

Υλικά I: Παρόν και Μέλλον

Τελικές εξετάσεις 26^{ης} Ιανουαρίου 2007

(Τα θέματα είναι ισοδύναμα, απαντήστε στα 4 από τα 5)

- α) Να γράψετε αναλυτικά την ηλεκτρονική δομή των ατόμων:
 $_{14}\text{Si}$, $_{29}\text{Cu}$, $_{8}\text{O}$, $_{30}\text{Zn}$

β) Ποιο από τα παρακάτω άτομα είναι μέταλλο και γιατί;
i) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, ii) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$, iii) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

γ) Τι είδη δεσμών συναντάμε στα υλικά: Πυρίτιο, γυαλί, νερό και διαμάντι;
- α) Να σχεδιάσετε τις κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις [011], [111], [211] σε μία τετραγωνική μοναδιαία κυψελίδα.

β) Να σχεδιάσετε τα επίπεδα (002), (212), (121) σε μία ορθορομβική μοναδιαία κυψελίδα.

γ) Υπολογίστε την επιφανειακή πυκνότητα (PD) για τα επίπεδα (001) και (110) για μία κυβική FCC κυψελίδα.
- α) Έστω ένα γυάλινο και ένα μεταλλικό δοχείο που βρίσκονται στην ίδια θερμοκρασία. Εξηγήστε γιατί, αν τα ακουμπήσουμε θα αισθανθούμε ότι το ένα είναι πιο κρύο απ' το άλλο.

β) Ποιος είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός θερμικής αγωγής στο σίδηρο και ποιος στο γυαλί; Ποιος μηχανισμός είναι πιο αποδοτικός από τον άλλο; (δικαιολογήστε την απάντησή σας)

γ) Πως σχετίζεται ο γραμμικός συντελεστής θερμικής διαστολής α_l με την ενέργεια του δεσμού; (δικαιολογήστε την απάντησή σας)
- Έστω ότι η δυναμική ενέργεια ενός δεσμού δίνεται από την σχέση
$$U(r) = -\frac{10}{r^3} + \frac{6}{r^4}$$
 σε μονάδες eV όταν η ακτίνα r εκφράζεται σε nm.

α) Μπορεί το δυναμικό αυτό να περιγράφει ένα ιοντικό δεσμό; (δικαιολογήστε την απάντησή σας)

β) Να σχεδιάσετε ποιοτικά το δυναμικό $U(r)$ και να εκφράσετε αναλυτικά την συνολική δύναμη συναρτήσει της ακτίνας r προσδιορίζοντας ποιος όρος αναφέρεται στις ελκτικές και ποιος στις απωστικές δυνάμεις.

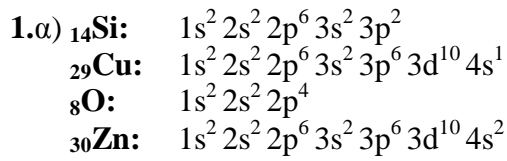
γ) Ποια θα είναι η απόσταση ισορροπίας ανάμεσα στα δύο ιόντα και ποια η αντίστοιχη ενέργεια αλληλεπίδρασης;
- Ένα αντικείμενο μάζας 500 kg πρόκειται να «κρεμαστεί» για τις ανάγκες μιας έκθεσης χρησιμοποιώντας ένα χαλύβδινο σύρμα.

α) Ποια θα πρέπει να είναι η ελάχιστη διάμετρος του σύρματος θεωρώντας τον παράγοντα ασφαλείας ίσο με 2;

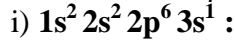
β) Ποια θα είναι σε αυτή την περίπτωση η διαμήκης και ποια η εγκάρσια παραμόρφωση του σύρματος;

(δίνονται ο συντελεστής Poisson $\nu = 0.3$, το μέτρο ελαστικότητας $E = 200 \text{ GPa}$ και η αντοχή διαρροής του χάλυβα $\sigma_y = 1000 \text{ MPa}$, επιτάχυνση βαρύτητας $g = 10 \text{ m/sec}^2$)

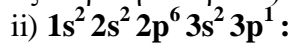
Υλικά Ι: Παρόν και Μέλλον
Τελικές εξετάσεις 26^{ης} Ιανουαρίου 2007
Λύσεις



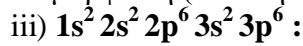
β) Ποιο από τα παρακάτω άτομα είναι μέταλλο και γιατί;



