



Τμήμα Μηχανολόγων  
Μηχανικών

Ελληνικό Μεσογειακό Πανεπιστήμιο

# Τεχνολογία Υλικών II

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών  
Ελληνικό Μεσογειακό Πανεπιστήμιο

Δρ. Σκλήρη Ευαγγελία

# Δομή Μαθήματος & Αξιολόγηση

## Δομή Μαθήματος

Το μάθημα περιλαμβάνει:

- **Θεωρητικές διαλέξεις** για την κατανόηση βασικών εννοιών της Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών
  - **Επίλυση ασκήσεων** και παραδειγμάτων εφαρμογής
  - **Προαιρετική πρόοδο**, η οποία συμβάλλει στην τελική βαθμολογία

## Τελικός βαθμός μαθήματος

- Τελική γραπτή εξέταση: **70%**
- Προαιρετική πρόοδος: **30%**

**Τελικός Βαθμός =  $0,70 \times$  Βαθμός Τελικής Εξέτασης +  $0,30 \times$  Βαθμός Προόδου**

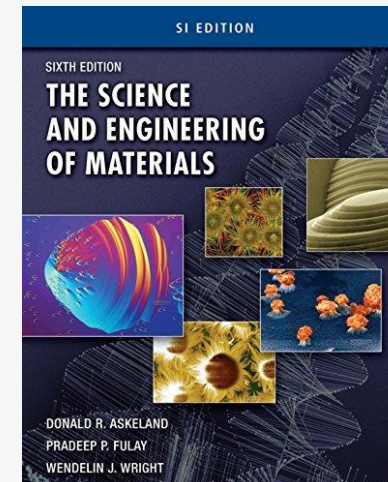
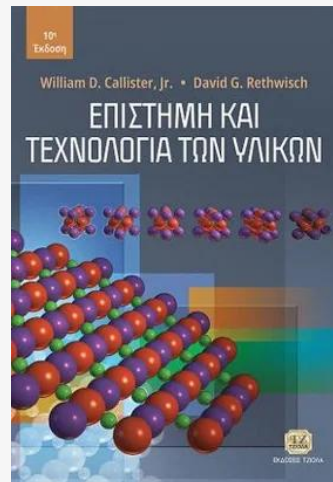
Όλο το εκπαιδευτικό υλικό και οι ανακοινώσεις θα αναρτώνται στο eClass, στην αντίστοιχη σελίδα του μαθήματος.

Ηλεκτρονική σελίδα μαθήματος (URL): <https://eclass.hmu.gr/courses/MECH152/>

# Βιβλιογραφία Μαθήματος

## Διδακτικά συγγράμματα:

- Callister .W, Rethwisch JR “**Επιστήμη και Τεχνολογία των υλικών**”, Σε ελληνική μετάφραση από τις Εκδόσεις Τζιόλα
- Χρυσουλάκης Γ, Παντελής Δ « **Τεχνολογία μεταλλικών υλικών**» Εκδόσεις Παπασωτηρίου
- Askeland D “**The Science and Engineering of materials**” Διαθέσιμο και σε ελληνική μετάφραση



# Σύνδεση με το Μάθημα Τεχνολογία Υλικών I

## ❑ Δομή → Ιδιότητες → Εφαρμογές → Επιλογή υλικού

Η βασική λογική της επιστήμης υλικών που συνδέει τη δομή με τη μηχανική συμπεριφορά και τη χρήση των υλικών στον σχεδιασμό.

## ❑ Έμφαση στα μεταλλικά υλικά

Μελέτη κρυσταλλικής δομής, ατελειών, μηχανισμών ενίσχυσης και θερμικών κατεργασιών που καθορίζουν την απόδοση των μετάλλων και κραμάτων.

## ❑ Μηχανική συμπεριφορά και αστοχία

Πλαστική παραμόρφωση, κόπωση, ερπυσμός και θραύση, φαινόμενα που επηρεάζουν άμεσα την αντοχή και την αξιοπιστία των μηχανολογικών κατασκευών.

# Σκοπός της Τεχνολογίας Υλικών II

- Μελέτη κεραμικών, πολυμερών και σύνθετων υλικών
- Κατανόηση ιδιοτήτων και εφαρμογών
- Επιλογή υλικού στον μηχανολογικό σχεδιασμό

Με την ολοκλήρωση του μαθήματος ο φοιτητής θα μπορεί:

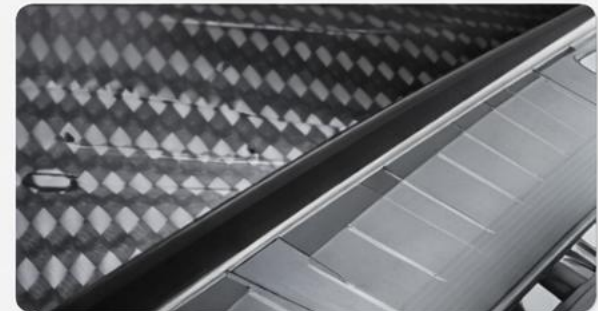
- ✓ να κατανοεί τη διαδικασία επιλογής κατάλληλων υλικών για μηχανολογικές κατασκευές
- ✓ να γνωρίζει τις βασικές κατηγορίες κεραμικών και τις εφαρμογές τους
- ✓ να γνωρίζει βασικά στοιχεία τεχνολογίας πλαστικών
- ✓ να γνωρίζει βασικά στοιχεία τεχνολογίας σύνθετων υλικών
- ✓ να αναγνωρίζει τους βασικούς μηχανισμούς αστοχίας υλικών

# Περιεχόμενα Μαθήματος

- Εισαγωγή στα κεραμικά υλικά
- Δεσμούς των κεραμικών υλικών
- Ιδιότητες
- Συντονισμό & λόγο ακτίνων
- Κρυσταλλικές δομές
- Ασκήσεις εφαρμογής

# Μη μεταλλικά Υλικά

- Υλικά χωρίς μεταλλικό δεσμό ως κυρίαρχο μηχανισμό συνοχής
- Περιλαμβάνουν:
  - κεραμικά
  - πολυμερή
  - σύνθετα υλικά
- Χρησιμοποιούνται ευρέως σε:
  - υψηλές θερμοκρασίες
  - ελαφριές κατασκευές
  - ηλεκτρονικές και βιοϊατρικές εφαρμογές



# Μη μεταλλικά Υλικά

## Γιατί χρειαζόμαστε μη μεταλλικά υλικά;

Περιορισμοί μετάλλων:

- υψηλή πυκνότητα
- χαμηλή αντοχή σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες
- ευαισθησία σε διάβρωση

Ανάγκη για:

- Υψηλές θερμοκρασίες λειτουργίας - θερμική αντοχή
- Μείωση βάρους κατασκευών - χαμηλό βάρος
- Αντοχή σε διάβρωση και φθορά
- Ειδικές λειτουργικές ιδιότητες – Νέες τεχνολογικές εφαρμογές

➤ **Οδηγεί στην ανάπτυξη μη μεταλλικών και σύνθετων υλικών.**

# Κεραμικά Υλικά

Τα κεραμικά είναι ανόργανα, μη μεταλλικά στερεά υλικά που αποτελούνται κυρίως από **ιονικούς και/ή ομοιοπολικούς δεσμούς**.

## Ταξινόμηση κεραμικών

- **Παραδοσιακά κεραμικά** - δομικές χρήσεις από φυσικές πρώτες ύλες.

Πηλός και τούβλα

Κεραμίδια

Πορσελάνη

Τσιμέντο και σκυρόδεμα

Κοινά γυαλιά (silica glass)

- **Προηγμένα** - Υλικά υψηλής καθαρότητας και ελεγχόμενης σύνθεσης για τεχνολογικές εφαρμογές.

$\text{Al}_2\text{O}_3$  (αλουμίνα)

$\text{SiC}$  (καρβίδιο πυριτίου)

$\text{Si}_3\text{N}_4$  (νιτρίδιο πυριτίου)

$\text{ZrO}_2$  (ζιρκονία)

Βιοκεραμικά (π.χ. υδροξυαπατίτης)

Πιεζοηλεκτρικά κεραμικά (π.χ. PZT)



# Κεραμικά Υλικά

Ιδιότητα	Παραδοσιακά κεραμικά	Προηγμένα κεραμικά
Πρώτες ύλες	Φυσικά ορυκτά (πηλός, άμμος)	Υψηλής καθαρότητας συνθετικές σκόνες
Μικροδομή	Μεγαλύτεροι πόροι, λιγότερος έλεγχος	Πυκνή και ελεγχόμενη μικροδομή
Μηχανική αντόχη	Μέτρια	Πολύ υψηλή
Σκληρότητα/Αντοχή σε φθορά	Μέτρια-υψηλή	Εξαιρετικά υψηλή
Θερμική αντοχή	Καλή	Πολύ υψηλή (υψηλές θερμοκρασίες λειτουργίας)
Ηλεκτρικές ιδιότητες	Συνήθως μονωτές	Από μονωτές έως λειτουργικά (πιεζοηλεκτρικά, ημιαγώγιμα)
Αξιοπιστία	Μεταβλητή	Υψηλή και ελεγχόμενη
Κόστος	Χαμηλό	Υψηλότερο
Εφαρμογές	Δομικά υλικά, γυαλιά, κεραμίδια	Ηλεκτρονικά, κοπτικά εργαλεία, βιοϊατρικά, ενέργεια

