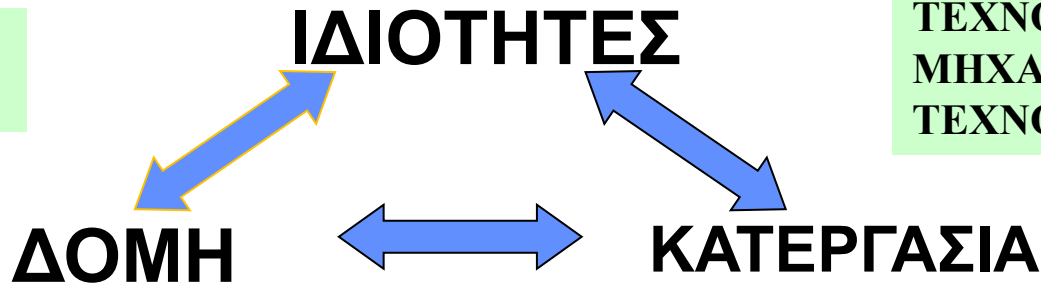


Συσχέτιση

Δομής (structure)
Ιδιοτήτων (properties)
κατεργασίας (Processing)

ΕΠΙΣΤΗΜΗ
ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΥΛΙΚΩΝ-
ΜΗΧΑΝΟΥΡΓΙΚΗ
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ



ΔΟΜΗ ΥΛΙΚΩΝ STRUCTURE OF MATERIALS

ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΔΟΜΗ
(Κατανομή ηλεκτρονίων-
ηλεκτρόνια σθένους)

- Αγώγιμα Υλικά
- Διηλεκτρικά Υλικά
- Μαγνητικά Υλικά
- Ημιαγώγιμα Υλικά
- Οπτικές ιδιότητες - Υλικά

Τρόπος σύνδεσης
των ατόμων
(Δεσμοί)

Διευθέτηση των ατόμων
στο χώρο

Ορολογία σχετική με τη δομή που θα συναντήσουμε Στην πορεία των διαλέξεων

- Ηλεκτρονική δομή
- Ατομική –Μοριακή δομή
(Ηλεκτρονική δομή και δεσμοί
- Άμορφη –Κρυσταλλική δομή
Διευθέτηση των δομικών μονάδων
(άτομα-ιόντα) στο χώρο
- Μακροσκοπική δομή
- Μικροσκοπική δομή
- Νανο δομές

Δεσμοί μεταξύ των ατόμων
Interatomic Bonding

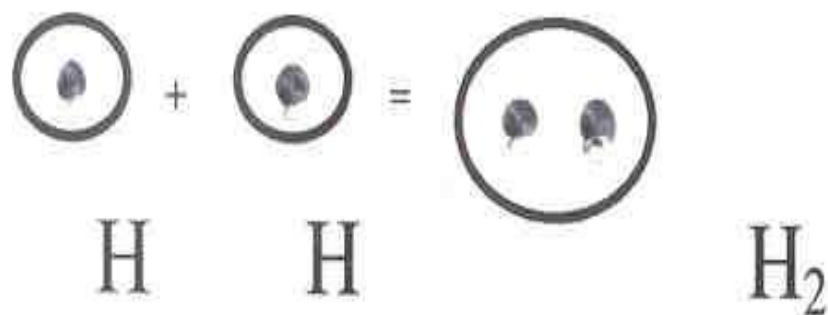
Δεσμοί μεταξύ των ατόμων

Interatomic Bonding

- **ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ**
- **ΕΤΕΡΟΠΟΛΙΚΟΣ (ΙΟΝΤΙΚΟΣ)**
- **ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΣ**
- **ΔΕΥΤΕΡΕΥΟΝΤΕΣ ΔΕΣΜΟΙ**

ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

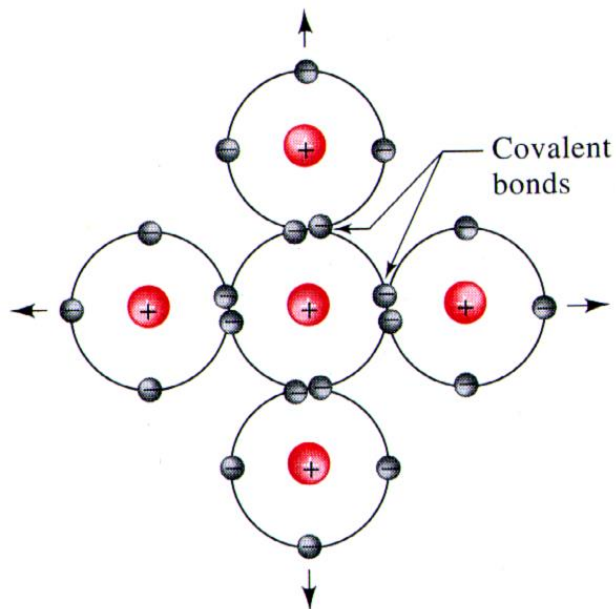
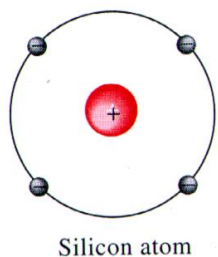
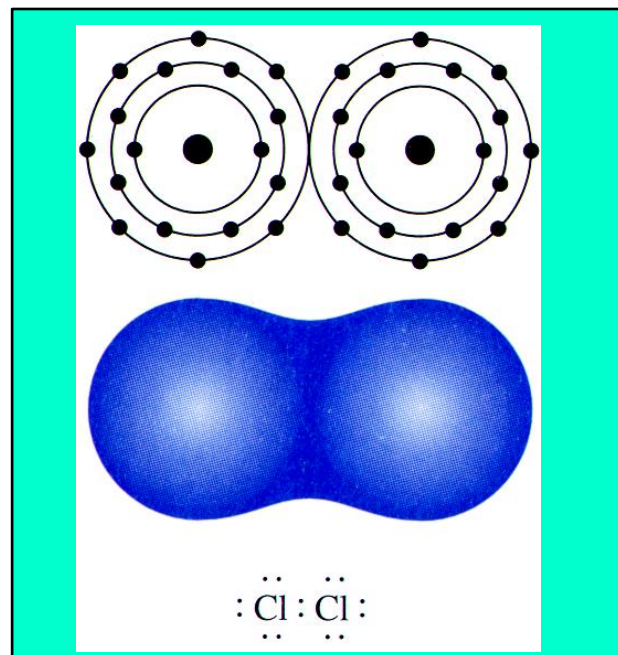
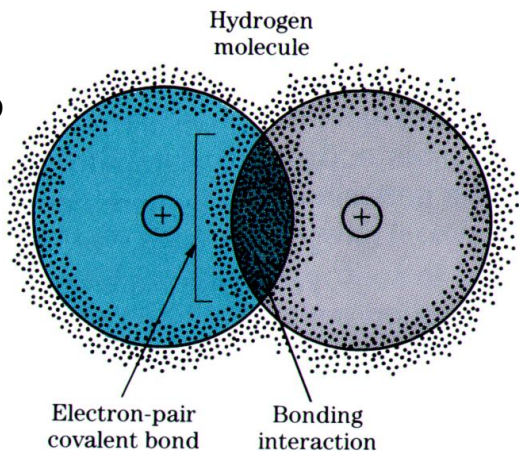
- Συγχώνευση ατομικών τροχιακών
(Κοινό ζεύγος ηλεκτρονίων)



