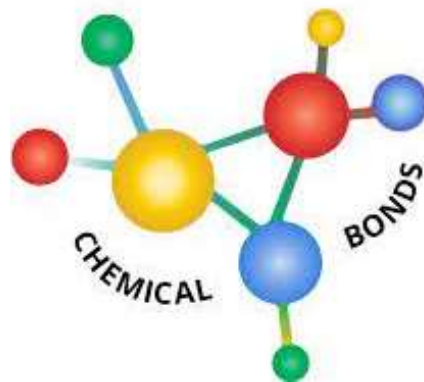


Ατομική δομή & δεσμοί μεταξύ ατόμων



Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

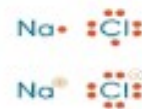
Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

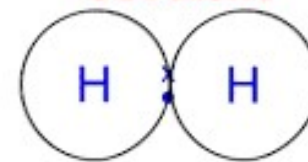
- Πώς σχηματίζονται οι δεσμοί μεταξύ ατόμων;
- Ποια είναι τα είδη των δεσμών;
- Ποιες ιδιότητες εξαρτώνται από τους δεσμούς;

Chemical Bonding

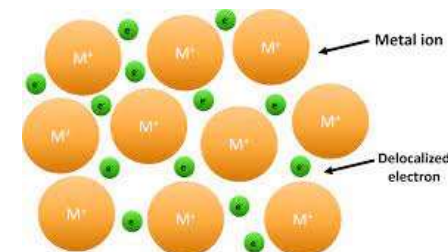
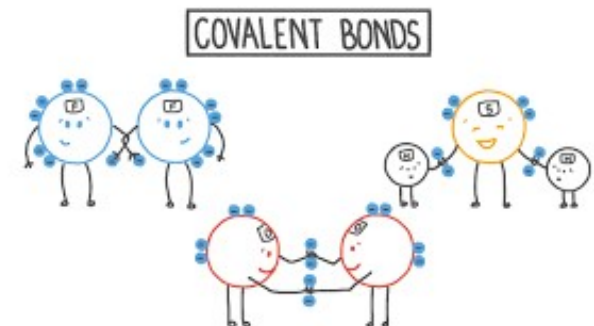
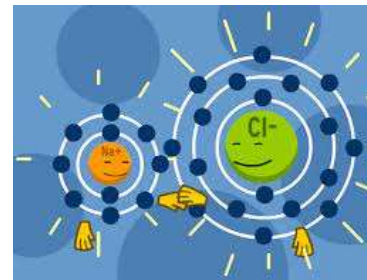
Ionic



Covalent

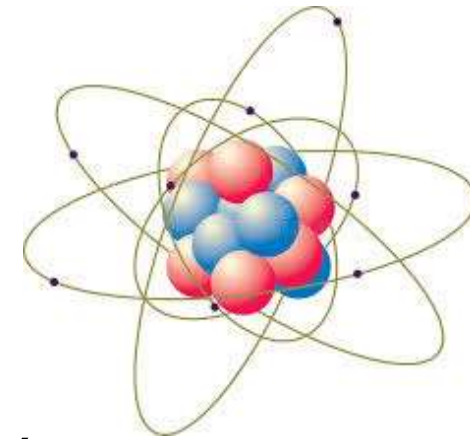


Metallic



ΔΕΣΜΟΙ

Η δομή των ατόμων



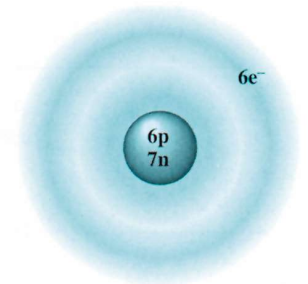
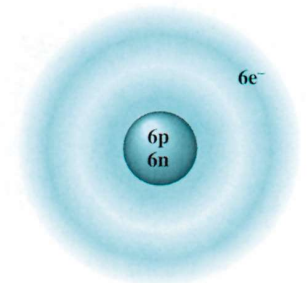
- άτομο – $\left. \begin{array}{l} \text{ηλεκτρόνια} \\ \text{πρωτόνια} \\ \text{νετρόνια} \end{array} \right\} 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$ – $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
- ατομικός αριθμός = # πρωτονίων στον πυρήνα του ατόμου
= # ηλεκτρονίων σε ουδέτερα είδη

- A [=] μονάδα ατομική μάζα = amu = 1/12 μάζα του ^{12}C

Ατομικό βάρος = βάρος 6.022×10^{23} μορίων ή ατόμων

$$1 \text{ amu/άτομο} = 1 \text{ g/mol}$$

C	12.011
H	1.008 κ.λπ.

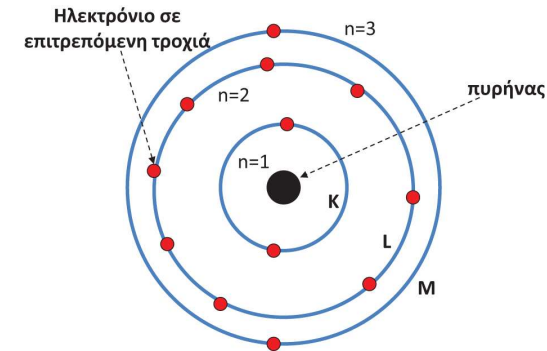


Η δομή των ατόμων

- Ορισμένες ιδιότητες...

- 1) χημικές
- 2) ηλεκτρικές
- 3) θερμικές
- 4) οπτικές

υπαγορεύονται από τη διαμόρφωση
των ηλεκτρονίων εντός του ατόμου (διευθέτηση
σε επιτρεπτές καταστάσεις)



Διευθέτηση ηλεκτρονίων σε ένα άτομο

- Τα ηλεκτρόνια επιδεικνύουν ιδιότητες κυματιδίου και σωματιδίου.
- Δύο από τα “κυματιδικά” χαρακτηριστικά των ηλεκτρονίων:
 - βρίσκονται σε **τροχιακά** τα οποία ορίζονται βάσει πιθανοτήτων.
 - κάθε τροχιακό σε μία διακριτή ενεργειακή στάθμη καθορίζεται μέσω συγκεκριμένων **κβαντικών αριθμών**.

Κβαντικός Αριθμός

n = κύριος (ενεργειακή στάθμη-στιβάδα κ.λπ.)

