ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

Υλικά Ι: Παρόν και Μέλλον

Πρόοδος 16 Δεκεμβρίου 2006

(Τα θέματα είναι ισοδύναμα)

1. α) Να γράψετε αναλυτικά την ηλεκτρονική δομή των ατόμων: $_{19}K$, $_{14}Si$, $_{24}Cr$, $_{7}N$, $_{29}Cu$.

   β) Να προσδιορίσετε την ομάδα του περιοδικού πίνακα στην οποία ανήκουν τα άτομα με ηλεκτρονική δομή:
   $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$

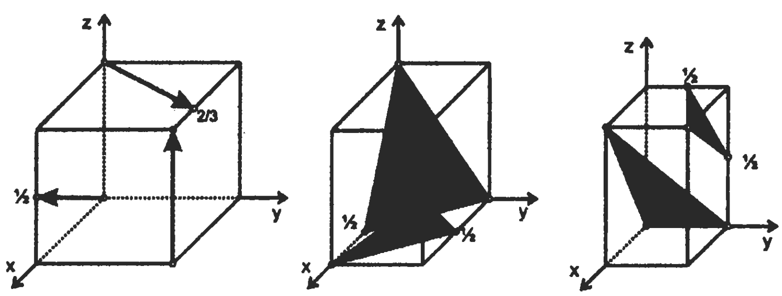
2. α) Περιγράψτε πως διαφοροποιούνται οι ιοντικοί, οι ομοιοπολικοί, οι μεταλλικοί και οι van der Waals δεσμοί όσον αφορά την ενέργεια δεσμού και την κατευθυντικότητα.

   β) Τι είδη δεσμών συναντάμε στα υλικά: αλουμίνιο, πυρίτιο, πολυαιθυλένιο, νερό και γυαλί;

3. α) Να σχεδιάσετε τις διευθύνσεις [111], [110], $[\bar{2}11]$, [221] σε μία ορθορομβική μοναδιαία κυψελίδα.

   β) Να σχεδιάσετε τα επίπεδα (111), $(\bar{1}20)$, (101) σε μία κυβική μοναδιαία κυψελίδα.

   γ) Βρείτε σε ποιο κρυσταλλογραφικό σύστημα ανήκουν οι παρακάτω κυψελίδες καθώς και τους δείκτες που καθορίζουν τις διευθύνσεις (ή τους δείκτες Miller των επιπέδων) που είναι σχεδιασμένες στο εσωτερικό τους.



(i) (ii) (iii)

4. α) Υπολογίστε τον αριθμό ατομικής πλήρωσης (APF) για την BCC κυβική δομή

   β) Πόσα άτομα ανήκουν αντίστοιχα σε μια FCC, BCC, και HPC κυψελίδα; Δικαιολογήστε την απάντηση σας

   γ) Υπολογίστε την επιφανειακή πυκνότητα PD για τα επίπεδα (111), (001), (110) για μία κυβική BCC κυψελίδα.

5. Έστω ότι η δυναμική ενέργεια ενός δεσμού δίνεται από την σχέση $U(r) = -\frac{4}{r^2} + \frac{1}{2r^4}$ σε μονάδες eV όταν η ακτίνα r εκφράζεται σε nm. Μπορεί το δυναμικό αυτό να περιγράφει ένα ιοντικό δεσμό; Να σχεδιάσετε ποιοτικά το δυναμικό U(r) και να εξηγήσετε σε ποιες δυνάμεις (ελκτικές – απωστικές) αναφέρεται ο κάθε όρος. Ποια θα είναι η απόσταση ισορροπίας ανάμεσα στα δύο ιόντα και ποια η αντίστοιχη ενέργεια αλληλεπίδρασης;

Λύσεις

1α) $_{19}K: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$, $_{14}Si: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$, $_{24}Cr: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^2$, $_7N: 1s^2 2s^2 2p^3$