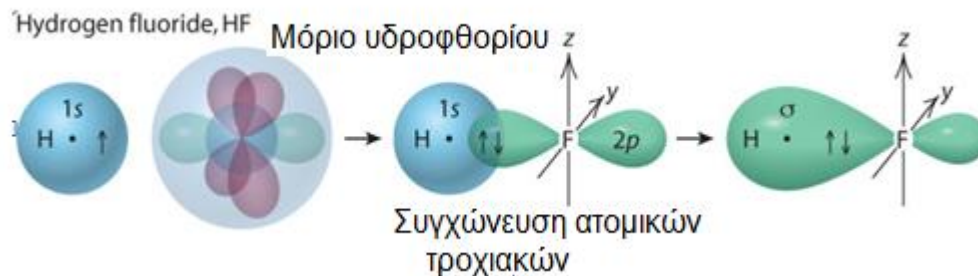
- Φύση ηλεκτροστατική (Ηλεκτρομαγνητική)
- Καθορισμένες θέσεις στο χώρο (Directionality)
- Η έννοια “μόριο έχει φυσική σημασία”
- Μικρή ελαστικότητα - υψηλή σκληρότητα

ΟΜΟΙΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

Μόριο του
Υδρογόνου



Εξήγηση της κατευθυντικότητας
(directionality)

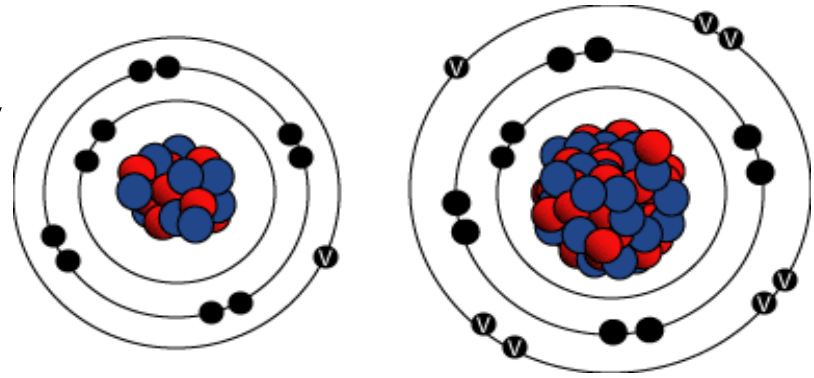


ΕΤΕΡΟΠΟΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

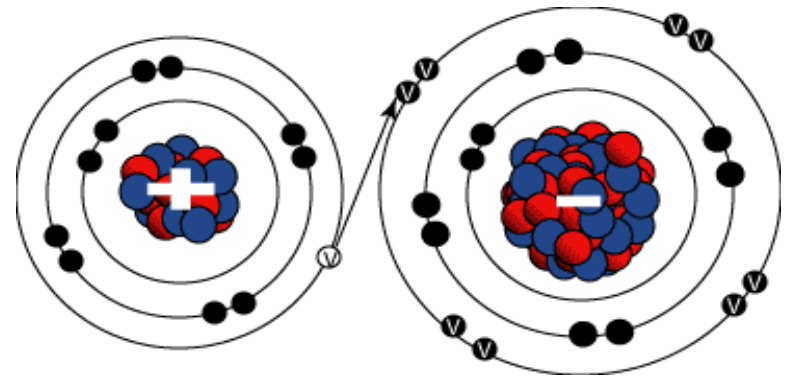
- Συγκράτηση ιόντων με δυνάμεις ηλεκτροστατικές
- Φύση ηλεκτροστατική
- Ιόντα σε καθορισμένες θέσεις αλλά με σημαντική δυνατότητα μετακίνησης
- Κρυσταλλικό πλέγμα
- Ελαστικότητα μεγαλύτερη του Ο.Δ

Ιοντικοί δεσμοί στα κεραμικά

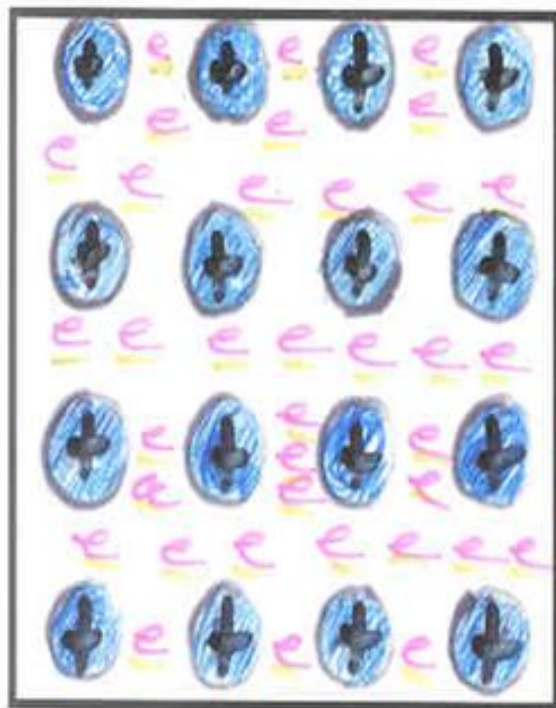
- ✓ Στα νεώτερα κεραμικά υλικά έχουμε ιοντικούς δεσμούς μεταξύ των ατόμων των οξειδίων και των αλάτων.



- ✓ Οι ιοντικοί δεσμοί είναι περισσότερο ελαστικοί από τους ομοιοπολικούς συνεπώς οι ομοιοπολικοί κρύσταλλοι έχουν μικρότερη ελαστικότητα από τους ιοντικούς.