ℓ = δευτερεύων (τροχιακά) s, p, d, f (0, 1, 2, 3, ..., $n-1$)

m_ℓ = μαγνητικός 1, 3, 5, 7 ($-\ell$ έως $+\ell$)

m_s = spin $1/2, -1/2$

Συμβολισμός

K, L, M, N, O (1, 2, 3,

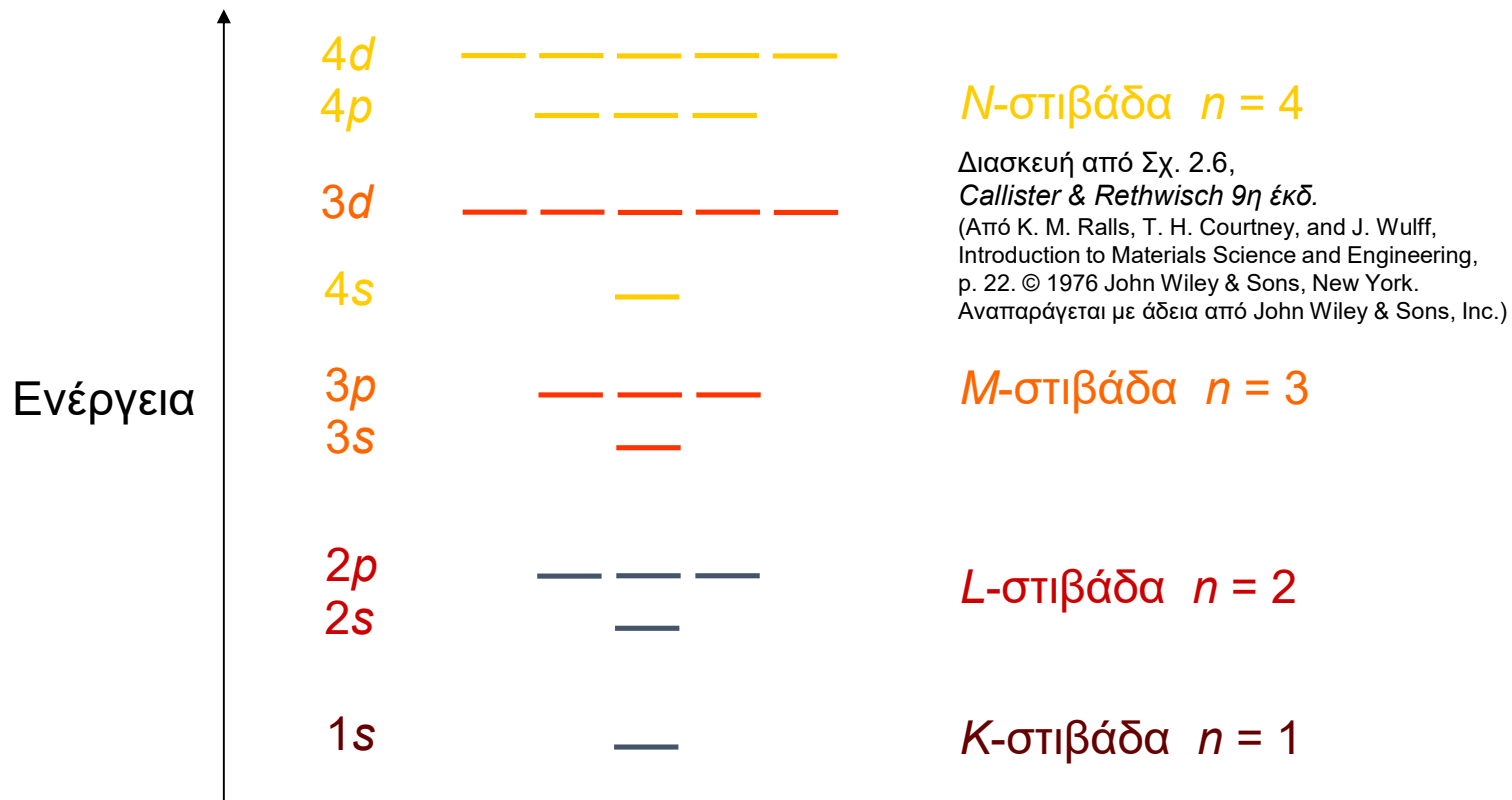


Bohr

Ενεργειακές καταστάσεις ηλεκτρονίων

Τα ηλεκτρόνια...

- έχουν διακριτές **ενεργειακές καταστάσεις**
- “προτιμούν” καταστάσεις με χαμηλότερες ενέργειες.



Ηλεκτρονική διαμόρφωση & στοιχεία

- Στα περισσότερα στοιχεία: Η ηλεκτρονική διαμόρφωση **δεν είναι σταθερή**.

Στοιχείο	Ατομ. αριθμός	Ηλ. Διαμόρφωση
Υδρογόνο	1	$1s^1$
Ήλιο	2	$1s^2$ (σταθερή)
Λίθιο	3	$1s^2 2s^1$
Βηρύλλιο	4	$1s^2 2s^2$
Βόριο	5	$1s^2 2s^2 2p^1$
Άνθρακας	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
...	...	...
Νέον	10	$1s^2 2s^2 2p^6$ (σταθερή)
Νάτριο	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Μαγνήσιο	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Αλουμίνιο	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
...	...	...
Αργό	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ (σταθερή)
...	...	...
Κρυπτό	36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$ (σταθερή)

Διασκευή από Πιν. 2.2, Callister & Rethwisch
9η έκδ.

- Γιατί; Η (εξωτερική) στιβάδα **σθένους** συνήθως δεν είναι συμπληρωμένη.

Ηλεκτρονική διαμόρφωση & άτομα

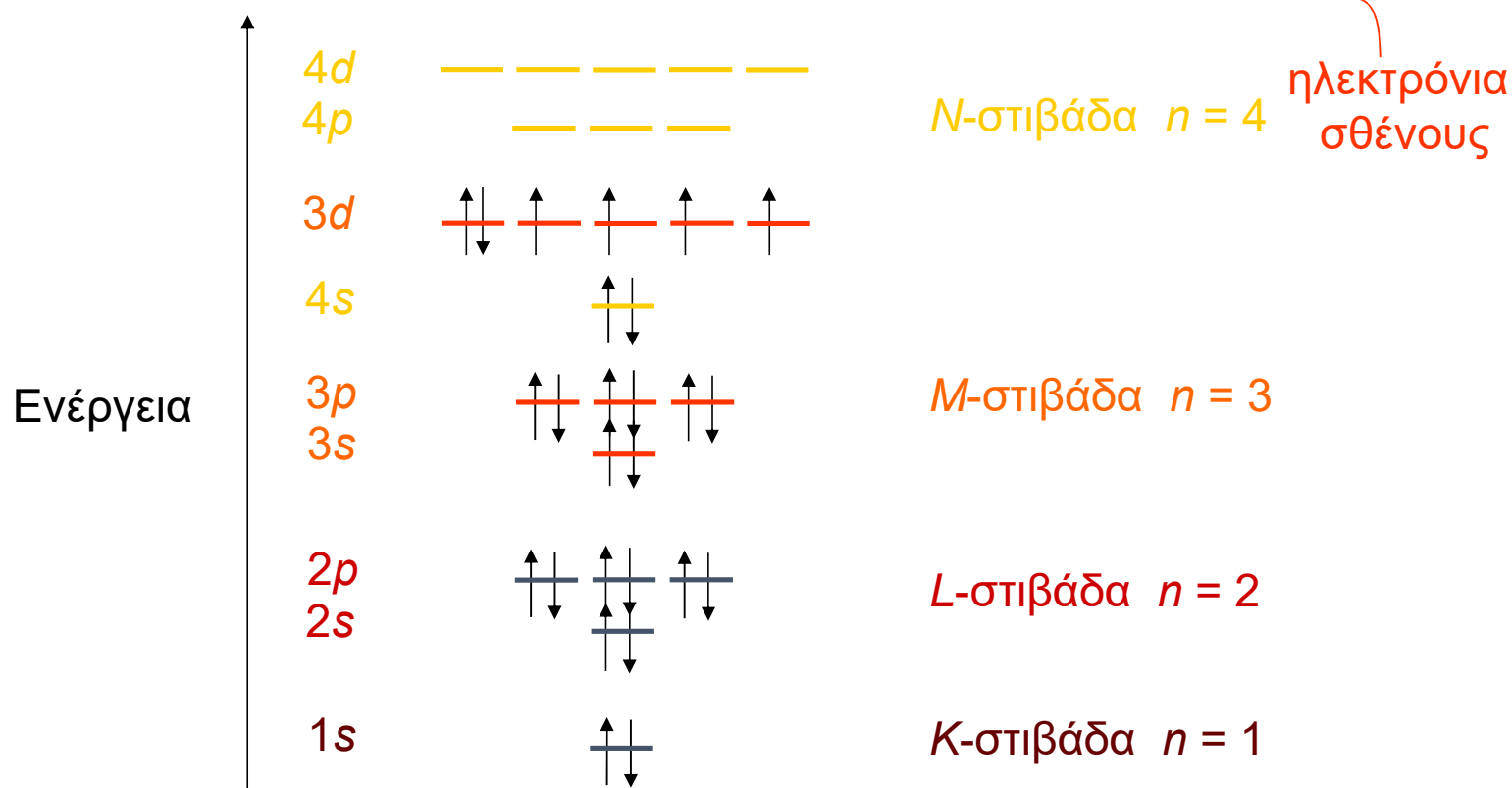
- **Ηλεκτρόνια σθένους:** βρίσκονται στη μη-συμπληρωμένη (εξωτερική) στιβάδα
 - Συμπληρωμένες στιβάδες: πιο σταθερή συμπεριφορά
 - Τα ηλεκτρόνια σθένους είναι άμεσα διαθέσιμα για σχηματισμό δεσμών και τείνουν να καθορίζουν τις χημικές ιδιότητες
-
- παράδειγμα: C (ατομικός αριθμός = 6)