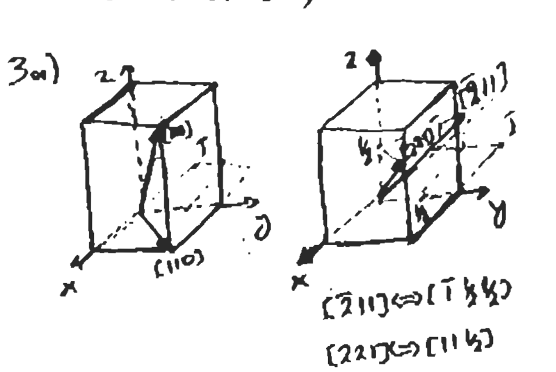
$_{29}Cu: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

β) ΙΙΑ, ΕΥΓΕΝΕΣ ΑΕΡΙΟ, ΙV Α

2α) ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΔΕΣΜΟΥ: ΙΟΝΤΙΚΟΙ > ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΙ > ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΙ > VAN DER WAALS

ΚΑΤΕΥΘΥΝΤΙΚΟΤΗΤΑ: ΜΟΝΟ ΟΙ ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΙ

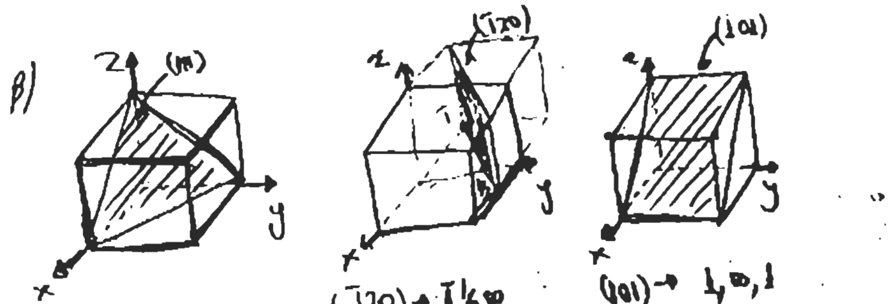
β) ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΣ, ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ, ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ, ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ + ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ (VAN DER WAALS) + ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΣ (ΙΟΝΤΙΚΟΣ 50%)

3α) 

[110]

$[\bar{2}11] \Leftrightarrow [\bar{1}\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}]$

$[221] \Leftrightarrow [11\tfrac{1}{2}]$

β) 

(111)

$(\bar{1}20) \to \bar{1}, \tfrac{1}{2}, \infty$

$(101) \to 1, \infty, 1$

γ) (i) ΚΥΒΙΚΟ, (ii) ΟΡΘΟΡΟΜΒΙΚΟ (iii) ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΟ

(i) $[1\,0\,\tfrac{1}{2}] \Leftrightarrow [201]$,

$[001] \to [2/3, 1, 0] \Leftrightarrow [230]$

(ii) $\bar{\tfrac{1}{2}}, \bar{1}, \tfrac{1}{2} \Rightarrow (\bar{2}\bar{1}2)$

(ΜΕΤΑΦ. ΣΥΣΤ. ΣΥΝΤ.) $\tfrac{1}{2}, 1, 1 \Rightarrow (211)$

(iii) (ΜΕΤΑΦ. ΣΥΣΤ. ΣΥΝΤ.) $\Rightarrow \bar{1}, \infty, 1 \Rightarrow (\bar{1}01)$

-//- -//- $1, \bar{\tfrac{1}{2}}, \bar{\tfrac{1}{2}} \Rightarrow (1\bar{2}\bar{2}) \Rightarrow (\bar{1}22)$

4) α) $(APF)_{BCC} = \dfrac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3}{(4/\sqrt{3}R)^3} = \dfrac{8\pi}{4 \cdot 16/\sqrt{3}} \cong 0.68$, β) $(\tfrac{1}{8}\cdot 8 + \tfrac{1}{2}\cdot 6 = 4)_{FCC}$, $(\tfrac{1}{8}\cdot 8 + 1 = 2)_{BCC}$, $(\tfrac{1}{6}\cdot 12 + \tfrac{1}{2}\cdot 2 + 3 = 6)_{HCP}$

γ) 

$\boxed{a = \frac{4}{\sqrt{3}}R \Rightarrow R = \frac{\sqrt{3}}{4}a}$

$$\boxed{(PD)_{(111)} = \frac{S + \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{6}\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^2}{\frac{\sqrt{2}}{2}a \cdot \frac{\sqrt{6}}{2}a}}$$