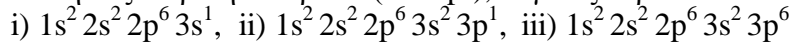
1e στην εξωτερική στοιβάδα (3s), ανήκει στην ομάδα IA \Rightarrow μέταλλο γιατί αποβάλλοντας 1 e το ιόν αποκτά σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση (8 e στην εξωτερική στοιβάδα)



3e στην εξωτερική στοιβάδα ($3s^2 3p^1$), ανήκει στην ομάδα IIIA \Rightarrow μέταλλο γιατί αποβάλλοντας 1 e το ιόν αποκτά σχετικά σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση (3s πλήρως συμπληρωμένη) ενώ αποβάλλοντας 3 e το ιόν αποκτά σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση (8 e στην εξωτερική στοιβάδα)

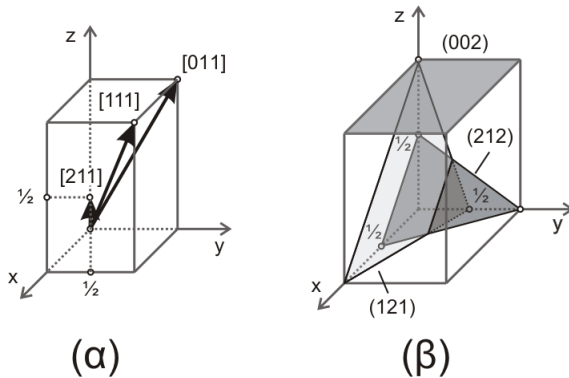


8e στην εξωτερική στοιβάδα ($3s^2 3p^6$), ευγενές αέριο



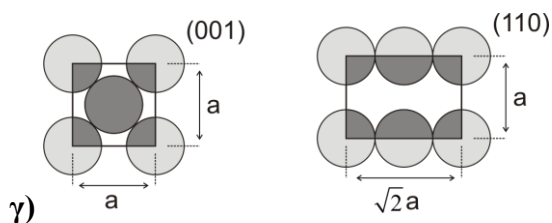
γ) **Πυρίτιο**: ομοιοπολικός, **γυαλί**: ομοιοπολικός, **νερό**: ομοιοπολικός και υδρογόνου και **διαμάντι**: ομοιοπολικός.

2.



β) $(002) \Leftrightarrow (001) \Rightarrow \infty, \infty, 1$
 $(212) \Rightarrow 1/2, 1, 1/2$
 $(121) \Rightarrow 1, 1/2, 1$

$$a = 2\sqrt{2}R$$



$$PD_{(001)} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\pi R^2\right) + \pi R^2}{(2\sqrt{2}R)^2} = 0.785,$$

$$PD_{(110)} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\pi R^2\right) + 2\left(\frac{1}{2}\pi R^2\right)}{(2\sqrt{2}R) \cdot \sqrt{2}(2\sqrt{2}R)} = 0.555$$

Υλικά Ι: Παρόν και Μέλλον

3. α) Σε τυπική θερμοκρασία δωματίου ($\sim 24^\circ\text{C}$) και τα δύο δοχεία θα βρίσκονται σε χαμηλότερη θερμοκρασία από το χέρι μας ($\sim 36^\circ\text{C}$) επομένως θα έχουμε μεταφορά θερμότητας από το χέρι μας προς αυτά. Λόγω της μεγαλύτερης θερμικής αγωγιμότητας του μετάλλου από το κεραμικό θα αισθανθούμε πιο κρύο το μεταλλικό δοχείο
- β) Στο σίδηρο η θερμότητα άγεται μέσω των ελευθέρων ηλεκτρονίων ενώ στο γυαλί κυρίαρχο ρόλο στις χαμηλές θερμοκρασίες παίζουν τα φωνόνια ενώ στις υψηλότερες σημαντικό ρόλο παίζει και η θερμική αγωγή μέσω ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Σε κάθε περίπτωση η θερμική αγωγή μέσω των ελευθέρων ηλεκτρονίων είναι αποδοτικότερη εξαιτίας του χαμηλού βαθμού σκέδασης τους από τις πλεγματικές ατέλειες (τα φωνόνια σκεδάζονται ισχυρά από αυτές).
- γ) Η αύξηση της μέσης απόστασης δεσμού με την αύξηση της θερμοκρασίας (θερμική διαστολή) οφείλεται στην ασυμμετρία της καμπύλης δυναμικής ενέργειας όπου η κλίση είναι αρκετά «απότομη» καθώς η απόσταση μειώνεται ενώ είναι «ομαλή» καθώς η απόσταση αυξάνεται. Καθώς η θερμοκρασία ανεβαίνει τα άτομα ταλαντώνονται σε γύρω από την θέση ισορροπίας Έτσι σε ισχυρούς δεσμούς όπου το πηγάδι δυναμικού είναι αρκετά «βαθύ» η ασυμμετρία αυτή είναι αρκετά μικρή άρα και η ποσοστιαία αύξηση της μέσης απόστασης (συντελεστής θερμικής διαστολής)