Ηλεκτρονική διαμόρφωση

Π.χ.: Fe με ατομικό αρ. = 26 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ $3d^6 4s^2$



Διασκευή από Σχ. 2.6, Callister & Rethwisch 9η έκδ.
(Από Κ. Μ. Ralls, T. H. Courtney, and J. Wulff,
Introduction to Materials Science and Engineering, p. 22.
© 1976 John Wiley & Sons, New York. Αναπαράγεται με
άδεια από John Wiley & Sons, Inc.)

Ηλεκτραρνητικότητα

- Τιμή: κυμαίνεται από **0.9** έως **4.1**
- Μεγάλες τιμές: υποδεικνύουν τάση αποδοχής ηλεκτρονίων

IA																	0
H																	He
2.1																	-
Li	IIA												IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA
1.0	Be												B	C	N	O	F
	1.5												2.0	2.5	3.1	3.5	4.1
Na	Mg												Al	Si	P	S	Cl
1.0	1.3												1.5	1.8	2.1	2.4	2.9
		IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	VIII				IB	IIB					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.9	1.1	1.2	1.3	1.5	1.6	1.6	1.7	1.7	1.8	1.8	1.7	1.8	2.0	2.2	2.5	2.8	-
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.3	1.4	1.4	1.5	1.4	1.4	1.5	1.5	1.7	1.8	2.0	2.2	-
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
0.9	0.9	1.1	1.2	1.4	1.4	1.5	1.5	1.6	1.5	1.4	1.5	1.5	1.6	1.7	1.8	2.0	-
Fr	Ra	Ac															
0.9	0.9	1.0															

Λανθανίδες: 1.0-1.2

Ακτινίδες: 1.0-1.2



Μικρότερη ηλεκτραρνητικότητα



Μεγαλύτερη ηλεκτραρνητικότητα

Ιοντικός δεσμός – μέταλλο + αμέταλλο

↑
δίνει
ηλεκτρόνια

δέχεται
ηλεκτρόνια

Ανόμοιες ηλεκτρarνητικότητες

$\pi.\chi.: \text{MgO} \quad \text{Mg} \quad 1s^2 2s^2 2p^6 \textcolor{red}{3s^2} \quad \text{O} \quad 1s^2 2s^2 2p^4$

$$\text{Mg}^{2+} \quad 1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6$$

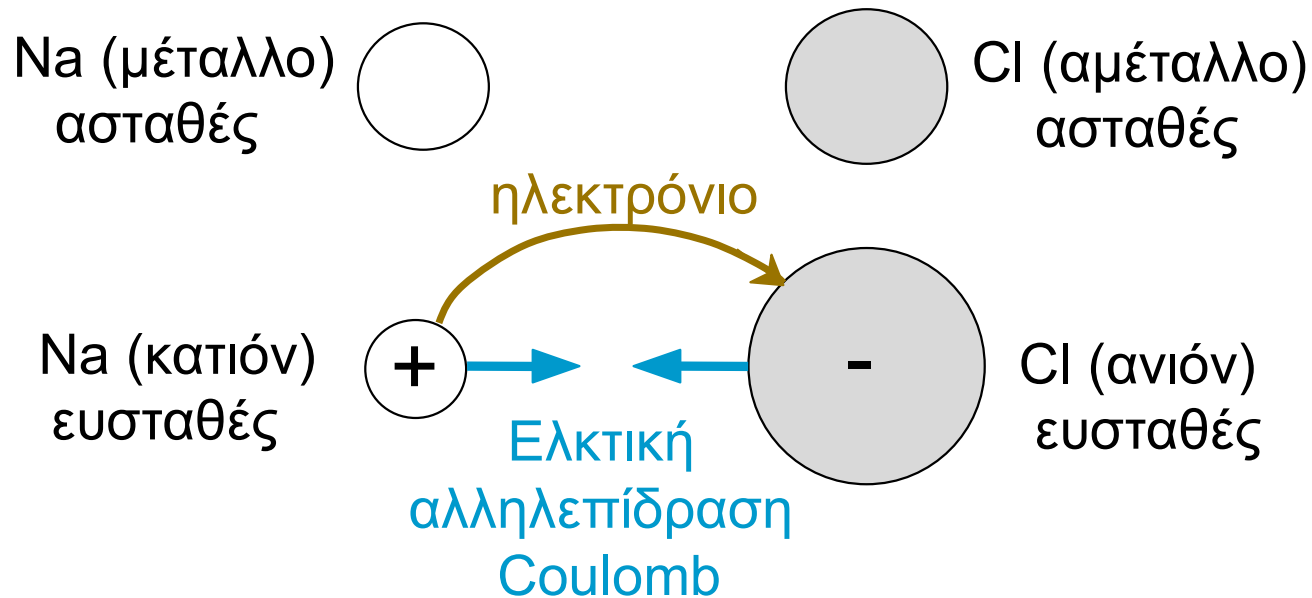
[Ne]

$$\text{O}^{2-} \quad 1s^2 2s^2 2p^6$$

[Ne]

