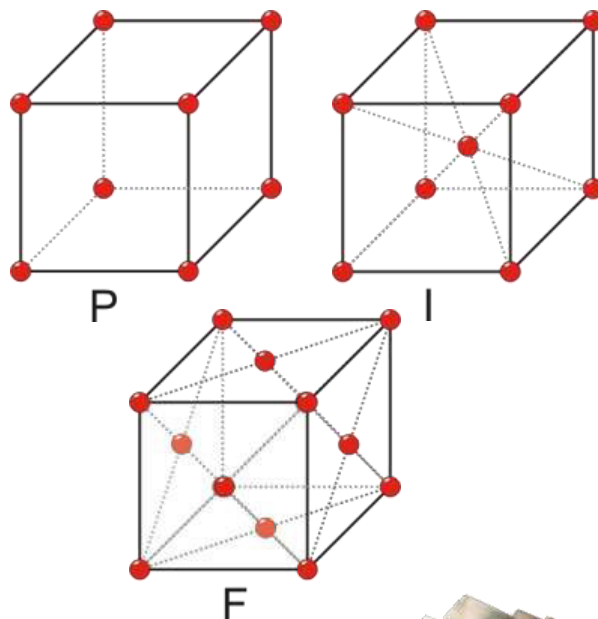


μήκη αξόνων

$$a = b = c$$

γωνίες αξόνων

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

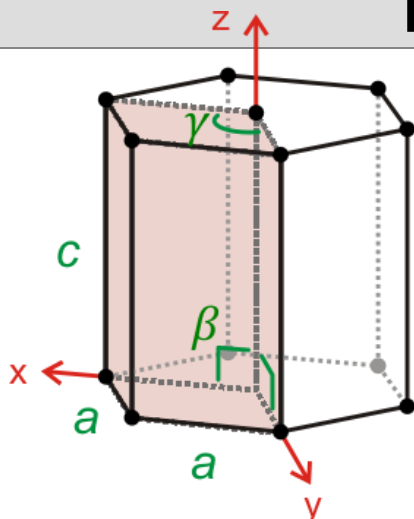


Ορυκτό άλας (NaCl)

Rob Lavinsky, iRocks.com /
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Κρυσταλλική δομή

Εξαγωνικό



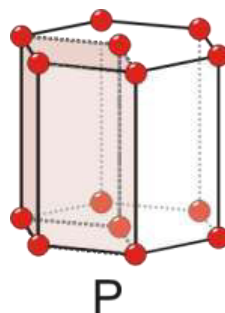
μήκη αξόνων

$$a = b \neq c$$

γωνίες αξόνων

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

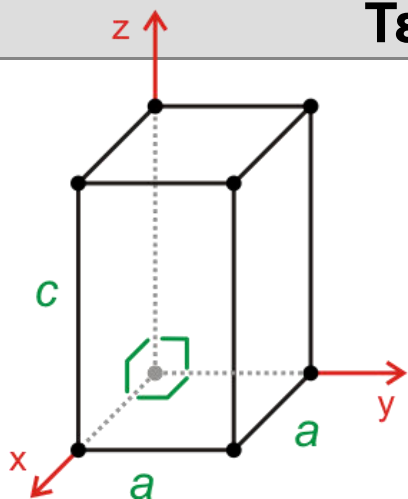
$$\gamma = 120^\circ$$



Beryl ($\text{Be}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_3)_6$)

User:Giac83/
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-2.5

Τετραγωνικό

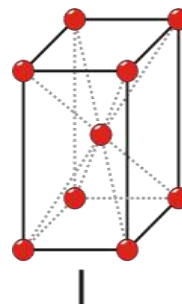
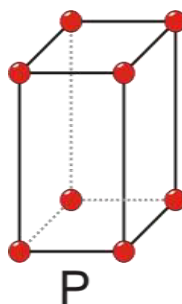


μήκη αξόνων

$$a = b \neq c$$

γωνίες αξόνων

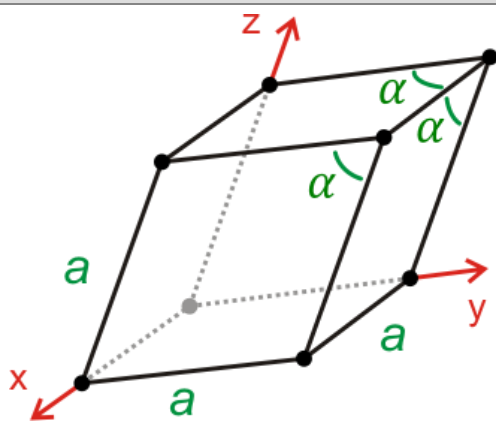
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Wulfenite (PbMoO_4)

Rob Lavinsky, iRocks.com /
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Ρομβοεδρικό

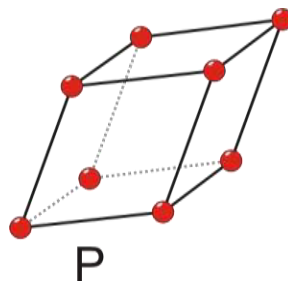


μήκη αξόνων

$$a = b = c$$

γωνίες αξόνων

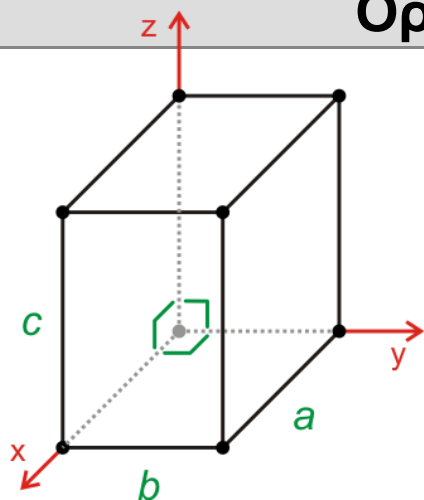
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



Quartz (SiO_2)

Didier Descouens/
Wikimedia Commons / CC-BY-3.0

Ορθορομβικό

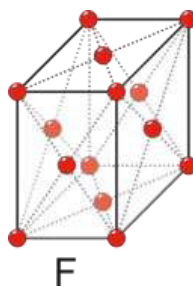
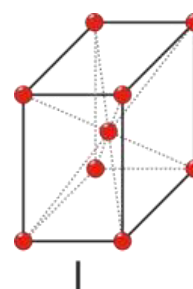
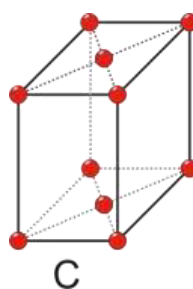
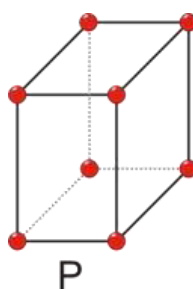


μήκη αξόνων

$$a \neq b \neq c$$

γωνίες αξόνων

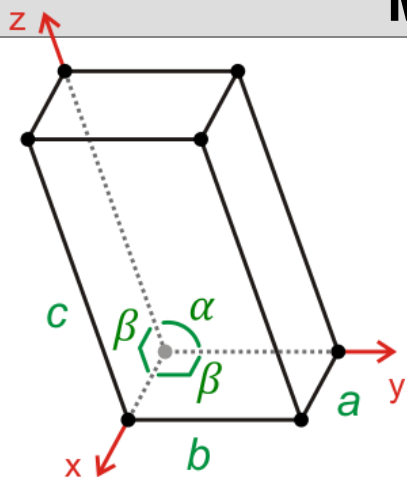
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Aragonite (CaCO_3)

Rob Lavinsky, iRocks.com /
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Μονοκλινές



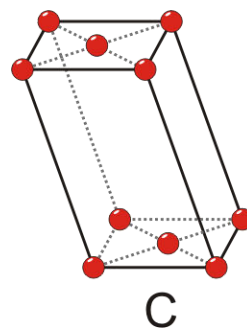
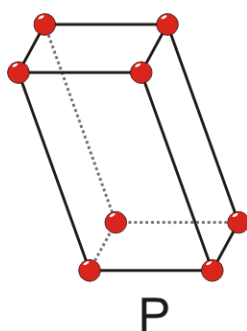
μήκη αξόνων

$$a \neq b \neq c$$

γωνίες αξόνων

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

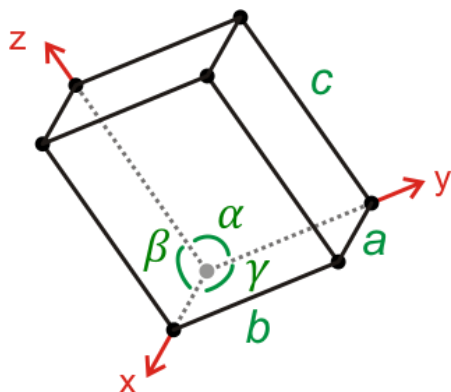
$$\alpha \neq 90^\circ$$



“Desert Rose” Gypsum ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)

Didier Descouens/
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Τρικλινές

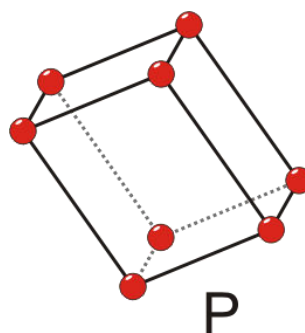


μήκη αξόνων

$$a \neq b \neq c$$

γωνίες αξόνων

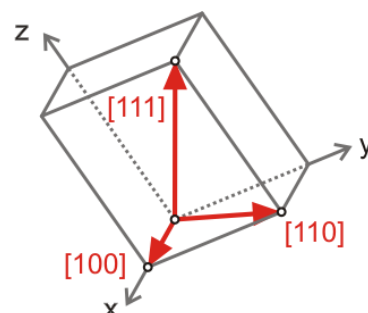
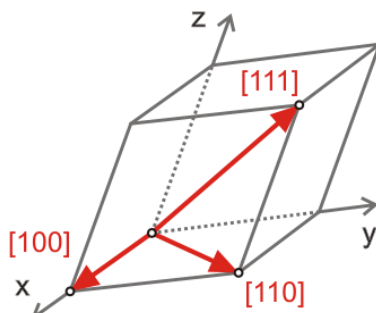
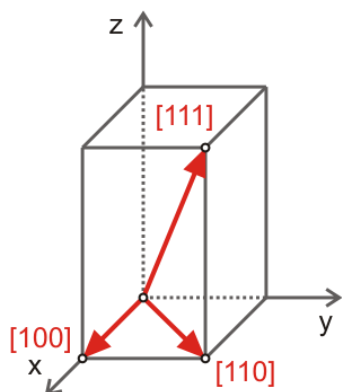
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Microcline (KAlSi_3O_8)

Tom Epaminondas/
Wikimedia Commons / CC BY-SA 2.0 BR

Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις



Διανύσματα

Αρχή

Κέντρο συντεταγμένων

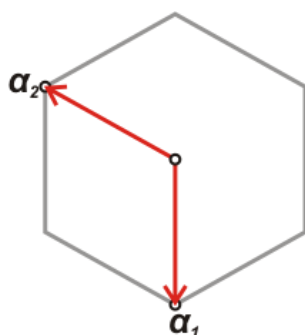
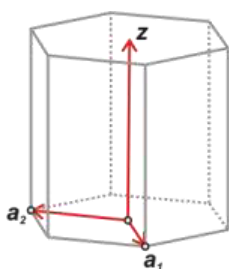
Μέτρο

αληγμένες διαστάσεις μοναδιαίας κυψελίδας

Συμβολισμός

$[u \ v \ w]$

Εξαγωνικοί κρύσταλλοι



$[u' \ v' \ w']$

$[u \ v \ t \ w]$

3 δείκτες

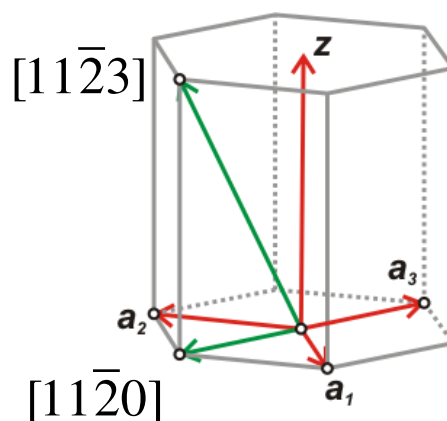
4 δείκτες

$$u = \frac{1}{3}(2u' - v')$$

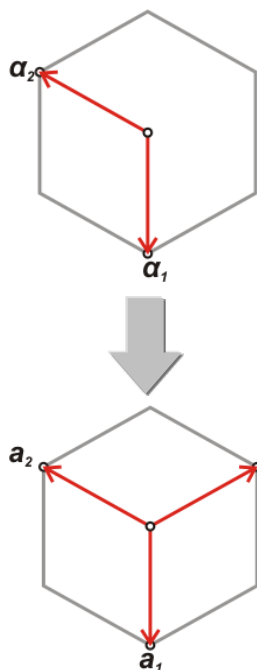
$$v = \frac{1}{3}(2v' - u')$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = w'$$



$$\mathbf{a}_1 = \bar{a}_1, \quad \mathbf{a}_2 = \bar{a}_2, \quad \mathbf{a}_3 = -(\bar{a}_1 + \bar{a}_2)$$

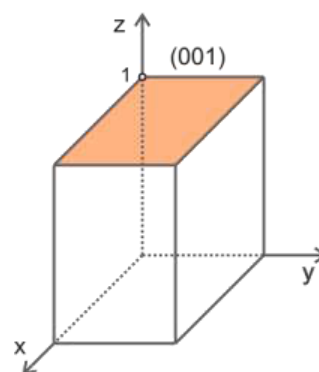
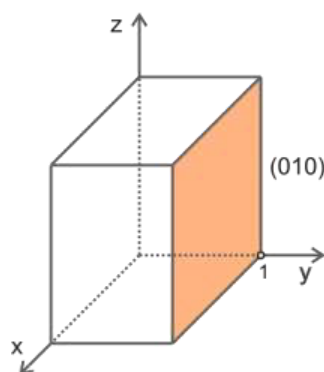
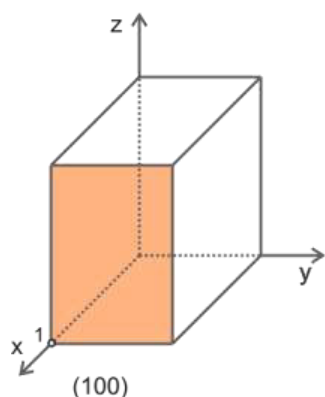


$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r} &= u' \bar{a}_1 + v' \bar{a}_2 \equiv u \mathbf{a}_1 + v \mathbf{a}_2 + t \mathbf{a}_3 \\ t &\equiv -(u + v) \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} u' \bar{a}_1 + v' \bar{a}_2 &= u \bar{a}_1 + v \bar{a}_2 + (u + v)(\bar{a}_1 + \bar{a}_2) = \\ &= (2u + v) \bar{a}_1 + (2v + u) \bar{a}_2 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} u' &= (2u + v) \\ v' &= (2v + u) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} u &= \frac{1}{3}(2u' - v') \\ v &= \frac{1}{3}(2v' - u') \end{aligned}$$

Κρυσταλλογραφικά επίπεδα



Συμβολισμός

$(h \ k \ l)$

h

αντίστροφο της τομής του επιπέδου με τον άξονα x

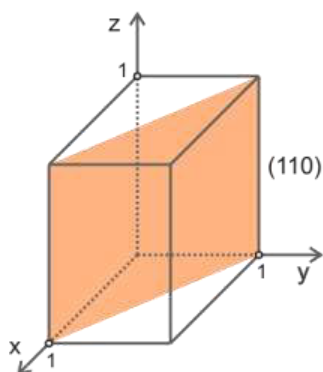
k

αντίστροφο της τομής του επιπέδου με τον άξονα y

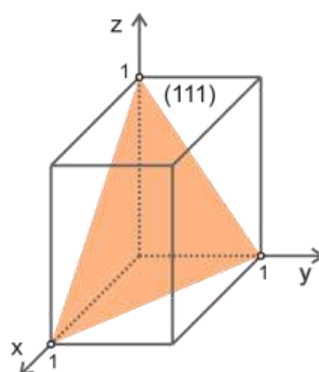
l

αντίστροφο της τομής του επιπέδου με τον άξονα z

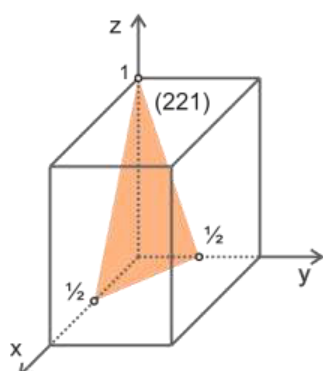
Κρυσταλλογραφικά επίπεδα: παραδείγματα



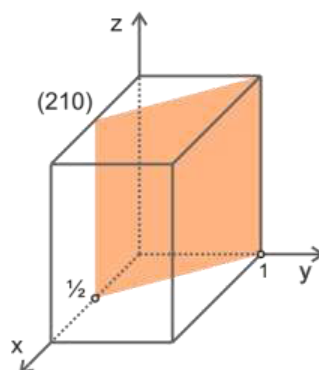
x	y	z
1	1	∞
h	k	l
1	1	0



x	y	z
1	1	1
h	k	l
1	1	1



x	y	z
1/2	1/2	1
h	k	l
2	2	1



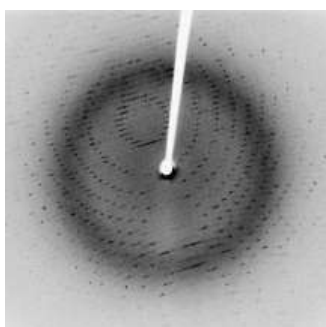
x	y	z
1/2	1	∞
h	k	l
2	1	0

Τεχνικές ανάλυσης της δομής

Περίθλαση κυμάτων από την κρυσταλλική δομή

Μήκος κύματος ~ διαστάσεις ατόμων

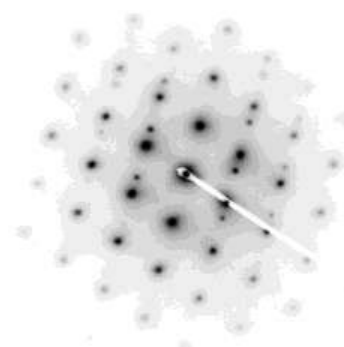
Ακτίνες Χ



X-Ray Diffraction pattern
Jeff Dahl
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

XRD

Περίθλαση ηλεκτρονίων

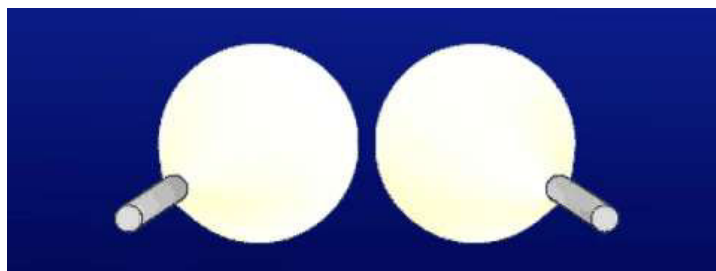


Transmission electron microscopy (inverted contrast)
User:Cm the p
Wikimedia Commons / Public Domain

TEM

Αρχή της επαλληλίας - Συμβολή

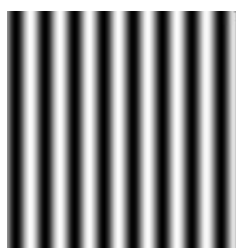
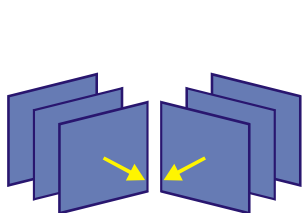
Όταν κύματα συναντιούνται στον χώρο το συνολικό πλάτος δίνεται από την επαλληλία των επιμέρους πλάτων



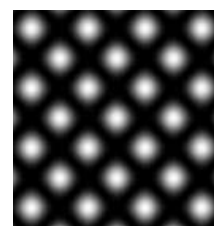
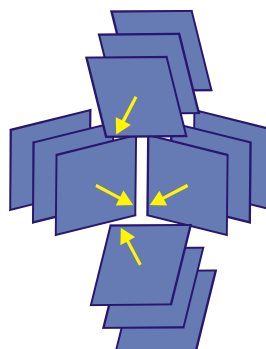
$$\text{Φως} + \text{Φως} = \text{Σκοτάδι}$$

Η μεταβολή της έντασης του κύματος εξαιτίας της επαλληλίας ονομάζεται συμβολή

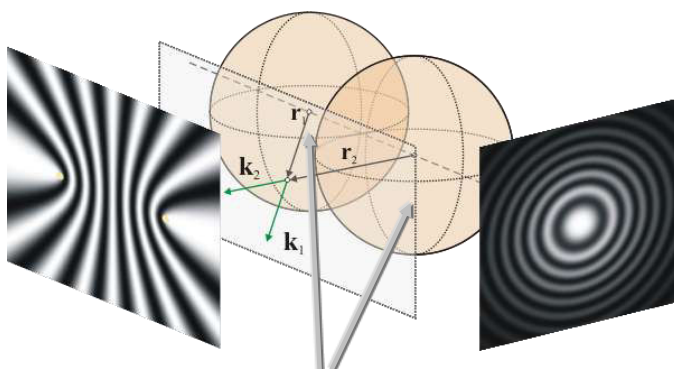
Συμβολή κυμάτων



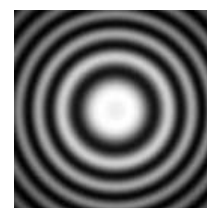
2 επίπεδα κύματα



4 επίπεδα κύματα

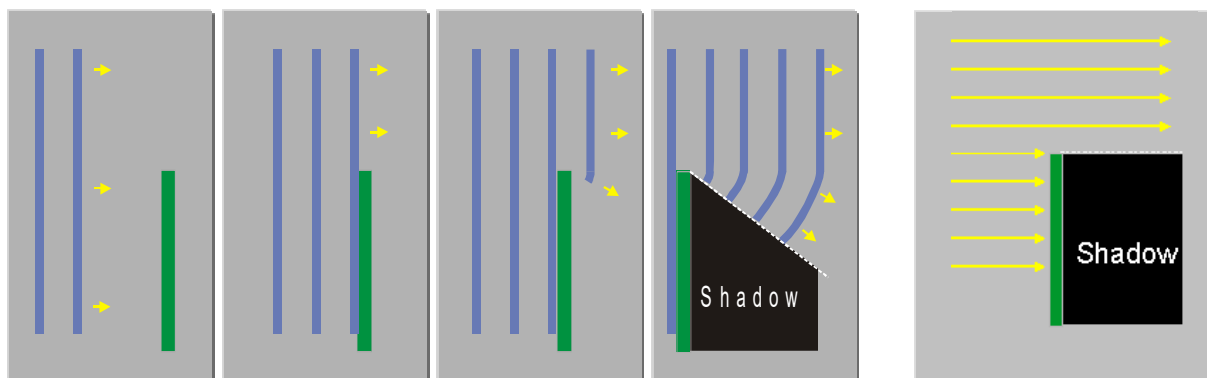


2 σημειακές πηγές



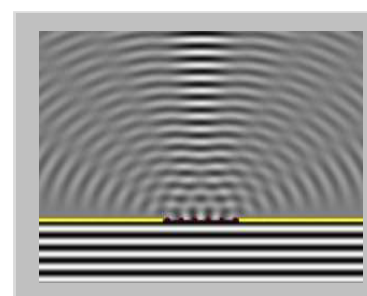
Αλλάζοντας την απόσταση των πηγών

Τα κύματα συναντούν εμπόδια: Περίθλαση



Τα κύματα παρακάμπτουν το εμπόδιο !

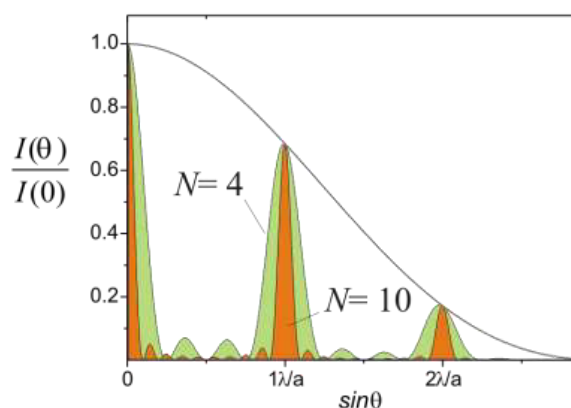
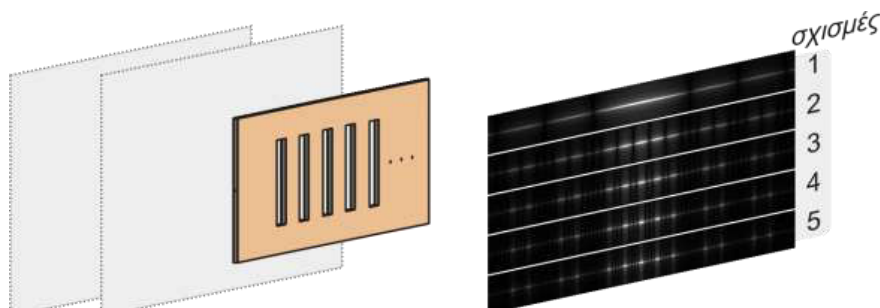
Το φαινόμενο όπου τα κύματα παρακάμπτουν εμπόδια που συναντούν κατά την διάδοση τους το ονομάζουμε **περίθλαση**



Περίθλαση από άνοιγμα

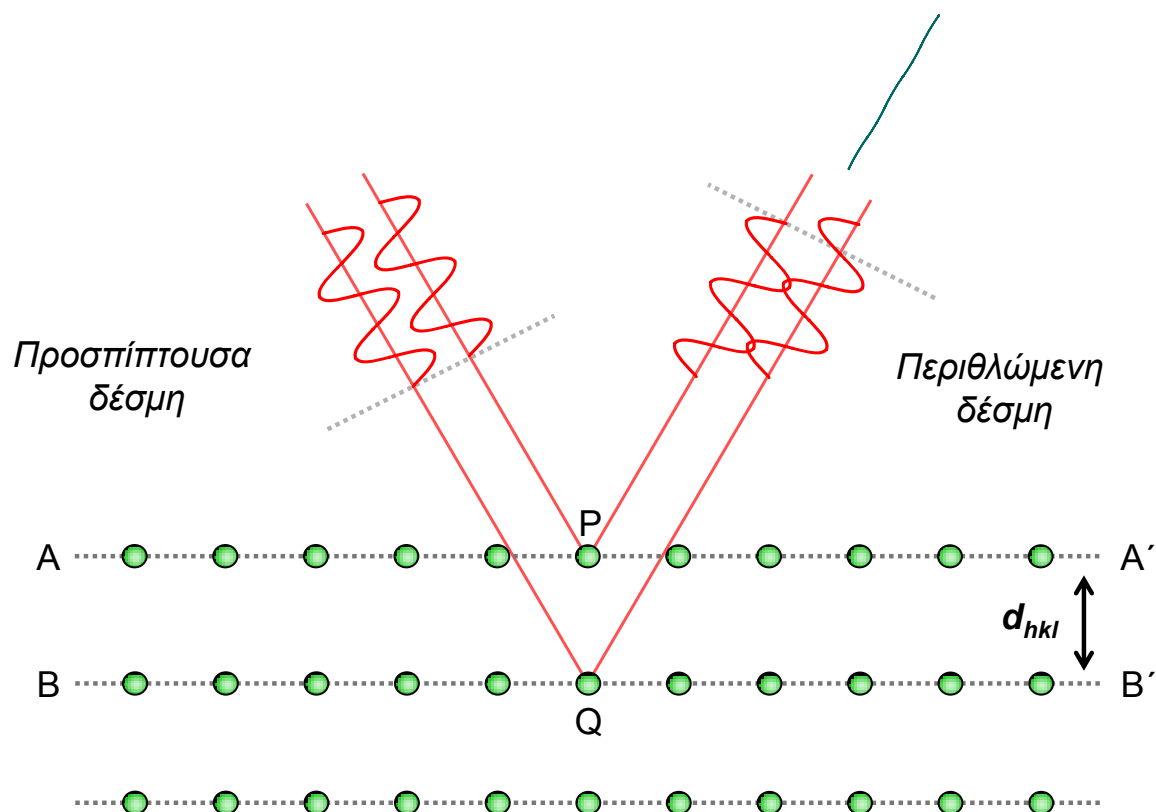
User: Lookang
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Περίθλαση από διατεταγμένα εμπόδια

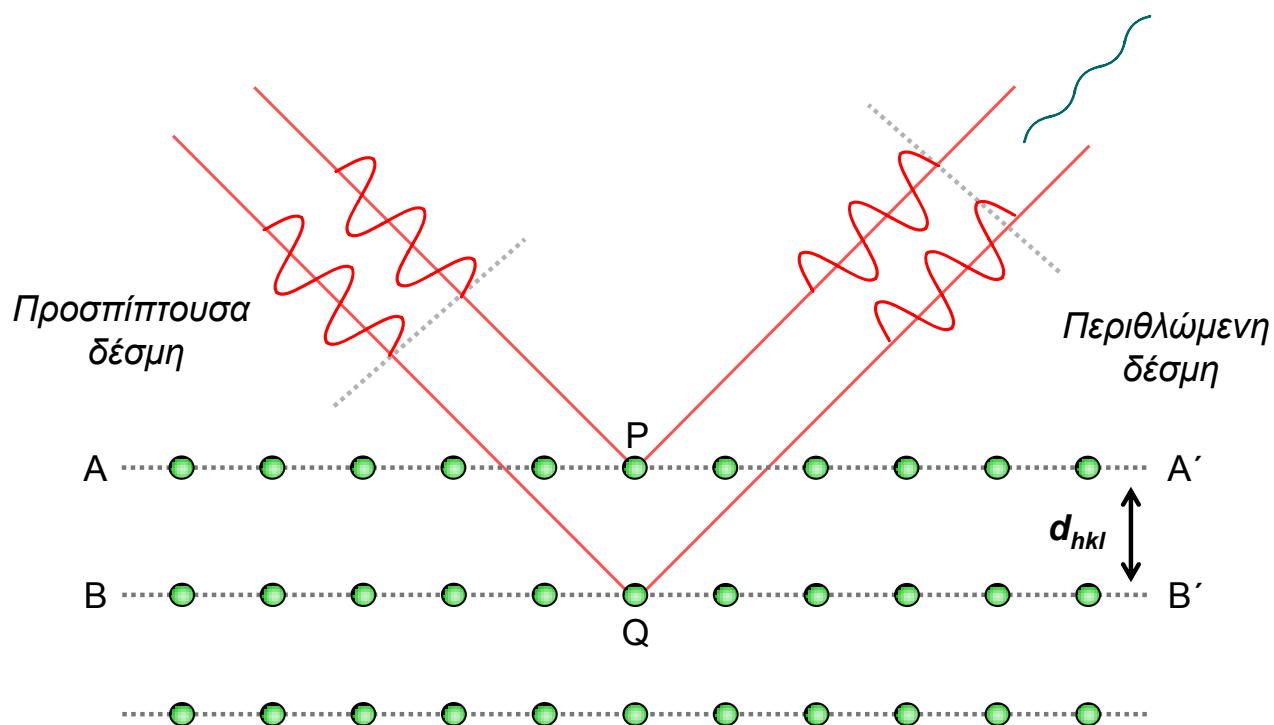


Κατά την περίθλαση από διατεταγμένα εμπόδια εμφανίζονται μέγιστα μόνο σε συγκεκριμένες διευθύνσεις !