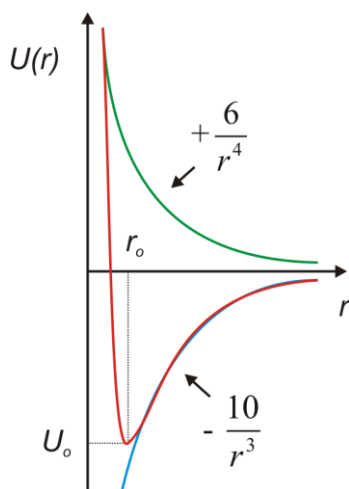
4.

α) Η συνολική δύναμη δίνεται από την σχέση:

$$F_{\text{tot}}(r) \equiv \frac{dU(r)}{dr} = \frac{3 \cdot 10}{r^4} - \frac{4 \cdot 6}{r^5} = \frac{30}{r^4} - \frac{24}{r^5},$$

Είναι φανερό ότι οι ελκτικές δυνάμεις περιγράφονται από τον όρο $\frac{30}{r^4}$ ενώ οι απωστικές από τον όρο $-\frac{24}{r^5}$. Εφόσον οι ελκτικές δυνάμεις δεν είναι της μορφής $\frac{A}{r^2}$ το δυναμικό $U(r)$ δεν περιγράφει ιοντικό δεσμό.

β)



Ο όρος $-\frac{10}{r^3}$ αντιστοιχεί σε ελκτικές δυνάμεις, ενώ ο όρος $\frac{6}{r^4}$ αντιστοιχεί σε απωστικές. Η συνολική δύναμη έχει ήδη υπολογιστεί στο (α). Η απόσταση ισορροπίας είναι η r_0 ενώ η ενέργεια του δεσμού η U_0 .

Υλικά I: Παρόν και Μέλλον

γ) Στην απόσταση ισορροπίας η συνολική δύναμη είναι μηδέν οπότε:

$$F_{tot}(r_o) = 0 = \frac{30}{r_o^4} - \frac{24}{r_o^5} \Rightarrow r_o = \frac{24}{30} = \frac{4}{5} = 0.8(nm),$$

Επίσης η ενέργεια δεσμού μπορεί να υπολογιστεί από την:

$$U_o = U(r_o) = -\frac{10}{r_o^3} + \frac{6}{r_o^4} = -\frac{625}{128} \simeq -4.9 (eV)$$

5.

α) Με παράγοντα ασφαλείας $N = 2$ η τάση εργασίας στο σύρμα θα είναι:

$$\sigma_w = \frac{\sigma_y}{N} = \frac{1000 MPa}{2} = 500 MPa$$

Η δύναμη εφελκυσμού που ασκείται στο σύρμα διαμέτρου D και διατομής S θα είναι

$$F = m \cdot g = 500 Kg \cdot 10 m/sec^2 = 5000 N$$

Όμως

$$\sigma_w = \frac{F}{S} \Rightarrow S = \frac{F}{\sigma_w} = \frac{5000 N}{500 \cdot 10^6 Pa} = 1 \cdot 10^{-5} m^2$$

Οπότε τελικά η ελάχιστη διάμετρος υπολογίζεται από την:

$$S = \pi \frac{D^2}{4} \Rightarrow D = 2\sqrt{\frac{S}{\pi}} \simeq 0.0036 m = 3.6 mm$$

β) Γνωρίζουμε ότι η διαμήκης παραμόρφωση ε_z συνδέεται με την τάση μέσω της σταθεράς ελαστικότητας E :

$$\sigma_w = E\varepsilon_z \Rightarrow \varepsilon_z = \frac{\sigma_w}{E} = \frac{500 MPa}{200 GPa} = 2.5 \cdot 10^{-3}$$

Ενώ η εγκάρσια παραμόρφωση συνδέεται με την διαμήκη μέσω του συντελεστή Poisson:

$$\nu = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_z} \Rightarrow \varepsilon_y = -\nu \varepsilon_z = -0.3 \cdot 2.5 \cdot 10^{-3} = -7.5 \cdot 10^{-4}$$