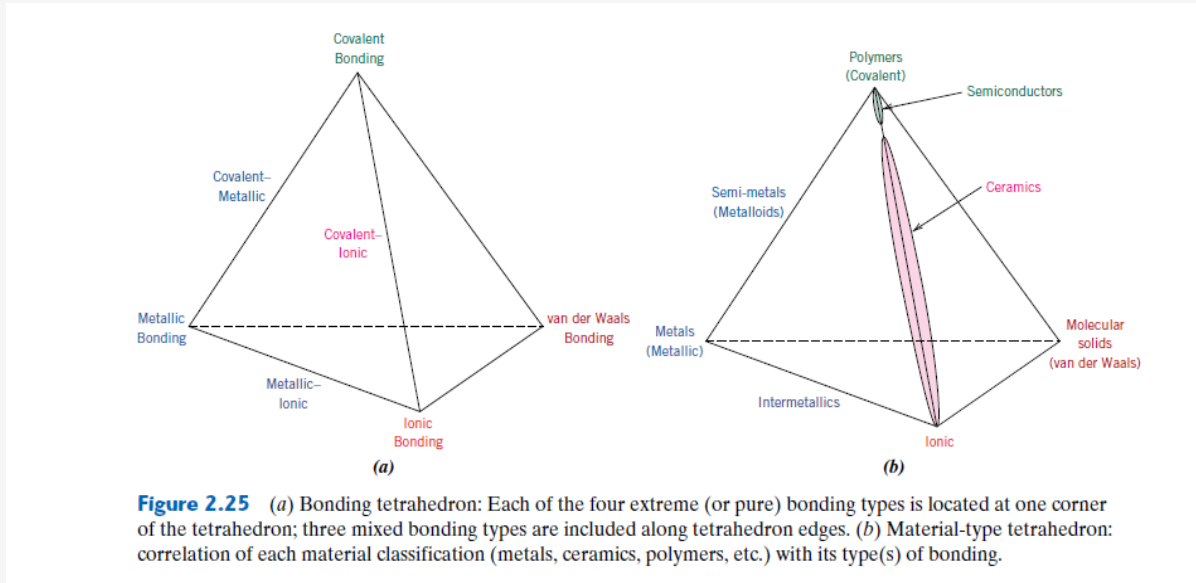
# Θεμελιώδεις Τύποι Δεσμών

- Μεταλλικός
- Ιοντικός
- Ομοιοπολικός
- Επίδραση στις ιδιότητες

Τα περισσότερα πραγματικά υλικά εμφανίζουν **συνδυασμό δεσμών**, γεγονός που οδηγεί σε ενδιάμεσες μηχανικές, θερμικές και ηλεκτρικές ιδιότητες.

Η **κατηγορία του υλικού** (μέταλλο, κεραμικό, πολυμερές, ημιαγωγός) συνδέεται άμεσα με τον κυρίαρχο τύπο δεσμού και τη δομή του.

# Θεμελιώδεις Τύποι Δεσμών



- **Μέταλλα** → κυρίως μεταλλικός δεσμός
- **Κεραμικά** → ιοντικός + ομοιοπολικός
- **Πολυμερή** → ομοιοπολικός + Van der Waals
- **Μοριακά στερεά** → κυρίως Van der Waals
- **Ημιαγωγοί** → κυρίως ομοιοπολικός

## Ο τύπος δεσμού καθορίζει την κατηγορία υλικού και τις ιδιότητές του

- Ιοντικός/ομοιοπολικός → σκληρά αλλά ψαθυρά (κεραμικά)
- Μεταλλικός → αγωγή και όλκιμα (μέταλλα)
- Van der Waals → χαμηλή αντοχή και χαμηλή θερμοκρασία τήξης (πολυμερή/μοριακά)

# Ατομικοί Δεσμοί στα Κεραμικά Υλικά

Στα κεραμικά οι δεσμοί είναι:

- **ιοντικοί**
- **ομοιοπολικοί**
- ή **συνδυασμός των δύο.**

## ELECTRONEGATIVITY

H 2,1																			He
Li 1,0	Be 1,6											B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0			Ne
Na 0,9	Mg 1,2											Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0			Ar
K 0,8	Ca 1,0	Sc 1,3	Ti 1,5	V 1,6	Cr 1,6	Mn 1,5	Fe 1,8	Co 1,9	Ni 1,9	Cu 1,9	Zn 1,6	Ga 1,6	Ge 1,8	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8			Kr
Rb 0,8	Sr 1,0	Y 1,2	Zr 1,4	Nb 1,6	Mo 1,8	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,2	Pd 2,2	Ag 1,9	Cd 1,7	In 1,7	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5			Xe
Cs 0,7	Ba 0,9	La 1,0	Hf 1,3	Ta 1,5	W 1,7	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,2	Pt 2,2	Au 2,4	Hg 1,9	Tl 1,8	Pb 1,9	Bi 1,9	Po 2,0	At 2,1			Rn

low

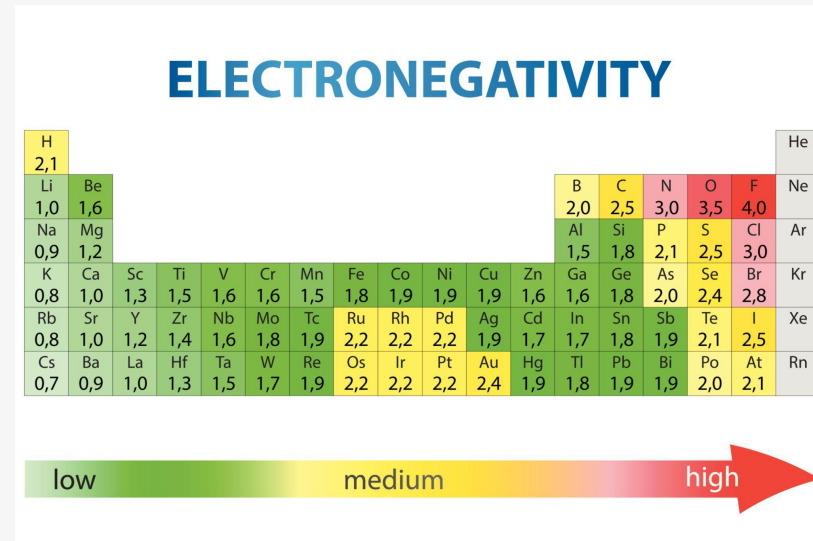
medium

high

➤ Ο ιοντικός χαρακτήρας εξαρτάται από τη **διαφορά ηλεκτραρνητικότητας** μεταξύ των ατόμων.

# Ατομικοί Δεσμοί στα Κεραμικά Υλικά

Ο ιοντικός χαρακτήρας εξαρτάται από τη διαφορά ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ των ατόμων.



Παράδειγμα κυρίως ιοντικού δεσμού

## MgO (οξείδιο του μαγνησίου)

- Μεγάλη διαφορά ηλεκτραρνητικότητας Mg–O
- Ισχυρά ιοντικός δεσμός
- Ιδιότητες:

- υψηλό σημείο τήξης
- καλή χημική αντοχή
- ηλεκτρικός μονωτής
- Σκληρό και ψαθυρό υλικό

Παράδειγμα κυρίως ομοιοπολικού δεσμού

## BN (νιτρίδιο του βορίου)

- Μικρότερη διαφορά ηλεκτραρνητικότητας B–N
- Κυρίως ομοιοπολικός δεσμός
- Ιδιότητες:

- πολύ υψηλή σκληρότητα
- θερμική αγωγιμότητα
- καλή αντοχή σε υψηλές θερμοκρασίες



# Ατομικοί Δεσμοί στα Κεραμικά Υλικά

## Άσκηση:

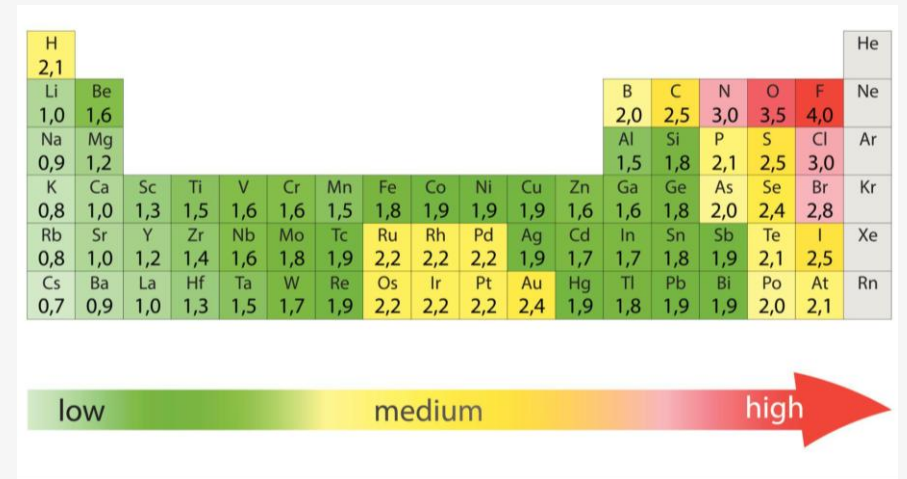
Να προσδιορίσετε το είδος δεσμού στα παρακάτω υλικά :

MgO

SiC

NaCl

Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>



## Απάντηση:

Υλικό	Τύπος Δεσμού	Αιτιολόγηση
MgO	Κυρίως ιοντικός	Μεγάλη διαφορά ηλεκτραρνητικότητας Mg–O
SiC	Κυρίως ομοιοπολικός	Μικρότερη διαφορά ηλεκτραρνητικότητας
NaCl	Ιοντικός	Καθαρός ιοντικός δεσμός
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Μικτός ιοντικός - ομοιοπολικός	Ισχυρός δεσμός Al–O με μερική ομοιοπολικότητα

# Βασικές Ιδιότητες Κεραμικών Υλικών

- Υψηλό σημείο τήξης
- Μεγάλη σκληρότητα και αντοχή σε φθορά
- Χαμηλή ηλεκτρική και θερμική αγωγιμότητα
- Υψηλή αντοχή σε διάβρωση
- Ψαθυρή θραύση

## Άσκηση:

**Γιατί τα κεραμικά είναι σκληρά αλλά ψαθυρά;**

# Βασικές Ιδιότητες Κεραμικών Υλικών

## **Άσκηση:**

Γιατί τα κεραμικά είναι σκληρά αλλά ψαθυρά;

## **Απάντηση:**

Οι δεσμοί στα κεραμικά είναι κυρίως ιοντικοί ή και ομοιοπολικοί. Οι ισχυροί δεσμοί δεν επιτρέπουν εύκολη ολίσθηση ατόμων. Το υλικό αντιστέκεται σε παραμόρφωση και χάραξη → μεγάλη σκληρότητα.