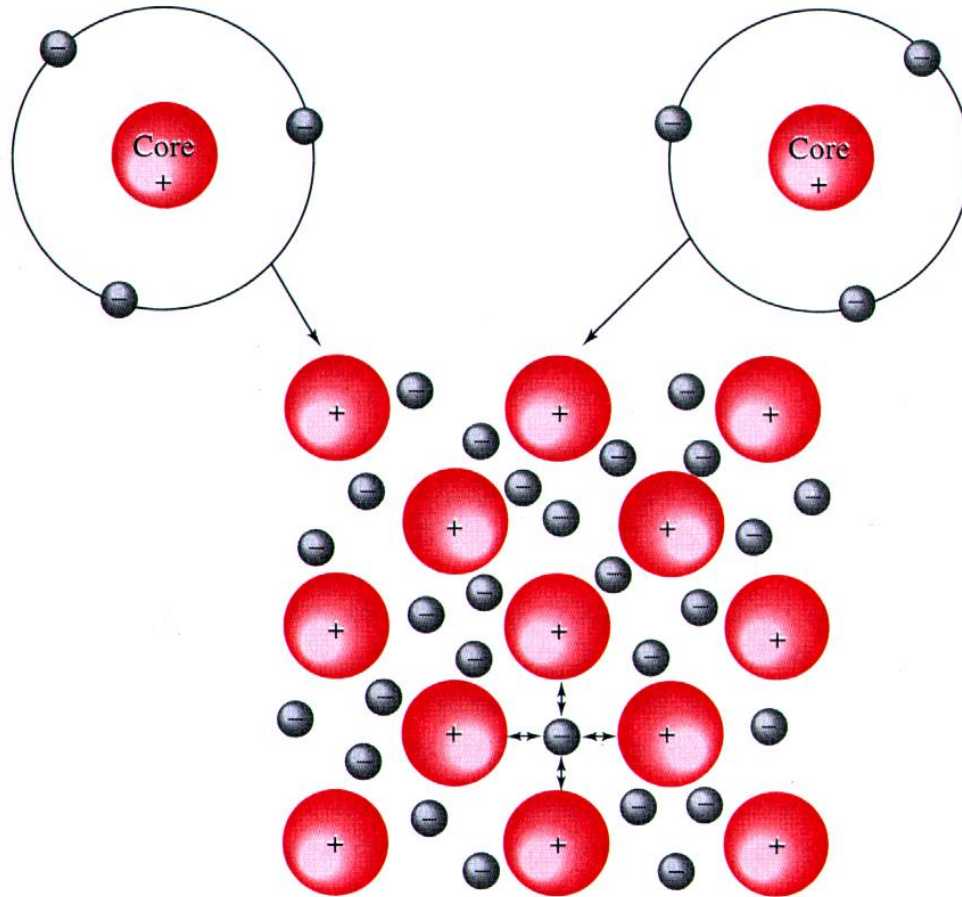


ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ



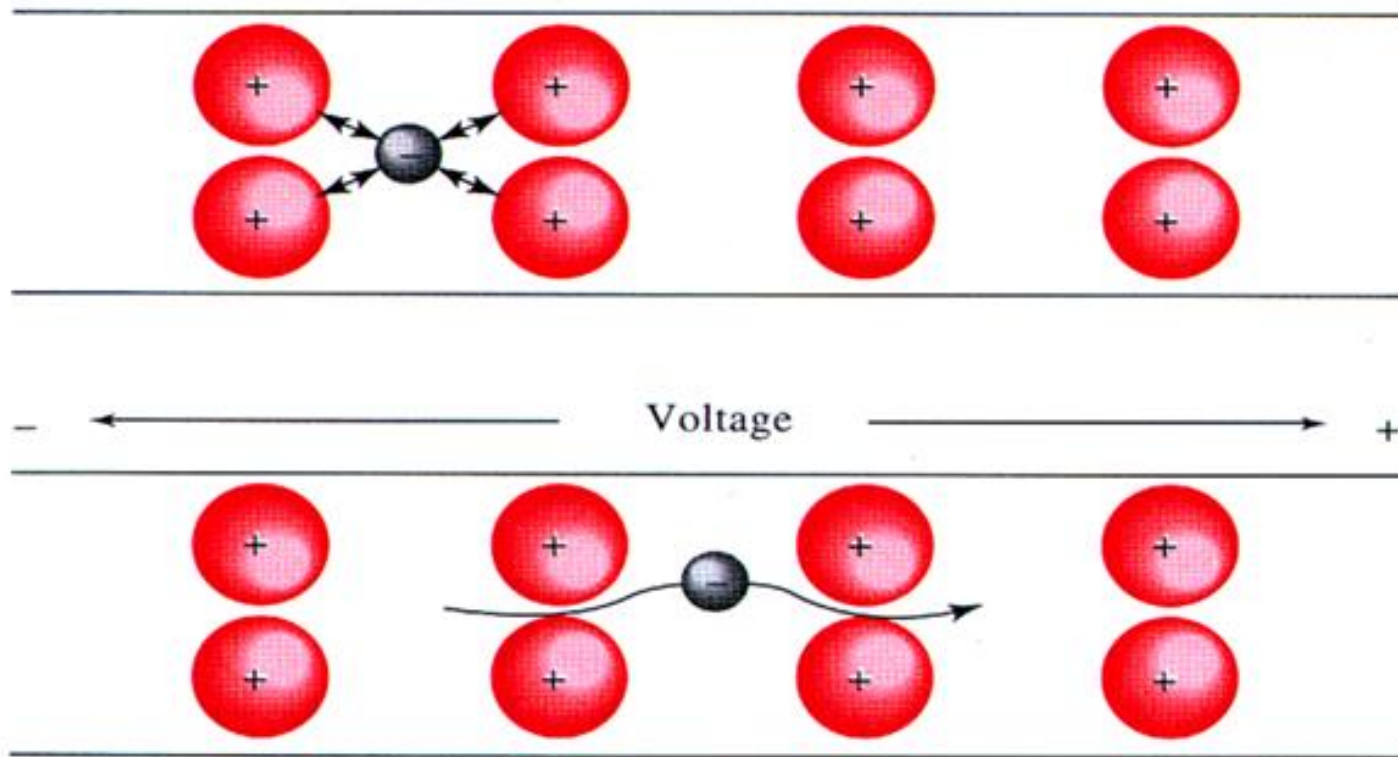
- Δυνάμεις ηλεκτροστατικές μεταξύ των ελεύθερα κινούμενων ηλεκτρονίων σθένους και των θετικά φορτισμένων ιόντων του μετάλλου
- Άτομα σε καθορισμένες θέσεις αλλά με σημαντική δυνατότητα μετακίνησης
- Κρυσταλλικό πλέγμα
- Ελαστικότητα μεγαλύτερη του Ε.Δ