Ιοντικός δεσμός

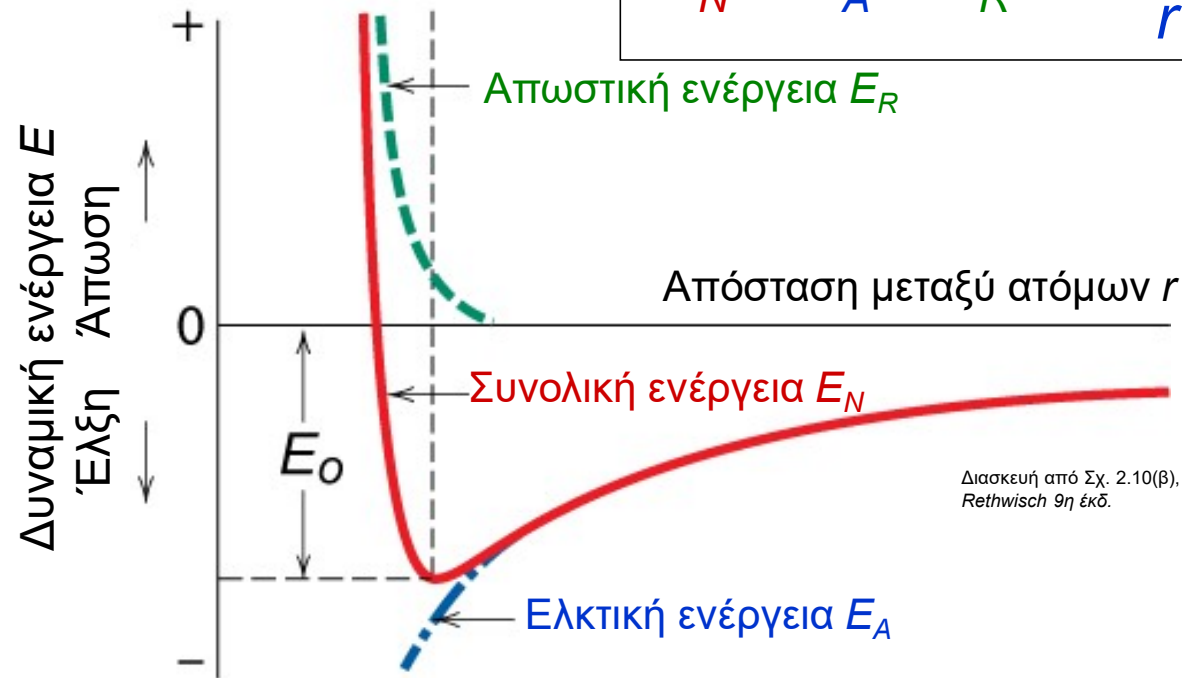
- Δημιουργείται μεταξύ θετικών & αρνητικών ιόντων.
- Απαιτεί **μεταφορά ηλεκτρονίων**.
- Μεγάλη διαφορά στην απαιτούμενη ηλεκτραρνητικότητα.
- Παράδειγμα: NaCl



Ιοντικός δεσμός

- Ενέργεια – η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας είναι η πλέον ευσταθής
 - Ισοστάθμιση όρων **ελκτικής** και **απωστικής** ενέργειας

$$E_N = E_A + E_R = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n}$$



Ομοιοπολικοί δεσμοί

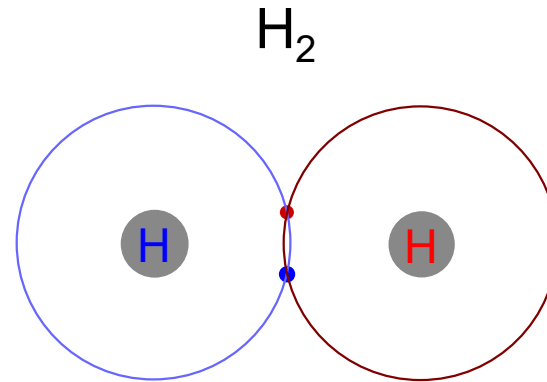
- Παρόμοια **ηλεκτραρνητικότητα** $\therefore$ μοιράζονται ηλεκτρόνια
- Υπαγορεύονται από το σθένος – τα τροχιακά s & p έχουν κυρίαρχο ρόλο στον σχηματισμό των δεσμών



Παράδειγμα: H_2

Κάθε H : έχει $1 e^-$, σθένους
χρειάζεται 1 επιπλέον

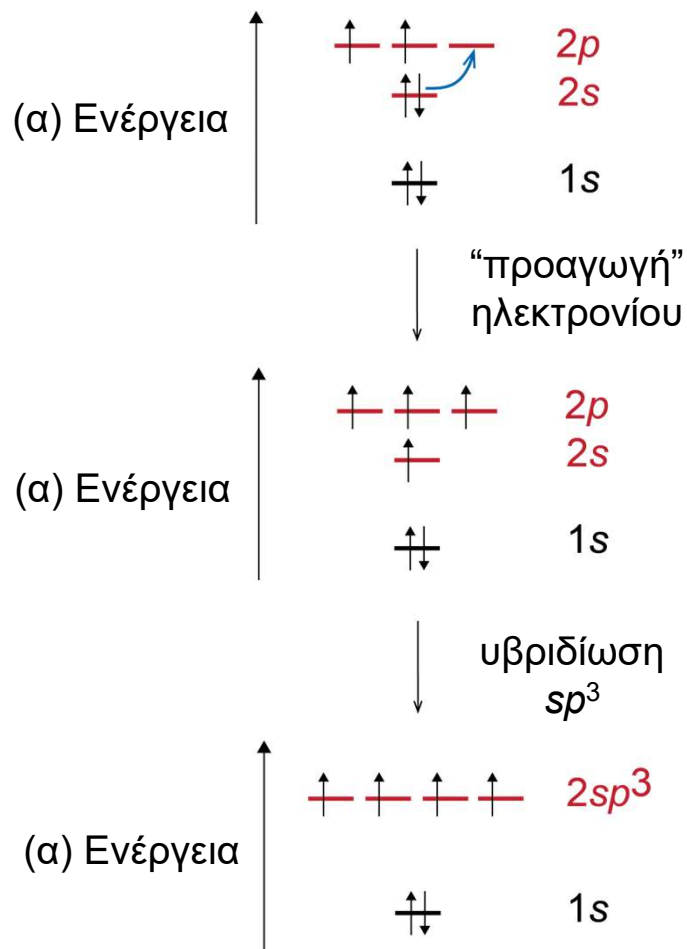
Ίδιες ηλεκτραρνητικότητες.



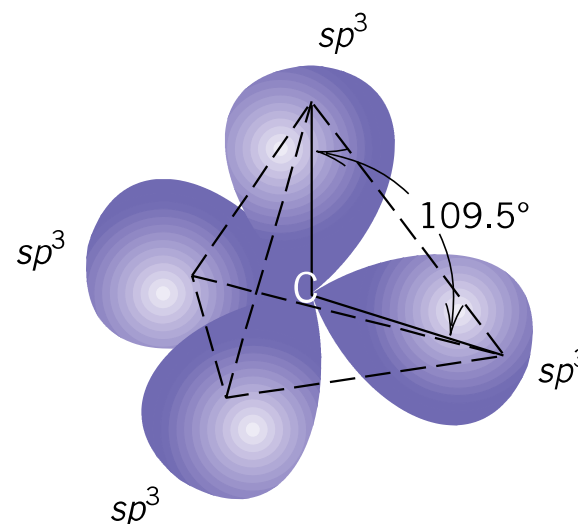
• διαμοιραζόμενο
ηλεκτρόνιο $1s$
από το 1ο άτομο
υδρογόνου

• διαμοιραζόμενο
ηλεκτρόνιο $1s$
από το 2ο άτομο
υδρογόνου

Σχηματισμός δεσμών



- Ο άνθρακας μπορεί να σχηματίζει υβριδικά τροχιακά sp^3



Σχ. 2.14, Callister & Rethwisch 9η έκδ.
(Διασκευή από J.E. Brady and F. Senese, *Chemistry: Matter and Its Changes*, 4th edition. Αναπαράγεται με άδεια από John Wiley and Sons, Inc.)