Η πλαστική παραμόρφωση στα στερεά γίνεται με ολίσθηση επιπέδων (dislocations).

Δεν υπάρχει πλαστική παραμόρφωση όπως στα μέταλλα.

Αν μετακινηθούν επίπεδα ιόντων → πλησιάζουν ίδια φορτία → ισχυρή απώθηση

Το υλικό σπάει απότομα αντί να λυγίζει.

# Παράγοντες Αντοχής Προηγμένων Κεραμικών Υλικών

Από πού προκύπτει η υψηλή μηχανική αντοχή των προηγμένων κεραμικών;

Μηχανισμός	Αποτέλεσμα στις ιδιότητες
Ισχυροί ιοντικοί / ομοιοπολικοί δεσμοί	Υψηλή σκληρότητα, υψηλό μέτρο ελαστικότητας, υψηλή θερμοκρασία τήξης
Υψηλή καθαρότητα & ελεγχόμενη σύσταση	Μείωση ατελειών → αυξημένη μηχανική αντοχή και αξιοπιστία
Έλεγχος ατελειών & ενίσχυση μικροδομής	Παρεμπόδιση ρωγμών → βελτιωμένη ανθεκτικότητα σε θραύση
Σχεδιασμός για συγκεκριμένη εφαρμογή	Βελτιστοποίηση αντοχής, αντοχής σε φθορά και συνολικής αξιοπιστίας

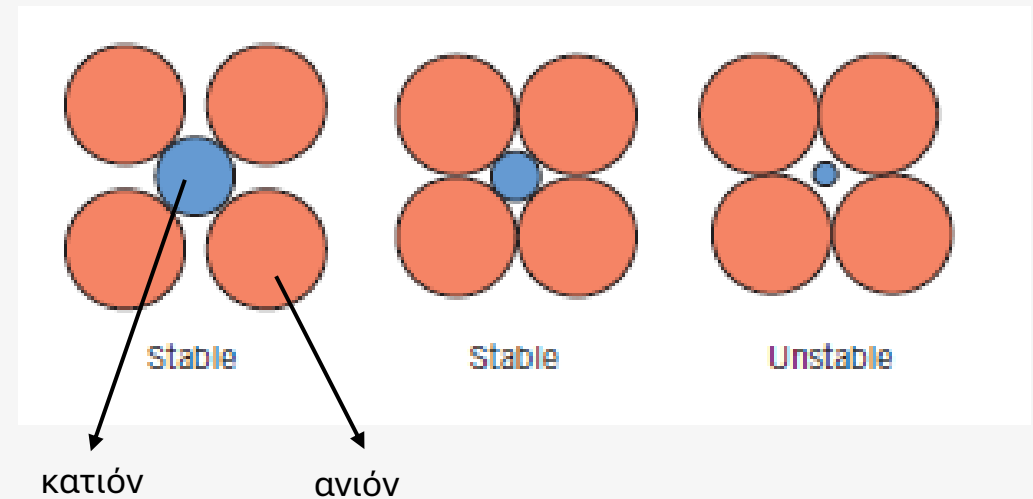
# Αριθμοί Ένταξης στα Κεραμικά

## Τι είναι ο αριθμός ένταξης;

- Αριθμός πλησιέστερων ιόντων αντίθετου φορτίου
- Περιγράφει τη γεωμετρία συντονισμού
- Συνδέεται με σταθερότητα και πυκνότητα δομής

## Επηρεάζει:

- Τοπική γεωμετρία ιόντων στο κρυσταλλικό πλέγμα
- Σχέση με λόγο ιοντικών ακτίνων και σταθερότητα δομής
- Κρίσιμος ρόλος στις ιδιότητες των κεραμικών



<i>Cation</i>	<i>Ionic Radius (nm)</i>	<i>Anion</i>	<i>Ionic Radius (nm)</i>
Al <sup>3+</sup>	0.053	Br <sup>-</sup>	0.196
Ba <sup>2+</sup>	0.136	Cl <sup>-</sup>	0.181
Ca <sup>2+</sup>	0.100	F <sup>-</sup>	0.133
Cs <sup>+</sup>	0.170	I <sup>-</sup>	0.220
Fe <sup>2+</sup>	0.077	O <sup>2-</sup>	0.140
Fe <sup>3+</sup>	0.069	S <sup>2-</sup>	0.184
K <sup>+</sup>	0.138		
Mg <sup>2+</sup>	0.072		
Mn <sup>2+</sup>	0.067		
Na <sup>+</sup>	0.102		
Ni <sup>2+</sup>	0.069		
Si <sup>4+</sup>	0.040		
Ti <sup>4+</sup>	0.061		

# Σχέση Λόγου Ιοντικών Ακτίνων – Συντονισμού

Μικρός λόγος ακτίνων (0.225-0.414) → τετραεδρικός συντονισμός (4)

Ενδιάμεσος λόγος ακτίνων (0.414-0.732) → οκταεδρικός συντονισμός (6)

Μεγάλος λόγος ακτίνων (0.732-1.0) → κυβικός συντονισμός (8)

## Δομή ZnS / SiC – Συντονισμός 4:4

- Τετραεδρική διάταξη ιόντων
- Μερικώς ομοιοπολικός χαρακτήρας
- Υψηλή σκληρότητα και θερμική αντοχή

Coordination Number	Cation–Anion Radius Ratio	Coordination Geometry
2	<0.155	
3	0.155–0.225	
4	0.225–0.414	
6	0.414–0.732	
8	0.732–1.0	

Source: W. D. Kingery, H. K. Bowen, and D. R. Uhlmann, *Introduction to Ceramics*, 2nd edition. Copyright © 1976 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.

# Σχέση Λόγου Ιοντικών Ακτίνων – Συντονισμού

## Δομή NaCl / MgO – Συντονισμός 6:6

- Οκταεδρική γεωμετρία
- Τυπική ιοντική κεραμική δομή
- Καλή θερμική και χημική σταθερότητα

## Δομή CsCl – Συντονισμός 8:8

- Κυβική διάταξη ιόντων
- Μεγάλος λόγος ιοντικών ακτίνων
- Υψηλή πυκνότητα συσκευασίας

<i>Coordination Number</i>	<i>Cation–Anion Radius Ratio</i>	<i>Coordination Geometry</i>
2	<0.155	
3	0.155–0.225	
4	0.225–0.414	
6	0.414–0.732	
8	0.732–1.0	

Source: W. D. Kingery, H. K. Bowen, and D. R. Uhlmann, *Introduction to Ceramics*, 2nd edition. Copyright © 1976 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.

# Σχέση Λόγου Ιοντικών Ακτίνων – Συντονισμού

- Ο αριθμός ένταξης καθορίζει τη γεωμετρία των ιόντων
- Ελέγχει τη σταθερότητα και τις ιδιότητες
- Βασική έννοια στη δομή των κεραμικών υλικών

**Table 12.3**  
Ionic Radii for Several  
Cations and Anions  
for a Coordination  
Number of 6

<i>Cation</i>	<i>Ionic Radius (nm)</i>	<i>Anion</i>	<i>Ionic Radius (nm)</i>
Al <sup>3+</sup>	0.053	Br <sup>-</sup>	0.196
Ba <sup>2+</sup>	0.136	Cl <sup>-</sup>	0.181
Ca <sup>2+</sup>	0.100	F <sup>-</sup>	0.133
Cs <sup>+</sup>	0.170	I <sup>-</sup>	0.220
Fe <sup>2+</sup>	0.077	O <sup>2-</sup>	0.140
Fe <sup>3+</sup>	0.069	S <sup>2-</sup>	0.184
K <sup>+</sup>	0.138		
Mg <sup>2+</sup>	0.072		
Mn <sup>2+</sup>	0.067		
Na <sup>+</sup>	0.102		
Ni <sup>2+</sup>	0.069		
Si <sup>4+</sup>	0.040		
Ti <sup>4+</sup>	0.061		

## Άσκηση:

Για μια κεραμική ένωση, ποια είναι τα δύο χαρακτηριστικά των συστατικών ιόντων που καθορίζουν την κρυσταλλική δομή;

# Σχέση Λόγου Ιοντικών Ακτίνων – Συντονισμού

## Άσκηση:

Για μια κεραμική ένωση, ποια είναι τα δύο χαρακτηριστικά των συστατικών ιόντων που καθορίζουν την κρυσταλλική δομή;

## Απάντηση:

Τα δύο βασικά χαρακτηριστικά είναι:

### **Ο λόγος των ιοντικών ακτίνων ( $r_c/r_A$ )**

Καθορίζει τον πιθανό αριθμό συντονισμού και τη γεωμετρία της δομής.