Μεταλλικός δεσμός



Μεταλλικός δεσμός

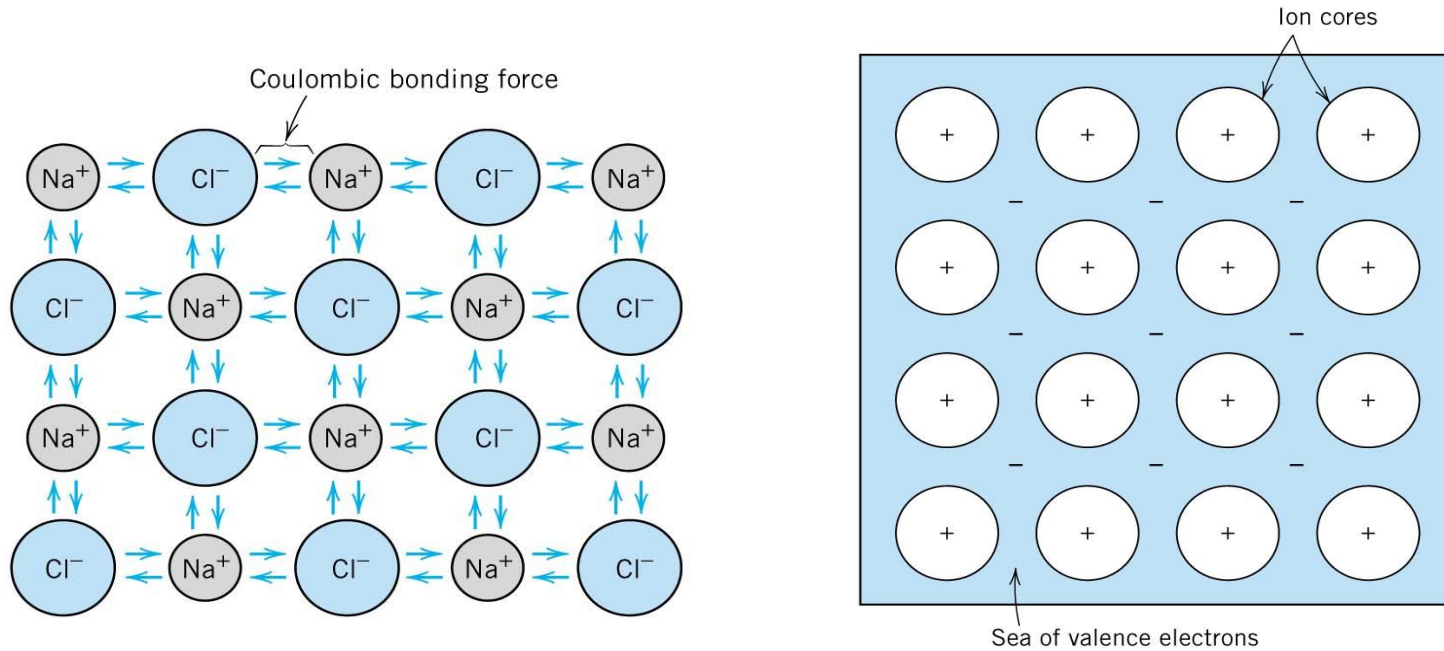
Ηλεκτρικές ιδιότητες του μεταλλικού δεσμού



Όταν εφαρμόζεται ηλεκτρικό ρεύμα στο μέταλλο τα ηλεκτρόνια από τη «από τη θάλασσα ηλεκτρονίων κινούνται εύκολα και ,μεταφέρουν το ρεύμα

Σύγκριση Μεταλλικού –ιοντικού δεσμού

Τα υλικά με μεταλλικό δεσμό έχουν μεγαλύτερη ελαστικότητα* από τα υλικά με ιοντικό δεσμό.



* Διαφοροποίηση από τον γενικό κανόνα της προηγούμενης διαφάνειας.

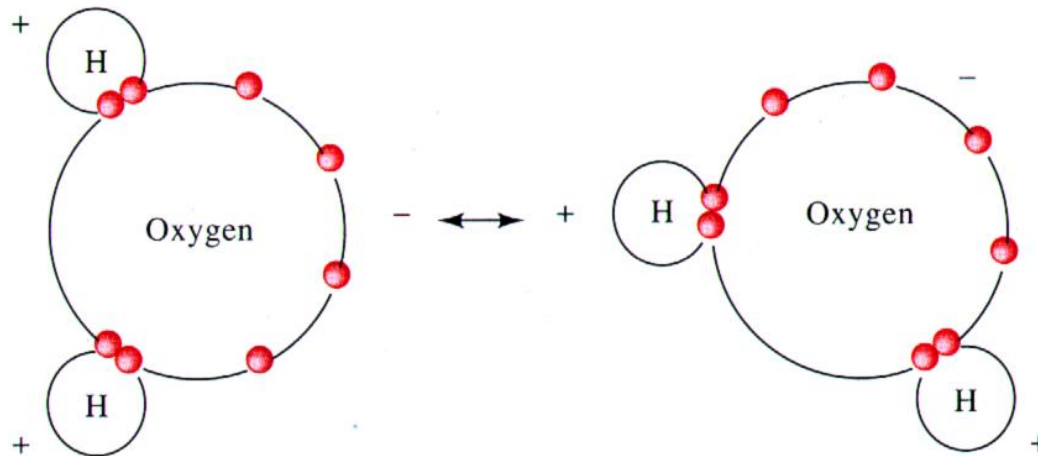
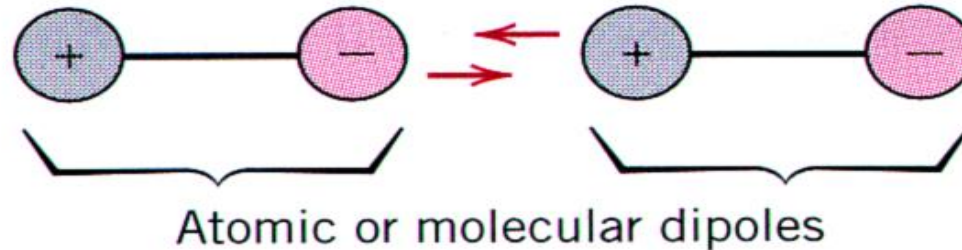
Δεν εφαρμόζεται στα Μεταβατικά Μέταλλα
πχ Fe, Co, Ni, Cu, Zn. Γιατί;

Τα μεταβατικά μέταλλα δημιουργούν στη δομή τους και ομοιοπολικούς δεσμούς από τα ασυμπλήρωτα 3d εσωτερικά τροχιακά.

Οι δεσμοί στα μέταλλα αυτά έχουν μικρότερη Ελαστικότητα από τον ιοντικό δεσμό!!