Σχ. 2.13, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

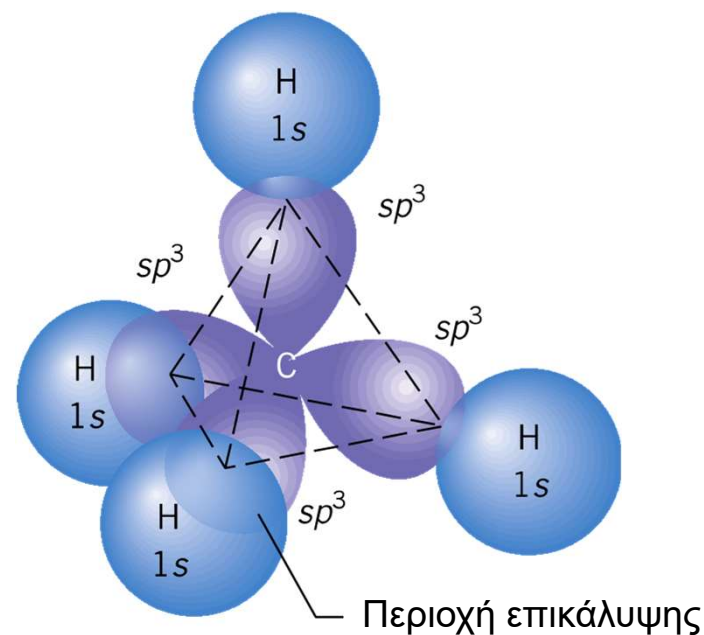
Ομοιοπολικοί δεσμοί: Άνθρακας

- Παράδειγμα: CH₄

C: έχει 4 e⁻ σθένους,
χρειάζεται 4 επιπλέον

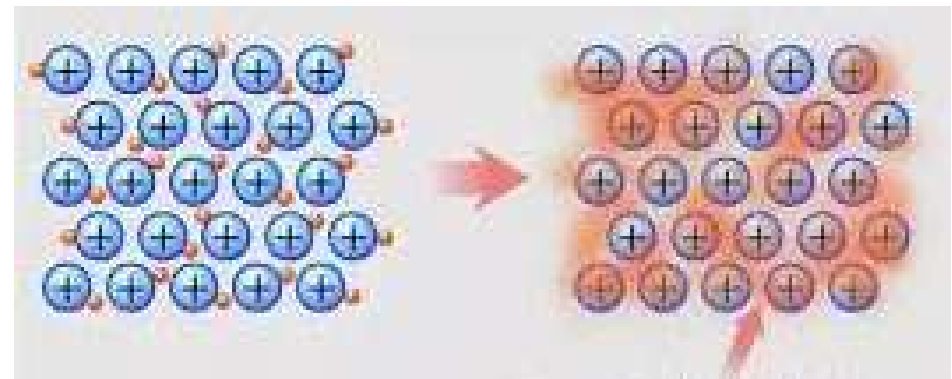
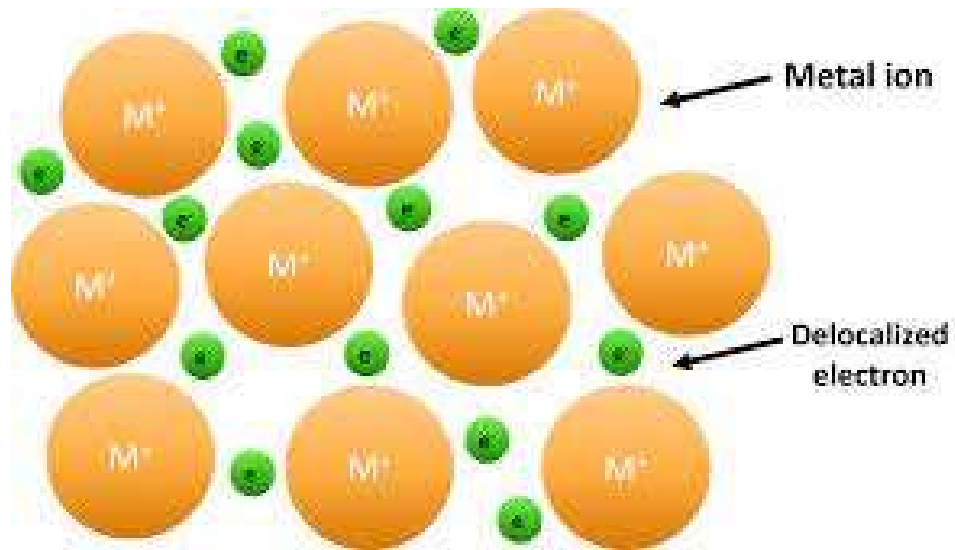
H: έχει 1 e⁻ σθένους,
χρειάζεται 1 επιπλέον

Οι ηλεκτραρνητικότητες των C και H είναι συγκρίσιμες· σχηματίζονται ομοιοπολικοί δεσμοί με διαμοιραζόμενα ηλεκτρόνια.



Σχ. 2.15, Callister & Rethwisch 9η έκδ.
(Διασκευή από J.E. Brady and F. Senese, *Chemistry: Matter and Its Changes*, 4th edition. Αναπαράγεται με άδεια από John Wiley and Sons, Inc.)

Μεταλλικός δεσμός



Νέφος ηλεκτρονίων

Πρωτεύοντες δεσμοί

- Μεταλλικός δεσμός -- “νέφος ηλεκτρονίων” (με ελευθερία κίνησης)
- Μεικτός δεσμός (ιοντικός-ομοιοπολικός)

$$\text{βαθμός (\%) ιοντικότητας} = \left(1 - e^{-\frac{(X_A - X_B)^2}{4}} \right) \times (100\%)$$

όπου X_A & X_B τιμές ηλεκτραρνητικότητας (Pauling)



π.χ.: MgO

$$\begin{aligned} X_{\text{Mg}} &= 1.3 \\ X_{\text{O}} &= 3.5 \end{aligned}$$

$$\% \text{ ιοντικότητας} = \left(1 - e^{-\frac{(3.5 - 1.3)^2}{4}} \right) \times (100\%) = 70.2\%$$

Δευτερεύοντες δεσμοί

Προκύπτουν από αλληλεπίδραση μεταξύ **δίπολων**

- Διακυμαινόμενα **δίπολα**

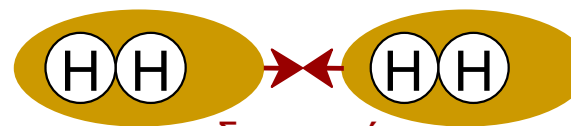
ασύμμετρα νέφη ηλεκτρονίων



δευτερεύων
δεσμός

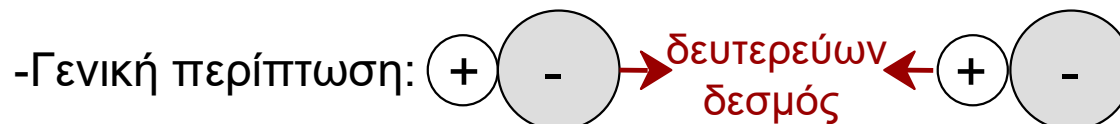
Διασκευή από Σχ. 2.20,
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