Περίθλαση ακτίνων Χ από συστοιχία επιπέδων

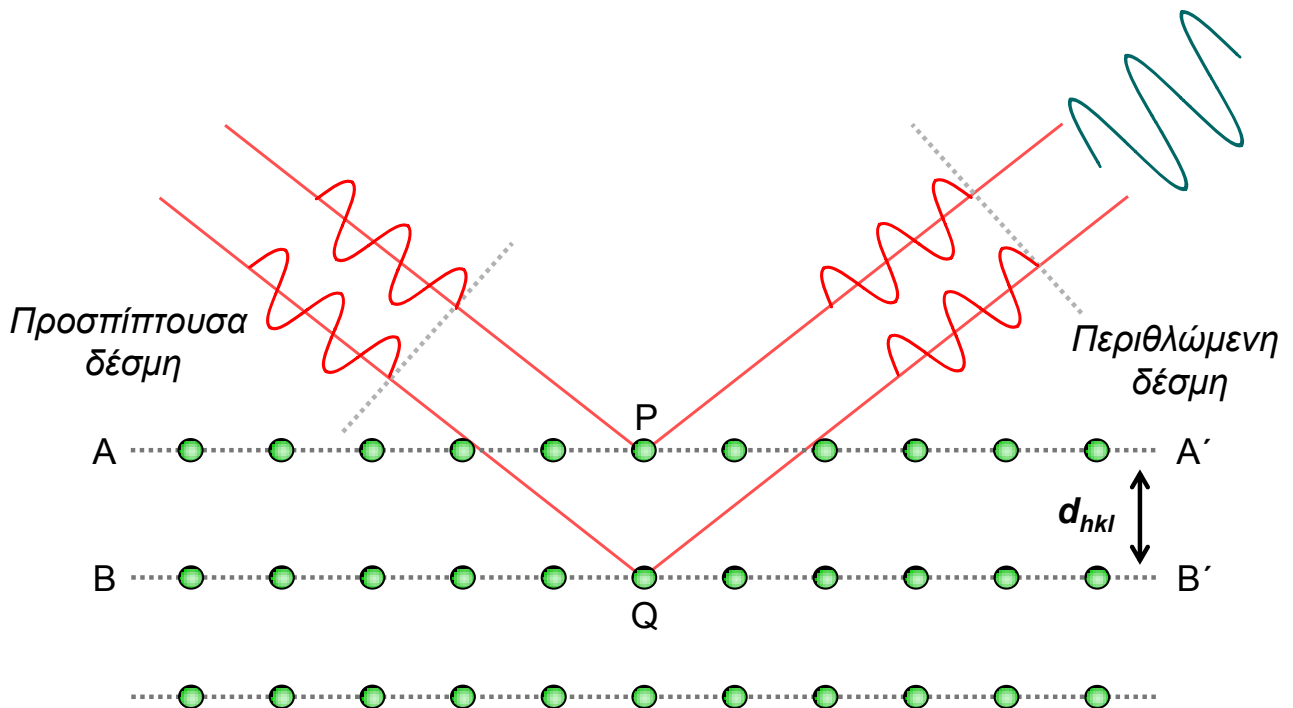


Περίθλαση ακτίνων Χ από συστοιχία επιπέδων



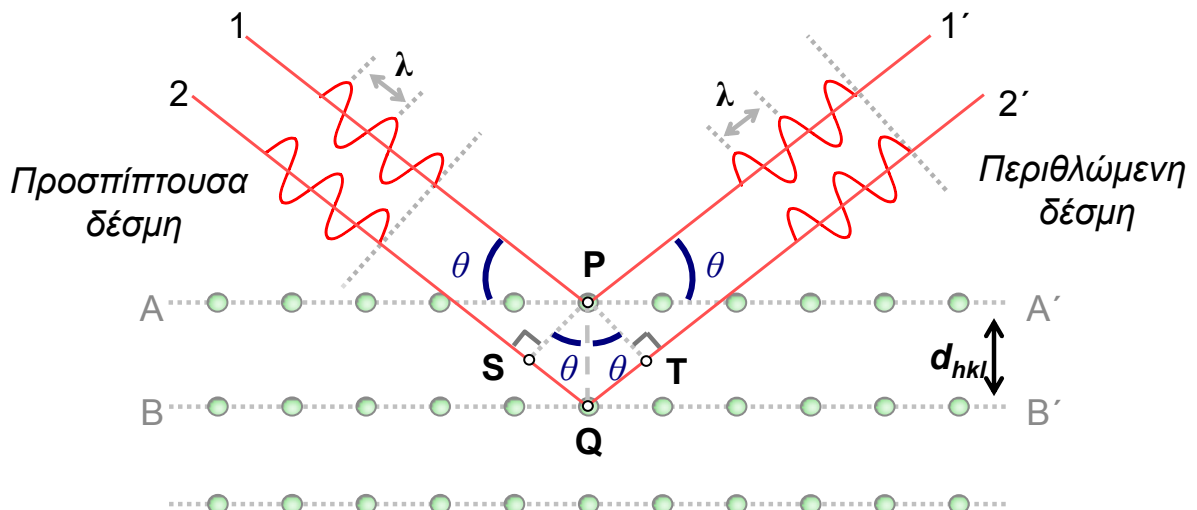
Περίθλαση ακτίνων Χ από συστοιχία επιπέδων

Κρυσταλλική δομή



Περίθλαση ακτίνων Χ & νόμος του Bragg

Κρυσταλλική δομή



Ενισχυτική συμβολή όταν:

$$SQ + QT = n\lambda$$

$$(SQ) = (QT) = d_{hkl} \sin \theta$$

$\Rightarrow$

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

Νόμος Bragg

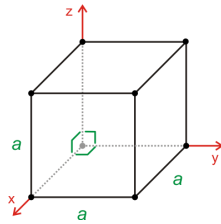
Απόσταση
επιπέδων

μήκος
κύματος

Υπολογισμός του d_{hkl} για διάφορα κρυσταλλικά συστήματα

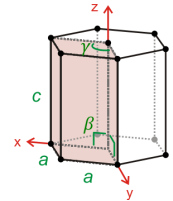
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Κυβικό



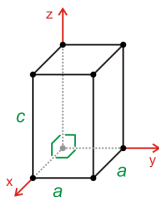
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3a^2} (h^2 + hk + k^2) + \frac{l^2}{c^2}$$

Εξαγωνικό



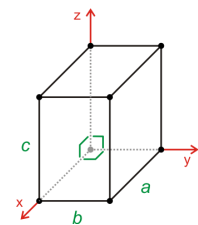
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Τετραγωνικό



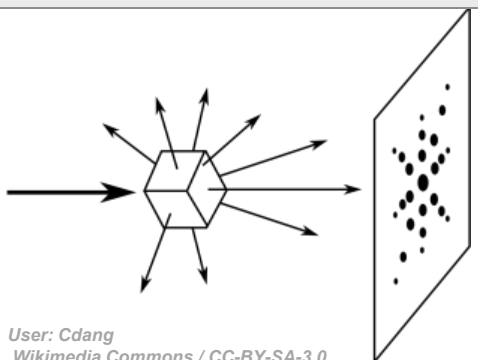
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Ορθορομβικό



Τεχνικές περίθλασης ακτίνων Χ

Laue

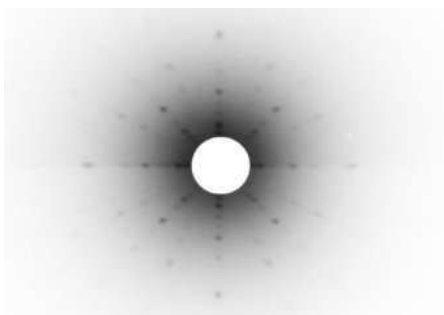


User: Cdang
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Η τεχνική **Laue** χρησιμοποιείται κυρίως για τον καθορισμό του προσανατολισμού μεγάλων μονοκρυστάλλων.

Πολυχρωματική ακτινοβολία διέρχεται ή ανακλάται από ένα σταθερό κρύσταλλο. Οι περιθλώμενες ακτίνες σχηματίζουν στο φιλμ κηλίδες που διατάσσονται σε καμπύλες.

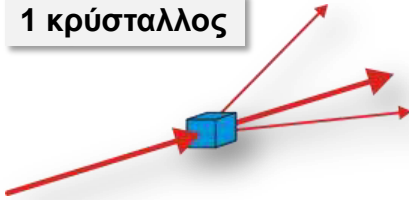
Η γωνία Bragg είναι δεδομένη για κάθε σει επιπέδων στον κρύσταλλο. Κάθε σει επιπέδων περιθλά το μήκος κύματος που ικανοποιεί την συνθήκη Bragg. Έτσι κάθε καμπύλη αντιστοιχεί σε ένα διαφορετικό μήκος κύματος



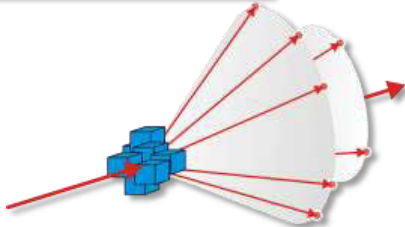
Backscattering Laue picture of a cubic crystal
User: Tizeff
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Τεχνικές περίθλασης ακτίνων Χ

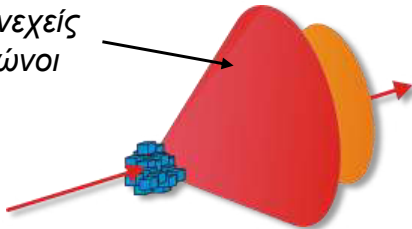
1 κρύσταλλος



δεκάδες κρύσταλλοι



εκατοντάδες κρύσταλλοι

Συνεχείς
κώνοι

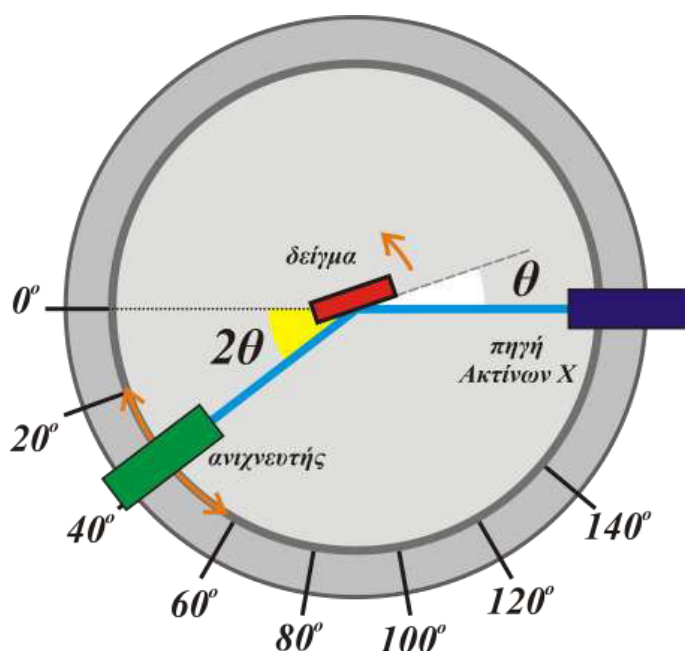
Περίθλαση σκόνης

Η τεχνική **περίθλασης σκόνης** χρησιμοποιείται για τον ακριβή καθορισμό των κρυσταλλικών παραμέτρων, δηλαδή των διαστάσεων της κρυσταλλικής κυψελίδας.

Μονοχρωματική ακτινοβολία διέρχεται ή ανακλάται από ένα δείγμα που έχει κονιορτοποιηθεί (μεγάλος αριθμός μικρο-κρυστάλλων σε τυχαίο προσανατολισμό).

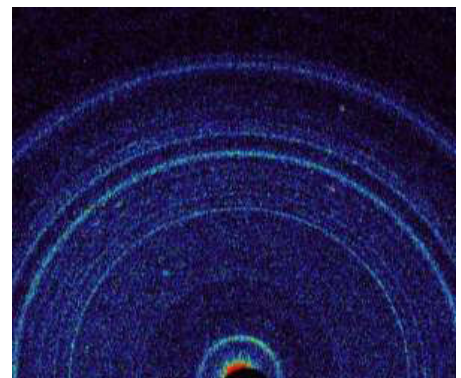
Για κάθε σκετ κρυσταλλικών επιπέδων, τυχαία, ένας ή περισσότεροι μικρο-κρύσταλλοι θα είναι προσανατολισμένοι έτσι ώστε να ικανοποιούνται οι συνθήκες Bragg,

Τεχνικές περίθλασης ακτίνων Χ



Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Περιθλασίμετρο ακτίνων Χ

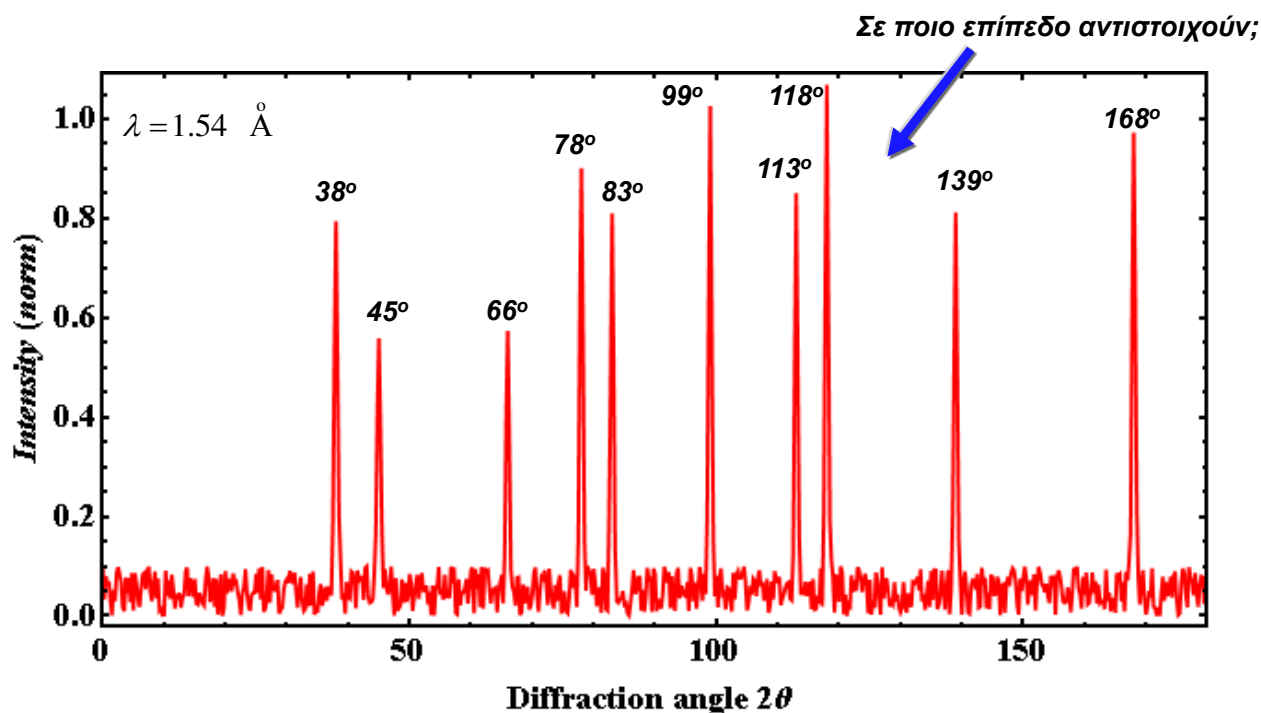


First X-ray diffraction view of Martian soil
NASA

Wikimedia Commons / Public Domain

Ανάλυση φάσματος περίθλασης

Κρυσταλλική δομή



Λαμβάνουμε το φάσμα και προσδιορίζουμε τις θέσεις των κορυφών

Κυβικό σύστημα

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

Νόμος Bragg

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \Rightarrow \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 \sin^2 \theta = \underbrace{(h^2 + k^2 + l^2)}_{\text{integer}}$$

const

π.χ. πολλαπλασιάζουμε με $K=27.3$

θ	$\sin^2(\theta)$	$K \sin^2(\theta)$	$h^2+k^2+l^2$	(hkl)	$a \text{ (\AA)}$
19.0	0.11	3.0	3	(111)	4.05
22.5	0.15	4.1	4	(200)	4.02
33.0	0.30	8.2	8	(220)	4.02
39.0	0.40	10.9	11	(311)	4.04
41.5	0.45	12.3	12	(222)	4.02
49.5	0.58	15.8	16	(400)	4.04
56.5	0.70	19.1	19	(331)	4.03
59.0	0.73	19.9	20	(420)	4.04
69.5	0.88	24.0	24	(422)	4.01
84.0	0.99	27.0	27	(511)	4.03

$$a^2 = \frac{\lambda^2 (h^2 + k^2 + l^2)}{4 \sin^2 \theta}$$

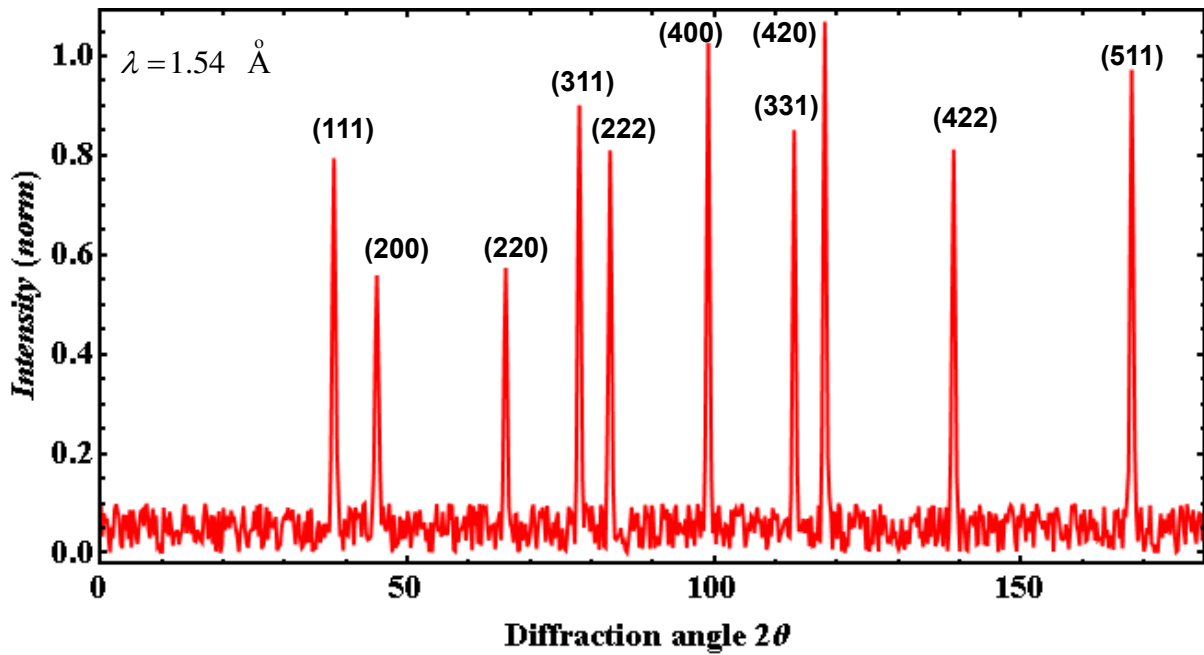
$\lambda = 1.54 \text{ \AA}$

Υπολογίζουμε τον πλησιέστερο ακέραιο

Κρυσταλλική δομή

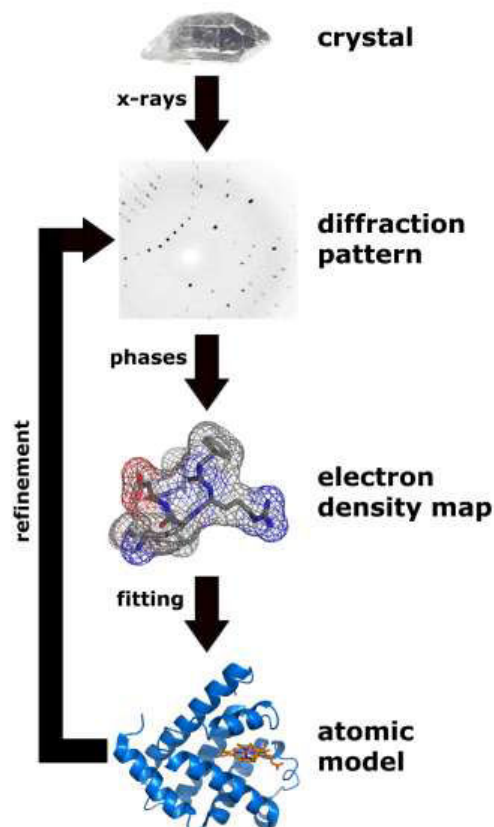
Αντιστοίχιση κρυσταλλογραφικών επιπέδων

Κρυσταλλική δομή



Ανάλυση της δομής με ακτίνες X

Κρυσταλλική δομή



Structure determination by X-ray crystallography
Thomas Splettstoesser
Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Ενότητα 6: Μηχανικές ιδιότητες

6

Μηχανικές ιδιότητες

Μηχανικές Ιδιότητες

Τάση-παραμόρφωση

Ελαστική συμπεριφορά

Πλαστική συμπεριφορά

Αντοχή και ολκιμότητα

Σκληρότητα

Μηχανική αντοχή

Αντοχή σε κάμψη



Αντοχή σε εφελκυσμό



Αντοχή σε συμπίεση



Αντοχή σε διάτμηση

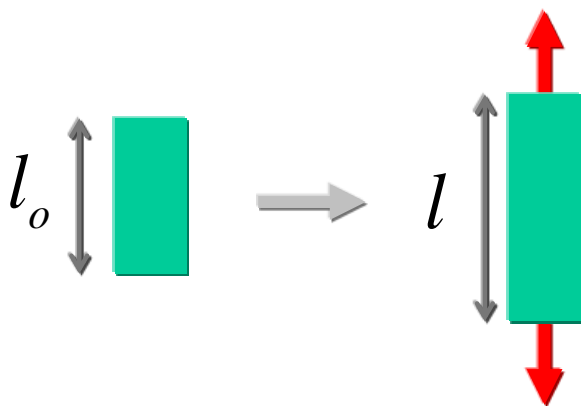


Αντοχή σε θραύση



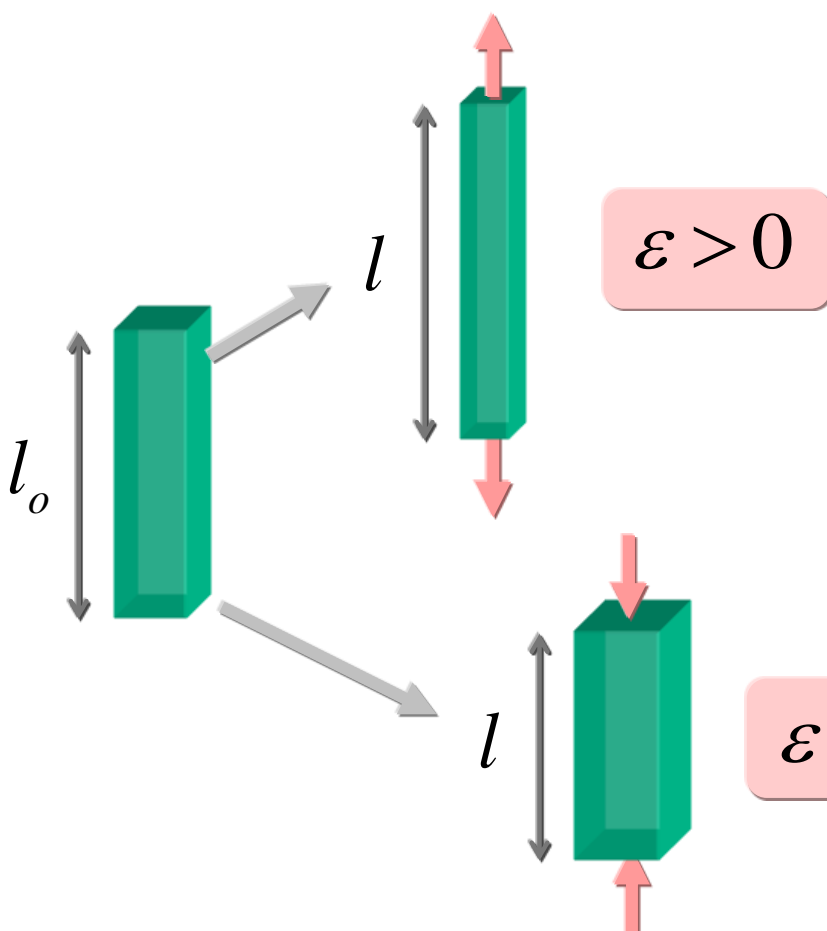
Παραμόρφωση

Ως παραμόρφωση (deformation) ονομάζουμε την επιμήκυνση ανά μονάδα μήκους



$$\varepsilon = \frac{l - l_o}{l_o}$$

Η παραμόρφωση ε είναι αδιάστατο μέγεθος

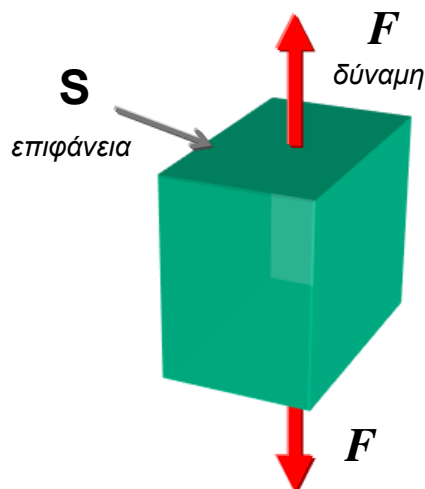


$$\varepsilon > 0$$

$$\varepsilon < 0$$

Τάση

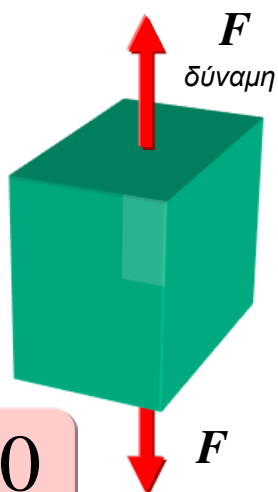
Ως τάση (stress) ονομάζουμε
την δύναμη ανά μονάδα επιφάνειας



$$\sigma = \frac{F}{S}$$

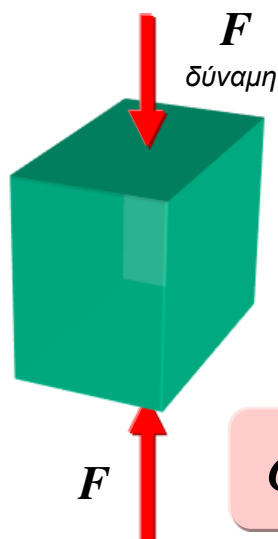
Η τάση σ μετριέται σε Newton/m² (= 1 Pa)

