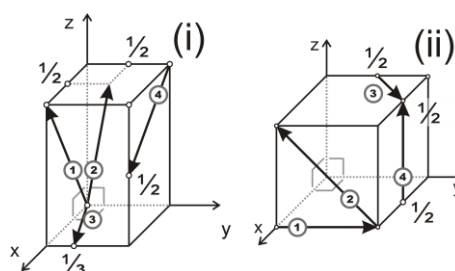


Υλικά I: Παρόν και Μέλλον Εξετάσεις Ιανουαρίου 2009

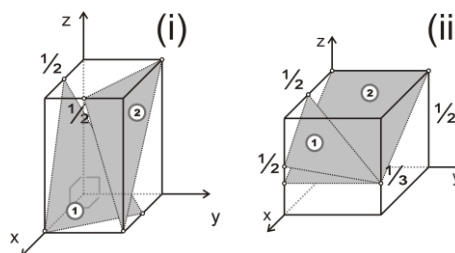
(Τα θέματα είναι ισοδύναμα)

1. α) Διορθώστε τα τυχόν λάθη στις παρακάτω ηλεκτρονικές δομές:
- | | |
|--|--|
| i) $1s^2 2s^1 2p^2$ | ii) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^1$ |
| iii) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^1 4p^6$ | iv) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4$ |
- β) Έστω δύο μεταλλικά στερεά ${}_{26}\text{Fe}$ και ${}_{13}\text{Al}$ με ενέργεια δεσμών 4.2 eV και 3.4 eV αντίστοιχα. Ποιο από τα δύο περιμένετε να παρουσιάζει μικρότερο μέτρο ελαστικότητας (*Young modulus*) και ποιο μεγαλύτερο σημείο τήξης; (δικαιολογήστε την απάντησή σας)
- γ) Ο χαλκός ${}_{29}\text{Cu}$ έχει πυκνότητα 8.94 gr/cm³, ατομικό βάρος 63.5 gr/mole και ατομική ακτίνα 0.128 nm. Προσδιορίστε αν έχει κρυσταλλική δομή BCC ή FCC. (Να δικαιολογήσετε την απάντησή σας)
- δ) Τι είδη δεσμών συναντάμε στα υλικά: Αλουμίνιο, νερό, πάγος, NaCl, διαμάντι, γραφίτης, PMMA;

2. α) Να προσδιορίσετε τις κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις σε καθ' ένα από τα διπλανά σχήματα



- β) Να προσδιορίσετε τους δείκτες Miller των κρυσταλλογραφικών επιπέδων σε καθ' ένα από τα διπλανά σχήματα.



- γ) Η ηλεκτρική ειδική αγωγιμότητα ενός άμορφου μεταλλικού υλικού είναι διαφορετική από αυτή του αντίστοιχου κρυσταλλικού; (δικαιολογήστε την απάντησή σας)
- δ) Σε τι διαφέρει η ηλεκτρονιακή δομή ενός απομονωμένου ατόμου από αυτή ενός στερεού υλικού;
3. Έστω ότι η δυναμική ενέργεια ενός δεσμού δίνεται από την σχέση $U(r) = -\frac{4.8}{r} + \frac{0.4}{r^3}$ σε μονάδες eV όταν η ακτίνα r εκφράζεται σε nm. Είναι ο δεσμός ιοντικός; 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 ελάχιστη ενέργεια που χρειάζεται για να «σπάσει ο δεσμός»;

4. Ο χειριστής ενός γερανού επιχειρεί να σηκώσει κοντέινερ βάρους 10 τόνων με τη χρήση χαλύβδινου σύρματος διαμέτρου 10 mm.
- α) Θα τα καταφέρει; Σε κάθε περίπτωση, τι θα συμβεί στο σύρμα;
- β) Ποια είναι η ελάχιστη διάμετρος του σύρματος για να μπορεί ο γερανός να σηκώσει τέτοια φορτία με παράγοντα ασφαλείας ίσο με 4; Ποια θα είναι σε αυτή την περίπτωση η διαμήκης και ποια η εγκάρσια παραμόρφωση του σύρματος;

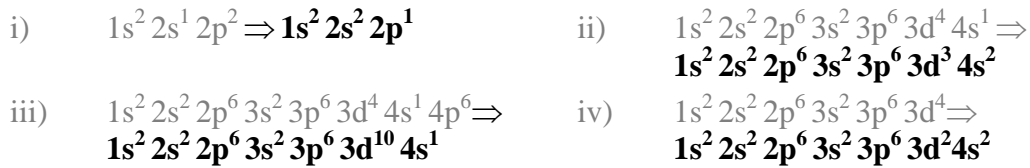
(δίνονται ο συντελεστής Poisson $\nu = 0.3$, το μέτρο ελαστικότητας $E = 200 \text{ GPa}$ και η αντοχή διαρροής του χάλυβα $\sigma_y = 1210 \text{ MPa}$, αντοχή σε εφελκισμό $\sigma_M = 1380 \text{ MPa}$, επιτάχυνση βαρύτητας $g \sim 10 \text{ m/s}^2$)