π.χ.: υγρό H_2
 $H_2 \rightarrow \leftarrow H_2$



δευτερεύων
δεσμός

- Μόνιμα **δίπολα** (πολικά μόρια)



Διασκευή από Σχ. 2.22,
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

-π.χ.: υγρό HCl



-π.χ.: πολυμερές



Σχηματισμός δευτερεύοντος
δεσμού

Ενέργειες Δεσμών

Ενέργειες δεσμών και θερμοκρασίες τήξης για διάφορες ουσίες

Ουσία	Ενέργεια δεσμού kJ/mol	Θερμοκρασία Τήξης (°C)
Ιοντικός		
NaCl	640	801
LiF	850	848
MgO	1000	2800
CaF ₂	1548	1418
Ομοιοπολικός		
Cl ₂	121	-102
Si	450	1410
InSb	523	
C (διαμάντι)	713	>3550
SiC	1230	2830
Μεταλλικός		
Hg	62	-39
Al	330	660
Ag	285	962
W	850	3414
Van der Waals^a		
Ar	7.7	-189 (@ 69 kPa)
Kr	11.7	-158 (@ 73.2 kPa)
CH ₄	18	-182
Cl ₂	31	-101
Υδρογόνου^a		
HF	35	-83
NH ₃	35	-78
H ₂ O	51	0

Ενέργεια Δεσμών:
Ιοντικός > Ομοιοπολικός > Μεταλλικός



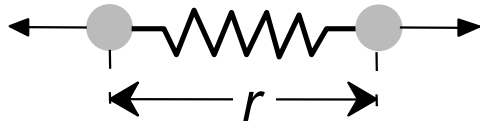
ΣΥΝΟΨΗ Τύποι δεσμών



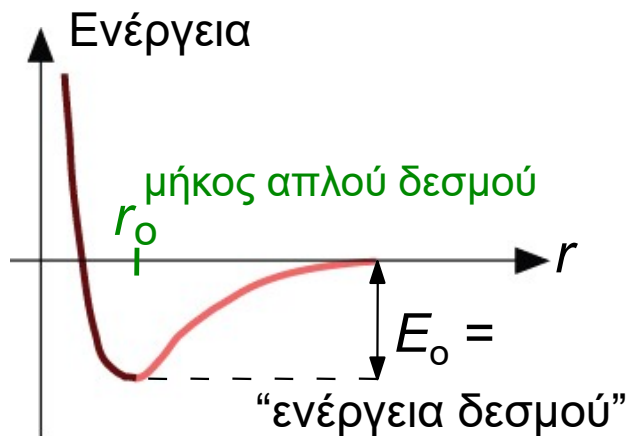
Τύπος	Ενέργεια δεσμού	Σχόλια
Ιοντικός	Μεγάλη!	Μη-κατευθυντικός χαρακτήρας (κεραμικά)
Ομοιοπολικός	Μεταβαλλόμενη μεγάλη-Διαμάντι μικρή-Βισμούθιο	Κατευθυντικός χαρακτήρας (ημιαγωγοί, κεραμικά πολυμερικές αλυσίδες)
Μεταλλικός	Μεταβαλλόμενη μεγάλη-Βολφράμιο μικρή-Υδράργυρος	Μη-κατευθυντικός χαρακτήρας (μέταλλα)
Δευτερέων	Μικρότερη από των παραπάνω	Κατευθυντικός χαρακτήρας μεταξύ αλυσίδων (πολυμερών) μεταξύ μορίων

Ιδιότητες εξαρτώμενες από το είδος δεσμού: T_m

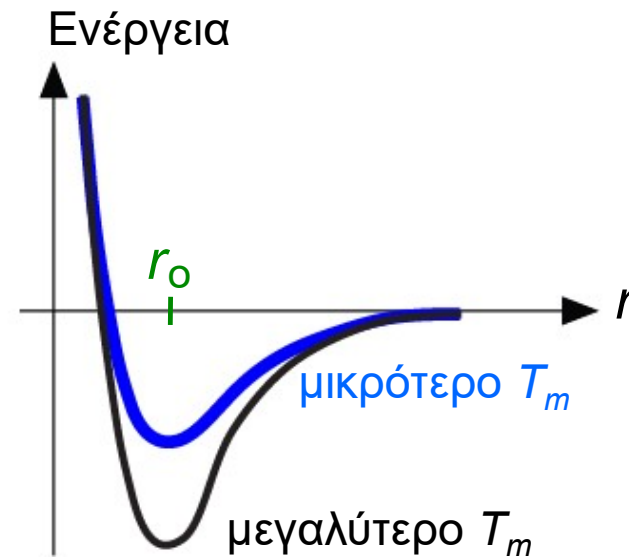
- Μήκος δεσμού, r



- Ενέργεια δεσμού, E_o



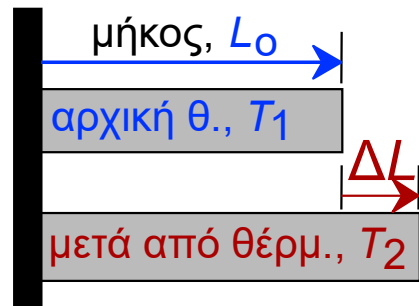
- Θερμοκρασία τήξης, T_m



Η T_m αυξάνεται καθώς αυξάνεται η E_o .

Ιδιότητες εξαρτώμενες από το είδος δεσμού: α

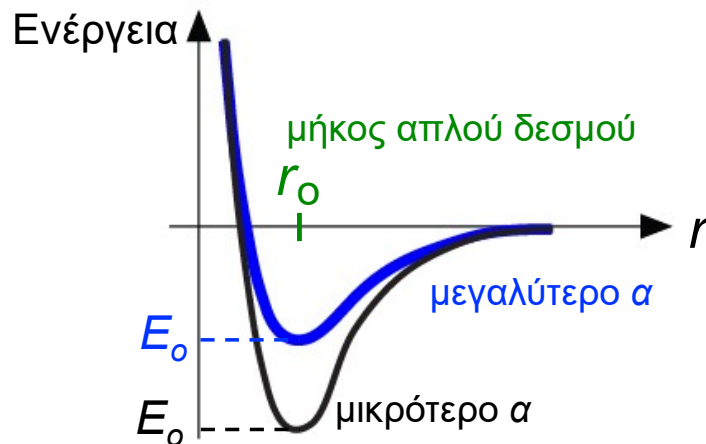
- Συντελεστής θερμικής διαστολής, α



συντ. θερμικής διαστολής

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

- $\alpha \sim$ συμμετρία ως προς r_0



Το α αυξάνεται καθώς μειώνεται η E_0 .