Δευτερεύοντες δεσμοί

Δεσμός Υδρογόνου - Δεσμός Van Der Waals

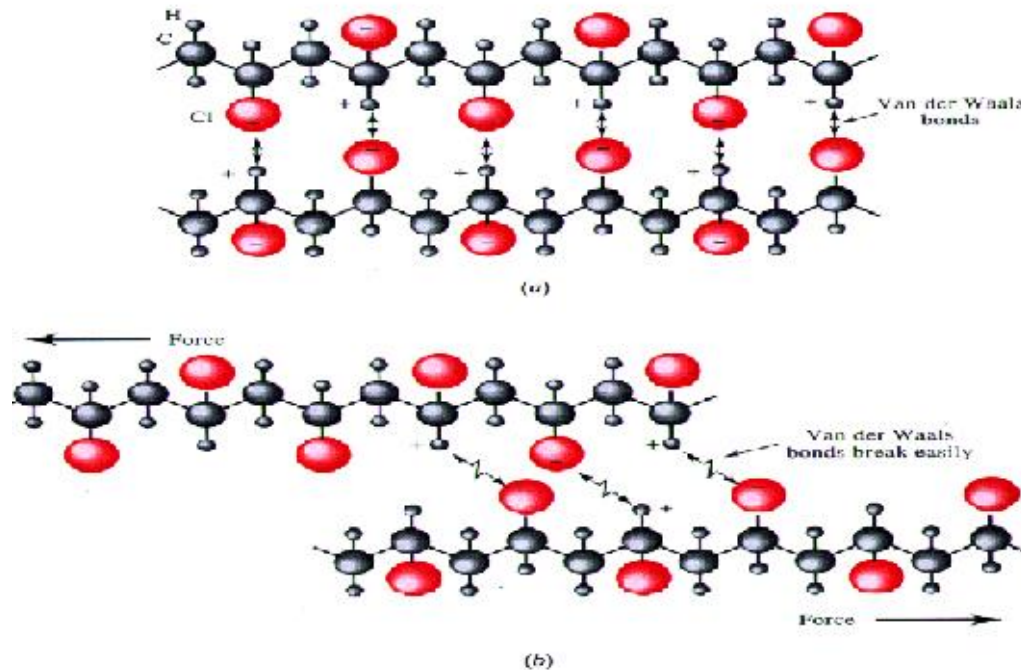


Ο δεσμός van der Waals σχηματίζεται ως αποτέλεσμα της πόλωσης μορίων ή ομάδας ατόμων.

Ο δεσμός υδρογόνου σχηματίζεται μεταξύ μορίων που περιέχουν υδρογόνο συνδεδεμένο με ηλεκτραρνητικό άτομο πχ μεταξύ μορίων του νερού

Δευτερεύοντες δεσμοί Secondary Bonding

Παράδειγμα:



(α) Στη δομή του PVC τα μακρομόρια συγκρατούνται με δυνάμεις Van der Waals

(β) Όταν εφαρμόζεται φορτίο στο υλικό οι δεσμοί Van der Waals Διασπώνται εύκολα και τα μόρια διολισθαίνουν

ΣΥΝΔΙΑΣΜΟΙ ΔΕΣΜΩΝ

- Ιοντικός- Ομοιοπολικός
- Μεταλλικός - Ομοιοπολικός
- Μεταλλικός - Ιοντικός

ΔΕΣΜΟΙ ΑΝΑ ΚΑΤΗΓΟΡΙΑ ΥΛΙΚΩΝ

ΜΕΤΑΛΛΑ- ΚΡΑΜΑΤΑ : Μεταλλικός
Μεταλλικός-Ομοιοπολικός

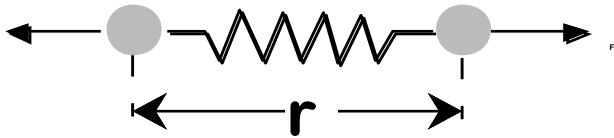
ΚΕΡΑΜΙΚΑ : Ομοιοπολικός
Ομοιοπολικός- Ιοντικός
Ιοντικός
Wan der Waals

ΠΟΛΥΜΕΡΗ : Ομοιοπολικός στις ανθρακικές
αλυσίδες
Wan der Waals μεταξύ των
μακρομορίων
“Ομοιοπολικός μεταξύ
μακρομορίων”

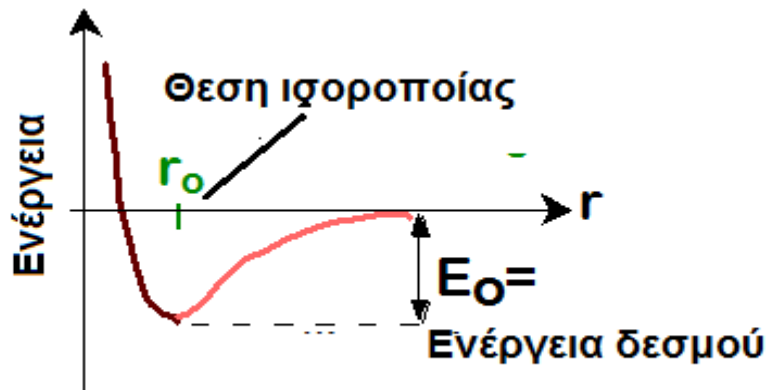
Ιδιότητες των υλικών από τους δεσμούς

Ενέργεια Vs Μήκος δεσμού

- Μήκος δεσμού, r



- Ενέργεια δεσμού, E_0



$$E_{\text{total}} = E_{\text{attractive}} + E_{\text{repulsive}} = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n}$$

$$\frac{dE_{\text{total}}}{dr} = \frac{A}{r^2} - \frac{nB}{r^{(n+1)}} = 0$$

Λύνοντας για $r (= r_0)$,

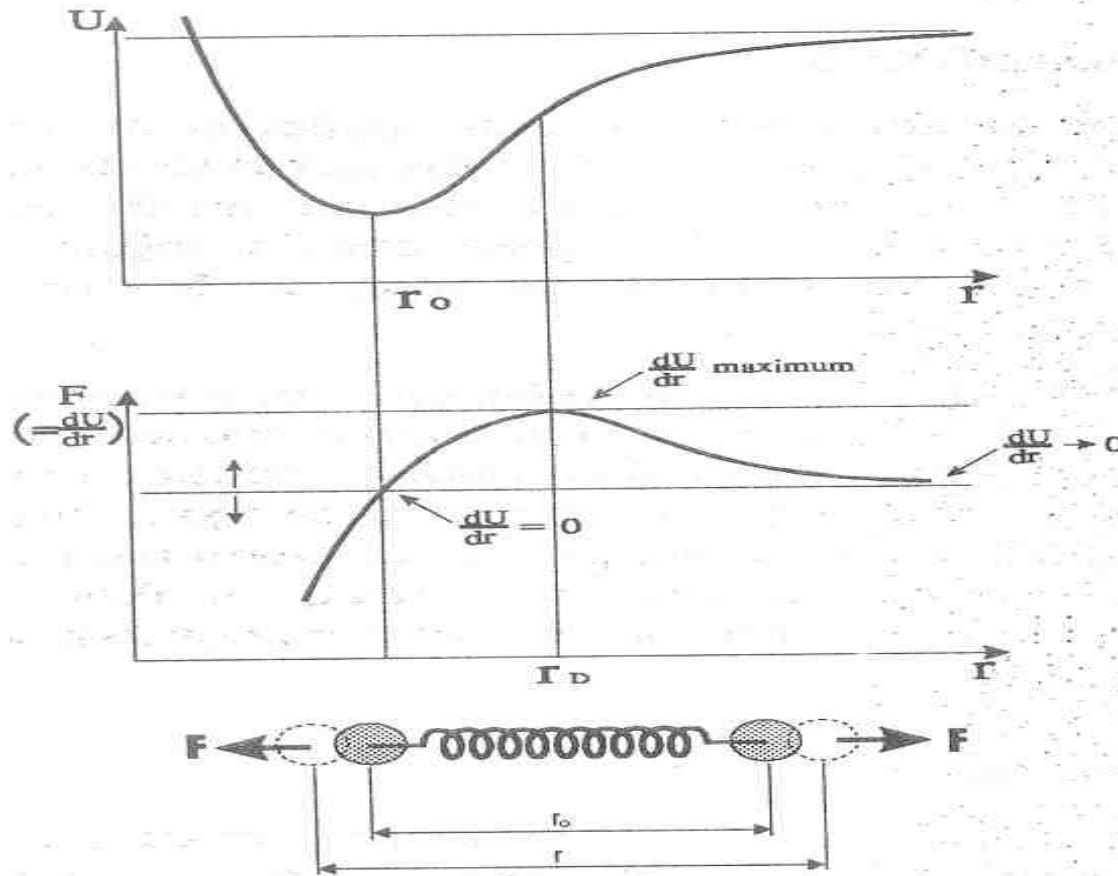
$$r_0 = \left(\frac{A}{nB}\right)^{1/(1-n)}$$