Το εμβαδόν (S) της τομής του κεντρικού ατόμου με το επίπεδο (111) μπορεί να υπολογιστεί ως εξής. Η εξίσωση του επιπέδου στην κυψελίδα είναι $x+y+z=1$ ενώ η διεύθυνση [111] τέμνει το επίπεδο (111) στο σημείο $\left.\begin{matrix} x_0 = y_0 = z_0 \\ x_0+y_0+z_0=1 \end{matrix}\right\} \Rightarrow x_0 = y_0 = z_0 = \frac{1}{3}$

Η απόσταση του σημείου τομής από το κέντρο του εσωτερικού ατόμου $(\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2})$ είναι:

$(\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}) - (\tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}, \tfrac{1}{3}) = (\tfrac{1}{6}, \tfrac{1}{6}, \tfrac{1}{6}) \Rightarrow h = \sqrt{3}\cdot\frac{1}{6}a$ έτσι η ακτίνα (z) της τομής του κεντρικού ατόμου με το επίπεδο (111) θα είναι $z^2 = R^2 - h^2$ ενώ το εμβαδόν της τομής:

$\boxed{S = \pi z^2 = \pi\left[\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^2 - \frac{3}{36}a^2\right] = \frac{60}{576}\cdot\pi\cdot a^2 \cong 0.327a^2}$ οπότε:

$$(PD)^{(BCC)}_{(111)} = \frac{0.327 + 0.0999}{\sqrt{12}/4} = \frac{0.421}{0.866} = 0.717$$

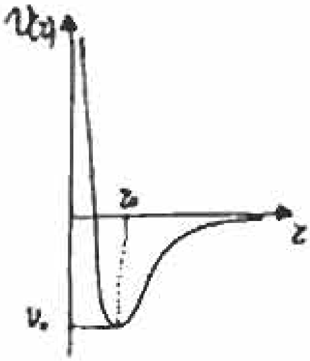
(001) $PD_{(001)} = \dfrac{4\cdot\frac{1}{4}(\pi R^2)}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}R\right)^2} = \dfrac{3\pi}{16} = 0.589$

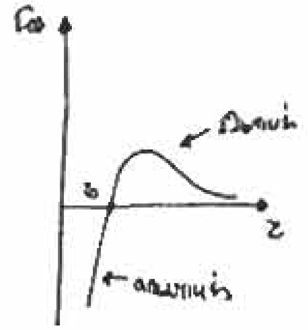
(110) $PD_{(110)} = \dfrac{4\frac{1}{4}(\pi R^2) + \pi R^2}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}R\right)\cdot\sqrt{2}\left(\frac{4}{\sqrt{3}}R\right)} = 0.833$

5) $U(r) = -\dfrac{4}{r^2} + \dfrac{1}{2r^4}$

Ο όρος που αντιστοιχεί σε ελκτικές δυνάμεις είναι ο $-\frac{4}{r^2}$ ενώ $F_{\alpha} = \dfrac{dU}{dr} = \overbrace{\dfrac{8}{r^3}}^{\text{ελκτικές}} - \underbrace{\dfrac{2}{r^5}}_{\text{απωστικές}}$

Οι ελκτικές δυνάμεις δεν είναι της μορφής $\frac{1}{r^2}$ οπότε ο δεσμός δεν είναι ιοντικός.





Στην απόσταση ισορροπίας $F_{\alpha} = 0 \rightarrow \left.\dfrac{dU(r)}{dr}\right|_{r_0} = 0 \Rightarrow \dfrac{8}{r_0^3} - \dfrac{2}{r_0^5} = 0 \Rightarrow r_0^2 = \dfrac{1}{4} \Rightarrow \boxed{r_0 = 0.5\ (nm)}$

Ενώ η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι

$$U(r_0) = -\frac{4}{r_0^2} + \frac{1}{2 r_0^4} = \left[\frac{4}{(1/4)} + \frac{1}{2(1/16)} \right] (eV) = (-16 + 8)\, eV = -8 eV$$