Εφελκυσμός



$$\sigma > 0$$

Θλίψη



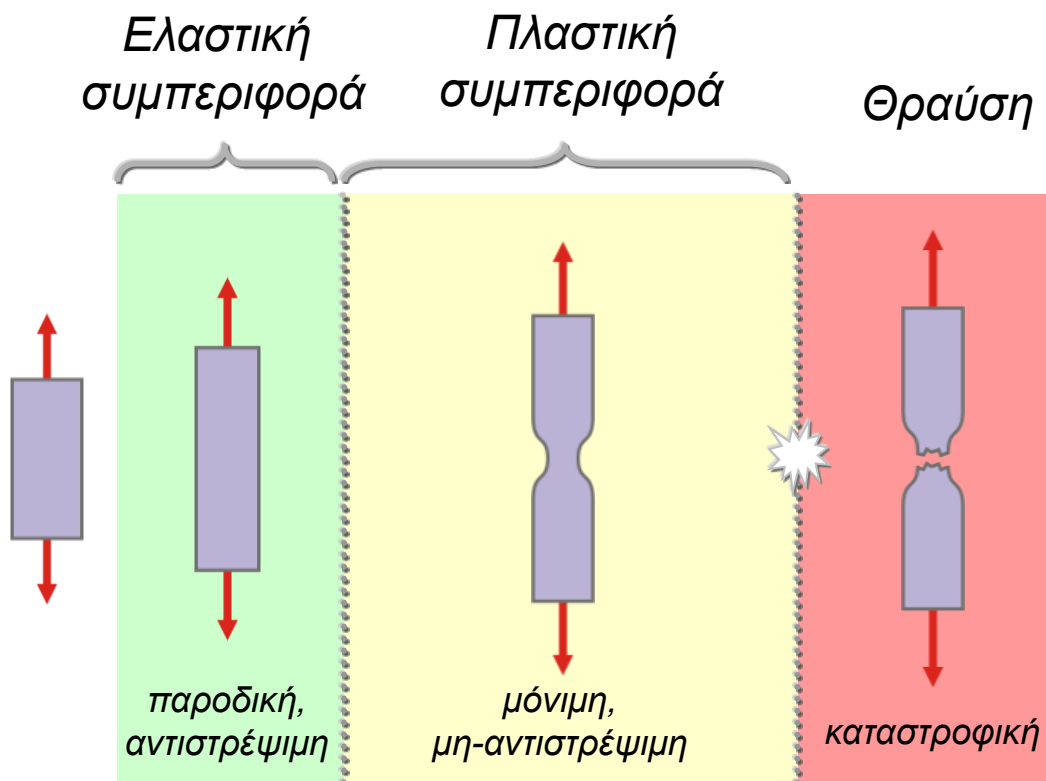
$$\sigma < 0$$

Η τάση σ μετριέται συνήθως σε MPa

$$1 \text{ MPa} = 10^6 \text{ N/m}^2$$

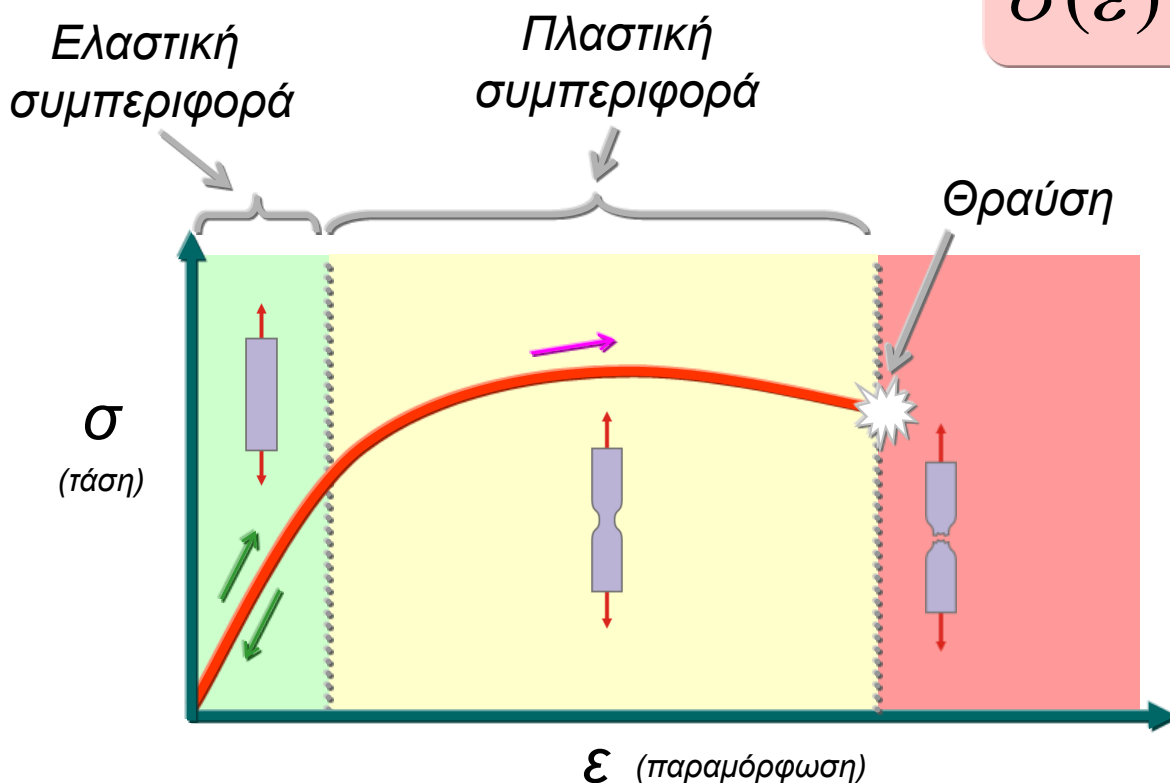
$$145 \text{ psi} = 1 \text{ MPa}$$

Πως παραμορφώνεται ένα υλικό υπό συνεχώς αυξανόμενη εφελκυστική τάση;



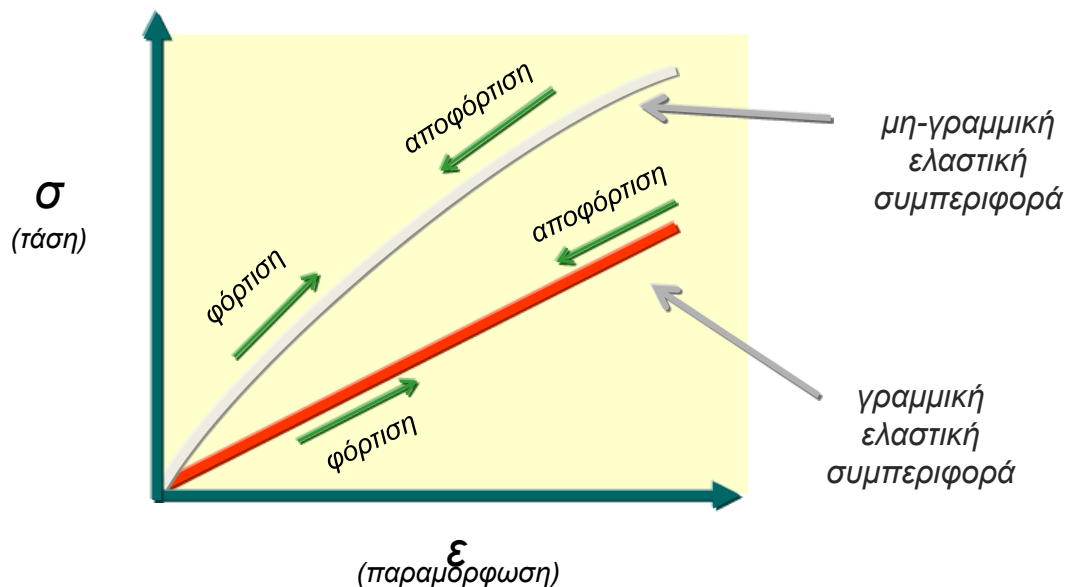
Πως συνδέονται η τάση με την παραμόρφωση ;

$$\sigma(\varepsilon) = ?$$



Ελαστική συμπεριφορά

Η ελαστική παραμόρφωση είναι παροδική και αντιστρέψιμη !
(οφείλεται σε «τέντωμα» δεσμών)

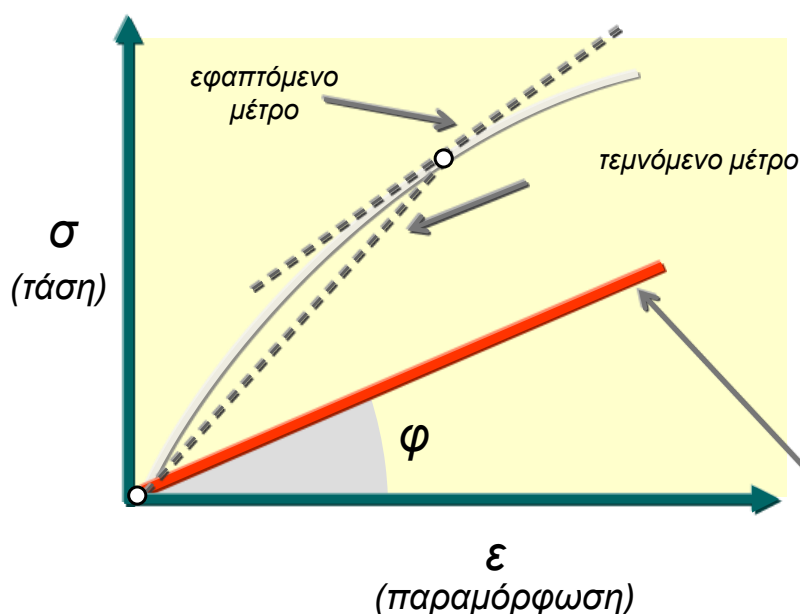


Στην γραμμική ελαστική συμπεριφορά η τάση είναι ανάλογη της παραμόρφωσης

$$\sigma \propto \epsilon$$

Μέτρο ελαστικότητας

Το μέτρο ελαστικότητας E ορίζεται από την κλίση της καμπύλης $\sigma(\epsilon)$



$$\sigma = E \cdot \epsilon$$

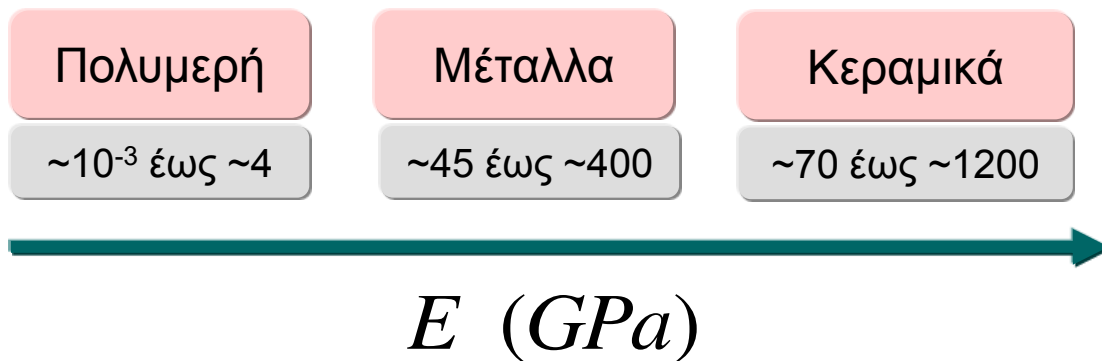
μέτρο ελαστικότητας

$$E = \tan \varphi$$

κλίση

Το μέτρο ελαστικότητας E μετριέται συνήθως σε **GPa***

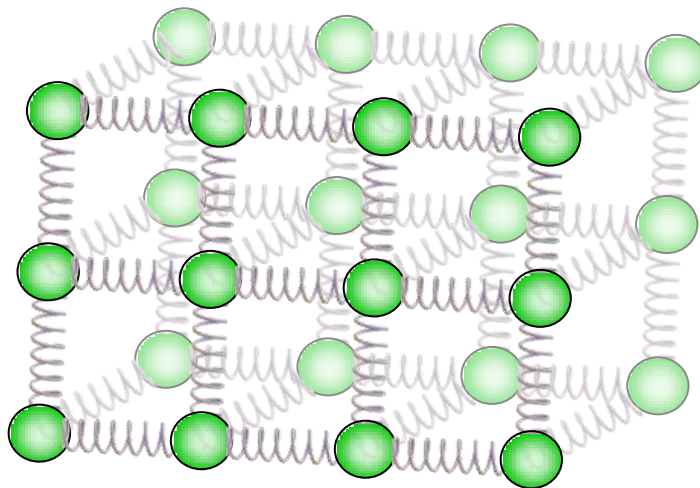
Τυπικές τιμές



Το μέτρο ελαστικότητας E μειώνεται καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία (αυξάνεται στα πολυμερή)

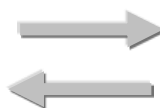
* 1 GPa = 10^9 Pa

Ελαστική συμπεριφορά – ατομική κλίμακα

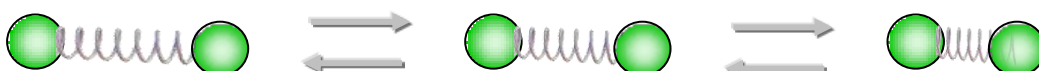


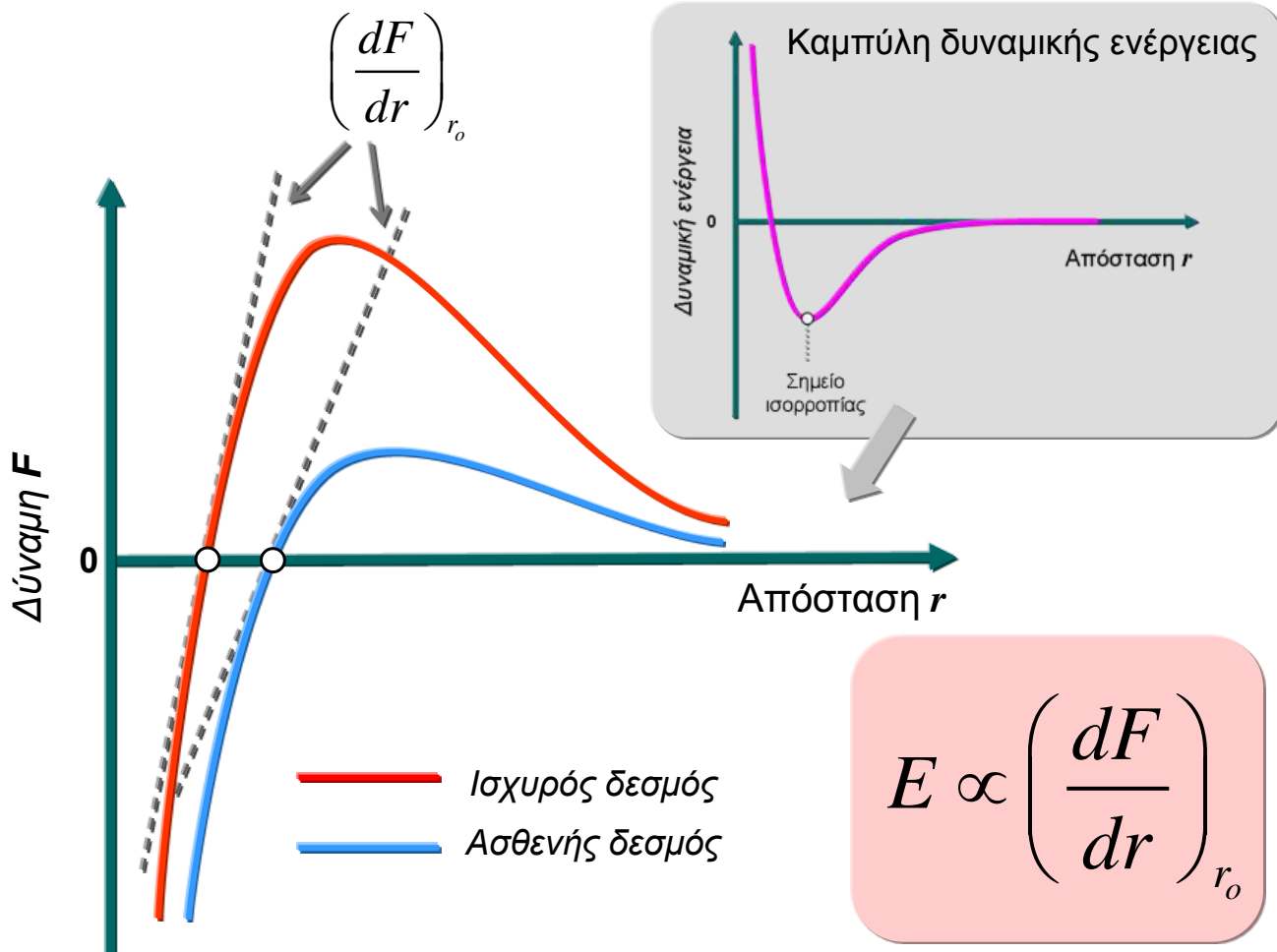
Μοντέλο
ελατηρίων

Μακροσκοπική ελαστική
παραμόρφωση



Αλλαγή στις διατομικές
αποστάσεις





Ανελαστικότητα

Η ανελαστικότητα αφορά την χρονική εξάρτηση της παραμόρφωσης. (Καθυστέρηση της επαναφοράς μετά την απομάκρυνση της τάσης)

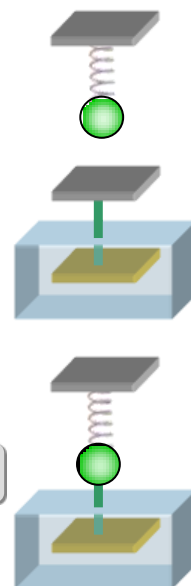
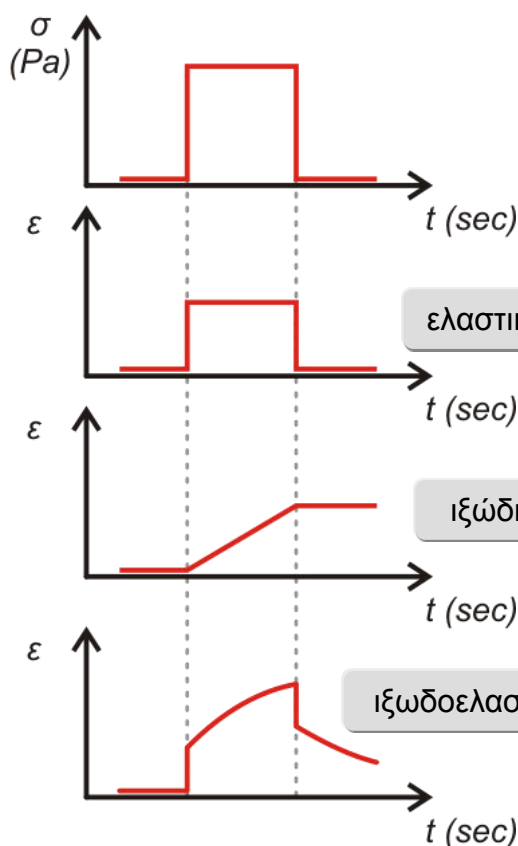
Κεραμικά

Μέταλλα

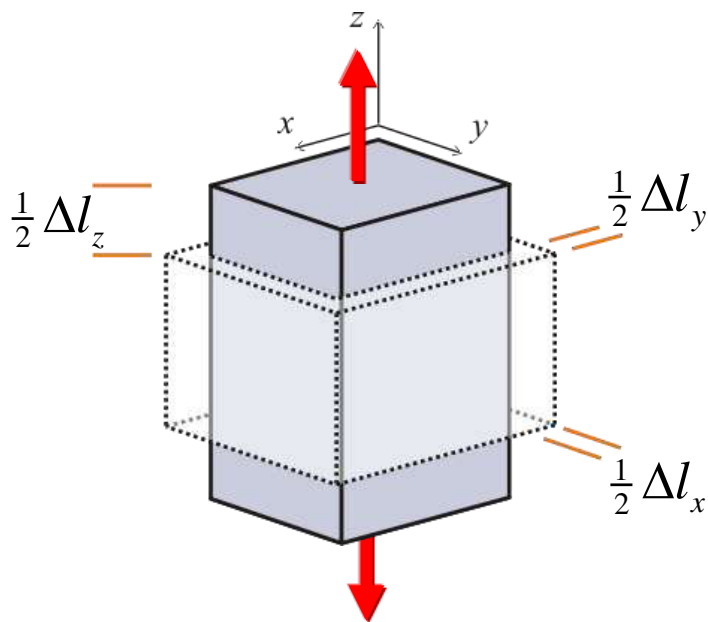
Πολυμερή

Σημαντική
(ιξωδοελαστικότητα)

Πολύ
μικρή



Λόγος Poisson (ν)



$$\nu = -\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_z} = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_z}$$

Μέγιστη τιμή $\nu = 0.5$
(για αμετάβλητο όγκο)

$\nu \sim 0.25 - 0.35$
(Μέταλλα)

Μέτρο
ελαστικότητας

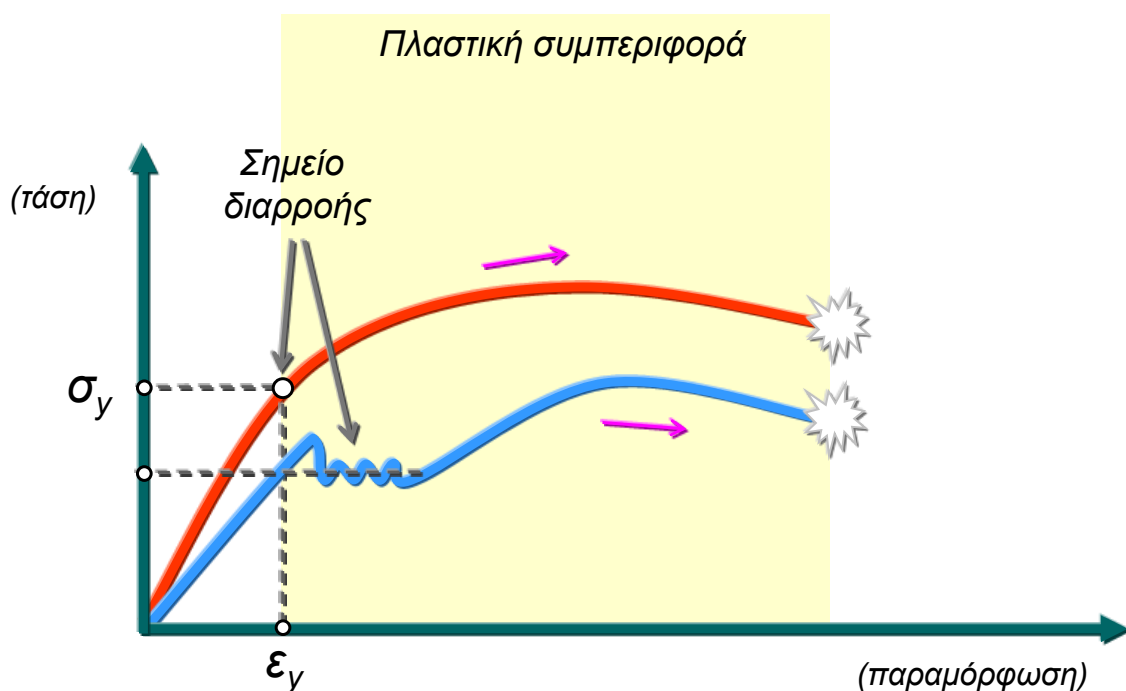
Λόγος
Poisson

$$E = 2G(1 + \nu)$$

Μέτρο
διάτμησης

Πλαστική συμπεριφορά

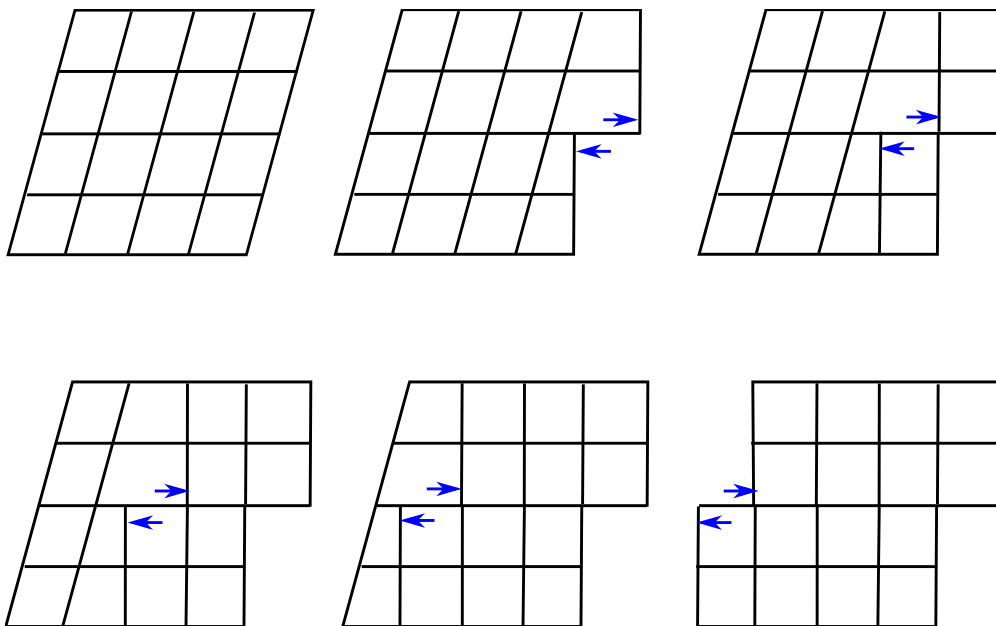
Η πλαστική παραμόρφωση είναι μόνιμη και μη-αντιστρέψιμη !
(οφείλεται σε «σπάσιμο» και αναδιοργάνωση των δεσμών)