Αντικαθιστώντας στην E_{total}

$$E_0 = -\frac{A}{\left(\frac{A}{nB}\right)^{1/(1-n)}} + \frac{B}{\left(\frac{A}{nB}\right)^{n/(1-n)}}$$

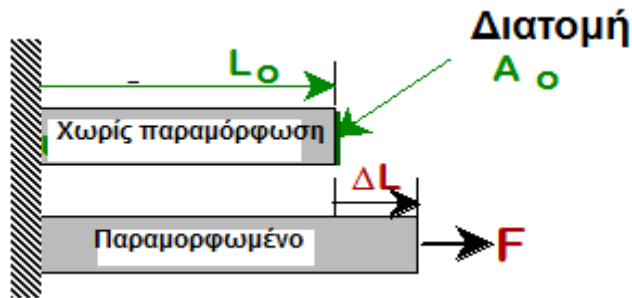
Μηχανική συμπεριφορά του δεσμού.

Ο δεσμός μπορεί να θεωρηθεί ότι συμπεριφέρεται σαν ένα γραμμικό ελαστικό μέσο



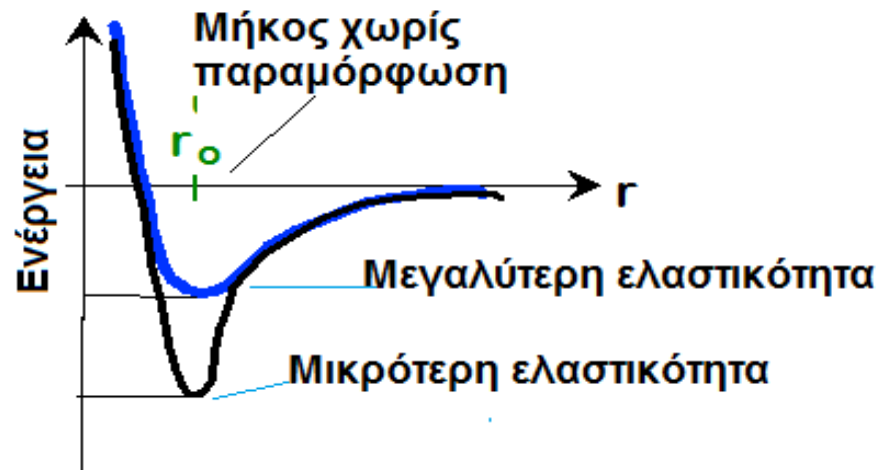
Ιδιότητες από τους δεσμούς: E (ελαστικότητα)

- Μέτρο Ελαστικότητας, E



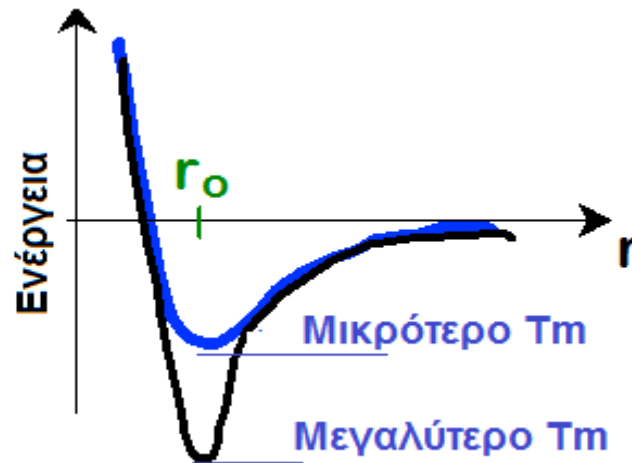
Elastic modulus

$$\frac{F}{A_0} = E \frac{\Delta L}{L_0}$$



Ιδιότητες από τους δεσμούς: T_m (Θερμοκρασία τήξεως)

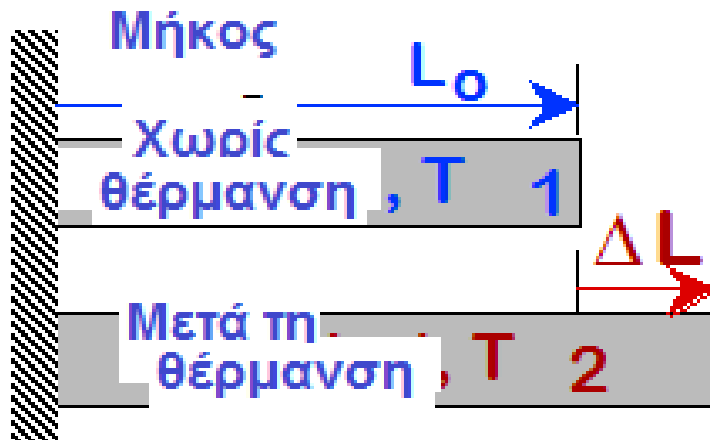
- Θερμοκρασία τήξεως, T_m



T_m είναι μεγάλη όταν η ελαστικότητα είναι μικρή.