### **Το ηλεκτρικό φορτίο των ιόντων**

Πρέπει να ικανοποιείται η ηλεκτρική ουδετερότητα του κρυστάλλου.

Επηρεάζει τη σταθερότητα της δομής.

## Άσκηση:

Δείξτε ότι ο ελάχιστος λόγος ακτίνων ανιόντος – κατιόντος για αριθμό ένταξης 3 (τριγωνικός επίπεδος) είναι 0.155.

# Σχέση Λόγου Ιοντικών Ακτίνων – Συντονισμού

## Άσκηση:

Δείξτε ότι ο ελάχιστος λόγος ακτίνων ανιόντος – κατιόντος για αριθμό ένταξης 3 είναι 0.155.

## Απάντηση:

Το **κατιόν** βρίσκεται στο κέντρο.

Περιβάλλεται από **3 ανιόντα** που σχηματίζουν **ισόπλευρο τρίγωνο**.

$r_A$  = ακτίνα ανιόντος

$r_C$  = ακτίνα κατιόντος

Απόσταση κέντρου ανιόντος  $\rightarrow$  σημείο επαφής:  $AP = r_A$

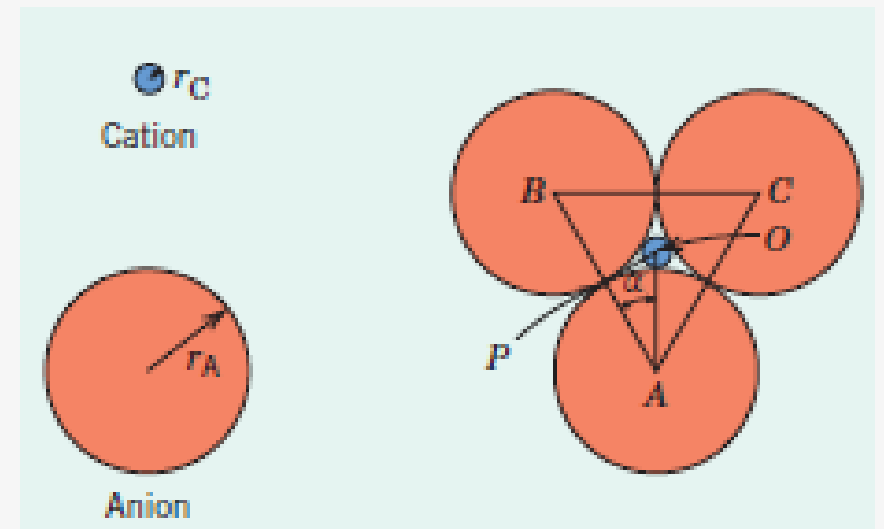
Απόσταση κέντρου ανιόντος  $\rightarrow$  κέντρου κατιόντος:  $AO = r_A + r_C$

Η γωνία στο τρίγωνο είναι  $60^\circ$ , άρα στο ορθογώνιο τρίγωνο:  $\alpha = 30^\circ$

$$\frac{AP}{AO} = \cos 30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

Άρα:

$$\frac{r_A}{r_A + r_C} = \frac{\sqrt{3}}{2} \rightarrow \frac{r_C}{r_A} = \frac{\sqrt{3}}{2} - 1 = 0.155$$



# Δομές Κεραμικών Υλικών

- Εισαγωγή στις κρυσταλλικές δομές κεραμικών
- Σχέση δομής – ιδιοτήτων
- Παραδείγματα βασικών δομών

# Βασικές Έννοιες Κρυσταλλικής Δομής

- **Πλέγμα** είναι ένα γεωμετρικό, περιοδικό σύστημα σημείων στον χώρο που δείχνει πού μπορούν να βρίσκονται τα άτομα σε έναν κρύσταλλο.  
**Κρύσταλλος = πλέγμα + άτομα**
- **Μοναδιαία κυψελίδα** είναι το μικρότερο τμήμα του πλέγματος που όταν επαναλαμβάνεται δημιουργεί ολόκληρο τον κρύσταλλο.
- Αν μετακινήσουμε τη μοναδιαία κυψελίδα κατά x, y και z άξονα παίρνουμε ολόκληρη την κρυσταλλική δομή.
- Όλες οι κυψελίδες είναι ίδιες.
- Ο κρύσταλλος έχει περιοδικότητα.

# Πώς Μετράμε Άτομα σε Μια Κυψελίδα

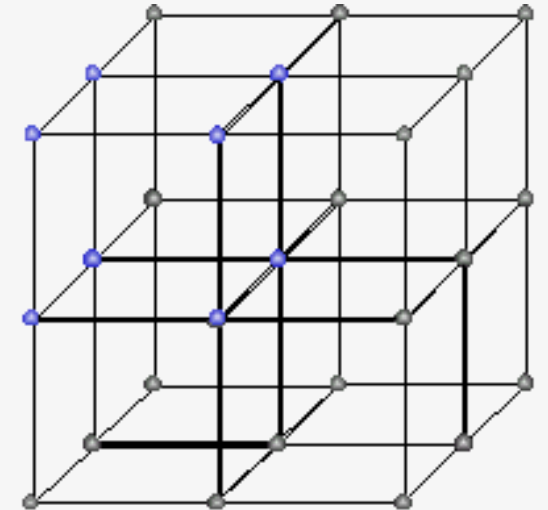
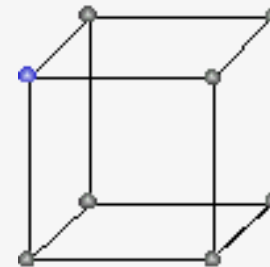
Πώς μοιράζεται ένα άτομο στη μοναδιαία κυψελίδα

Άτομο στη **γωνία** → το μοιράζονται **8** κυψελίδες → μετρά **1/8**

Άτομο στο **κέντρο ακμής** → το μοιράζονται **4** κυψελίδες → μετρά **1/4**

Άτομο στο **κέντρο έδρας** → το μοιράζονται **2** κυψελίδες → μετρά **1/2**

Άτομο **ολόκληρο μέσα** → ανήκει σε **μία** κυψελίδα → μετρά **1**

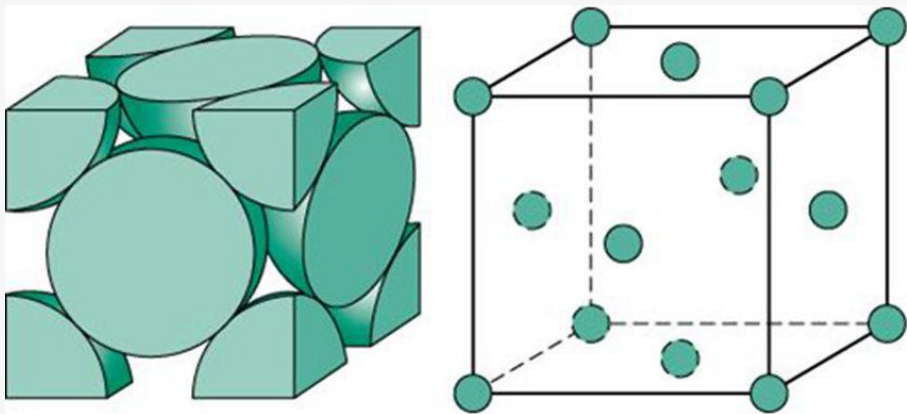


# Κυβικές Κρυσταλλικές Δομές

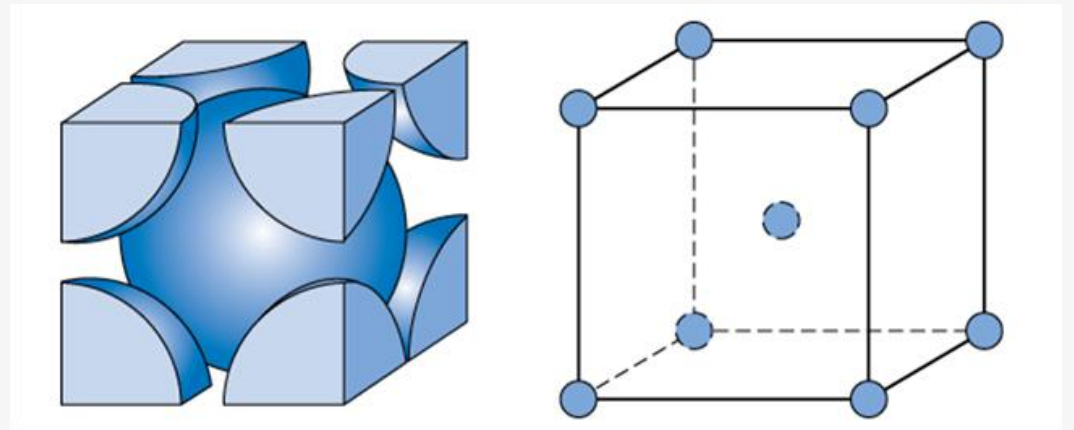
Υπάρχουν τρεις βασικοί τύποι:

- **Simple Cubic (SC)**
- **Body-Centered Cubic (BCC)**
- **Face-Centered Cubic (FCC)**

**Face-Centered Cubic (FCC)**



**Body-Centered Cubic (BCC)**



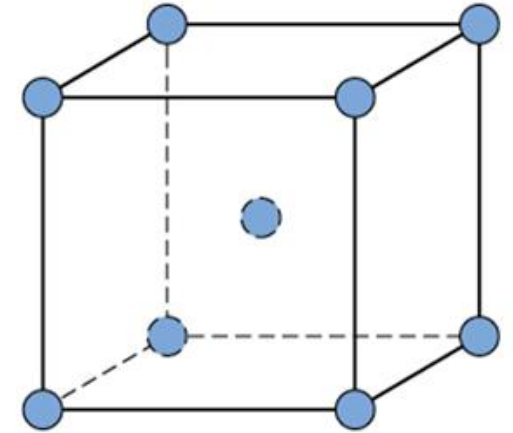
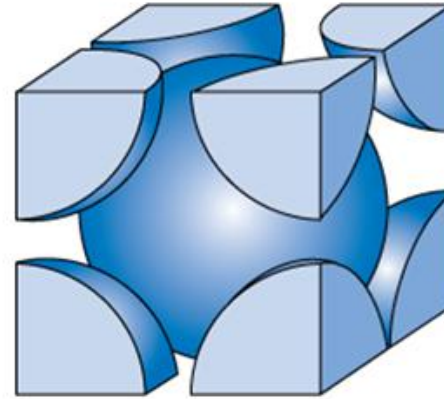
# Δομή BCC (Body-Centered Cubic)

## Θέσεις ατόμων

- 8 άτομα στις **γωνίες** του κύβου
- 1 άτομο στο **κέντρο** της κυψελίδας

## Υπολογισμός ατόμων ανά κυψελίδα

$$8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2 \text{ άτομα}$$



## Συντονισμός: CN = 8

Κάθε άτομο περιβάλλεται από 8 πλησιέστερους γείτονες.

Συντελεστής ατομικής πλήρωσης

$$\text{APF} = \frac{\text{Όγκος των ατόμων της μοναδιαίας κυψελίδας}}{\text{Όγκος μοναδιαίας κυψελίδας}} = 0.68$$

# Δομή FCC (Face-Centered Cubic)

## Θέσεις ατόμων

- 8 άτομα στις **γωνίες** του κύβου
- 6 άτομα στα **κέντρα των εδρών**

## Υπολογισμός ατόμων ανά κυψελίδα

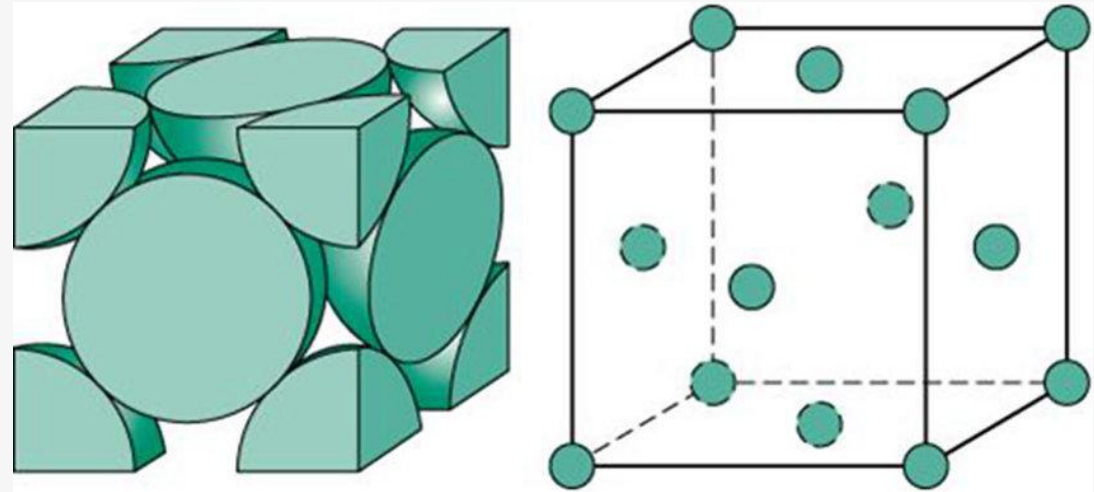
$$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4 \text{ άτομα}$$

## Συντονισμός

$$\text{CN} = 12$$

Κάθε άτομο περιβάλλεται από **12 πλησιέστερους γείτονες** σε ίση απόσταση.

$$\text{APF} \approx 0.74$$



# Δομή CCP (Cubic Close Packed)

Η δομή **CCP** είναι ισοδύναμη με την **FCC**:

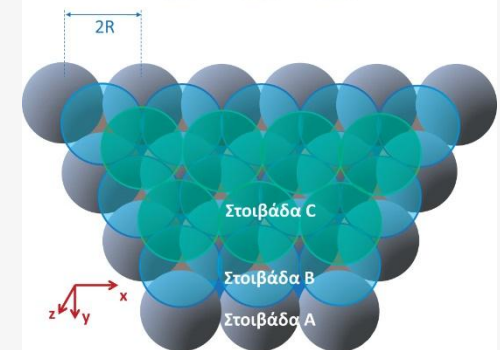
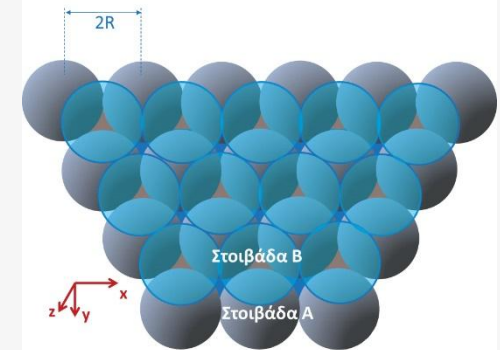
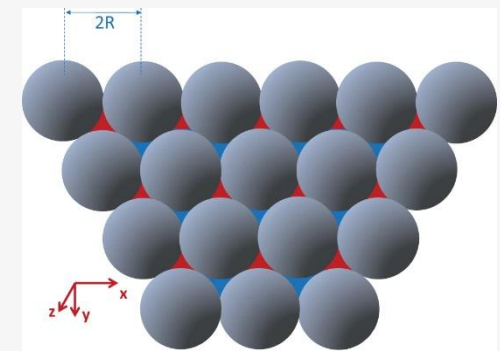
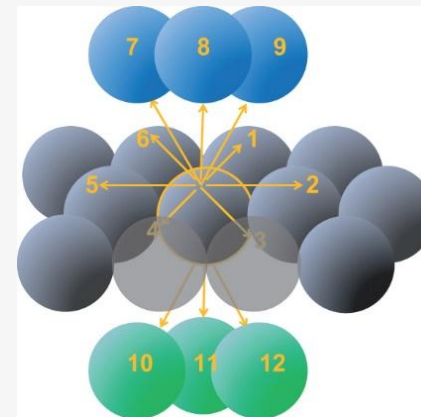
- ίδιος αριθμός ατόμων (4 ανά κυψελίδα)

- ίδιος συντονισμός (**CN = 12**)

- Τρισδιάστατη διάταξη του τύπου ABCABC (επαναλαμβανόμενη τριπλή αλληλουχία επιπέδων στοιβάδων)

Κάθε άτομο εφάπτεται με 6 άτομα του επιπέδου του (επίπεδη στοιβάδα υψηλής πυκνότητας), με 3 άτομα της στοιβάδας που βρίσκεται ακριβώς από πάνω του και με 3 άτομα της στοιβάδας που βρίσκεται ακριβώς από κάτω του

- ίδιος **APF = 0.74**



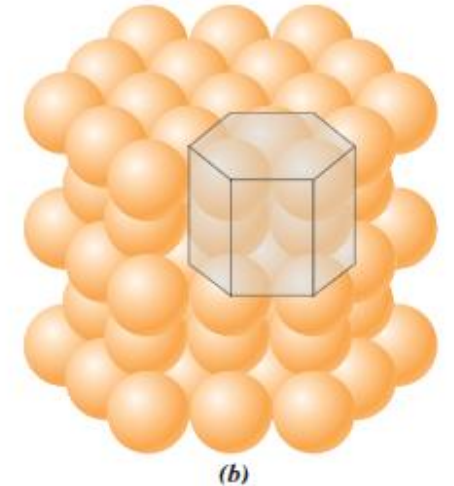
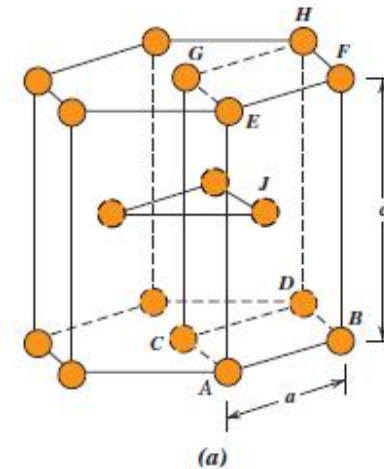
# Εξαγωνική Δομή Μέγιστης Πυκνότητας (HCP)

Άτομα ανά κυψελίδα: 6

Συντονισμός: CN = 12

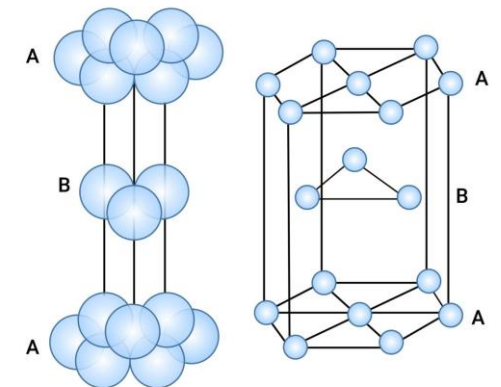
APF  $\approx 0.74$   $\rightarrow$  ίδια πυκνότητα με FCC

Όχι κυβική συμμετρία (εξαγωνική)



Τρισδιάστατη διάταξη του τύπου ABABAB (επαναλαμβανόμενη τριπλή αλληλουχία επίπεδων στοιβάδων)

ABABA.... of hcp arrangement of spheres. Metals like magnesium, zinc, etc. adopt this type of arrangement



# Ενδοπλεγματικές Θέσεις (Interstitial Sites)

Οι ενδοπλεγματικές θέσεις είναι τα κενά ανάμεσα στα άτομα ενός κρυσταλλικού πλέγματος όπου μπορούν να τοποθετηθούν μικρότερα άτομα ή ιόντα.