Μέταλλα

$$\varepsilon_y \approx 0.005$$

Σπάσιμο δεσμών και δημιουργία νέων (οφείλεται σε ολίσθηση)



Ολίσθηση:
κίνηση
διαταραχών

Σχηματική απεικόνιση κίνησης μιας διαταραχής σε κρυσταλλικό πλέγμα, που οδηγεί τελικά σε πλαστική παραμόρφωση
User:Cdang / Wikimedia Commons / Public Domain

Κεραμικά

Έχουμε συχνά θραύση πριν την πλαστική παραμόρφωση

Κρυσταλλικά

Μηχανισμός: ολίσθηση

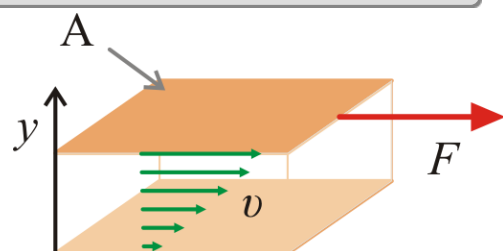
Δυσκολία στην ολίσθηση διότι υπάρχουν πολύ λίγα συστήματα ολίσθησης

Μη-Κρυσταλλικά

Μηχανισμός: ιξώδης ροή

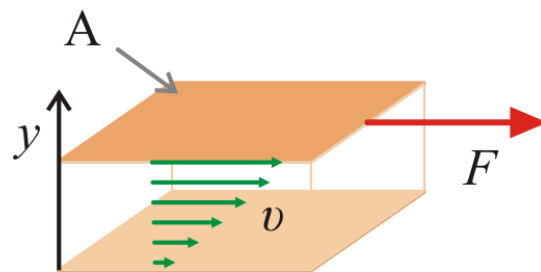
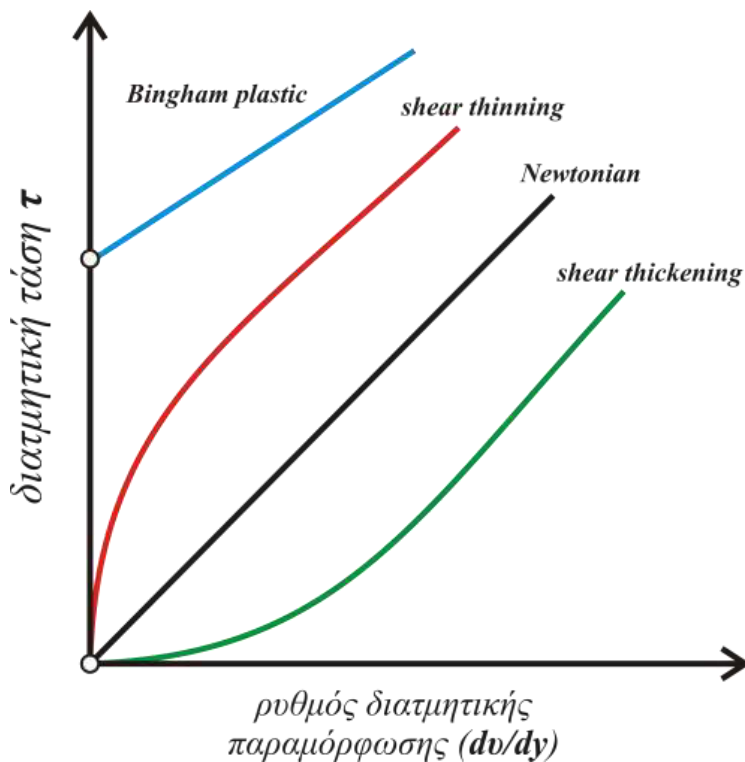
Ο ρυθμός παραμόρφωσης είναι ανάλογος της τάσης

$$\eta = \frac{\tau}{(dv/dy)} = \frac{F/A}{(dv/dy)}$$



SI: $\text{Pa}\cdot\text{s} = \text{N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$ CGS: (poise) $P=0.1 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ (νερό $\eta \approx 1 \text{ cP} = 1 \text{ mPa}\cdot\text{s}$)

Ιξώδης Ροή



Shear Thickening

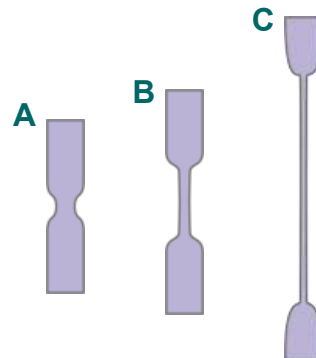
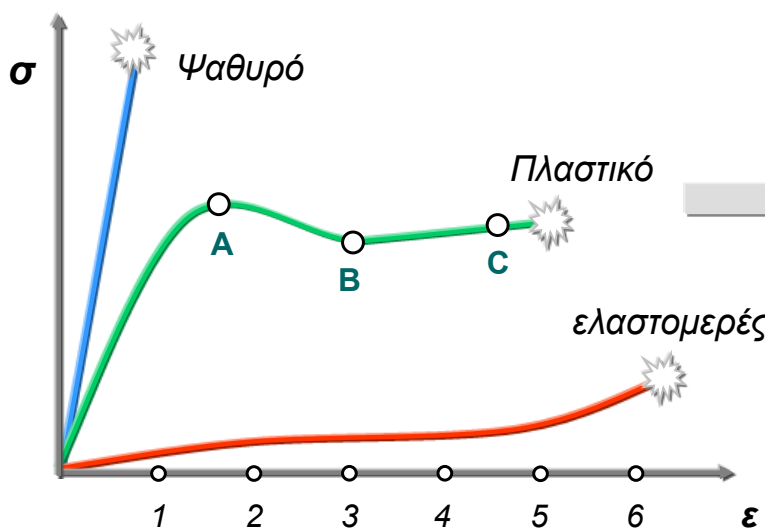
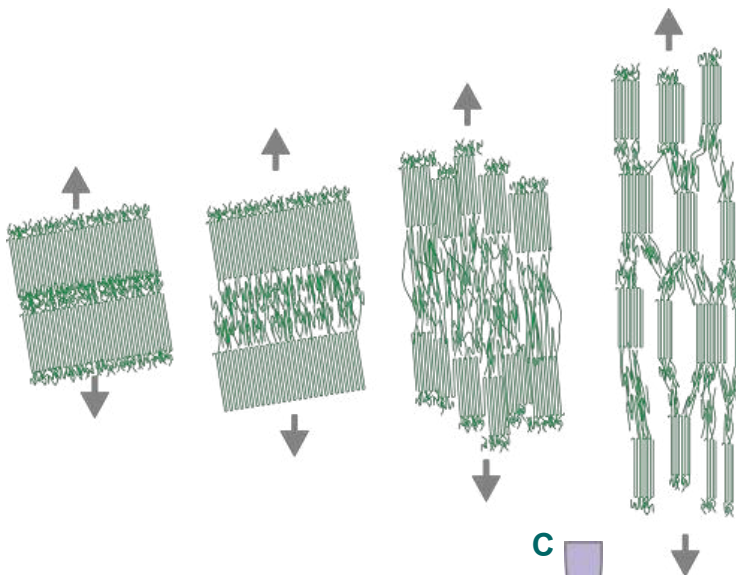
Αύξηση του ιξώδους
καθώς αυξάνεται ο ρυθμός παραμόρφωσης

Shear Thinning

Μείωση του ιξώδους
καθώς αυξάνεται ο ρυθμός παραμόρφωσης

Πολυμερή

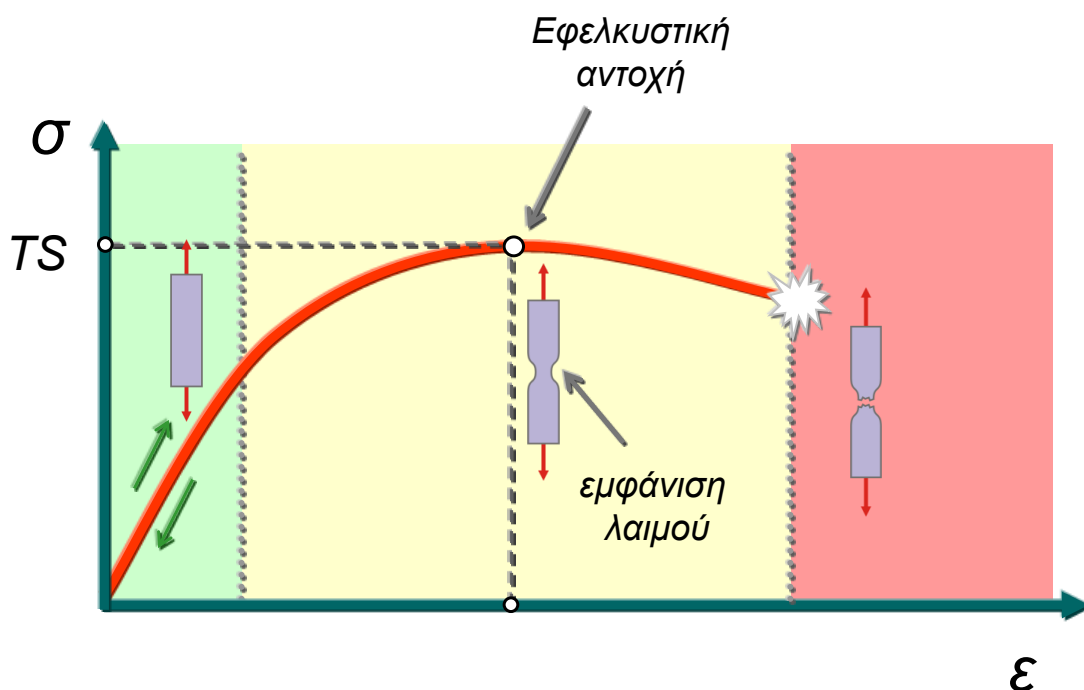
Αλληλεπίδραση μεταξύ φυλλωδών δομών και παρεμβαλλομένων άμορφων περιοχών



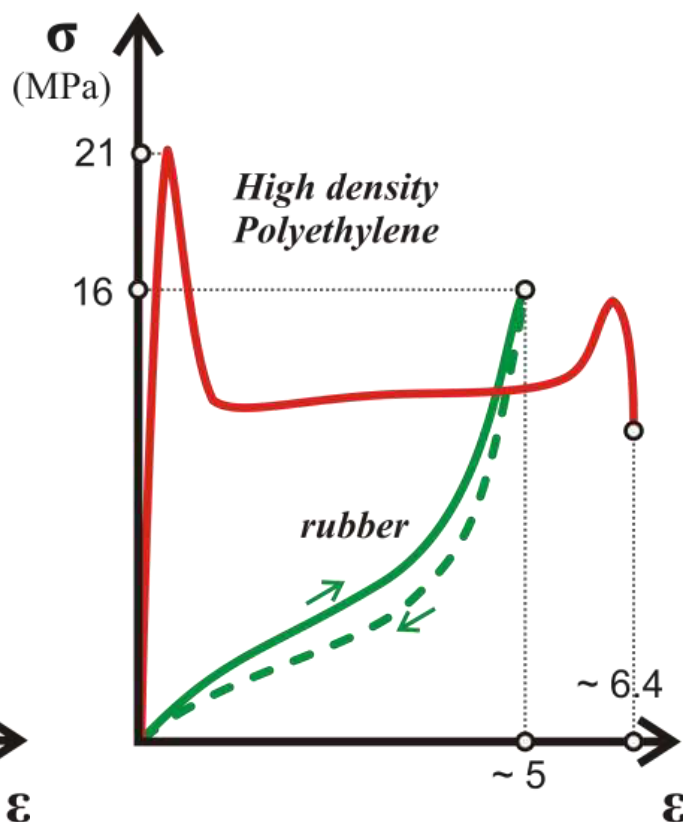
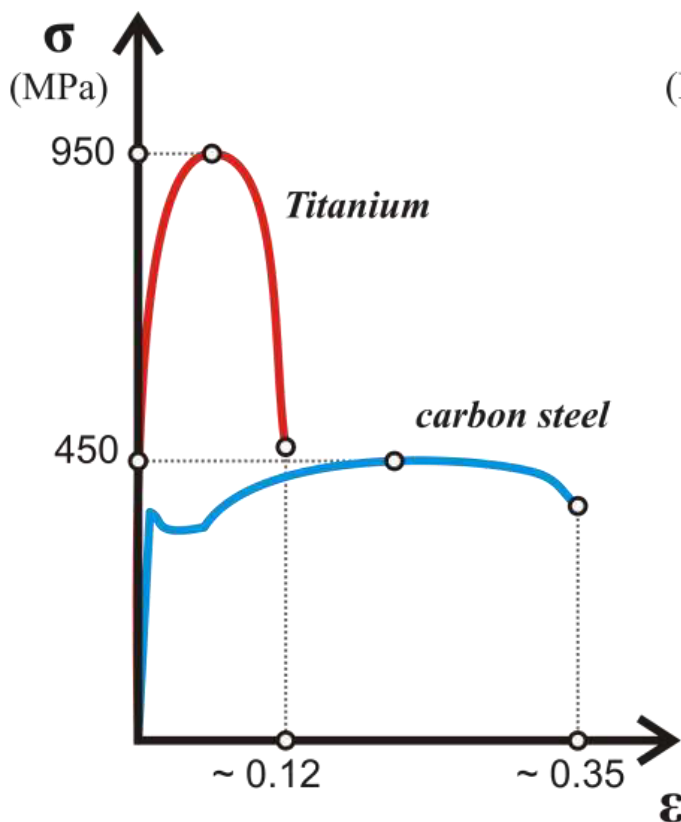
Αντίθετα από τα μέταλλα έχουμε διάδοση του λαιμού

Αντοχή σε εφελκυσμό

Μηχανικές Ιδιότητες

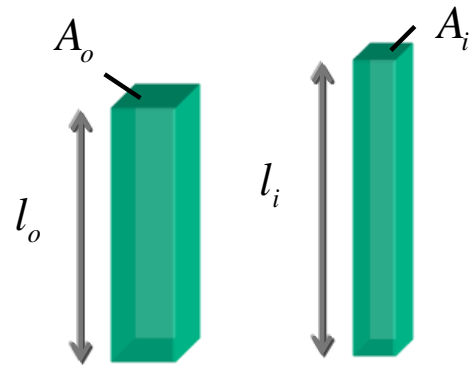
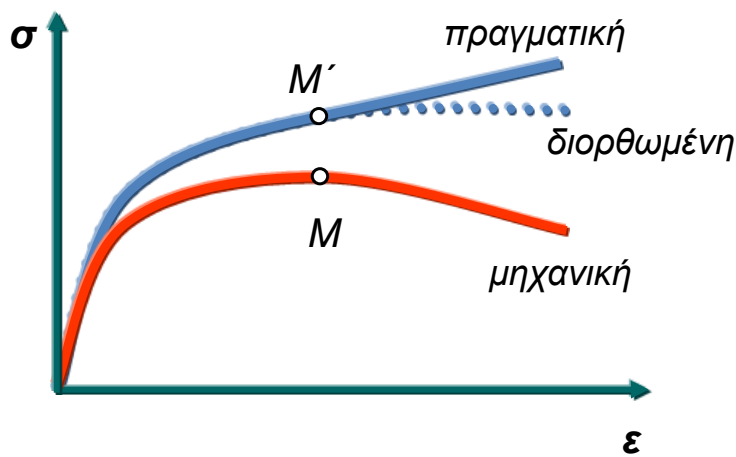


Αντοχή σε εφελκυσμό - Παραδείγματα



Τυπικές καμπύλες παραμόρφωσης -τάσης για μέταλλα και πολυμερή

Πραγματική τάση και παραμόρφωση



Μηχανικά

$$\sigma = \frac{F}{A_o}$$

$$\varepsilon = \frac{l_i - l_o}{l_o}$$

Πραγματικά

$$\sigma_T = \frac{F}{A_i}$$

$$\varepsilon_T = \ln \frac{l_i}{l_o}$$

Μέχρι την έναρξη
δημιουργίας λαιμούΣυντελεστής
ενδοτράχυνσης

$$\sigma_T = K \varepsilon_T^n$$

$$\sigma_T = \sigma (1 + \varepsilon)$$

$$\varepsilon_T = \ln(1 + \varepsilon)$$

Υπολογισμός πραγματικής τάσης

$$\sigma_T \equiv \frac{F}{A_i}$$

Αν δεν έχουμε μεταβολή του όγκου:

$$\left. \begin{aligned} A_i \cdot l_i &= A_o \cdot l_o \Rightarrow \frac{l_i}{l_o} = \frac{A_o}{A_i} \\ \varepsilon &\equiv \frac{l_i - l_o}{l_o} \Rightarrow \frac{l_i}{l_o} = 1 + \varepsilon \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{1}{A_i} = \frac{1}{A_o} (1 + \varepsilon) \Rightarrow$$

$$\frac{\sigma_T}{A_i} = \frac{\sigma}{A_o} (1 + \varepsilon) \Rightarrow \sigma_T = \sigma (1 + \varepsilon)$$

Υπολογισμός πραγματικής παραμόρφωσης

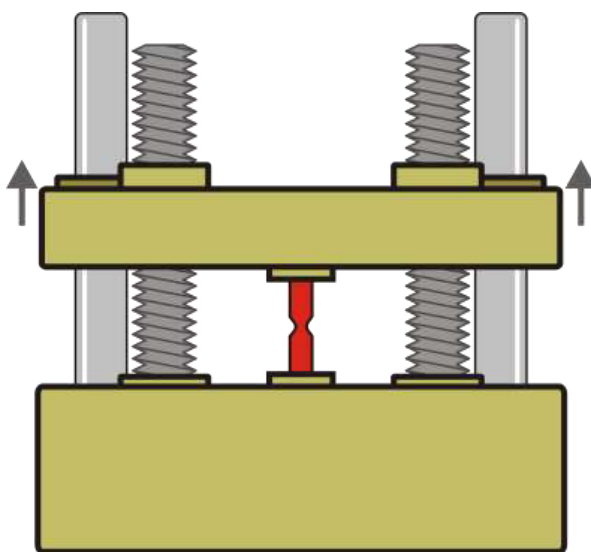
Η διαδικασία εφελκυσμού μπορεί να θεωρηθεί ως μια σειρά από διαδοχικές παραμορφώσεις:

$$d\varepsilon = \frac{dl}{l}$$

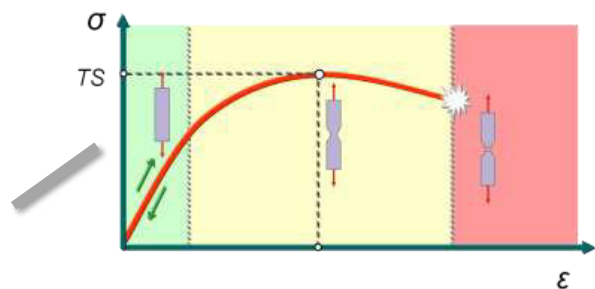
οπότε η συνολική πραγματική παραμόρφωση θα είναι:

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_T &= \int_{l_o}^{l_i} \frac{dl}{l} = \ln\left(\frac{l_i}{l_o}\right) \\ \varepsilon &\equiv \frac{l_i - l_o}{l_o} \Rightarrow \frac{l_i}{l_o} = \varepsilon + 1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \varepsilon_T = \ln(1 + \varepsilon)$$

Μετρώντας την Μηχανική αντοχή



Σχηματική απεικόνιση μιας τυπικής μηχανής μέτρησης μηχανικής αντοχής (βαρέως τύπου)



Μεταλλικό δοκίμιο μετά το τεστ μηχανικής αντοχής

User: Sigmund / Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Καταστροφική μέθοδος

Παράγοντας ασφαλείας

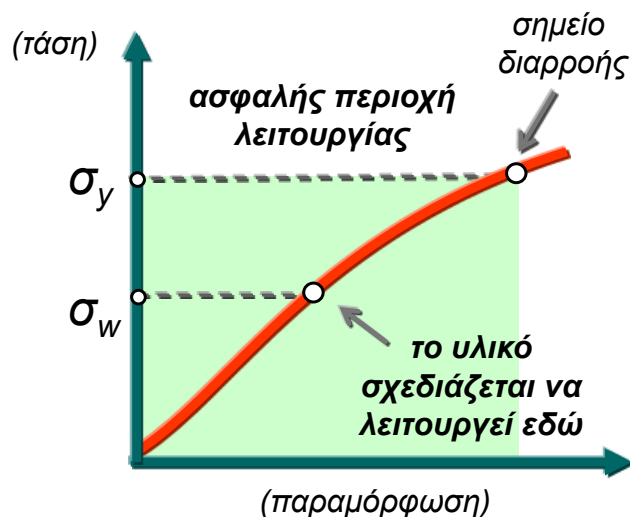
Σε κατασκευή τα υλικά πρέπει να καταπονούνται σε τέτοιο βαθμό που να λειτουργούν πάντα στην **ελαστική περιοχή**

$$\sigma_w \equiv \frac{F}{S} \leq \sigma_y$$

τάση εργασίας τάση διαρροής

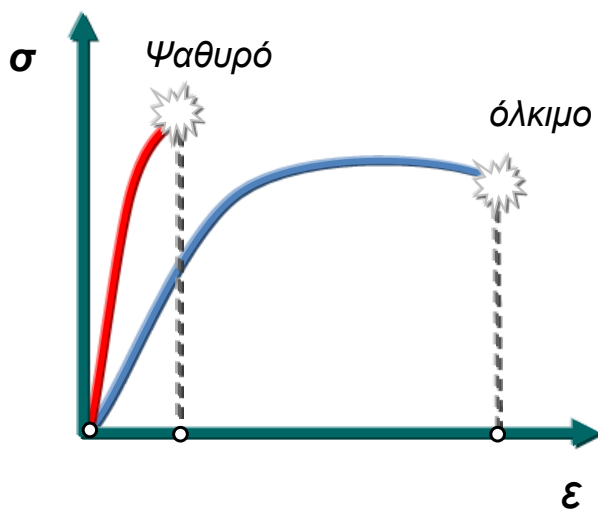
Ως παράγοντα ασφαλείας **N** ορίζουμε τον λόγο:

$$N \equiv \frac{\sigma_y}{\sigma_w} > 1$$



Ολκιμότητα (Ductility)

Μέτρο του βαθμού πλαστικής παραμόρφωσης έως την θραύση



$$EL = \frac{l_f - l_o}{l_o}$$

εξαρτάται από το μήκος

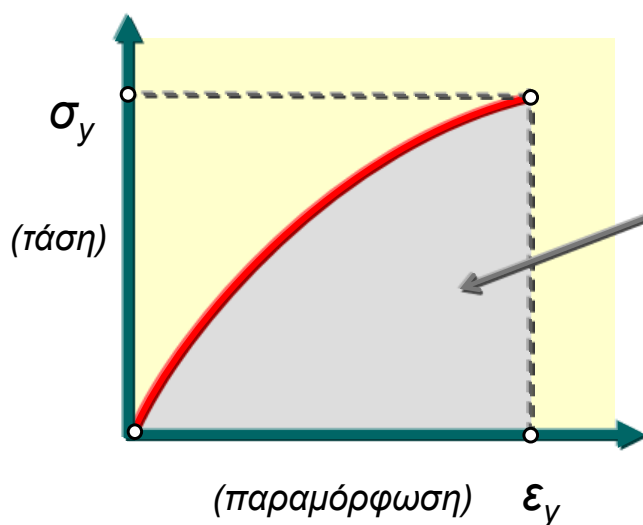
$$RA = \frac{A_o - A_f}{A_o}$$

δεν εξαρτάται από το μήκος

Ψαθυρά όσα έχουν παραμόρφωση θραύσης $\epsilon < 5\%$

Επανάταξη (Resilience)

Η ικανότητα ενός υλικού να απορροφά ενέργεια όταν παραμορφώνεται



$$U_r = \int_0^{\varepsilon_y} \sigma d\varepsilon$$

Γραμμική
ελαστικότητα

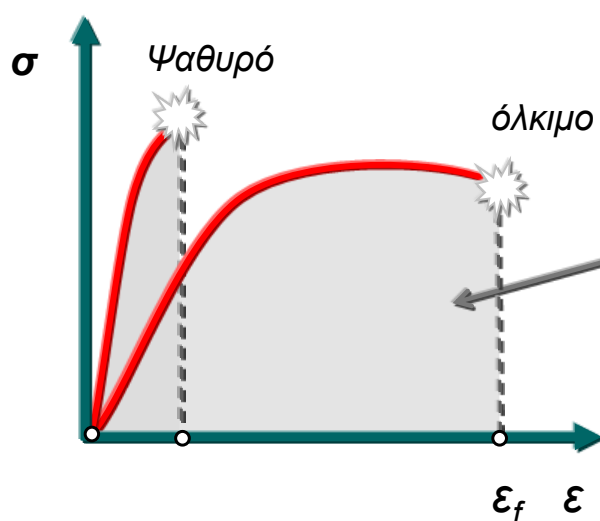
$$U_r = \frac{1}{2} \sigma_y \varepsilon_y = \frac{\sigma_y^2}{2E}$$

Μονάδες πυκνότητας ενέργειας:

$$\frac{N}{m^2} = \frac{N \cdot m}{m^3} = \frac{J}{m^3}$$

Δυσθραυστότητα (Toughness)

Μέτρο της ικανότητας ενός υλικού να απορροφά ενέργεια έως την θραύση



$$U_T = \int_0^{\varepsilon_f} \sigma d\varepsilon$$

Μονάδες πυκνότητας ενέργειας:

$$\frac{N}{m^2} = \frac{N \cdot m}{m^3} = \frac{J}{m^3}$$

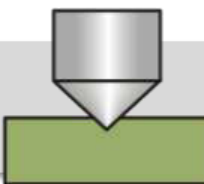
Σκληρότητα (hardness)

Μέτρο της αντίστασης σε τοπική παραμόρφωση

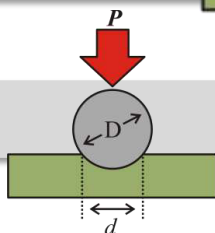


Σκληρόμετρο Rockwell
User:Metrolberica/ Wikimedia
Commons / CC-BY-SA-3.0

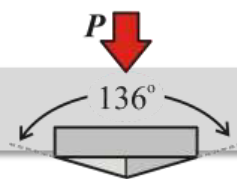
Rockwell and
Superficial Rockwell



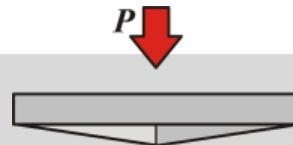
Brinell



Vickers



Knoop

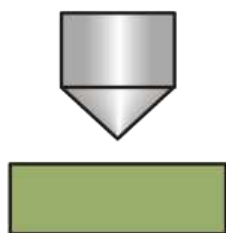


Micro-hardness

Rockwell &
Superficial Rockwell

Διαφορά βάθους διείσδυσης
μικρού και μεγάλου φορτίου

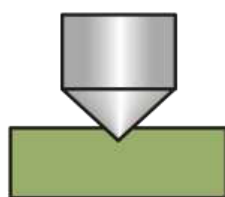
κωνική ακίδα
ή ατσάλινο σφαιρίδιο



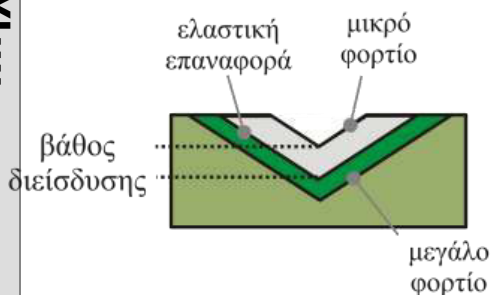
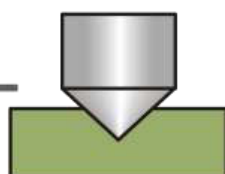
δείγμα

Μικρό φορτίο

Rockwell: 10 kg
Επιφ. Rockwell: 3 kg



Μεγάλο φορτίο



Rockwell	60 kg
	100 kg
	150 kg
Superficial Rockwell	15 kg
	30 kg
	45 kg

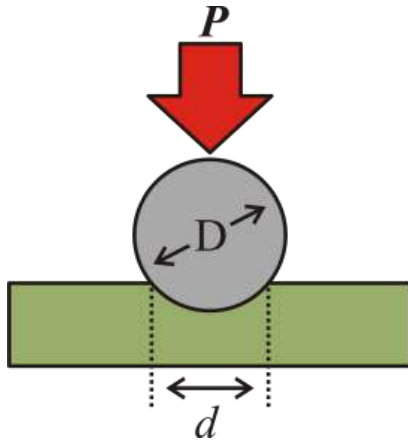
Το κύριο πλεονέκτημα της μεθόδου είναι η δυνατότητα της **άμεσης εκτίμησης της σκληρότητας** χωρίς χρήση υπολογισμών. Συνήθως χρησιμοποιείται στην **μηχανική** και την **μεταλλουργία**.