Υλικά Ι: Παρόν και Μέλλον

Εξετάσεις Ιανουαρίου 2009

Λύσεις των θεμάτων

1. α) Διορθώστε τα τυχόν λάθη στις παρακάτω ηλεκτρονικές δομές:



β) Έστω δύο μεταλλικά στερεά $_{26}\text{Fe}$ και $_{13}\text{Al}$ με ενέργεια δεσμών 4.2 eV και 3.4 eV αντίστοιχα. Ποιο από τα δύο περιμένετε να παρουσιάζει μικρότερο μέτρο ελαστικότητας (*Young modulus*) και ποιο μεγαλύτερο σημείο τήξης; (δικαιολογήστε την απάντησή σας)

Απάντηση (ενδεικτική): Μικρότερο μέτρο ελαστικότητας περιμένουμε να παρουσιάζει το $_{13}\text{Al}$ εξαιτίας του ασθενέστερου δεσμού. Αναλυτικότερα, το μακροσκοπικό μέτρο ελαστικότητας συνδέεται με την κλίση της καμπύλης δύναμης- απόστασης ιόντων στο δεσμό ($dF(r)/dr$). Η καμπύλη αυτή ουσιαστικά είναι η παράγωγός της καμπύλης δυναμικής ενέργειας-απόστασης ιόντων ($dU(r)/dr$). Συνοψίζοντας το μέτρο ελαστικότητας είναι ανάλογο της δεύτερης παραγώγου $d^2U(r)/dr^2$. Έτσι όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια του δεσμού τόσο «βαθύτερο» είναι το πηγάδι δυναμικού και τόσο πιο απότομη η κλίση του. Από την άλλη πλευρά ο $_{26}\text{Fe}$ περιμένουμε να παρουσιάζει μεγαλύτερο σημείο τήξης εξαιτίας της μεγαλύτερης «θερμικής ενέργειας» που απαιτείται για να «σπάσει» ο ισχυρότερος δεσμός του.

γ) Ο χαλκός $_{29}\text{Cu}$ έχει πυκνότητα 8.94 gr/cm³, ατομικό βάρος 63.5 gr/mole και ατομική ακτίνα 0.128 nm. Προσδιορίστε αν έχει κρυσταλλική δομή BCC ή FCC. (Να δικαιολογήσετε την απάντησή σας)

Απάντηση:

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ atoms/mole}, A = 63.5 \text{ gr/mole}, R = 128 \text{ nm} = 0.128 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$$

Αν η κρυσταλλική δομή είναι BCC τότε η πυκνότητα θα δίνεται απ' την σχέση:

$$\rho_{BCC} = 2 \text{ atoms} \cdot \frac{A}{N_A} \cdot \frac{1}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}} R\right)^3} \approx 8.2 \text{ gr/cm}^3$$

Αν η κρυσταλλική δομή είναι FCC τότε η πυκνότητα θα δίνεται απ' την σχέση:

$$\rho_{FCC} = 4 \text{ atoms} \cdot \frac{A}{N_A} \cdot \frac{1}{(2\sqrt{2} R)^3} \approx 8.9 \text{ gr/cm}^3$$

Η τιμή ρ_{FCC} είναι αρκετά κοντά στην πραγματική οπότε περιμένουμε ο Cu να έχει κρυσταλλική δομή **FCC**.

δ) Τι είδη δεσμών συναντάμε στα υλικά: Αλουμίνιο, νερό, πάγος, NaCl, διαμάντι, γραφίτης, PMMA;

Απάντηση:

Μεταλλικός, Ομοιοπολικός & Υδρογόνου, Ομοιοπολικός & Υδρογόνου, Ιοντικός, Ομοιοπολικός, Ομοιοπολικός & Van der Waals, Ομοιοπολικός

2. α) Να προσδιορίσετε τις κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις σε καθ' ένα από τα διπλανά σχήματα

(i) 1: $[1 \ 0 \ 1]$, 2: $[1/2 \ 1/2 \ 1] \Leftrightarrow [1 \ 1 \ 2]$, 3: $[1 \ 1/3 \ 0] \Leftrightarrow [3 \ 1 \ 0]$, 4: $[1 \ 0 \ \bar{1}/2] \Leftrightarrow [2 \ 0 \ \bar{1}]$