Τετράεδρο → 4 γείτονες (CN = 4)

Οκτάεδρο → 6 γείτονες (CN = 6)

**Τετραεδρική Θέση (CN = 4)**

Το κενό περιβάλλεται από 4 άτομα.

Τα άτομα σχηματίζουν τετράεδρο.

Συντονισμός = 4.

Στο FCC:

Τετραεδρικές θέσεις =  $2N$  (8 ανά κυψελίδα).

**Οκταεδρική Θέση (CN = 6)**

Το κενό περιβάλλεται από 6 άτομα.

Τα άτομα σχηματίζουν οκτάεδρο.

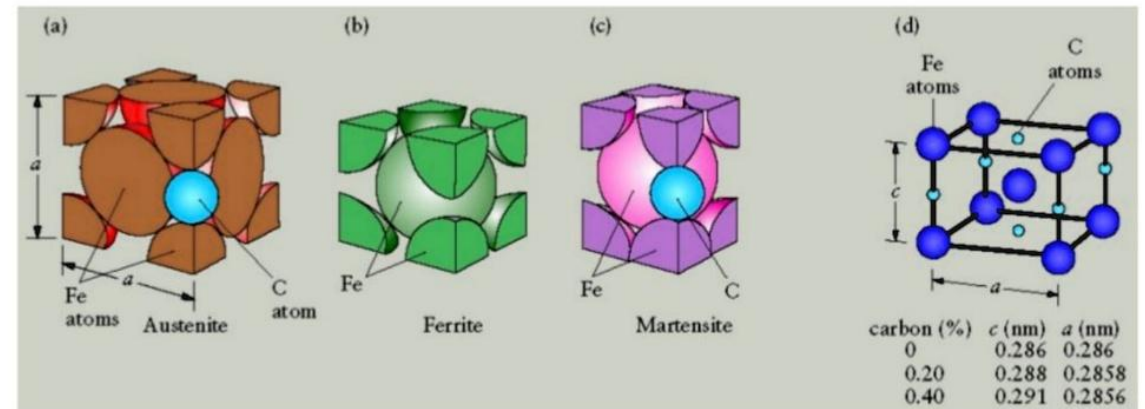
Συντονισμός = 6.

Στο FCC:

Οκταεδρικές θέσεις =  $N$  (4 ανά κυψελίδα).

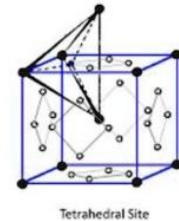
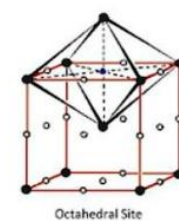
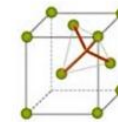
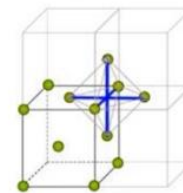
Calculate octahedral and tetrahedral sites for FCC and BCC structure.

## Interstitial sites



Octahedron - octahedral site =  $O_6$

Tetrahedron - tetrahedral site =  $T_4$



FCC

BCC

# Ενδοπλεγματικές Θέσεις (Interstitial Sites)

Το **κέντρο** ενός τετραέδρου ή οκταέδρου που σχηματίζεται από γειτονικά άτομα είναι μια **ενδοπλεγματική θέση**, δηλαδή ένα **κενό στο πλέγμα** όπου μπορεί να μπει μικρότερο άτομο/ión.

## Υπολογισμός για FCC

• **1 στο κέντρο της κυψελίδας** → μετρά ολόκληρη

• **12 στα μέσα των ακμών**

- κάθε ακμή μοιράζεται σε **4 κυψελίδες** άρα συνεισφορά:  $12 \times \frac{1}{4} = 3$

**Σύνολο** :  $1 + 3 = 4$  οκταεδρικές θέσεις

Στην FCC υπάρχουν **4 άτομα/κυψελίδα**, άρα:  $N = 4$  οκταεδρικές θέσεις

Οι τετραεδρικές θέσεις:

- βρίσκονται **εξ ολοκλήρου μέσα στην κυψελίδα**
- είναι **8 συνολικά**
- **δεν μοιράζονται** με άλλες κυψελίδες

**Σύνολο** : 8 τετραεδρικές θέσεις

# Δομή τύπου NaCl

$$r_{\text{Na}^+} = 0.102 \text{ nm}$$

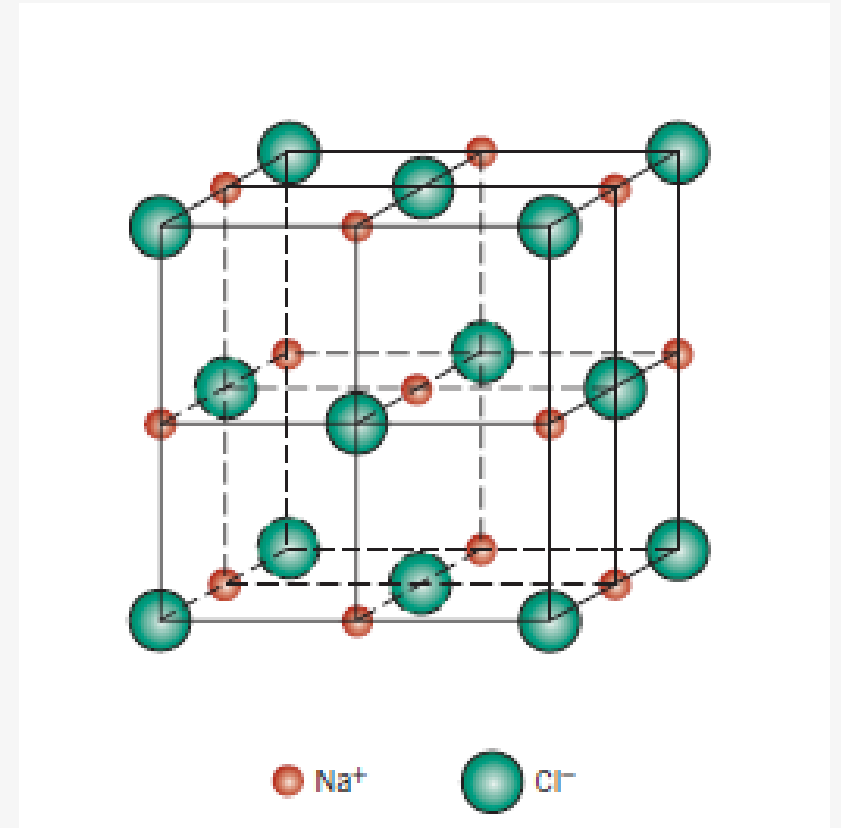
$$r_{\text{Cl}^-} = 0.181 \text{ nm}$$

$$r_C/r_A = 0.564$$

Κάθε κατιόν περιβάλλεται από 6 ανιόντα σε οκταεδρική διάταξη

Ο λόγος ιονικών ακτίνων  $r_C/r_A \approx 0.414-0.732$  επιτρέπει συντονισμό 6

- Δομή τύπου rock-salt (FCC υποπλέγμα ανιόντων)
- Κατιόντα σε οκταεδρικές θέσεις
- Συντονισμός 6:6 (οκταεδρική γεωμετρία)
- Λόγος ιονικών ακτίνων  $r_C/r_A \approx 0.414-0.732$
- Παραδείγματα: NaCl, MgO
- Υψηλό σημείο τήξης και ηλεκτρική μόνωση λόγω ισχυρού ιοντικού δεσμού



# Δομή τύπου CsCl

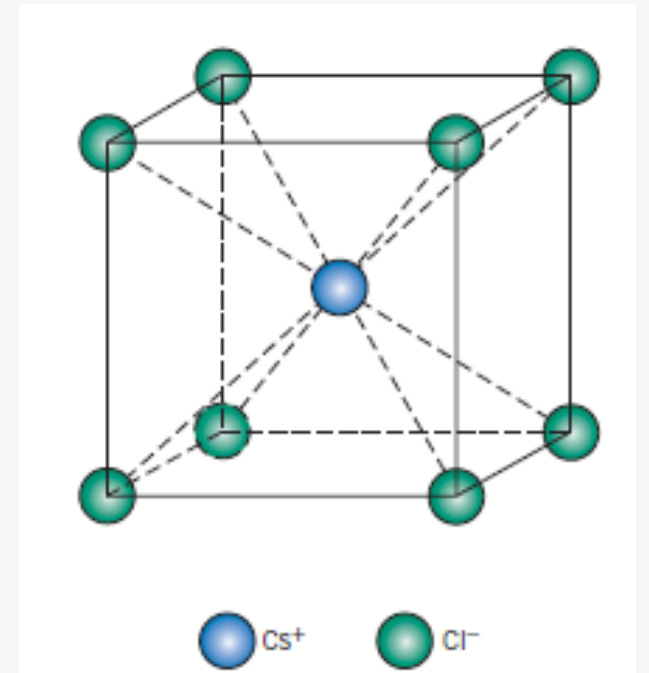
$$r_{\text{Cs}^+} = 0.167 \text{ nm}$$

$$r_{\text{Cl}^-} = 0.181 \text{ nm}$$

$$r_{\text{C}}/r_{\text{A}} = 0.92$$

Ο λόγος ιοντικών ακτίνων στο CsCl είναι περίπου 0.92, τιμή που ευνοεί συντονισμό 8 και κυβική δομή CsCl.