Brinell

Μέτρηση αποτυπώματος
σφαιρικής ακίδας και
υπολογισμός μέσω σχέσης



Αποτύπωμα μέτρησης Brinell
User:IGW/ Wikimedia Commons
/ CC-BY-SA-3.0



$$HB = \frac{2P}{\pi D (D - \sqrt{D^2 - d^2})}$$

Μεθοδολογία:

Η σφαιρική ακίδα πιέζεται πάνω στο δείγμα με ελεγχόμενη δύναμη. Το φορτίο παραμένει για περίπου 10-15 sec.

Μετά από αυτό τον χρόνο η ακίδα απομακρύνεται αφήνοντας ένα κυκλικό αποτύπωμα στο δείγμα.

Η διάμετρος d του αποτυπώματος μετρείται οπτικά (με μικροσκόπιο).

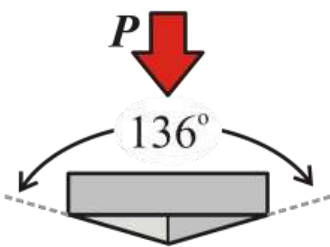
Πλεονεκτήματα: Καλύπτει όλη την περιοχή σκληροτήτων

Μειονεκτήματα: είναι αργή, χρειάζεται μικροσκόπιο

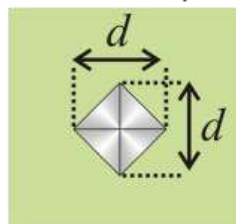
Vickers

Μέτρηση αποτυπώματος διαμαντένιας
πυραμίδας και υπολογισμός μέσω σχέσης

microhardness



αποτύπωμα



$$HV = \frac{1.854 P}{d^2}$$

Μεθοδολογία:

Η ακίδα πιέζεται πάνω στο δείγμα με ελεγχόμενη δύναμη (<20 N).

Το φορτίο παραμένει για περίπου 10-15 sec.

Μετά από αυτό τον χρόνο η ακίδα απομακρύνεται αφήνοντας ένα ρομβοειδές αποτύπωμα στο δείγμα.

Η διάμετρος l του αποτυπώματος μετρείται οπτικά (με μικροσκόπιο).



Διαμαντένια πυραμίδα
R. Tanaka/ Wikimedia Commons
/ CC-BY-3.0



Αποτύπωμα μέτρησης Vickers
Dennis M. Clarke/ Wikimedia Commons
/ CC-BY-SA-3.0

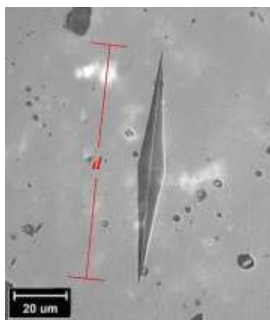
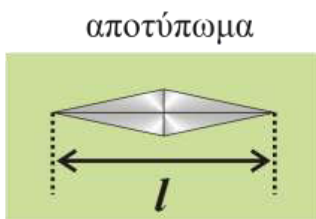
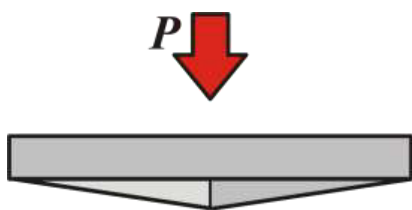
Πλεονεκτήματα: Ιδανική για μικρά ή λεπτά δείγματα.

Μειονεκτήματα: είναι αργή, χρειάζεται μικροσκόπιο

Κnoop

Μέτρηση αποτυπώματος διαμαντένιας πυραμίδας και υπολογισμός μέσω σχέσης

microhardness



$$HK = \frac{14.2P}{l^2}$$

Αποτύπωμα μέτρησης Κnoop (Al_2O_3)

User: His Manliness / Wikimedia Commons / CC-BY-3.0

Μεθοδολογία:

Η ακίδα πιέζεται πάνω στο δείγμα με ελεγχόμενη δύναμη ($<10 \text{ N}$).

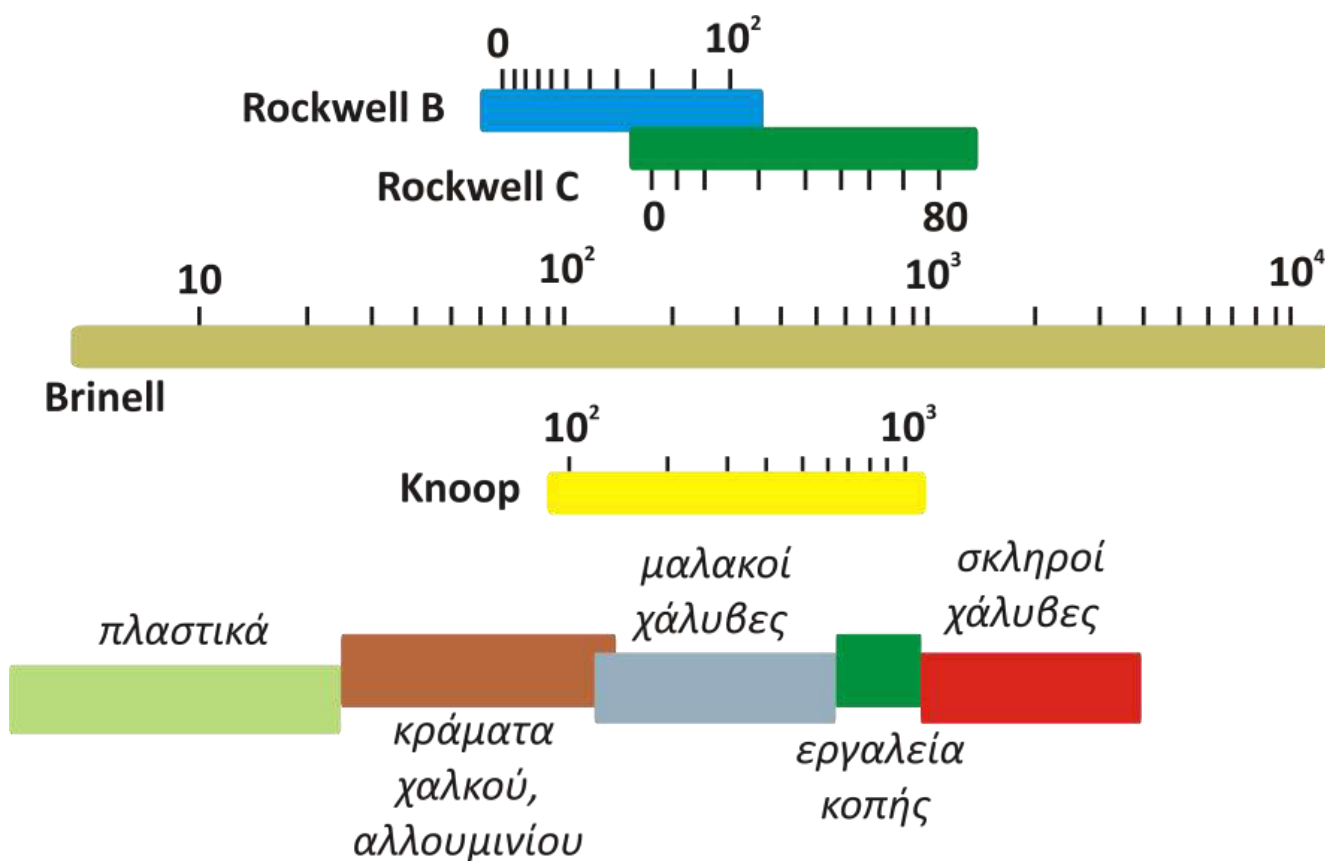
Το φορτίο παραμένει για περίπου 10-15 sec.

Μετά από αυτό τον χρόνο η ακίδα απομακρύνεται αφήνοντας ένα ρομβοειδές αποτύπωμα στο δείγμα.

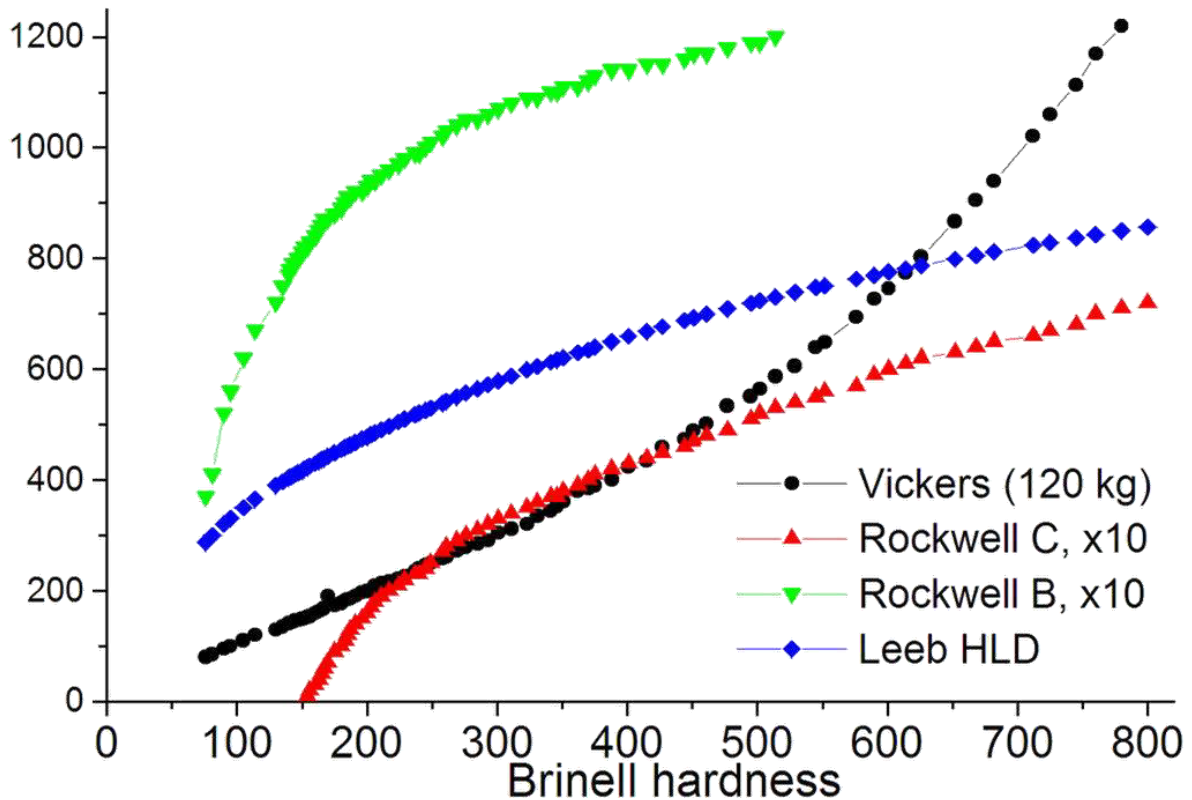
Η διάμετρος l του αποτυπώματος μετρείται οπτικά (με μικροσκόπιο).

Πλεονεκτήματα: Ιδανική για ψαθυρά υλικά (~ μισή διείσδυση από την Vickers)

Μειονεκτήματα: είναι αργή, χρειάζεται μικροσκόπιο



Τυπικές περιοχές τιμών σκληρότητας για διάφορες κατηγορίες υλικών



Σύγκριση τιμών σκληρότητας από διάφορες μεθόδους

User: MaterialsScientist/Wikipedia/ CC-BY-SA_3.0

Στην περίπτωση των μετάλλων η τιμή της σκληρότητας σχετίζεται γραμμικά με την αντοχή στον εφελκυσμό !

Μετρώντας **σκληρότητα** (εύκολη, «μη-καταστροφική» μέτρηση) μπορούμε να εκτιμήσουμε την τιμή της **αντοχής στον εφελκυσμό (TS)** (δύσκολη, καταστροφική μέτρηση)

$$(TS) \cong 3.45 (HB)$$

Συσχέτιση μεταξύ σκληρότητας (HB) και αντοχής στον εφελκυσμό (TS) για χάλυβες

Ενότητα 7: Θερμικές Ιδιότητες

7

Θερμικές Ιδιότητες

Θερμικές ιδιότητες

Θερμοχωρητικότητα

Θερμική διαστολή

Θερμική αγωγιμότητα

Θερμική τάση

Θερμοχωρητικότητα

Η θερμοχωρητικότητα εκφράζει την ικανότητα του υλικού να απορροφά θερμότητα από το περιβάλλον

προσφερόμενη
θερμότητα

$$C = \frac{dQ}{dT}$$

$$\frac{J}{mole \cdot K}$$

μεταβολή
θερμοκρασίας

Θερμοχωρητικότητα
ανά μονάδα μάζας

Ειδική θερμότητα

$$c = \frac{C}{m}$$

$$C_V = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_V$$

υπό σταθερό όγκο

$$C_P = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_P$$

υπό σταθερή πίεση

Γενικά: $C_P > C_V$

C_V

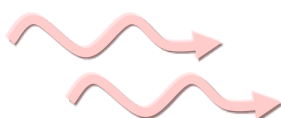
Όλη η απορροφούμενη θερμότητα οδηγεί στην αύξηση της θερμοκρασίας

C_P

Μέρος της απορροφούμενης θερμότητας ξοδεύεται στην αύξηση του όγκου

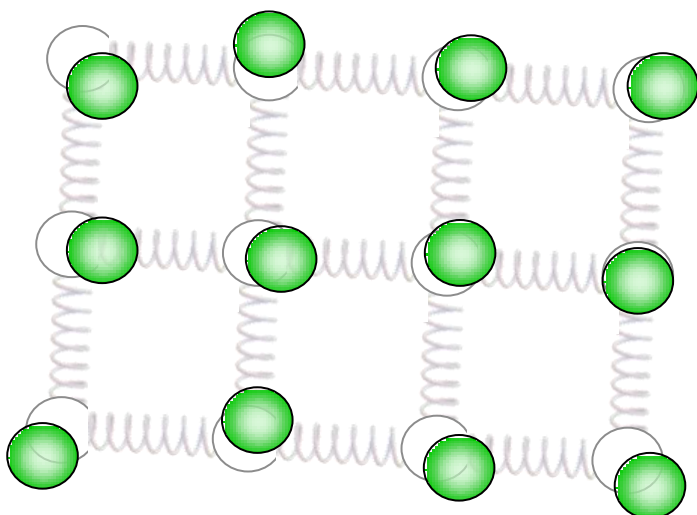
Θερμοχωρητικότητα – ατομική κλίμακα

Θερμική ενέργεια



Αύξηση της θερμοκρασίας

Αύξηση της δονητικής ενέργειας



Φωνόνια

κβαντισμένη δονητική ενέργεια

Ελαστικά κύματα στο κρυσταλλικό πλέγμα με μεγάλη συχνότητα & μικρό μήκος κύματος

Φωνόνια

Θερμικές ιδιότητες

$$k = 6\pi/6a \quad \lambda = 2.00a \quad \omega_k = 2.00\omega$$

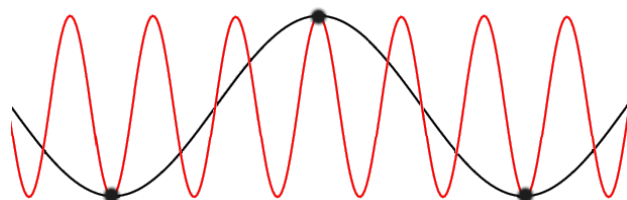
$$k = 5\pi/6a \quad \lambda = 2.40a \quad \omega_k = 1.93\omega$$

$$k = 4\pi/6a \quad \lambda = 3.00a \quad \omega_k = 1.73\omega$$

$$k = 3\pi/6a \quad \lambda = 4.00a \quad \omega_k = 1.41\omega$$

$$k = 2\pi/6a \quad \lambda = 6.00a \quad \omega_k = 1.00\omega$$

$$k = 1\pi/6a \quad \lambda = 12.00a \quad \omega_k = 0.52\omega$$



Ακουστικά φωνόνια σε 1D κρυσταλλικό πλέγμα,
© User: Greg L / Wikimedia Commons / CC-BY-SA-3.0

Οπτικά φωνόνια 1D κρυσταλλικό πλέγμα,
© User: Shaind / Wikipedia / Public Domain

**Διαμήκη
«Ακουστικά»**

**Εγκάρσια
«Οπτικά»**

Υλικά Ι, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Διδάσκων: Δημήτρης Παπάζογλου

Θερμικές ιδιότητες

**Θερμική
ενέργεια**

**Αύξηση της
θερμοκρασίας**

Φωνόνια

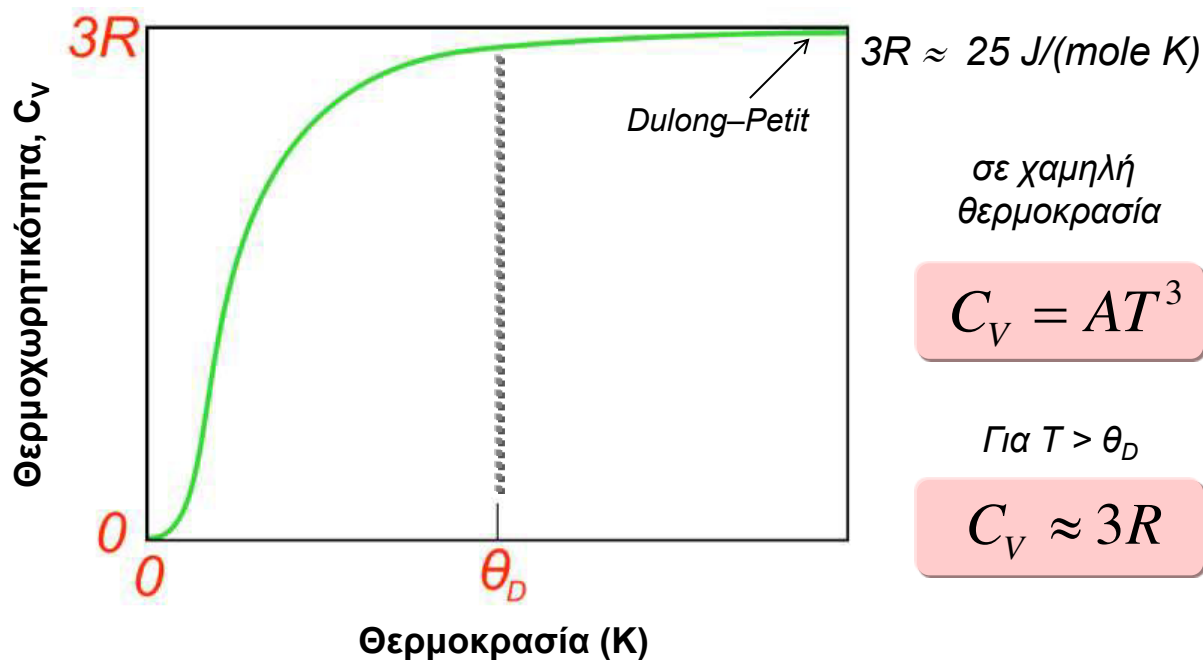
Κυρίαρχος μηχανισμός
απορρόφησης θερμικής
ενέργειας

Ηλεκτρόνια

Ηλεκτρονική συνεισφορά
ασήμαντη για θερμοκρασίες
 $T > 0K$

Μικρό κλάσμα των
ηλεκτρονίων συμμετέχει

Θερμοχωρητικότητα – εξάρτηση από θερμοκρασία



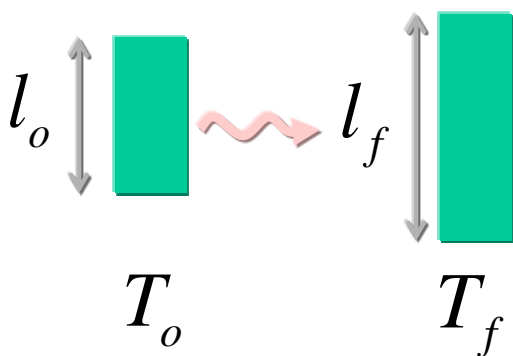
θ_D : θερμοκρασία Debye
συνήθως μικρότερη από θερμοκρασία δωματίου

Τυπικές Θερμοκρασίες Debye

Aluminium	428 K
Cadmium	209 K
Chromium	630 K
Copper	343.5 K
Gold	170 K
Iron	470 K
Lead	105 K
Manganese	410 K
Nickel	450 K
Platinum	240 K

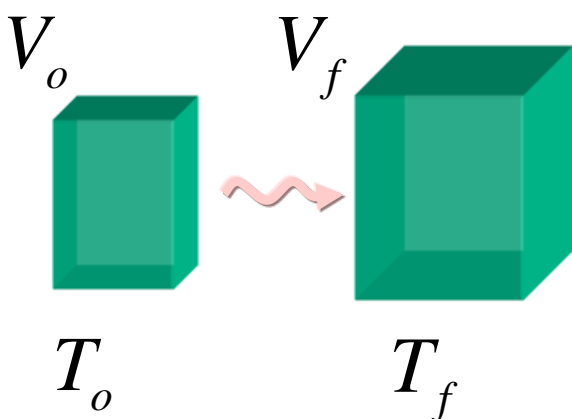
Silicon	645 K
Silver	215 K
Tantalum	240 K
Tin (white)	200 K
Titanium	420 K
Tungsten	400 K
Zinc	327 K
Carbon	2230 K
Ice	192 K

Θερμική διαστολή



$$\alpha_l \Delta T \equiv \frac{\Delta l}{l_o} = \varepsilon$$

Γραμμικός συντελεστής
θερμικής διαστολής
Μονάδες: $^{\circ}\text{C}^{-1}$



γενικά ανισότροπος

$$\alpha_v \Delta T \equiv \frac{\Delta V}{V_o}$$

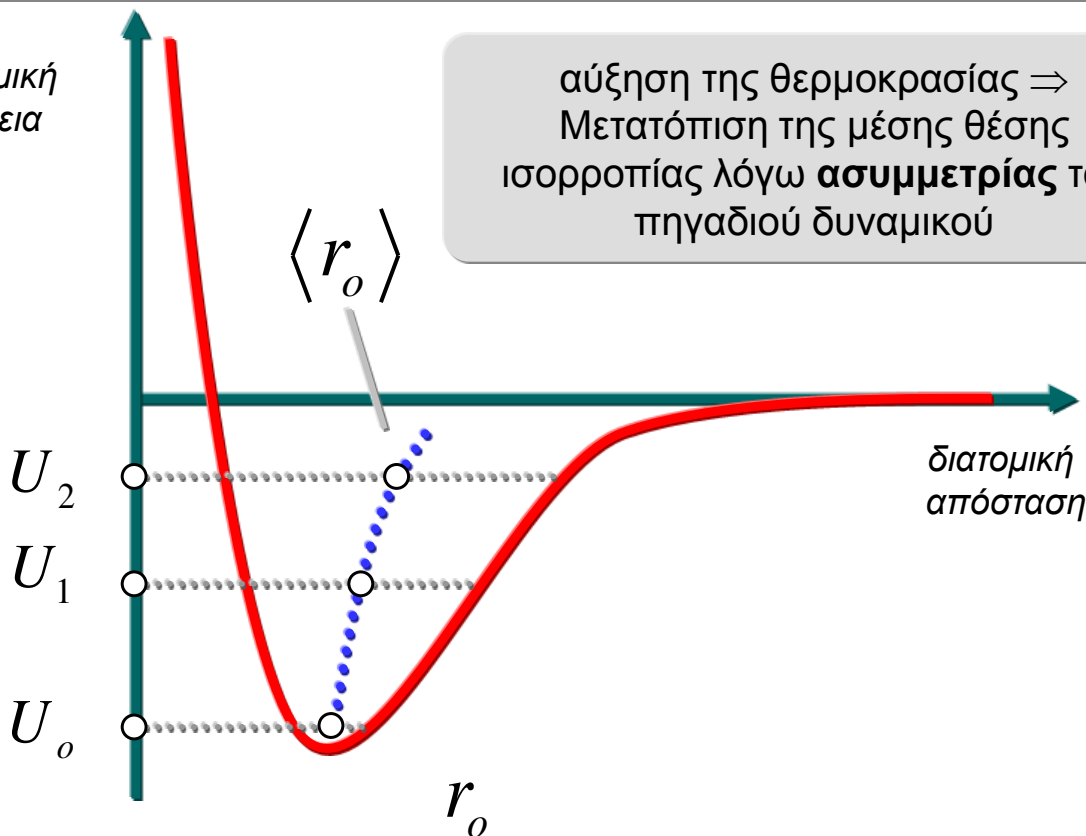
Κατ' όγκο συντελεστής
θερμικής διαστολής
Μονάδες: $^{\circ}\text{C}^{-1}$

Ισότροπα υλικά

$$\alpha_v \approx 3\alpha_l$$

Θερμική διαστολή – ατομική κλίμακα

Δυναμική
ενέργεια



αύξηση της θερμοκρασίας $\Rightarrow$
Μετατόπιση της μέσης θέσης
ισορροπίας λόγω **ασυμμετρίας** του
πηγαδιού δυναμικού

Ισχυροί δεσμοί $\Rightarrow$ μικρή διαστολή με την θερμοκρασία

Τυπικές τιμές συντελεστών θερμικής διαστολής

Κεραμικά

0.5 - 15 ($\times 10^{-6}$)

Μέταλλα*

5 - 25 ($\times 10^{-6}$)

Πολυμερή

50 - 400 ($\times 10^{-6}$)