ΣΥΝΟΨΗ

Πρωτεύοντες δεσμοί

Κεραμικά

(ιοντικοί & ομοιοπολικοί δεσμοί):

Μεγάλη ενέργεια δεσμού

μεγάλη T_m
μεγάλη E
μικρός α

Μέταλλα

(μεταλλικοί δεσμοί):

Μεταβλητή ενέργεια δεσμού

μέτρια T_m
μέτρια E
μέτριος α

Πολυμερή

(ομοιοπολικοί & δευτερεύοντες):



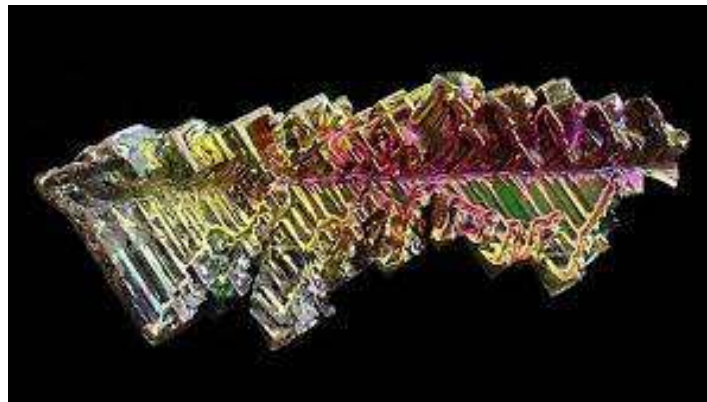
Κατευθυντικά χαρακτηριστικά

Κυριαρχούν οι ιδιότητες των δευτερευόντων δεσμών

μικρή T_m
μικρή E
μεγάλος α



Βασικές αρχές κρυσταλλογραφίας

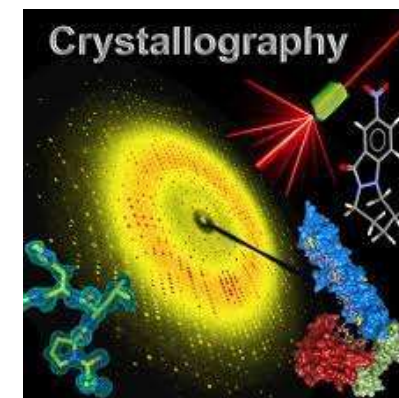
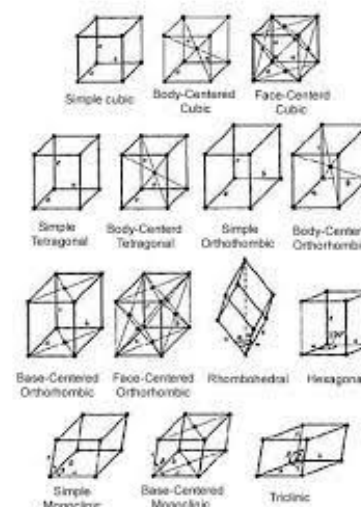
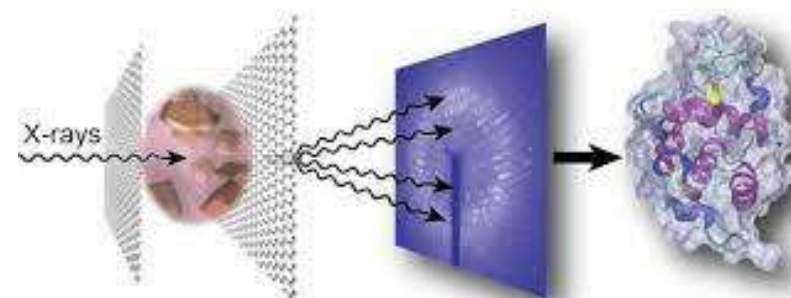


Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

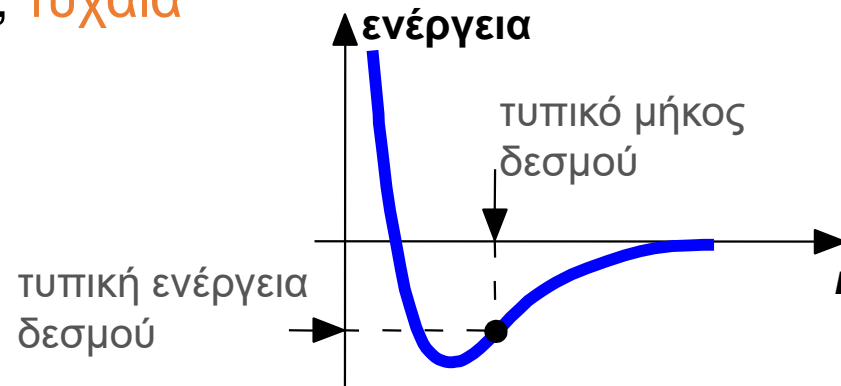
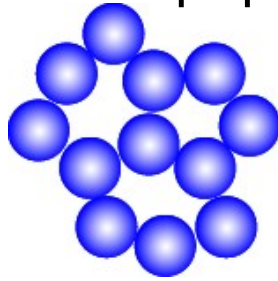
- Ποιες είναι οι διαφορές, ως προς τη διάταξη των ατόμων, μεταξύ κρυσταλλικών και μη-κρυσταλλικών στερεών;
- Εύρεση και συμβολισμός των κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων και επιπέδων.
- Υπό ποιες συνθήκες μπορεί να μεταβάλλεται μία ιδιότητα των υλικών ανάλογα με τη διεύθυνση μέτρησης;



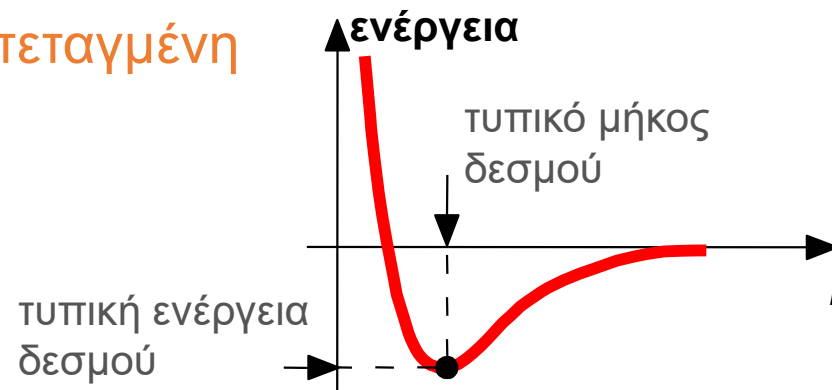
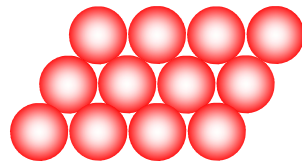
ΒΑΣΙΚΕΣ ΑΡΧΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΓΡΑΦΙΑΣ

Ενέργεια δεσμών και ατομική πλήρωση

- Μη-πυκνή πλήρωση, **τυχαία** τοποθέτηση ατόμων



- Πυκνή πλήρωση, **διατεταγμένη** τοποθέτηση ατόμων

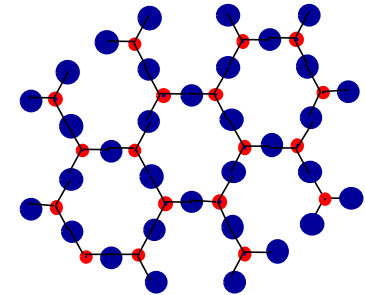


Οι διατεταγμένες δομές πυκνής πλήρωσης τείνουν να έχουν χαμηλότερες ενέργειες.