- Κυβική απλή δομή (BCC-type διάταξη ιόντων)
- Κατιόν στο κέντρο κύβου – ανιόντα στις κορυφές
- Συντονισμός 8:8 (κυβική γεωμετρία)
- Λόγος ιοντικών ακτίνων  $r_{\text{C}}/r_{\text{A}} > 0.732$
- Παράδειγμα: CsCl
- Υψηλή ηλεκτροστατική σταθερότητα λόγω μεγάλου συντονισμού



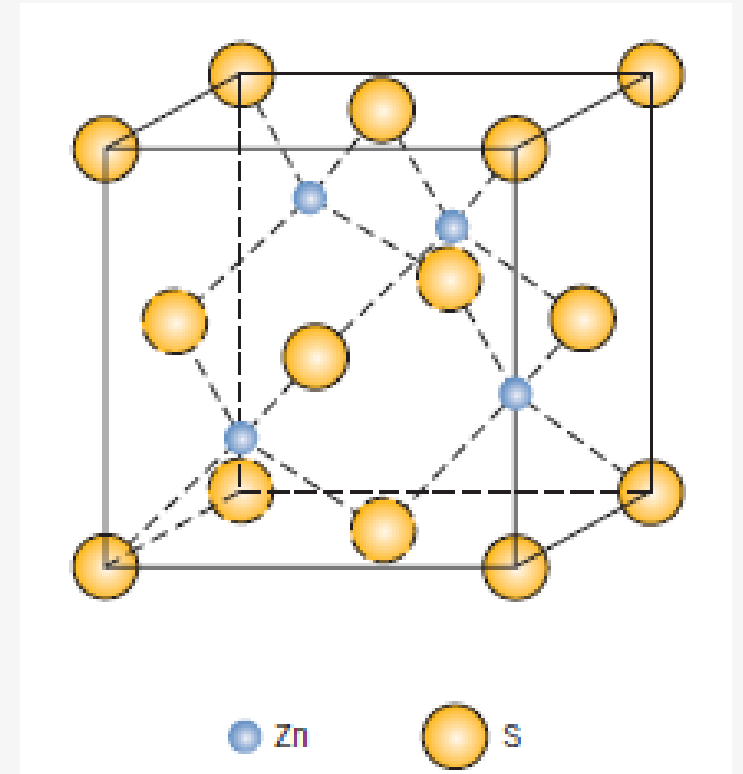
# Δομή τύπου ZnS (σφαλερίτης)

$$r_{\text{Zn}^{2+}} = 0.060 \text{ nm}$$

$$r_{\text{S}^{2-}} = 0.181 \text{ nm}$$

$$r_{\text{C}}/r_{\text{A}} = 0.33$$

- Κυβική δομή με τετραεδρικές θέσεις κατιόντων
- Κατιόντα  $\text{Zn}^{2+}$  σε τετραεδρικές θέσεις του FCC υποπλέγματος ανιόντων  $\text{S}^{2-}$
- Συντονισμός 4:4 (τετραεδρική γεωμετρία)
- Λόγος ιονικών ακτίνων  $r_{\text{C}}/r_{\text{A}} \approx 0.33 \rightarrow$  εύρος 0.225–0.414
- Μερικώς ομοιοπολικός χαρακτήρας δεσμού
- Παραδείγματα: ZnS, SiC, GaAs



# Δομή φθορίτη ( $\text{CaF}_2$ )

$$r_{\text{Ca}^{2+}} = 0.112 \text{ nm}$$

$$r_{\text{F}^-} = 0.133 \text{ nm}$$

$$r_{\text{C}}/r_{\text{A}} = 0.84$$

Τα  $\text{Ca}^{2+}$  σχηματίζουν πλέγμα FCC.

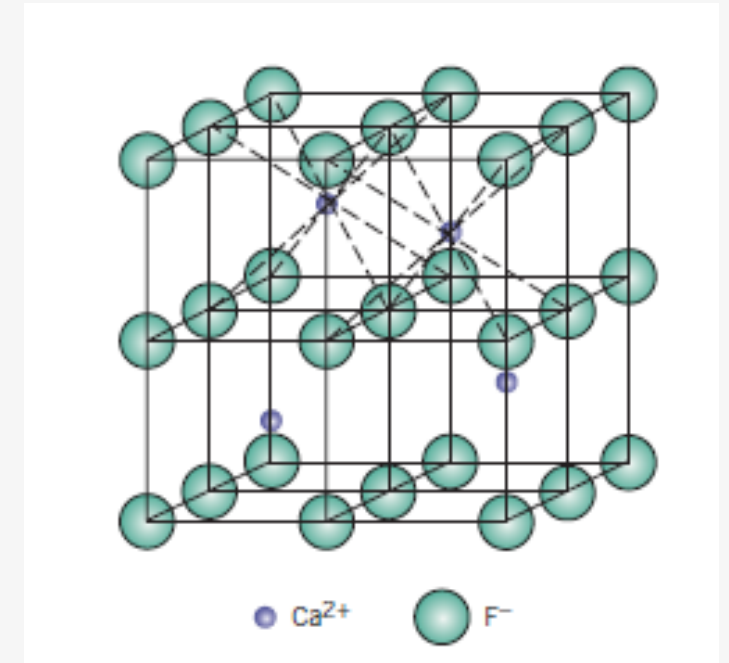
Κάθε  $\text{Ca}^{2+}$  περιβάλλεται από 8  $\text{F}^-$  → κυβικός συντονισμός (CN = 8).

Τα  $\text{F}^-$  καταλαμβάνουν τετραεδρικές θέσεις του πλέγματος.

Κάθε  $\text{F}^-$  περιβάλλεται από 4  $\text{Ca}^{2+}$  → τετραεδρικός συντονισμός (CN = 4).

Συνεπώς, στη δομή  $\text{CaF}_2$  ισχύει: 8 – 4.

- Κυβική δομή με κατιόντα σε θέσεις FCC
- Ανιόντα  $\text{F}^-$  σε όλες τις τετραεδρικές θέσεις του πλέγματος
- Συντονισμός:  $\text{Ca}^{2+} \rightarrow 8$ ,  $\text{F}^- \rightarrow 4$
- Λόγος ιονικών ακτίνων  $r_{\text{C}}/r_{\text{A}} \approx 0.84$
- Υψηλή συμμετρία και ισχυρή ιοντική σταθερότητα
- Παραδείγματα:  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$  (κυβική φάση),  $\text{UO}_2$



# Δομή περοβσκίτη ( $\text{ABO}_3$ )

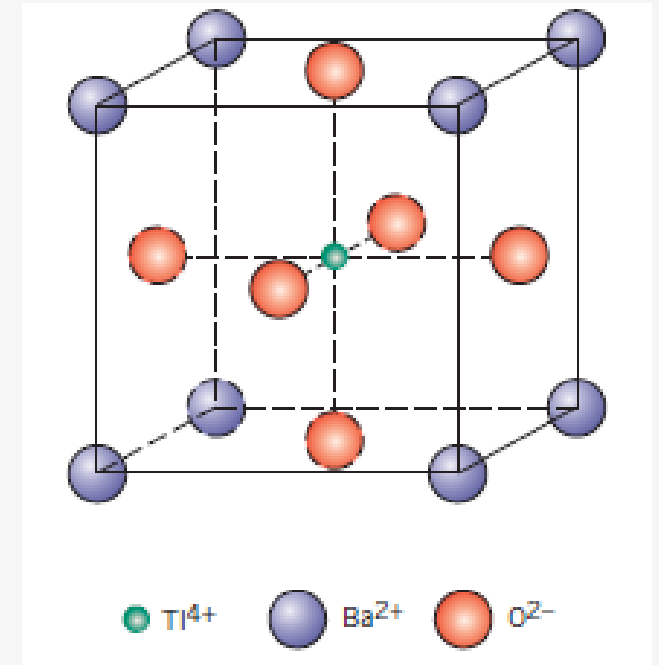
- Κυβική δομή με κατιόν A στις κορυφές του κύβου
- Κατιόν B στο κέντρο του κύβου
- Ιόντα  $\text{O}^{2-}$  στα κέντρα των εδρών
- Συντονισμός:
- B  $\rightarrow$  6 (οκταεδρικός,  $\text{BO}_6$ )

Το B περιβάλλεται από 6 O στα κέντρα εδρών  $\rightarrow$  οκτάεδρο

- A  $\rightarrow$  12 (κυβοοκταεδρικός)

Το A περιβάλλεται από 12 O  $\rightarrow$  κυβοοκταεδρικό περιβάλλον.