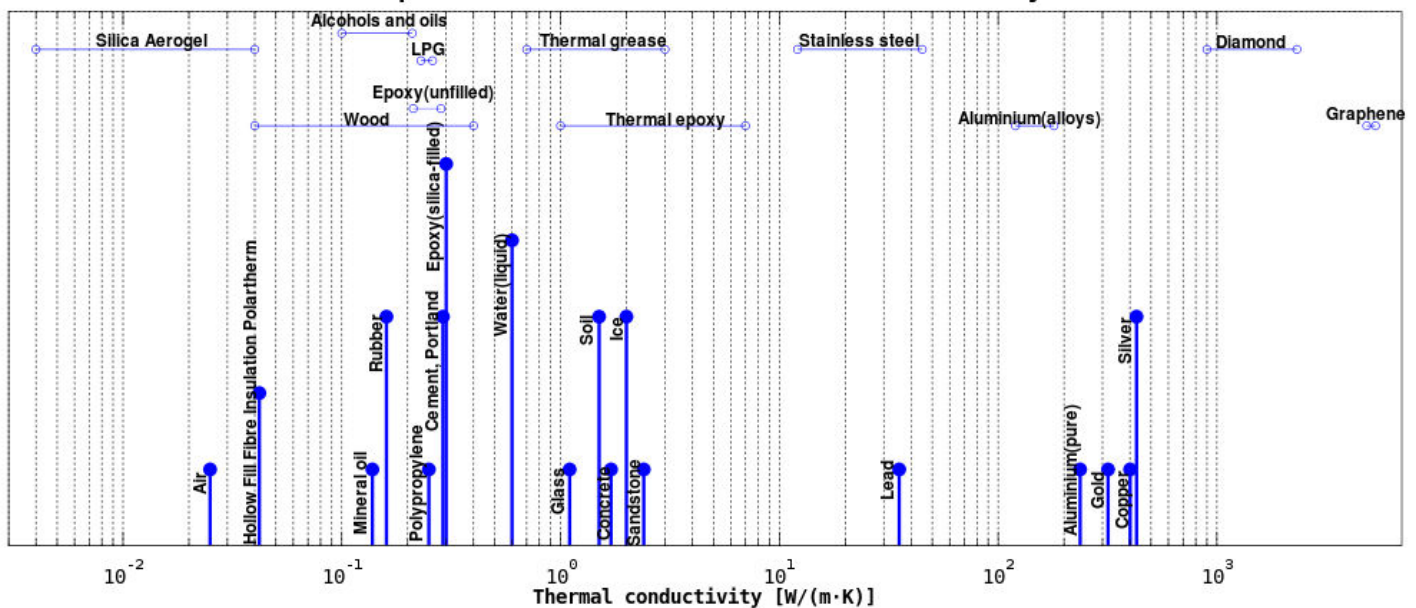
$$\alpha_l \text{ (} ^\circ\text{C}^{-1}\text{)}$$

Κρυσταλλικά : α_l ανισότροπο, άμορφα: α_l ισότροπο

*

κράμα KOVAR Fe-Ni-Co: $\alpha_l = 1 \cdot 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$

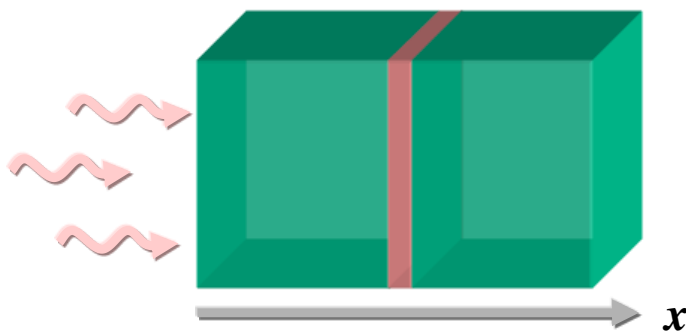
Experimental values of thermal conductivity



Τυπικές πειραματικές τιμές θερμικής αγωγιμότητας

Grzegorz Knor/ Wikimedia Commons / Public Domain

Θερμική αγωγιμότητα



Ροή θερμότητας
ανά μονάδα
χρόνου και
επιφάνειας

Μονάδες:

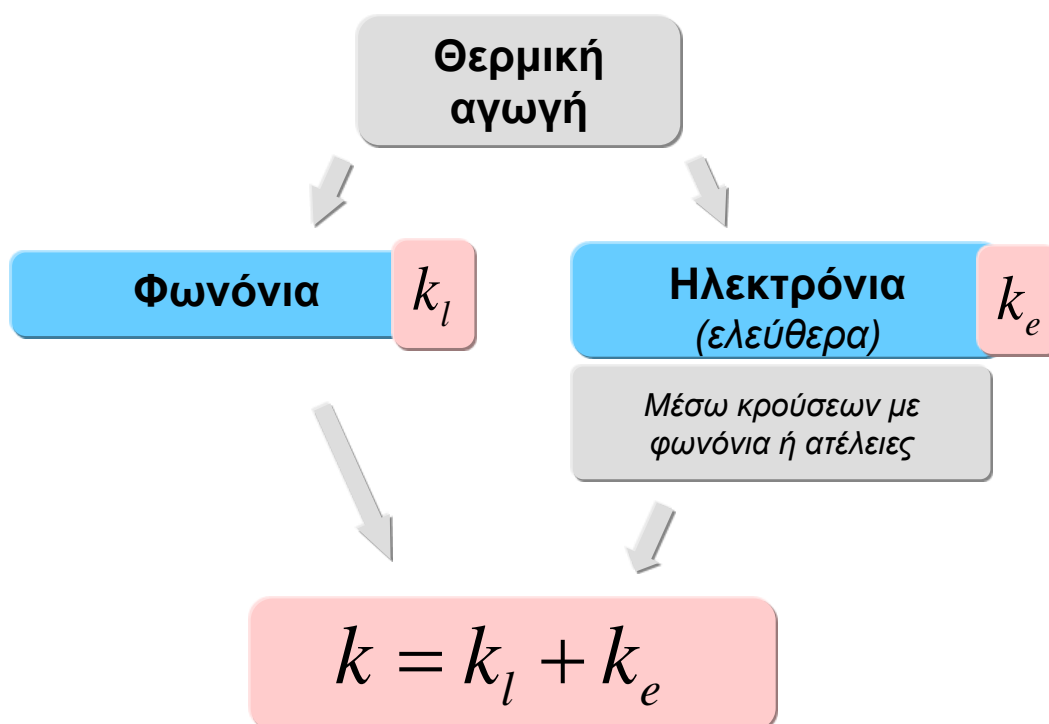
$$\frac{W}{m^2} \quad \text{ή} \quad \frac{Btu}{ft^2 \cdot h}$$

$$q = -k \frac{dT}{dx}$$

Θερμική αγωγιμότητα

Μονάδες: $\frac{W}{m \cdot K}$

Μηχανισμοί θερμικής αγωγής



Συνήθως ένας μηχανισμός υπερισχύει

Μέταλλα

$$k_e \gg k_l$$

$$k : 20 - 400 \frac{W}{m \cdot K}$$

Στα μέταλλα ο ηλεκτρονικός μηχανισμός μεταφοράς θερμότητας είναι πιο αποδοτικός από την φωνονική συνεισφορά

Στα μέταλλα τα ελεύθερα ηλεκτρόνια είναι υπεύθυνα και για ηλεκτρική αγωγιμότητα.

Νόμος Wiedemann-Franz

$$L = \frac{k}{\sigma \cdot T}$$

σταθερά $2.44 \cdot 10^{-8} \frac{\Omega m \cdot W}{K^2}$

Θερμική αγωγιμότητα $\frac{W}{m \cdot K}$

Θερμοκρασία K

Ηλεκτρική αγωγιμότητα $1/\Omega m \cdot m$

Μέταλλα – θερμικές ιδιότητες

Υλικό	Θερμική αγωγιμότητα $W/(m \cdot K)$	Ειδική θερμότητα $J/(Kg \cdot K)$	Συντελεστής θερμικής διαστολής $\times 10^{-6} (^{\circ}C)^{-1}$
Aluminium	247	900	23.6
Copper	398	386	17
Gold	315	128	14.2
Iron	80	448	11.8
Silver	428	235	19.7
Kovar (54Fe -29 Ni-17Co)	17	460	5.1

Πηγή: Wikipedia

Κράματα: Η παρουσία προσμίξεων οδηγεί σε μείωση της θερμικής αγωγιμότητας εξαιτίας της δράσης των προσμίξεων ως κέντρων σκέδασης

Κεραμικά

$$k_l \gg k_e$$

$$k : 2 - 50 \frac{W}{m \cdot K}$$

Στα κεραμικά υλικά τα φωνόνια είναι κατά κύριο λόγο υπεύθυνα για την θερμική αγωγιμότητα.

Τα φωνόνια δεν είναι τόσο **αποδοτικά** στην μεταφορά θερμότητας όσο τα ελεύθερα ηλεκτρόνια επειδή **σκεδάζονται** έντονα από τις **ατέλειες** του πλέγματος

Θερμικές ιδιότητες

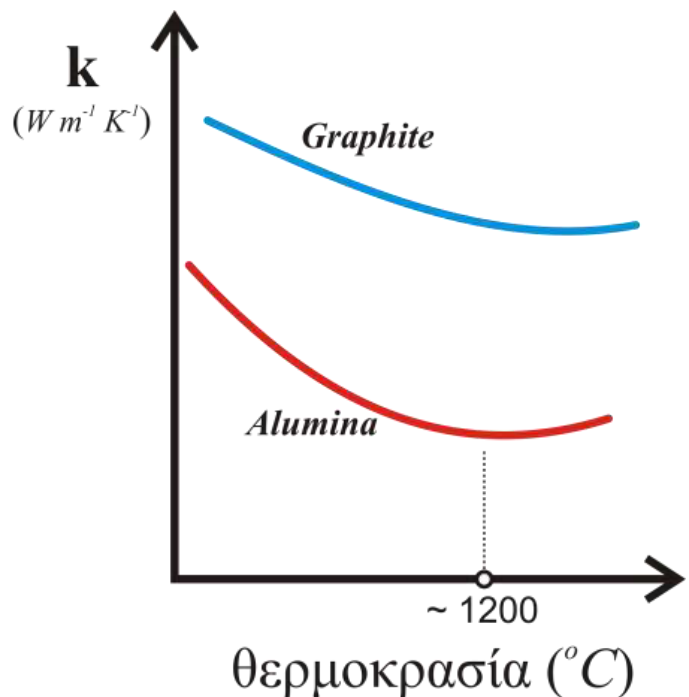
Υλικό	Θερμική αγωγιμότητα $W/(m \cdot K)$	Ειδική θερμότητα $J/(Kg \cdot K)$	Συντελεστής θερμικής διαστολής $\times 10^{-6} (^{\circ}C)^{-1}$
Fused Silica (SiO_2)	1.4	850	0.4
Soda-lime glass	1.7	840	9.0
Borosilicate glass (Pyrex)	1.4	850	3.3
Alumina (Al_2O_3)	39	775	7.6

Πηγή: Wikipedia

Κεραμικά

σε χαμηλές θερμοκρασίες η θερμική αγωγιμότητα κατά κανόνα **μειώνεται** με την αύξηση της θερμοκρασίας

σε υψηλές θερμοκρασίες η θερμική αγωγιμότητα **αυξάνεται** λόγω της μεταφοράς θερμότητας με ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία



Τα άμορφα κεραμικά είναι λιγότερο αγωγίμα από κρυσταλλικά

Το πορώδες **ελαττώνει** τη θερμική αγωγιμότητα
(θερμική αγωγιμότητα αέρα $0.02 W/m \cdot K$)

Πολυμερή

$$k \approx 0.3 \frac{W}{m \cdot K}$$

Στα πολυμερή η θερμική αγωγιμότητα επιτυγχάνεται με την δόνηση και περιστροφή των μοριακών αλυσίδων.
Η αύξηση του βαθμού κρυσταλλικότητας ενός πολυμερούς οδηγεί στην αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας!

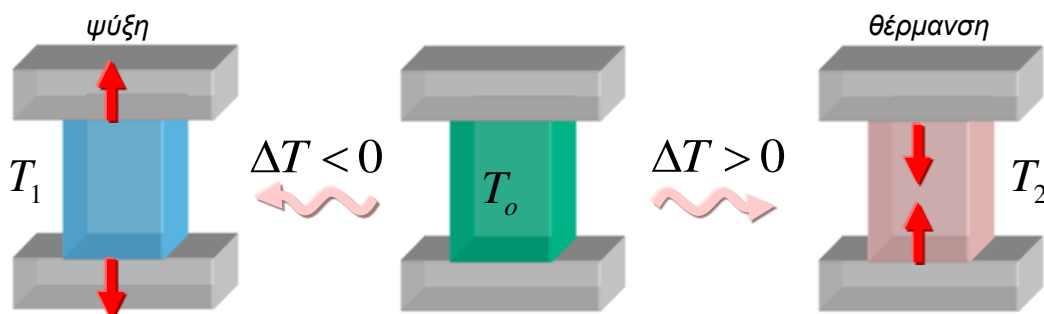
Θερμικές ιδιότητες

Υλικό	Θερμική αγωγιμότητα $W/(m \cdot K)$	Ειδική θερμότητα $J/(Kg \cdot K)$	Συντελεστής θερμικής διαστολής $\times 10^{-6} (^{\circ}C)^{-1}$
PE (Polyethylene)	0.5	1850	~150
Teflon/PTFE (Polytetrafluoroethylene)	0.25	1050	~190
PP (Polypropylene)	0.12	1925	~160

Πηγή: Wikipedia

Θερμική τάση

Όταν ένα υλικό θερμαίνεται ή ψύχεται ενώ βρίσκεται σε περιορισμό αναπτύσσονται θερμικές τάσεις



«Θερμική»
τάση

$$\sigma = -E \cdot a_l \cdot \Delta T$$

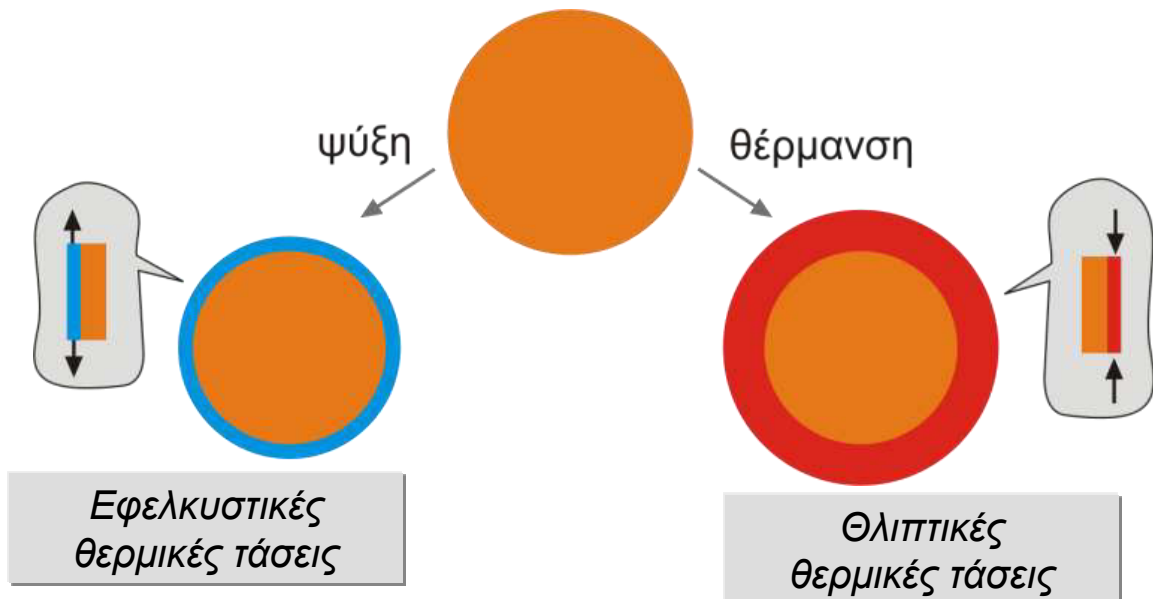
Μεταβολή
θερμοκρασίας

Μέτρο
ελαστικότητας

Συντελεστής
γραμμικής διαστολής

Αντοχή σε θερμικό σοκ

Θερμικό σοκ: απότομη ψύξη ή θέρμανση



Οδηγούν σε θραύση μέσω του σχηματισμού ρωγμών !

Όλκιμα υλικά

Οι τάσεις που αναπτύσσονται από το θερμικό σοκ οδηγούν σε πλαστική παραμόρφωση

Ψαθυρά υλικά

Οι τάσεις που αναπτύσσονται από το θερμικό σοκ οδηγούν σε θραύση !

TSR: αντίσταση στο θερμικό σοκ

$$TSR = \frac{\sigma_f k}{E \alpha_l}$$

Βελτιώνεται με μεγάλη αντοχή στη θραύση,
Μικρό μέτρο ελαστικότητας,
Μικρό συντελεστή θερμικής διαστολής,
Μεγάλη θερμική αγωγιμότητα

Ενότητα 8: Ηλεκτρικές Ιδιότητες

8

Ηλεκτρικές Ιδιότητες

Νομός του Ohm

Η τάση είναι ανάλογη της έντασης του ρεύματος.

τάση
Volt

$$V = I \cdot R$$

αντίσταση
Ohm

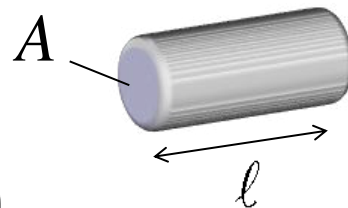
Ηλεκτρικό
ρεύμα
Ampere

Ειδική αντίσταση

$$\rho = \frac{R \cdot A}{\ell}$$

Ανεξάρτητη από
μήκος και διατομή

Ohm · m



πυκνότητα
ρεύματος
Ampere · m⁻²

$$J = \sigma \cdot E$$

Ένταση ηλεκτρικού
πεδίου

Volt · m⁻¹

Ειδική ηλεκτρική
αγωγιμότητα
(Ohm · m)⁻¹

$$\sigma = \frac{1}{\rho}$$

Τυπικές τιμές συντελεστών ειδικής ηλεκτρικής αγωγιμότητας

Μονωτές

10⁻²⁰ έως 10⁻¹⁰

Ημιαγωγοί

10⁻⁶ έως 10⁴

Μέταλλα

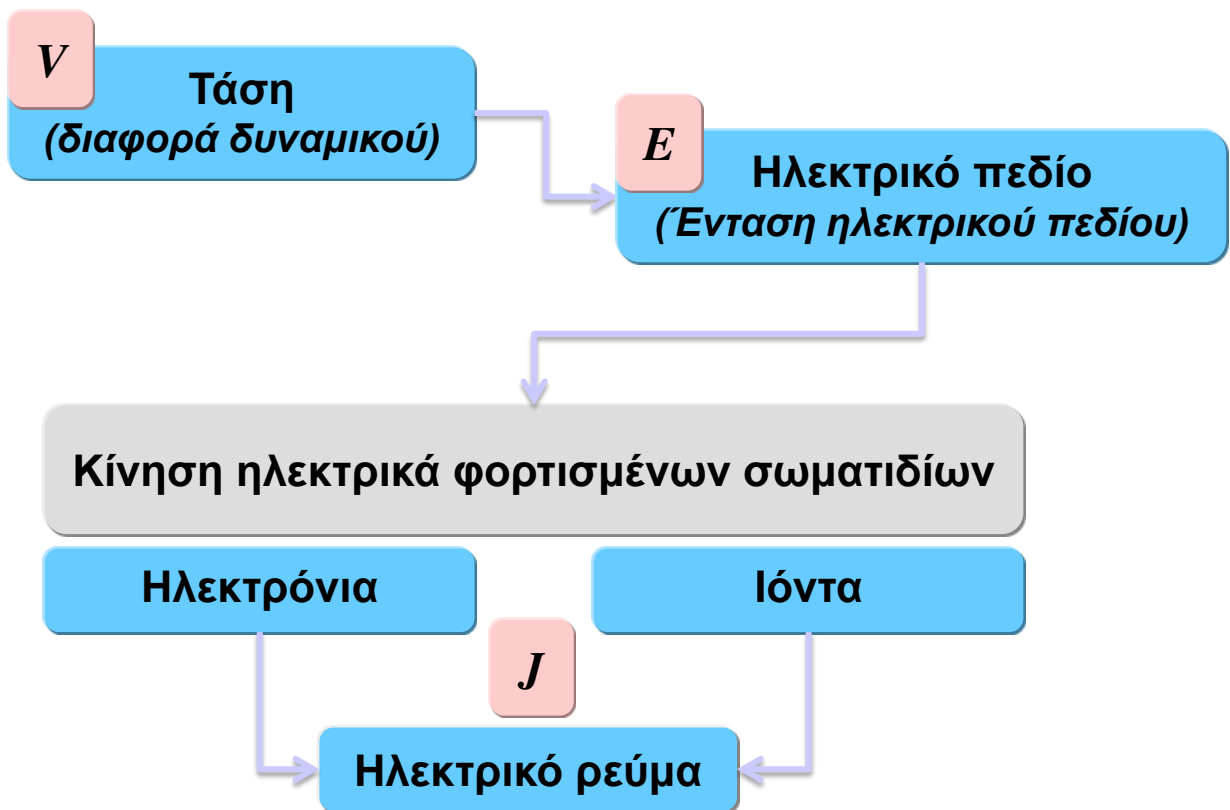
~ 10⁷

σ (Ohm · m)⁻¹

27 τάξεις μεγέθους !

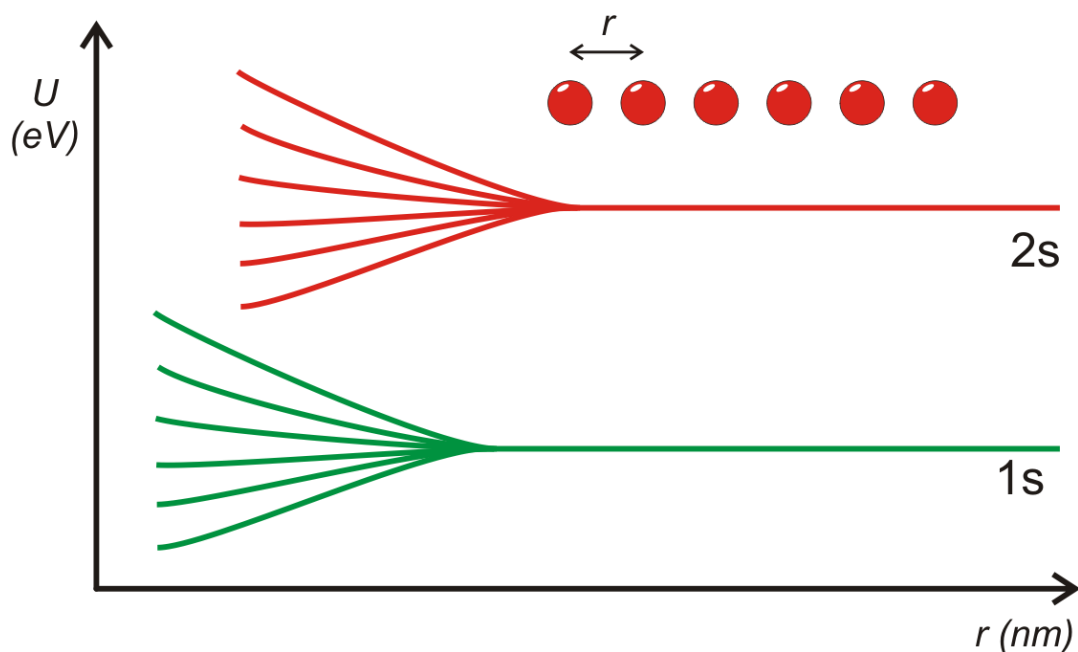
Ηλεκτρική αγωγιμότητα– ατομική κλίμακα

Ηλεκτρικές ιδιότητες

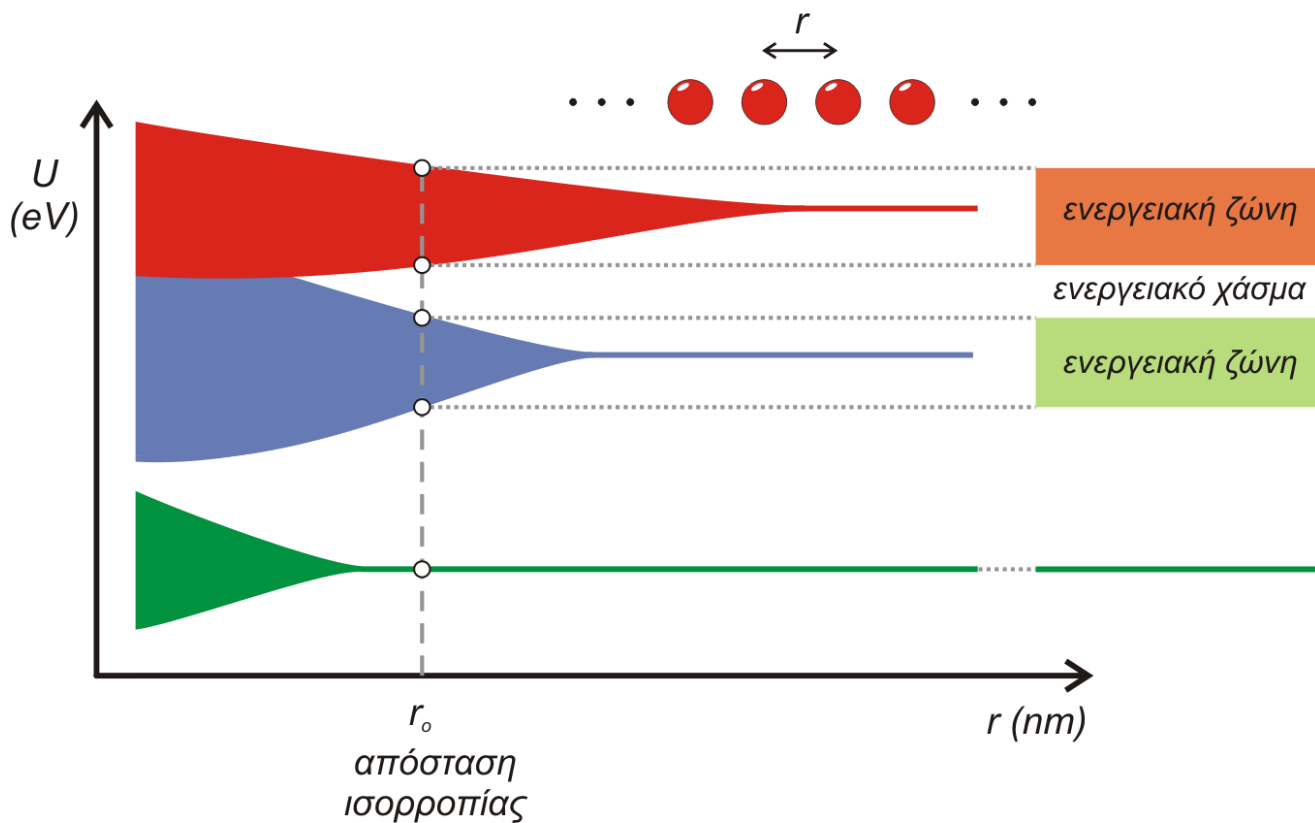


Ενεργειακό χάσμα

Ηλεκτρικές ιδιότητες

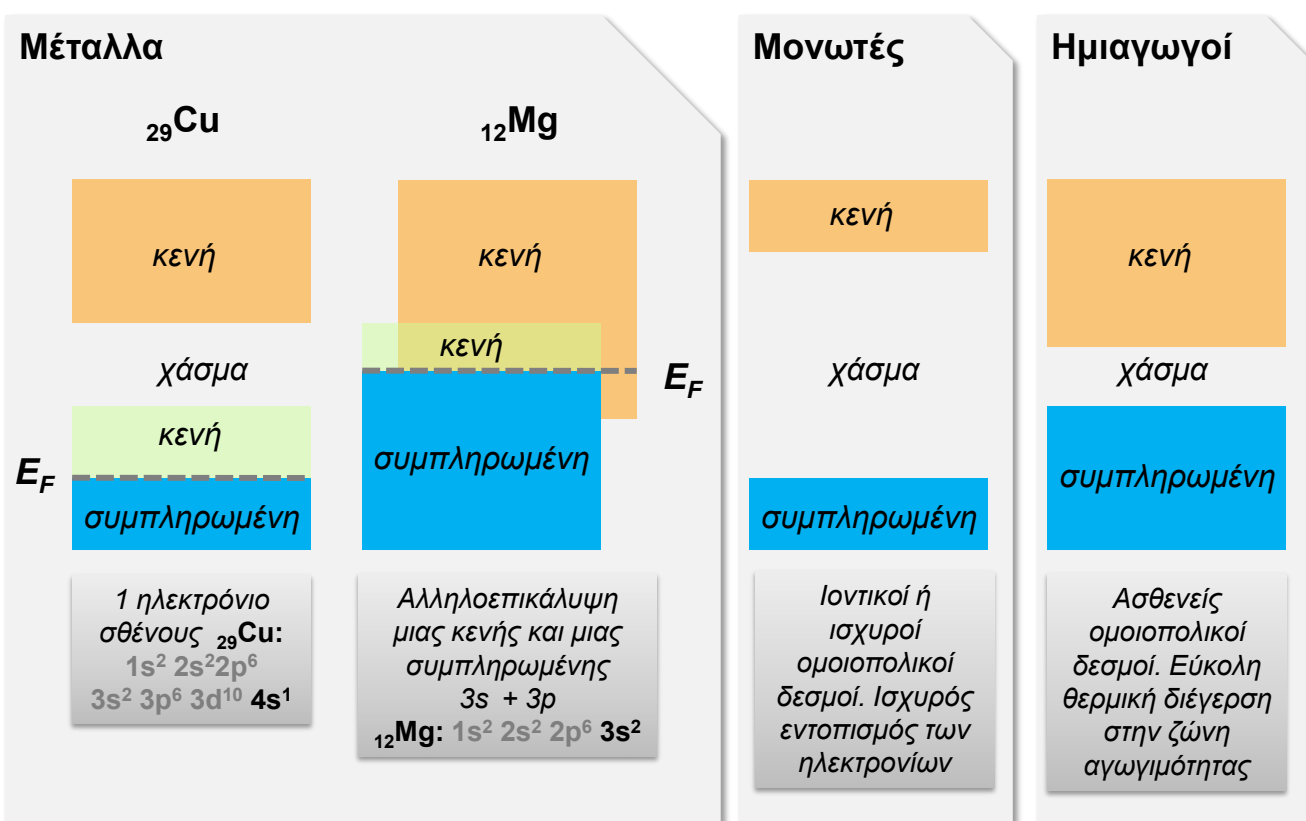


Σχηματικό διάγραμμα της ενέργειας ηλεκτρονίων ως συνάρτηση της απόστασης μεταξύ ατόμων για ένα συσσωμάτωμα 6 ατόμων