(ii) 1: $[0 \ 1 \ 0]$, 2: $[0 \ \bar{1} \ 1]$, 3: $[1/2 \ 1/2 \ 0] \Leftrightarrow [1 \ 1 \ 0]$, 4: $[0 \ 0 \ 1]$

β) Να προσδιορίσετε τους δείκτες Miller των κρυσταλλογραφικών επιπέδων σε καθ' ένα από τα διπλανά σχήματα

(i) 1: $x: 1, y: 2, z: 2 \Rightarrow (1 \ 1/2 \ 1/2) \Leftrightarrow (2 \ 1 \ 1)$,
 2: $x: -1, y: -1/2, z: -1 \Rightarrow (\bar{1} \ \bar{2} \ \bar{1}) \Leftrightarrow (1 \ 2 \ 1)$.

(ii) 1: $x: -1/2, y: -3, z: -1/2 \Rightarrow (\bar{2} \ \bar{1}/3 \ \bar{2}) \Leftrightarrow (6 \ 1 \ 6)$,
 2: $x: -1, y: \alpha, z: -2/3 \Rightarrow (\bar{1} \ 0 \ \bar{3}/2) \Leftrightarrow (2 \ 0 \ 3)$.

Υλικά I: Παρόν και Μέλλον Εξετάσεις Ιανουαρίου 2009

γ) Η ηλεκτρική ειδική αγωγιμότητα ενός άμορφου μεταλλικού υλικού είναι διαφορετική από αυτή του αντίστοιχου κρυσταλλικού; (δικαιολογήστε την απάντησή σας)

Απάντηση: Η ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα του άμορφου μεταλλικού υλικού περιμένουμε να είναι μικρότερη από αυτή του κρυσταλλικού, εξαιτίας της ύπαρξης αυξημένου αριθμού κρυσταλλικών ατελειών. Οι κρυσταλλικές ατέλειες λειτουργούν ως κέντρα σκέδασης και αυξάνουν την αντίσταση ενώ μειώνουν την αγωγιμότητα.

δ) Σε τι διαφέρει η ηλεκτρονιακή δομή ενός απομονωμένου ατόμου από αυτή ενός στερεού υλικού;

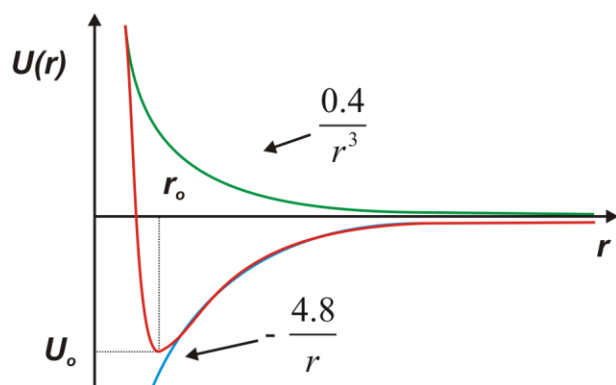
Απάντηση (ενδεικτική): Τα ενεργειακά επίπεδα του απομονωμένου ατόμου διαταράσσονται καθώς τα άτομα έρχονται σε γειτνίαση σε ένα στερεό υλικό. Αυτό το φαινόμενο είναι πιο έντονο στις εξωτερικές ηλεκτρονιακές στοιβάδες. Έτσι, σε ένα στερεό τα ηλεκτρόνια δέχονται επιδράσεις και από τα γειτονικά άτομα με αποτέλεσμα κάθε διακριτή ατομική κατάσταση να χωρίζεται σε μια σειρά κοντινών ενεργειακών καταστάσεων που οδηγούν τελικά στην δημιουργία ενεργειακών ζωνών.

3. Έστω ότι η δυναμική ενέργεια ενός δεσμού δίνεται από την σχέση $U(r) = -\frac{4.8}{r} + \frac{0.4}{r^3}$ σε μονάδες eV όταν η ακτίνα r εκφράζεται σε nm. Είναι ο δεσμός ιοντικός; 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 ελάχιστη ενέργεια που χρειάζεται για να «σπάσει ο δεσμός»;

Λύση: Η συνολική δύναμη δίνεται από την σχέση: $F_{tot}(r) \equiv \frac{dU(r)}{dr} = \frac{4.8}{r^2} - \frac{1.2}{r^4}$. Είναι φανερό ότι

οι ελκτικές δυνάμεις περιγράφονται από τον όρο $\frac{4.8}{r^2}$ ενώ οι απωστικές από τον όρο $-\frac{1.2}{r^4}$.

Εφόσον οι ελκτικές δυνάμεις είναι $\propto \frac{1}{r^2}$ το δυναμικό $U(r)$ περιγράφει ιοντικό δεσμό.