- Πιεζοηλεκτρικές και διηλεκτρικές ιδιότητες



**A-site**  $\rightarrow$   $\text{Ba}^{2+}$  (στις κορυφές)

**B-site**  $\rightarrow$   $\text{Ti}^{4+}$  (στο κέντρο)

$\text{O}^{2-}$   $\rightarrow$  κέντρα εδρών

# Δομές Κεραμικών Υλικών

## Άσκησης:

- Βασιζόμενοι στα ιοντικά φορτία και στις ιοντικές ακτίνες, προβλέψτε τις κρυσταλλικές δομές για τα παρακάτω υλικά:  
(α) CsI    (β) NiO    (γ) KI    (δ) NiS
- Η κρυσταλλική **δομή zinc blende (σφαλερίτης, ZnS)** προέρχεται από την διάταξη μέγιστης πυκνότητας των επιπέδων των ανιόντων.
  - (α) Η ακολουθία στοίβαξης για αυτή τη δομή θα είναι FCC ή HCP; Γιατί;
  - (β) Τα κατιόντα θα καταλαμβάνουν τετραεδρικές ή οκταεδρικές θέσεις; Γιατί;
  - (γ) Τι κλάσμα των διαθέσιμων θέσεων θα καταλαμβάνεται;

# Σχέση Λόγου Ιοντικών Ακτίνων – Συντονισμού

## Άσκηση:

Βασιζόμενοι στα ιοντικά φορτία και στις ιοντικές ακτίνες (Πίνακας), προβλέψτε τις κρυσταλλικές δομές για τα παρακάτω υλικά:

(α) CsI    (β) NiO    (γ) KI    (δ) NiS

## Απάντηση:

(α) Λόγος ακτίνων:  $\frac{r_{Cs^+}}{r_{I^-}} = \frac{0.170}{0.220} = 0.77 \rightarrow CN = 8 \rightarrow$  κυβικός συντονισμός  $\rightarrow$  δόμη τύπου CsCl (8:8)

Στοιχειομετρία:  $8 \times 1/8 = 1$

1 στο κέντρο άρα 1:1 ✓

(β) Λόγος ακτίνων:  $\frac{r_{Ni^{2+}}}{r_{O^{2-}}} = \frac{0.069}{0.140} = 0.49 \rightarrow CN = 6 \rightarrow$  οκταεδρική γεωμετρία  $\rightarrow$  δόμη τύπου NaCl (6:6)

Στοιχειομετρία: FCC έχει 4 ανιόντα και 4 οκταεδρικές θέσεις άρα 4 κατιόντα  $\rightarrow 4:4 \rightarrow 1:1$  ✓

# Σχέση Λόγου Ιοντικών Ακτίνων – Συντονισμού

(γ) Λόγος ακτίνων:  $\frac{r_{K^+}}{r_{I^-}} = \frac{0.138}{0.220} = 0.63 \rightarrow CN = 6 \rightarrow$  οκταεδρική γεωμετρία  $\rightarrow$  δόμη τύπου NaCl (6:6)

FCC:

4 ανιόντα

4 οκταεδρικές  $\rightarrow$  4 κατιόντα

Στοιχειομετρία 4:4  $\rightarrow$  1:1 ✓

(δ) Λόγος ακτίνων:  $\frac{r_{Ni^{2+}}}{r_{S^{2-}}} = \frac{0.069}{0.184} = 0.38 \rightarrow$  τετραεδρική γεωμετρία  $\rightarrow$  δόμη τύπου ZnS (4:4)

FCC:

4 ανιόντα

8 τετραεδρικές θέσεις

Γεμίζουμε τις μισές:

$8 / 2 = 4$  κατιόντα

Στοιχειομετρία 4:4  $\rightarrow$  1:1 ✓

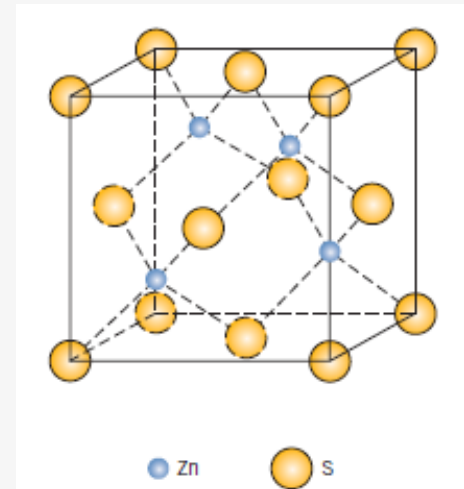
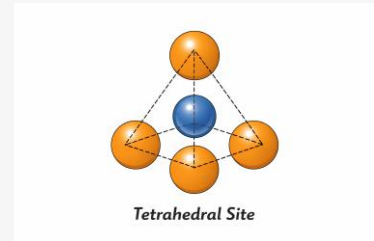
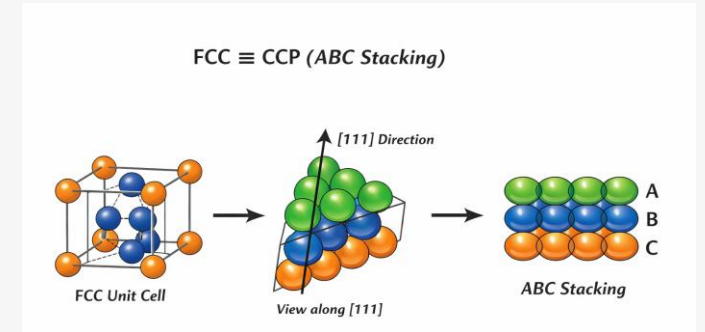
# Δομές Κεραμικών Υλικών

## Άσκηση:

- Η κρυσταλλική δομή zinc blende (σφαλερίτης, ZnS) προέρχεται από την διάταξη μέγιστης πυκνότητας των επιπέδων των ανιόντων.
- (α) Η ακολουθία στοίβαξης για αυτή τη δομή θα είναι FCC ή HCP; Γιατί;
- (β) Τα κατιόντα θα καταλαμβάνουν τετραεδρικές ή οκταεδρικές θέσεις; Γιατί;
- (γ) Τι κλάσμα των διαθέσιμων θέσεων θα καταλαμβάνεται;

## Απάντηση:

- (α) Τα ανιόντα  $S^{2-}$  κάνουν FCC (CCP) πλέγμα. Τα κατιόντα  $Zn^{2+}$  μπαίνουν σε τετραεδρικές θέσεις.
- (β) Στη δομή zinc blende κάθε κατιόν έχει συντονισμό 4 (τετραεδρικό περιβάλλον) και κάθε ανιόν επίσης συντονισμό 4. Αν γέμιζαν οκταεδρικές θέσεις, ο συντονισμός θα ήταν 6 (τύπου NaCl), που δεν είναι η zinc blende.
- (γ) Σε ένα FCC/CCP πλέγμα ανιόντων υπάρχουν:  
8 τετραεδρικές θέσεις. Για ZnS απαιτείται αναλογία 1:1 (ίσα κατιόντα και ανιόντα), άρα χρειάζονται 4 κατιόντα άρα γεμίζουν οι μισές τετραεδρικές θέσεις.



# Χαρακτηριστικά Κεραμικών Υλικών

## Ιοντικός και/ή ομοιοπολικός δεσμός

Τα κεραμικά υλικά χαρακτηρίζονται κυρίως από ιονικούς και ομοιοπολικούς δεσμούς, οι οποίοι είναι ισχυροί και κατευθυντικοί και γι' αυτό προσδίδουν υψηλή σκληρότητα και θερμική αντοχή, αλλά και ψαθυρή συμπεριφορά.

## Ηλεκτρική ουδετερότητα πλέγματος

Για να είναι σταθερή μια κεραμική δομή, πρέπει να υπάρχει ηλεκτρική ουδετερότητα στο πλέγμα, δηλαδή το συνολικό φορτίο κατιόντων και ανιόντων να μηδενίζεται.

## Συντονισμός κατιόντων – ανιόντων

Επιπλέον, κάθε ιόν περιβάλλεται από συγκεκριμένο αριθμό ιόντων αντίθετου φορτίου — αυτός είναι ο συντονισμός κατιόντων-ανιόντων, ο οποίος εξαρτάται από τον λόγο ιονικών ακτίνων και καθορίζει τη γεωμετρία της δομής.

## Σταθερότητα κρυσταλλικής διάταξης

Όλοι αυτοί οι παράγοντες μαζί οδηγούν σε μια σταθερή κρυσταλλική διάταξη, η οποία τελικά καθορίζει τις ιδιότητες του κεραμικού υλικού.

# Βιβλιογραφία

## **Διδακτικά συγγράμματα:**

- Callister, W.D. & Rethwisch, D.G., *Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών*, Ελληνική μετάφραση, Εκδόσεις Τζιόλα.

## **Figures adapted from:**

- W.D. Callister & D.G. Rethwisch, *Materials Science and Engineering: An Introduction*, Wiley.

Ευχαριστώ για την προσοχή σας!