Σχηματικό διάγραμμα της ενέργειας ηλεκτρονίων ως συνάρτηση της απόστασης μεταξύ ατόμων για ένα στερεό

Ηλεκτρονιακές δομές στερεών στους 0°K



Ενέργεια Fermi

Κατανομή
Fermi-Dirac

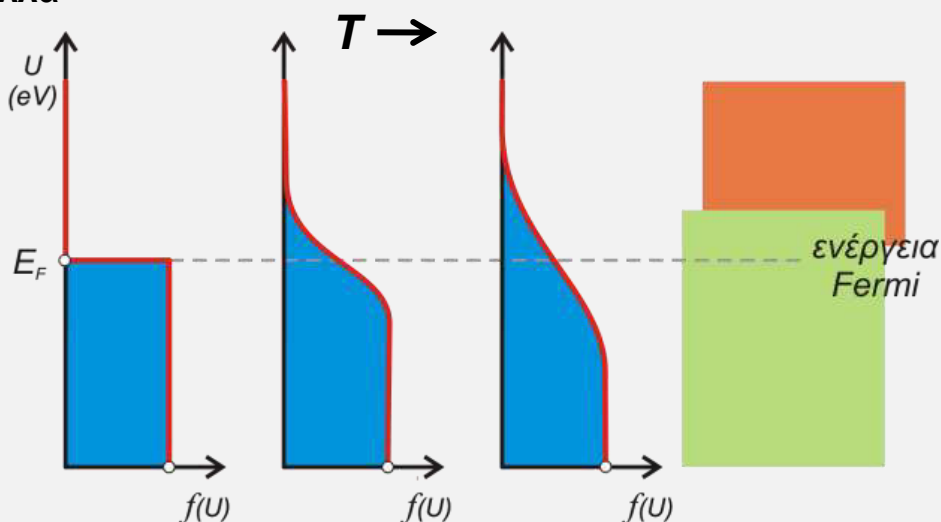
$$f(U) = \frac{1}{e^{\frac{U-E_F}{kT}} + 1}$$

$$kT \cong 0.026 \text{ eV}$$

$$(T = 300^\circ \text{ K})$$

E_F : στα μέταλλα η υψηλότερη συμπληρωμένη κατάσταση στους 0° K

Μέταλλα



Ενέργεια Fermi

Κατανομή
Fermi-Dirac

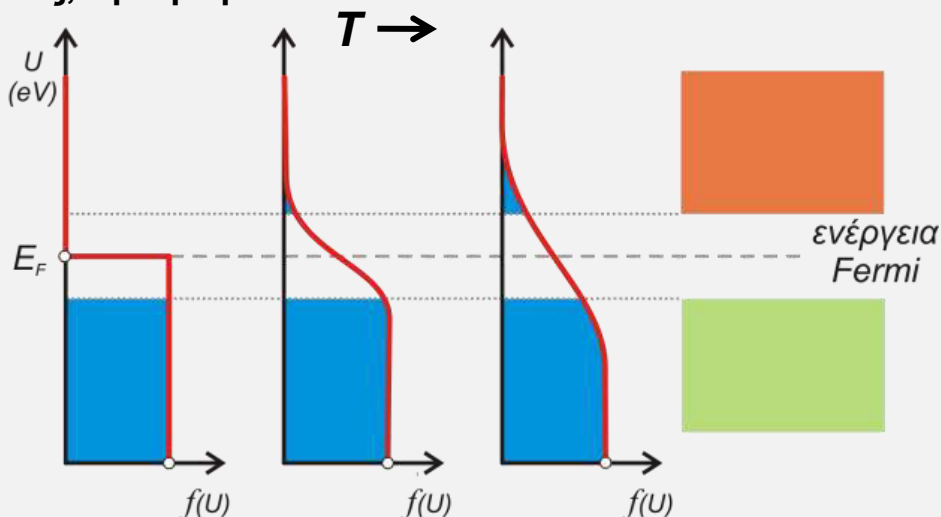
$$f(U) = \frac{1}{e^{\frac{U-E_F}{kT}} + 1}$$

$$kT \cong 0.026 \text{ eV}$$

$$(T = 300^\circ \text{ K})$$

$U = E_F$: πιθανότητα κατάληψης 50%

Μονωτές, Ημιαγωγοί



Τυπικές τιμές ενέργειας Fermi

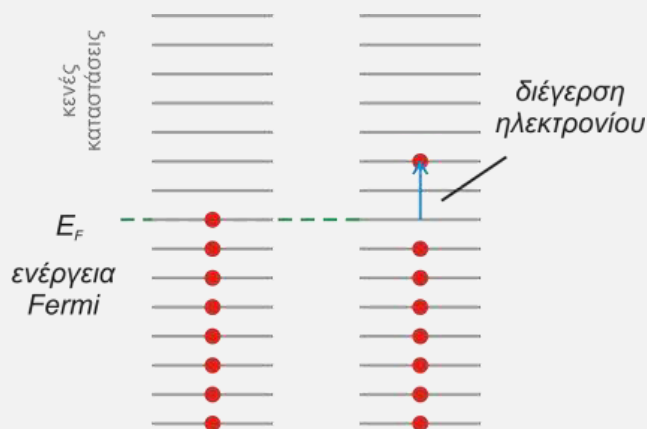
Στοιχείο	Ενέργεια Fermi E_F (eV)	Θερμοκρασία Fermi T_F (10^4 K)	Ταχύτητα Fermi v_F (nm/fs)
Cu	7.00	8.16	1.57
Ag	5.49	6.38	1.39
Al	11.7	13.6	2.03
Ga	10.4	12.1	1.92
In	8.63	10.0	1.74

Πηγή: Wikipedia

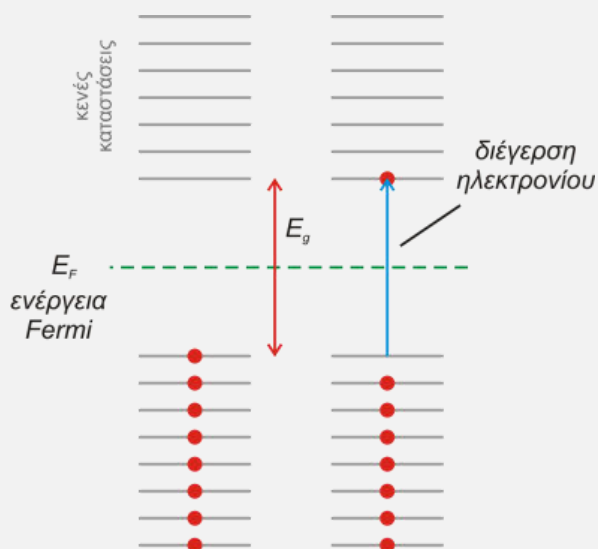
$$T_F \equiv \frac{E_F}{k}$$

$$v_F \equiv \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}}$$

Μέταλλα



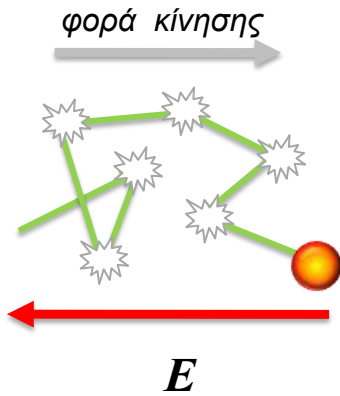
Μονωτές - Ημιαγωγοί



Μόνο ηλεκτρόνια με ενέργεια **μεγαλύτερη** της ενέργειας Fermi μπορούν να συμμετέχουν στην αγωγιμότητα

Ευκινησία ηλεκτρονίων

Ηλεκτρικές ιδιότητες



Σκέδαση ηλεκτρονίων λόγω ατελειών στο κρυσταλλικό πλέγμα

Άτομα πρόσμιξης

Πλεγματικά κενά

Ένθετα άτομα

Διαταραχές

φωνόνια

Απώλεια κινητικής ενέργειας

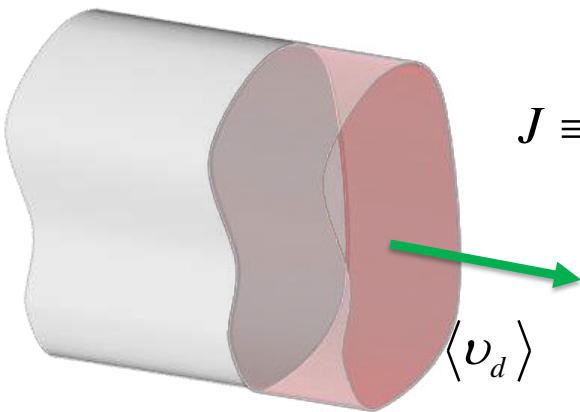
$$\langle v_d \rangle = \mu_e \cdot E$$

Ένταση ηλεκτρικού πεδίου $\text{Volt} \cdot \text{m}^{-1}$

μέση ταχύτητα μετατόπισης $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

Ευκινησία ηλεκτρονίων $\text{m}^2 \cdot \text{Volt}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

Ηλεκτρικές ιδιότητες - Ευκινησία ηλεκτρονίων



$$J \equiv \frac{\text{φορτίο} / \text{χρονος}}{\text{επιφάνεια}} = \sigma E = |e| n \langle v_d \rangle \left. \vphantom{\frac{\text{φορτίο} / \text{χρονος}}{\text{επιφάνεια}}} \right\} \Rightarrow \langle v_d \rangle = \mu_e E$$

$$\sigma = n \mu_e |e|$$

Φορτίο ηλεκτρονίου C

Ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα $(\text{Ohm} \cdot \text{m})^{-1}$

Πυκνότητα ηλεκτρονίων m^{-3}

Ευκινησία ηλεκτρονίων $\text{m}^2 \cdot \text{Volt}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

Ειδική αντίσταση μετάλλων

Κανόνας Matthiessen

Συνολική
ειδική
αντίσταση

$$\rho_{tot} = \rho_t + \rho_i + \rho_d$$

Θερμική
συνεισφορά

Συνεισφορά
προσμίξεων

Συνεισφορά
παραμόρφωσης

$$\sigma = \frac{1}{\rho}$$

Επίδραση
θερμοκρασίας

$$\rho_t = \rho_o + \alpha T$$

σταθερές

Επίδραση
συγκέντρωσης
προσμίξεων

$$\rho_i = A + c_i(1 - c_i)$$

σταθερά

Συγκέντρωση σε
κλάσμα ατόμων

Επίδραση
πλαστικής
παραμόρφωσης

Αύξηση της
ειδικής αντίστασης

$$\rho_i = \rho_a V_a + \rho_b V_b$$

Ογκομετρικά
κλάσματα

Ημιαγωγοί (ενεργειακό χάσμα < 2eV)

Ενδογενείς (Intrinsic)

Καθαρά υλικά (IVA ομάδα)

Si: **1.11 eV** Ge: **0.67 eV**

Ενώσεις III-V (IIIA, VA)

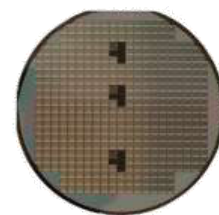
GaAs: **1.42 eV** GaP: **2.25 eV**

InSb: **0.17 eV**

Ενώσεις II-VI (IIA, VIA)

CdS: **2.40 eV** ZnTe: **2.26 eV**

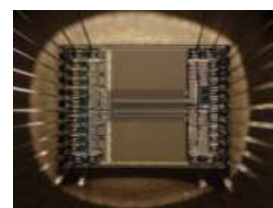
Μονοκρύσταλλος Πυριτίου
Massimiliano Lincetto / Wikimedia
Commons, CC-BY-SA-3.0



Silicon Waffer
/ Wikimedia Commons/ Public Domain



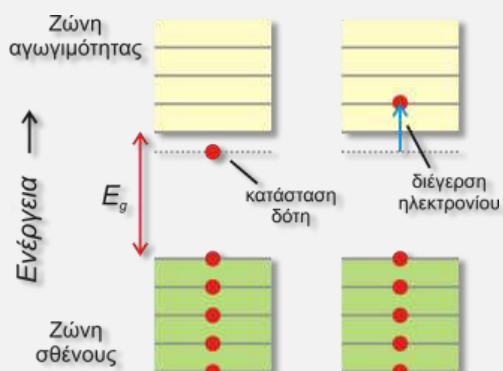
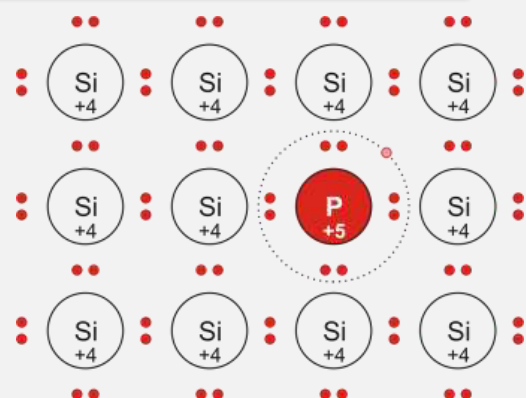
Clean room
© User: Duk/ Wikimedia
Commons/Public Domain



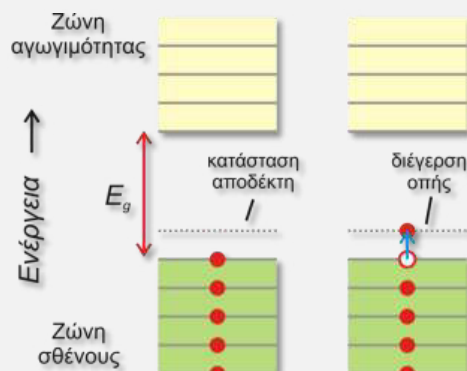
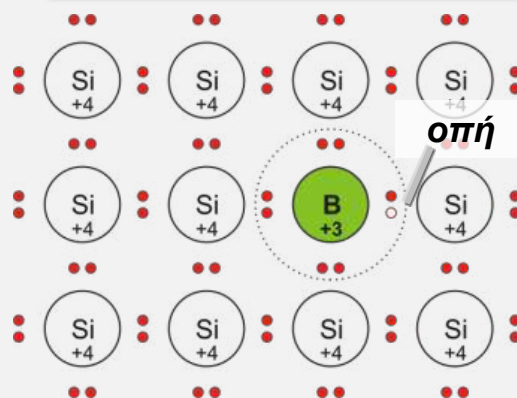
Μνήμη EPROM
© User: Zephyris
/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Εξωγενείς (Extrinsic) Ημιαγωγοί

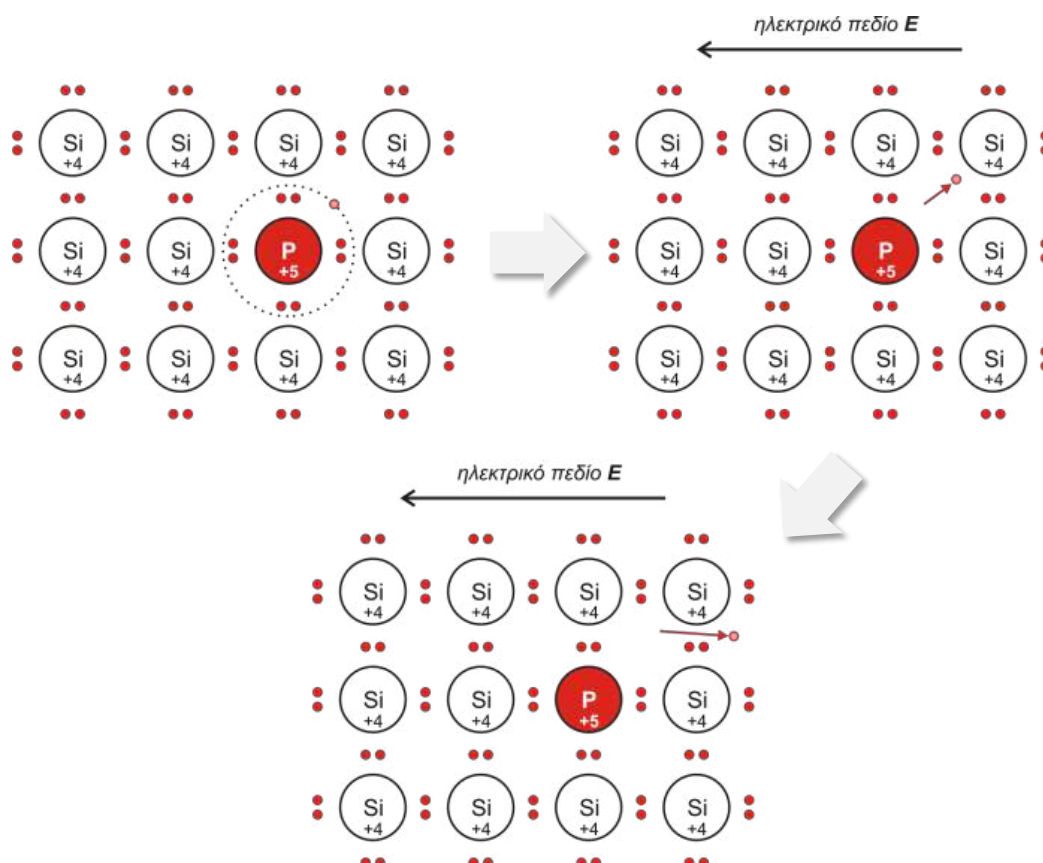
Προσμίξεις τύπου n



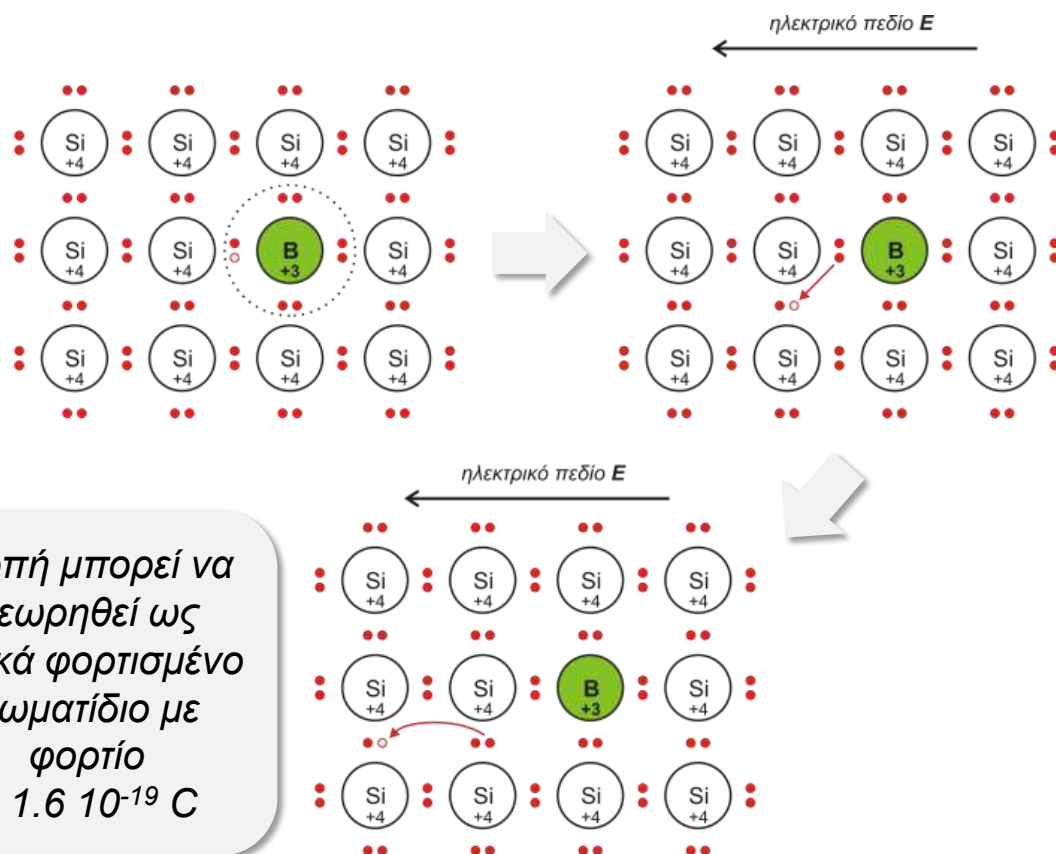
Προσμίξεις τύπου p



Ηλεκτρική αγωγή σε ημιαγωγούς με προσμίξεις τύπου n



Ηλεκτρική αγωγή σε ημιαγωγούς με προσμίξεις τύπου p



Ηλεκτρική αγωγιμότητα

ηλεκτρόνια οπές Ενδογενείς

$$\sigma = n|e|\mu_e + p|e|\mu_h$$

$$\mu_h < \mu_e, \quad n = p$$

$$\sigma = n|e|(\mu_e + \mu_h)$$

$\mu_h < \mu_e$ Εξωγενείς

Τύπου n (P, As, Sb) (VA)

$$n \gg p$$

$$\sigma \cong n|e|\mu_e$$

Τύπου p (B, Ga, Al) (IIIA)

$$n \ll p$$

$$\sigma \cong p|e|\mu_h$$

Επίδραση της θερμοκρασίας

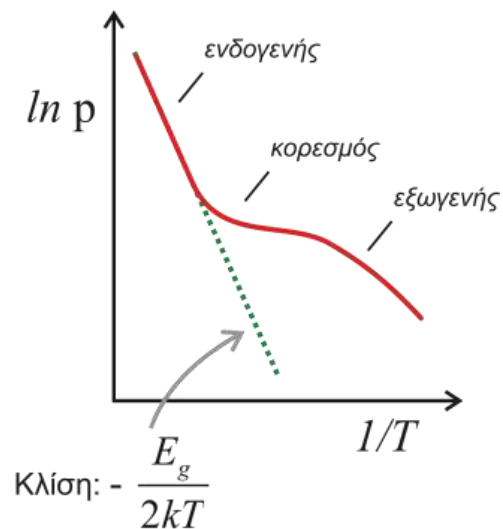
Ενδογενείς

Ισχυρή αύξηση n , p με την αύξηση της θερμοκρασίας

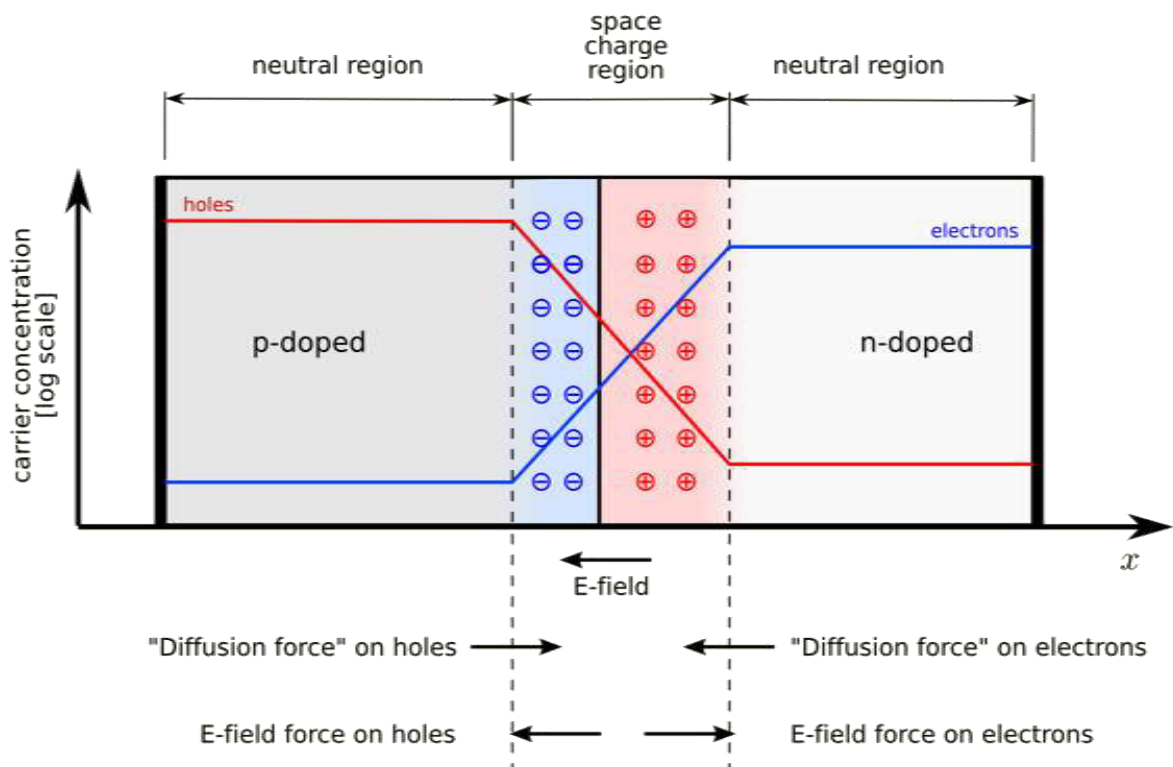
Ασθενής μείωση μ_e , μ_h με την αύξηση της θερμοκρασίας

$$\ln \sigma \cong C - \frac{E_g}{2kT} \Rightarrow$$

$$\ln n \cong \ln p \cong C' - \frac{E_g}{2kT}$$

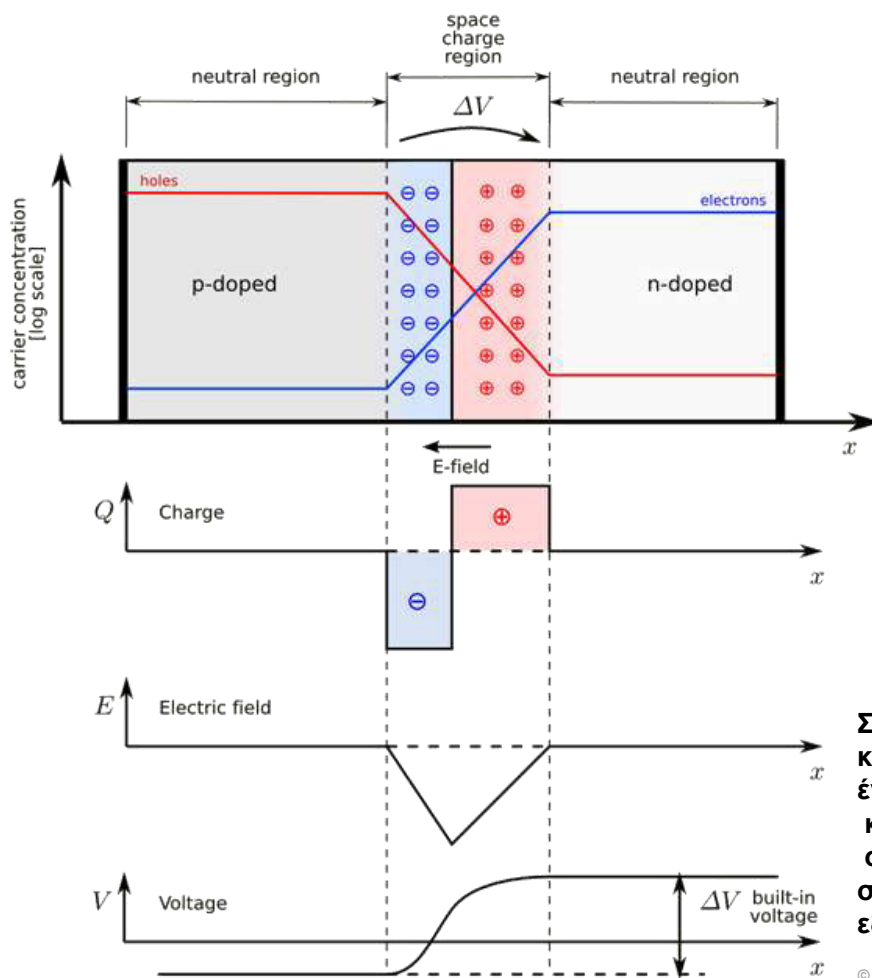


Επαφή p-n



Σχηματική απεικόνιση μιας επαφής p-n

© en:User:TheNoise/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



Σχηματική απεικόνιση κατανομών φορτίου (Q), έντασης ηλεκτρικού πεδίου (E), και διαφοράς δυναμικού (V) σε μια επαφή p-n που βρίσκεται σε θερμική ισορροπία με μηδενική εξωτερική τάση