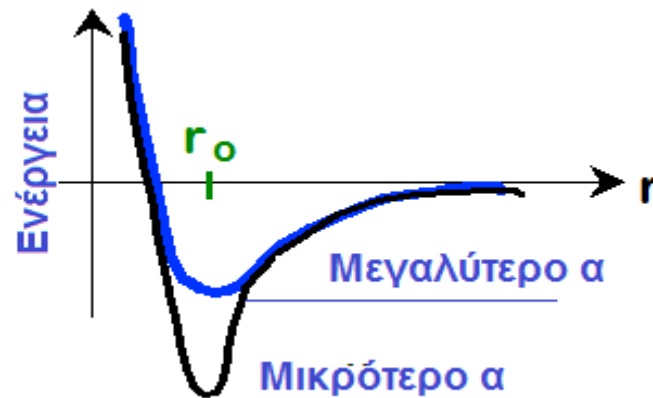
Ιδιότητες από τους δεσμούς: α

- Συντελεστής θερμικής διαστολής, α



Συντελεστής θερμικής διαστολής

$$\frac{\Delta L}{L_0} = \alpha (T_2 - T_1)$$



Ανασκόπηση των βασικότερων σημείων

Κεραμικά

(Ιοντικοί & ομοιοπολικοί δεσμοί):

Μεγάλη ενέργεια δεσμών

Μεγάλο T_m

Μεγάλο E

Μικρό α

Μέταλλα

Μεταλλικός δεσμός

Μέση ενέργεια δεσμών

Μέσο T_m

Μέσο E

Μέσο α

Πολυμερή

(Ομοιοπολικός στις ανθρακικές αλυσίδες
Δευτερεύοντες μεταξύ των μακρομορίων):

Οι δευτερεύοντες δεσμοί
καθορίζουν τη συμπεριφορά τους

Μικρό T_m

Μικρό E

Μεγάλο α



Κατά προσέγγιση ταξινόμηση των δεσμών ως προς την ελαστικότητα τους

Ομοιοπολικός

Μεταλλικός*

Ιοντικός*



Ελαστικότητα



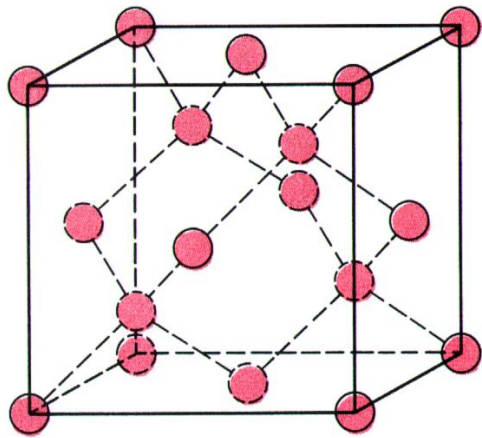
Μέτρο
ελαστικότητας

Ενδεικτικές τιμές	Τύπος δεσμού	Σταθερά N/m	E(GN/m ²)
	Ομοιοπολικός (C-C)	180	1000
	Μεταλλικός (Cu-Cu)	15-40	50-150
	Ιοντικός (Na-Cl)	9-21	30-70
	Δεσμός H	2	8
	Van der Waals	1	2

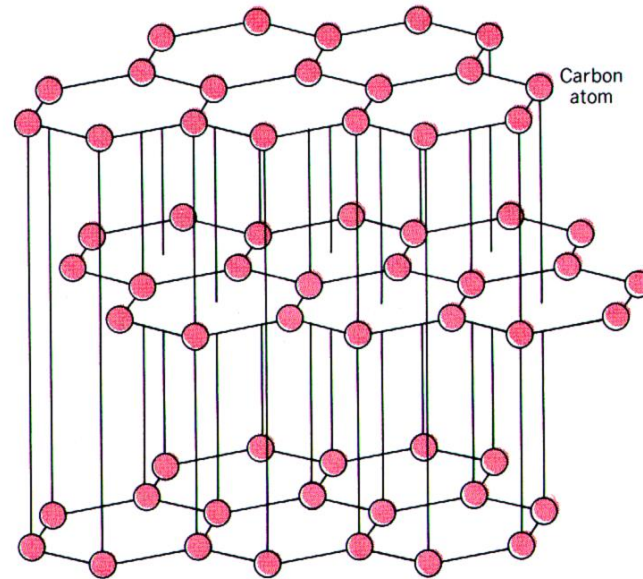
Ερωτήσεις

- Να συγκρίνετε ως προς την ελαστικότητα ένα μεταβατικό με ένα μη μεταβατικό μέταλλο
- Να κατατάξετε τα παρακάτω υλικά ως προς την ελαστικότητας ΤΟΥΣ: Διαμάντι ,χαλκός ,θερμοπλαστικό, κεραμικό οξειδίο
- Ποια είναι η σημασία των δεσμών ως προς τη μηχανική συμπεριφορά που επάγουν στα υλικά
- Ποιές ιδιότητες και ποιο τρόπο επηρεάζονται καθορίζονται από τους δεσμούς
- Τι δεσμούς έχουμε στο νερό, τον πάγο και τους υδρατμούς
- Ποιους δευτερεύοντες δεσμούς συναντούμε στα πολυμερή. Ποια είναι η επίπτωση τους στην μηχανική τους συμπεριφορά

Τι κάνει τα υλικά διαφορετικά;