Ο όρος $-\frac{4.8}{r}$ αναφέρεται στις ελκτικές δυνάμεις, ενώ ο όρος $\frac{0.4}{r^3}$ αναφέρεται σε απωστικές. Η απόσταση ισορροπίας είναι η r_0 ενώ η ενέργεια του δεσμού η U_0 .

Στην απόσταση ισορροπίας η συνολική δύναμη είναι μηδέν οπότε:

$$F_{tot}(r_0) = 0 = \frac{4.8}{r_0^2} - \frac{1.2}{r_0^4} \Rightarrow r_0 = \sqrt{\frac{1.2}{4.8}} = \sqrt{\frac{1}{4}} = 0.5(nm),$$

Επίσης η ενέργεια δεσμού μπορεί να υπολογιστεί από την:

$$U_0 = U(r_0) = -\frac{4.8}{r_0} + \frac{0.4}{r_0^3} = -6.4(eV)$$

Αυτό είναι και το ελάχιστο ποσό ενέργειας που χρειάζεται για να «σπάσει» ο δεσμός

Υλικά Ι: Παρόν και Μέλλον Εξετάσεις Ιανουαρίου 2009

4. Ο χειριστής ενός γερανού επιχειρεί να σηκώσει κοντέινερ βάρους 10 τόνων με τη χρήση χαλύβδινου σύρματος διαμέτρου 10 mm.

α) Θα τα καταφέρει; Σε κάθε περίπτωση, τι θα συμβεί στο σύρμα;

β) Ποια είναι η ελάχιστη διάμετρος του σύρματος για να μπορεί ο γερανός να σηκώσει τέτοια φορτία με παράγοντα ασφαλείας ίσο με 4; 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 $\sigma_y = 1210 \text{ MPa}$, αντοχή σε εφελκυσμό $\sigma_M = 1380 \text{ MPa}$, επιτάχυνση βαρύτητας $g \sim 10 \text{ m/s}^2$)

Λύση:

α) Η δύναμη εφελκυσμού που ασκείται στο σύρμα είναι $F = m \cdot g = 10^4 \text{ Kg} \cdot 10 \text{ m/sec}^2 = 10^5 \text{ N}$,

ενώ η τάση εργασίας στο σύρμα διαμέτρου D_o και διατομής

$$S_o = \pi \frac{D_o^2}{4} \cong 3.14 \cdot \frac{(10 \cdot 10^{-3})^2}{4} \text{ m}^2 \cong 78.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ θα είναι: } \sigma_w^o = \frac{F}{S_o} \cong \frac{10^5}{78.5 \cdot 10^{-6}} \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \cong 1274 \text{ MPa}.$$

Η τιμή αυτή είναι $\sigma_y < \sigma_w < \sigma_M$ επομένως ο χειριστής θα τα καταφέρει αλλά το σύρμα θα παραμορφωθεί πλαστικά και θα πρέπει να αντικατασταθεί.

β) Με παράγοντα ασφαλείας $N = 4$ η τάση εργασίας στο σύρμα θα είναι:

$$\sigma_w = \frac{\sigma_y}{N} = \frac{1210 \text{ MPa}}{4} = 302.5 \text{ MPa}.$$

Γνωρίζοντας ότι η δύναμη εφελκυσμού που θα ασκείται στο σύρμα είναι $F = 10^5 \text{ N}$ μπορούμε

$$\text{να υπολογίσουμε την επιθυμητή διατομή: } \sigma_w = \frac{F}{S} \Rightarrow S = \frac{F}{\sigma_w} = \frac{10^5 \text{ N}}{302.5 \text{ MPa}} = 330.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2.$$

$$\text{Τελικά η ελάχιστη διάμετρος υπολογίζεται από την: } S = \pi \frac{D^2}{4} \Rightarrow D = 2 \sqrt{\frac{S}{\pi}} \cong 20.5 \text{ mm}.$$

Γνωρίζουμε ότι η διαμήκης παραμόρφωση ε_z συνδέεται με την τάση μέσω της σταθεράς

$$\text{ελαστικότητας } E: \sigma_w = E \varepsilon_z \Rightarrow \varepsilon_z = \frac{\sigma_w}{E} = \frac{302.5 \text{ MPa}}{200 \text{ GPa}} \cong 1.510^{-3}, \text{ ενώ η εγκάρσια παραμόρφωση}$$

συνδέεται με την διαμήκη μέσω του συντελεστή Poisson:

$$\nu = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_z} \Rightarrow \varepsilon_y = -\nu \varepsilon_z = -0.3 \cdot 1.5 \cdot 10^{-3} = -4.5 \cdot 10^{-4}$$