© en:User:TheNoise/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Ηλεκτρική Δίοδος

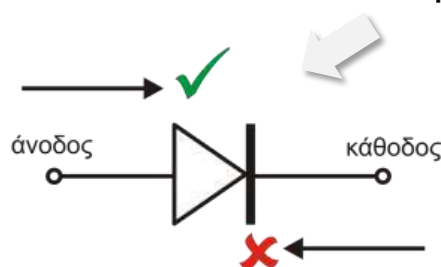
Ηλεκτρικό στοιχείο που επιτρέπει την διέλευση ρεύματος μόνο σε μια διεύθυνση



Τυπική κατασκευή p-n διόδου

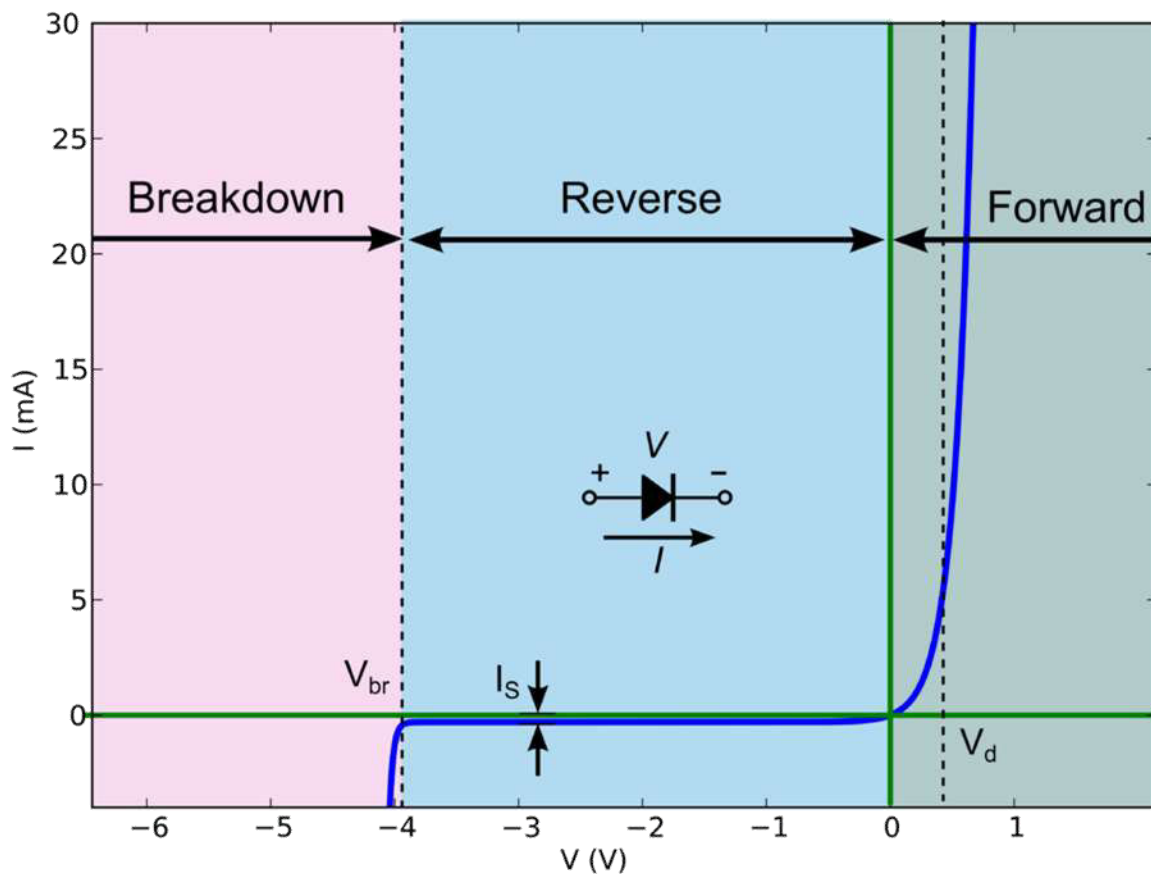


γραφική απεικόνιση p-n διόδου σε ηλεκτρικό κύκλωμα



Λεπτομέρεια από το εσωτερικό διόδου

© User:Morcheeba / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-2.5



Τυπική καμπύλη τάσης-ρεύματος για μια ηλεκτρική δίοδο

© User: Hldsc / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-2.5

Μικροηλεκτρονική

Η επιστήμη και τεχνολογία κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων

Εναπόθεση
(Deposition)

Αφαίρεση
(Removal)

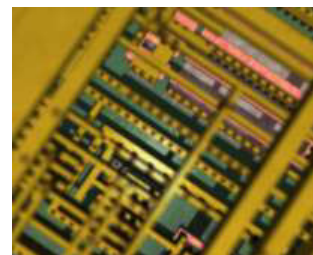
Λιθογραφία
(Lithography)

Τροποποίηση ηλεκτρικών
ιδιοτήτων
(Modification of electrical
properties)



Clean room

© User: Duk / Wikimedia Commons/Public Domain



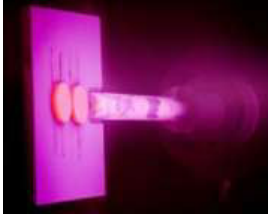
Ολοκληρωμένο κύκλωμα
(ψευδοχρωματική απεικόνιση)

© David Carron / Wikimedia Commons,
CC-BY-SA-3.0

Εναπόθεση (Deposition)

(PVD)

*physical vapour
deposition*



PVD
(ceramic powder introduced into the plasma flame, which vaporizes it and then condenses it to form the ceramic coating.)

NASA/Wikimedia Commons/Public Domain

(CVD)

*chemical vapour
deposition*

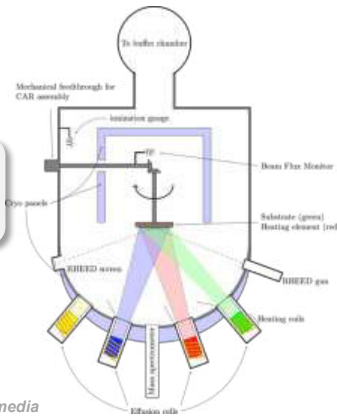


CVD
(DC plasma (violet), A heating element (red) provides the necessary substrate temperature.)

User:Polyparadigm
/Wikimedia Commons/Public Domain

(MBE)

*molecular beam
epitaxy*



MBE
User:Vegar Ottesen / Wikimedia
Commons, CC-BY-SA-3.0

(ECD)

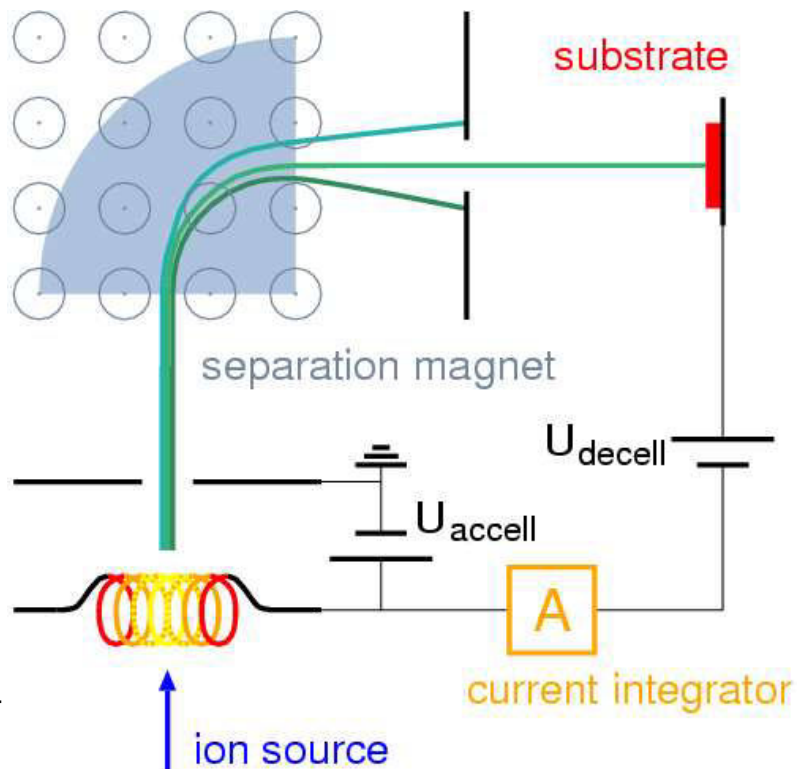
*electrochemical
deposition*

(ADL)

*Atomic layer
deposition*

Τροποποίηση ηλεκτρικών ιδιοτήτων (Modification of electrical properties)

**Εμφύτευση
Ιόντων
(ion implantation)**



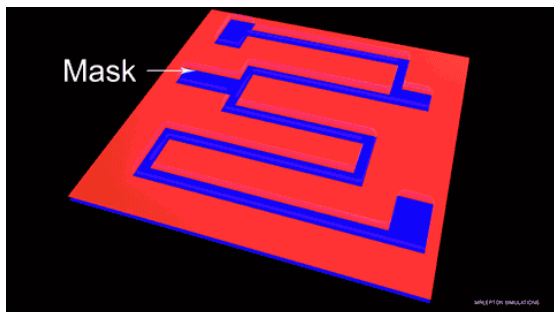
Σχηματική απεικόνιση διάταξης εμφύτευσης-εναπόθεσης ιόντων με διαχωριστή μάζας
User:Dschwen/Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Αφαίρεση (Removal)

etching

wet

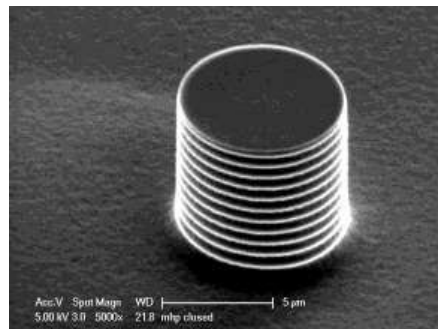
Χρήση υγρών
διαλυτών



Σχηματική απεικόνιση αφαίρεσης με wet etching
User:Mrneutrino / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

dry

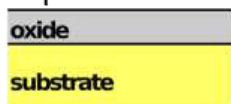
Χρήση πλάσματος



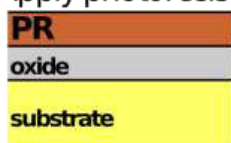
Εικόνα SEM από ion etching (Si pillar)
User:Pgalajda / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Λιθογραφία (Lithography)

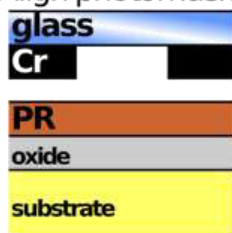
a. Prepare wafer



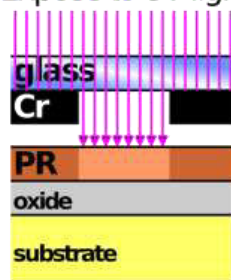
b. Apply photoresist



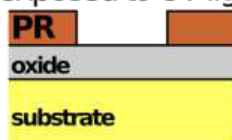
c. Align photomask



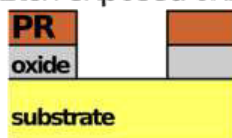
d. Expose to UV light



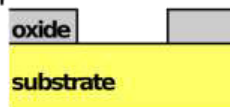
e. Develop and remove photoresist exposed to UV light



f. Etch exposed oxide

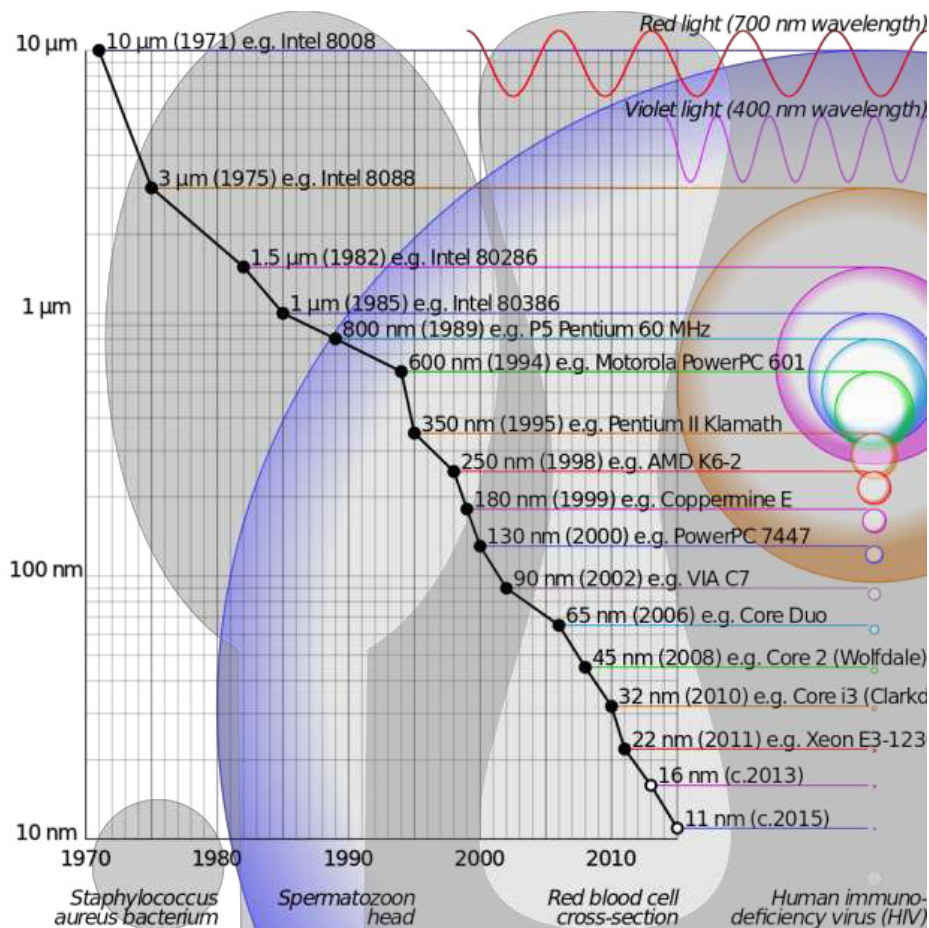


g. Remove remaining photoresist



Σχηματική απεικόνιση φωτολιθογραφικής διαδικασίας για κατασκευή ολοκληρωμένου κυκλώματος

User:Cmglee / Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



Γραφική απεικόνιση της εξέλιξης στην μείωση των διαστάσεων στην Μικροηλεκτρονική

© User: Cmglee/ Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Ιοντικά κεραμικά

Ηλεκτρική αγωγιμότητα

Ηλεκτρονιακή

Ιοντική

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{ionic}$$

σθένος

Συντ. διάχυσης

$$\mu_i = \frac{s_i |e| D_i}{kT}$$

Τυπικές ηλεκτρικές ιδιότητες

Υλικό	Ειδική αντίσταση ρ ($m \cdot \Omega$)	Ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα σ $1/(m \cdot \Omega)$
Άνθρακας (άμορφος)	$(5 \sim 8) \cdot 10^{-4}$	$(1.25 \sim 2) \cdot 10^3$
Γραφίτης	$(2.5 \sim 5) \cdot 10^{-6}$	$(2 \sim 3) \cdot 10^5$
Διαμάντι	$\sim 10^{12}$	$\sim 10^{-13}$
Κοινό Γυαλί	$(0.1 \sim 1000) \cdot 10^{12}$	$(0.001 \sim 10) \cdot 10^{-12}$
Εβονίτης	$> 10^{13}$	$\sim 10^{-14}$
Teflon	$> 10^{16}$	$< 10^{-16}$
PET	$\sim 10^{14}$	$\sim 10^{-14}$

Πηγή: Wikipedia

Πολυμερή

Τυπικά τα πολυμερή έχουν **χαμηλή** ηλεκτρική αγωγιμότητα



Δοκιμαστικό κατσαβίδι

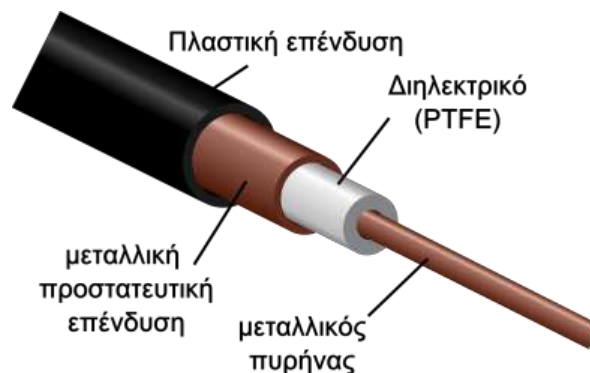
© User:Haragayato/Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



Μονωτικές ταινίες

© User:DMGualtieri/Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

$$\sigma_{\text{teflon}} \approx 10^{-17} (\Omega \cdot m)^{-1}$$

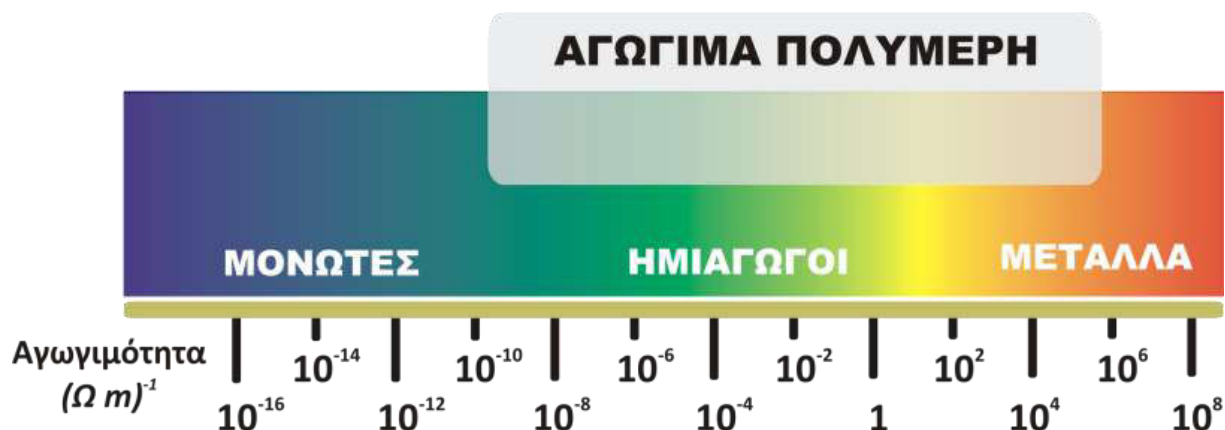


Σχηματική απεικόνιση τομής ηλεκτρικού καλωδίου

© User:Tkgd2007/Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Αγώγιμα πολυμερή !

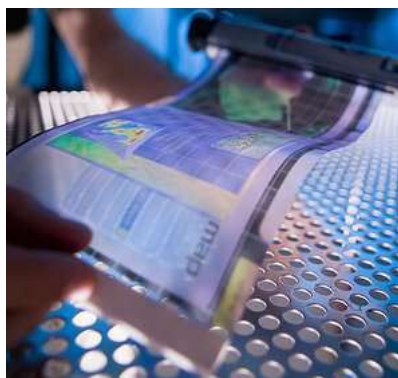
$$\sigma \approx 1.5 \cdot 10^7 (\Omega \cdot m)^{-1}$$



**The Nobel Prize in Chemistry 2000
was awarded jointly to :**
Alan J. Heeger, Alan G. MacDiarmid and Hideki Shirakawa
"for the discovery and development of conductive polymers".

Περισσότερες Πληροφορίες: (<http://www.nobelprize.org>)

Αγώγιμα πολυμερή: Εφαρμογές



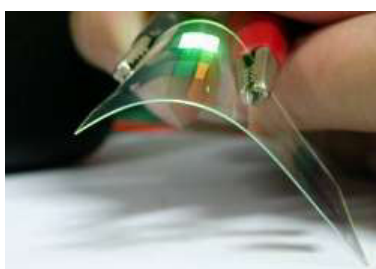
Flexible display

© User:RDECOM/Wikimedia Commons, CC-BY-SA-1.0



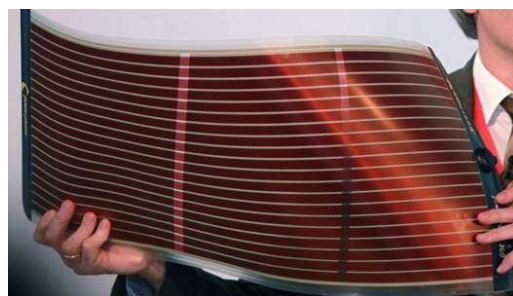
Flexible display (e-paper)

© Windell Oskay /Wikimedia Commons, CC-BY-SA-2.0



Flexible organic LED (OLED)

© User:meharris/Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0



Flexible organic solar cell

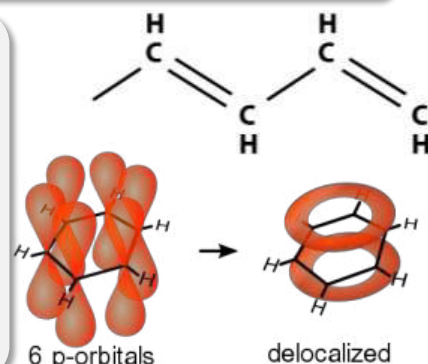
© Armin Kübelbeck/Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

Πως λειτουργούν;

συζευγμένοι διπλοί δεσμοί (conjugated double bonds)

Στους συζευγμένους δεσμούς, οι δεσμοί μεταξύ των ατόμων του άνθρακα είναι εναλλάξ απλοί και διπλοί.

Κάθε διπλός δεσμός περιέχει ένα ισχυρά «εντοπισμένο» σ τροχιακό που σχηματίζει ένα ισχυρό δεσμό καθώς και ένα ασθενέστερα «εντοπισμένο» π τροχιακό.

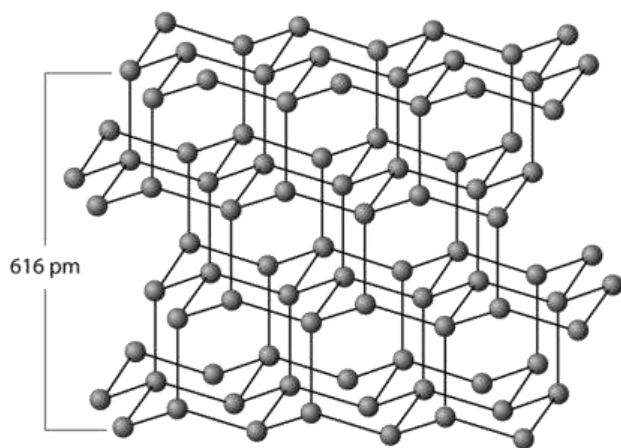


Υβριδισμός τροχιακών στους δακτυλίους του βενζολίου

© User:Vladsinger/Wikimedia Commons, CC-BY-SA-3.0

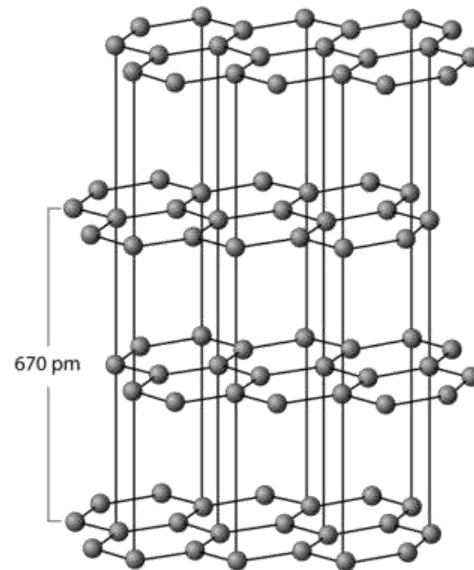
Προσμίξεις

Φορείς φορτίου (ηλεκτρόνια ή οπές) πρέπει να προστεθούν στο υλικό . Η ύπαρξη τους επιτρέπει την μεταφορά φορτίου στην μοριακή αλυσίδα



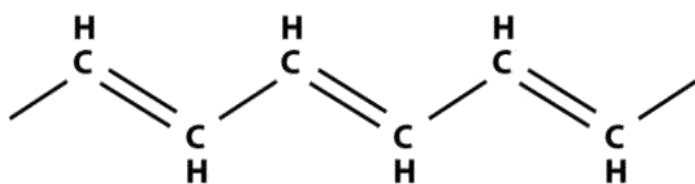
Δομή Διαμαντιού

σ τροχιακά



Δομή Γραφίτη

$\sigma + \pi$
τροχιακά



Πολυακετυλένιο

$\sigma + \pi$
τροχιακά