Diamond



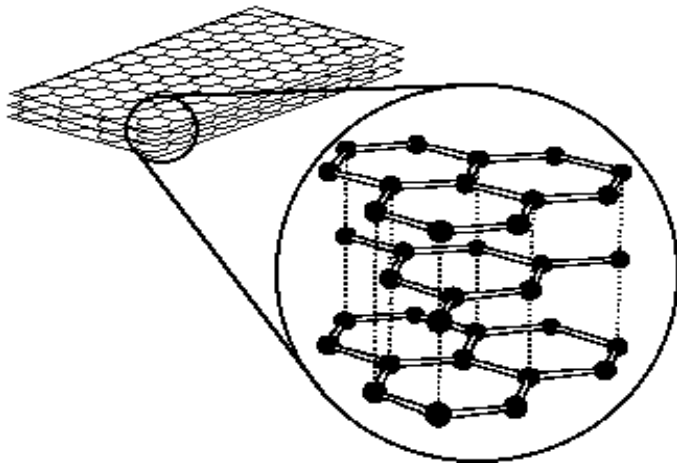
Graphite

Ο συνδυασμός των ατόμων και οι δεσμοί μεταξύ των ατόμων

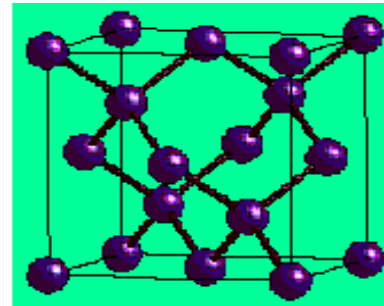
Δεσμοί



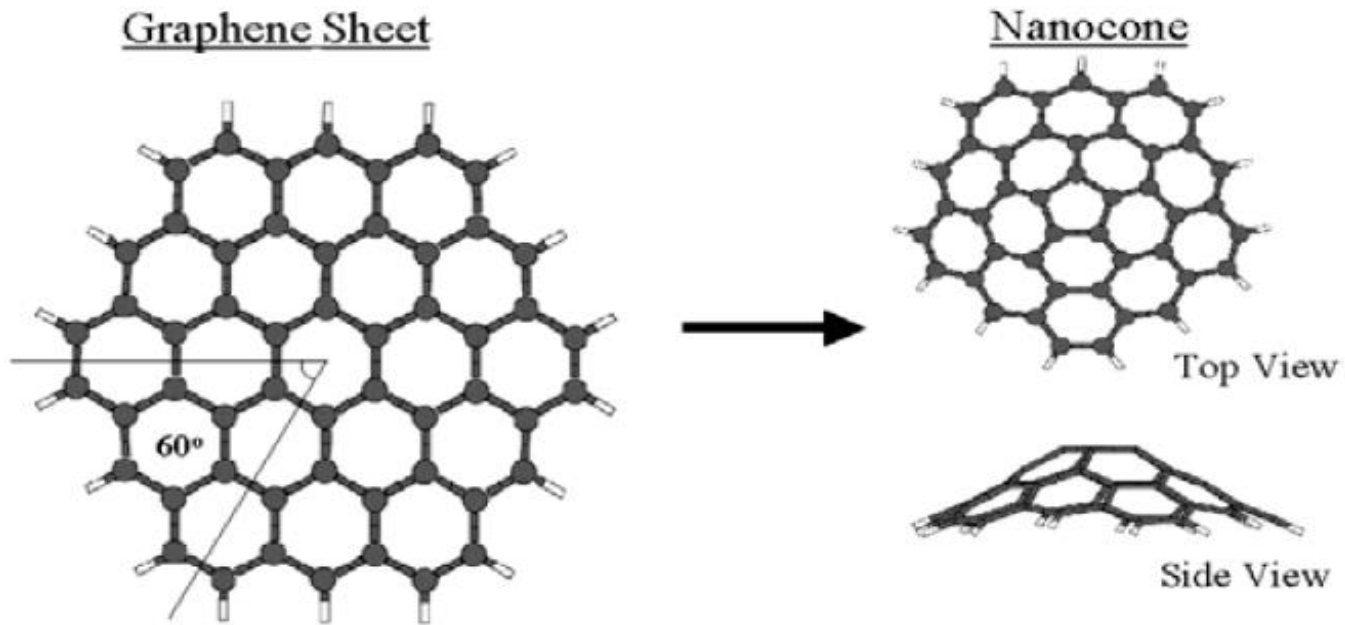
Graphite – sp^2



Diamond – sp^3



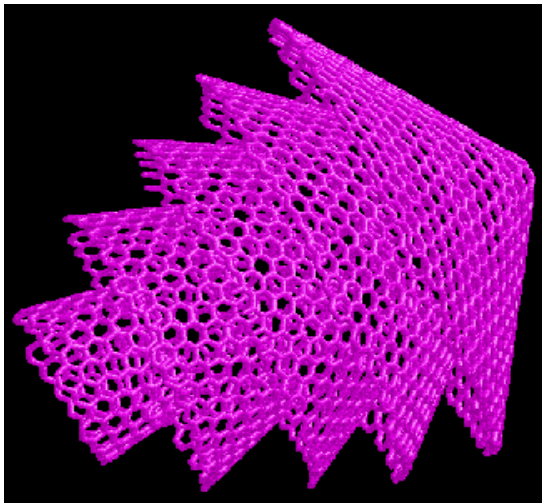
Nanocarbon



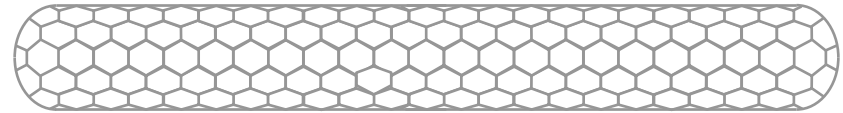
Shenderova *et al.* Nanotechnology
12 (2001) 191.

Nanocarbon

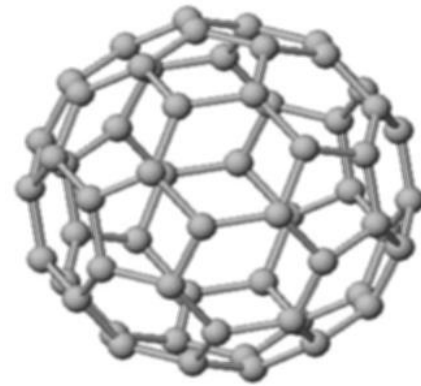
1 – 5 pentagons



6 + 6 pentagons



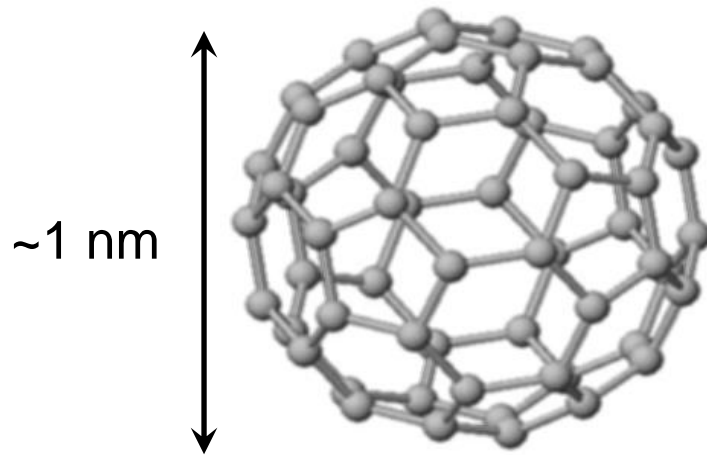
12 pentagons



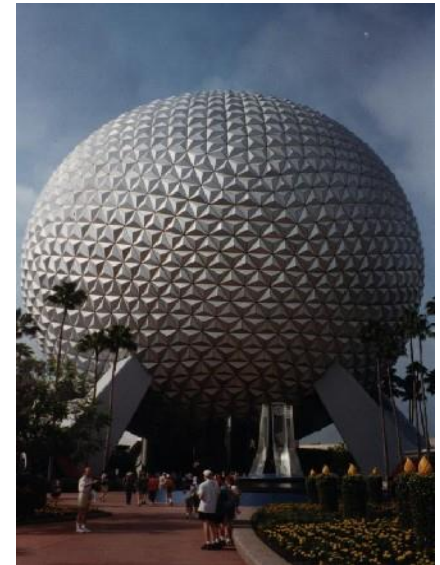
Fullerene

”The most symmetrical large molecule”

- Discovered in 1985
 - Nobel prize Chemistry 1996, Curl, Kroto, and Smalley
- C_{60} , also 70, 76 and 84.
 - 32 facets (12 pentagons and 20 hexagons)
 - prototype



Epcot center, Paris



Architect: R. Buckminster Fuller

Carbon Nanotube Structures