Δομή ατόμων και υλικά

Κρυσταλλικά υλικά...

- περιοδική διάταξη ατόμων σε 3Δ σχηματισμούς
- τυπική σε:
 - μέταλλα
 - πολλά κεραμικά
 - ορισμένα πολυμερή



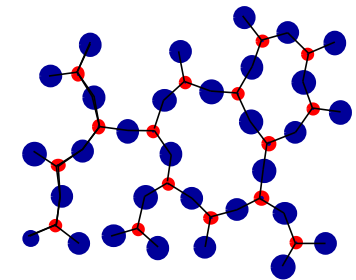
Κρυσταλλικό SiO₂

Διασκευή από Σχ. 3.11(α),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Μη-κρυσταλλικά υλικά...

- μη-περιοδική δομή ατόμων
- εμφανίζεται:
 - σε πολύπλοκες δομές
 - κατά την ταχεία ψύξη

• Si • Οξυγόνο



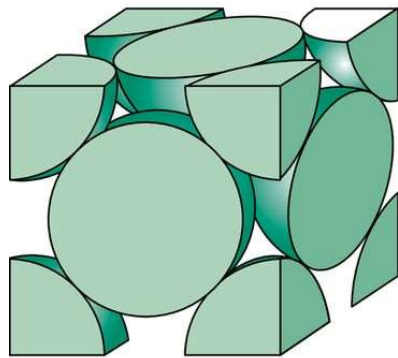
Μη-κρυσταλλικό SiO₂

Διασκευή από Σχ. 3.11(β),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

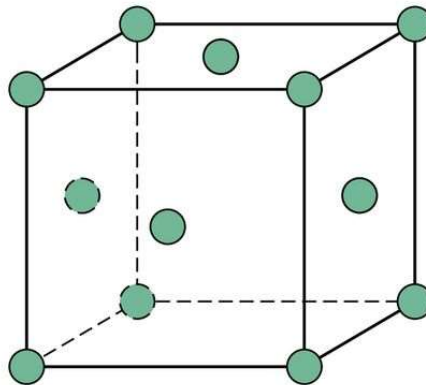
"άμορφο" = μη-κρυσταλλικό

Κρυσταλλικές δομές

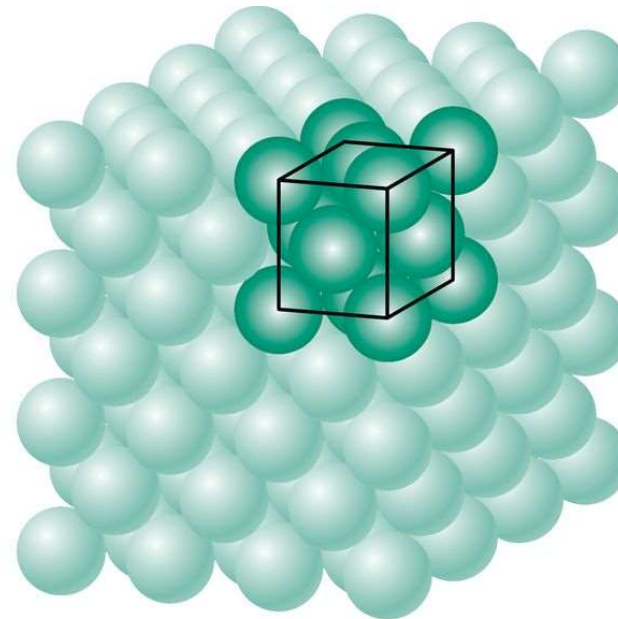
- Κρυσταλλική δομή
- Πλέγμα



(a)



(b)

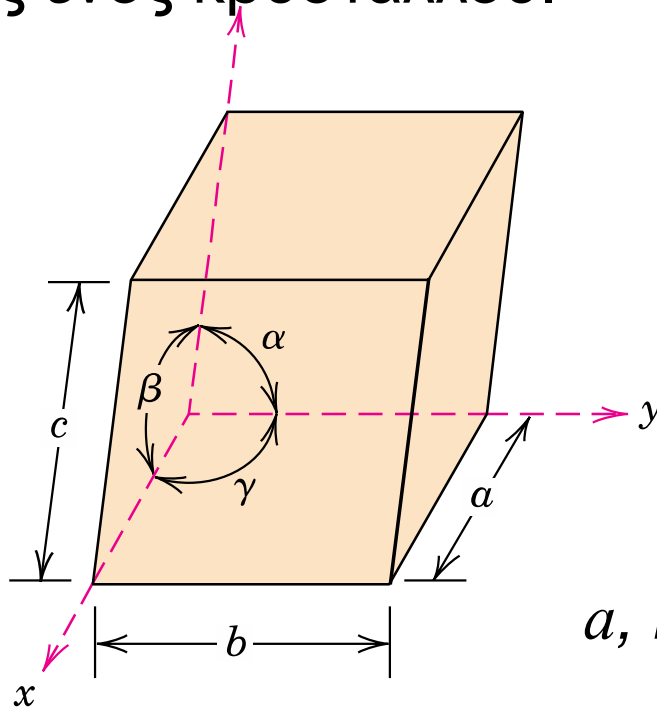
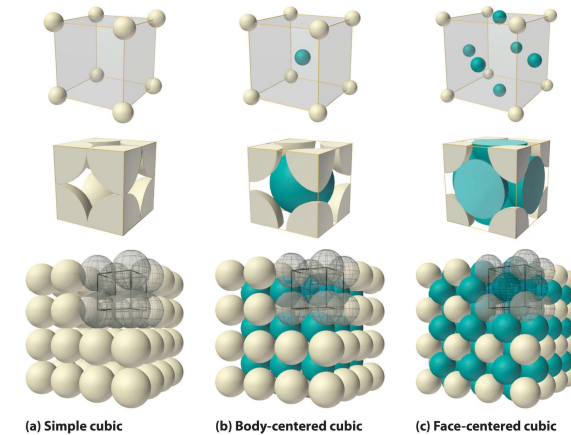


(c)

‘Μοντέλο ατομικών σκληρών σφαιρών’

Κρυσταλλικά συστήματα

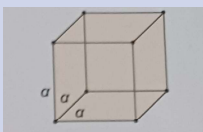
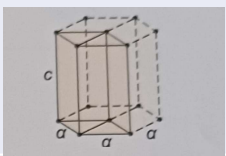
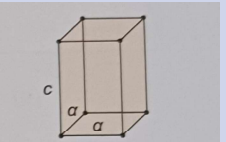
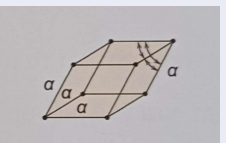
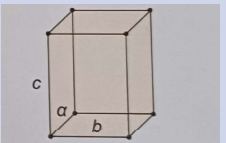
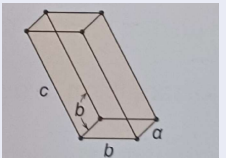
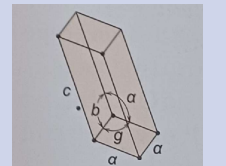
Μοναδιαία κυψελίδα: ο στοιχειώδης (ελάχιστος) όγκος που εμπεριέχει το πλήρες (επαναλαμβανόμενο) μοτίβο πλέγματος ενός κρυστάλλου.



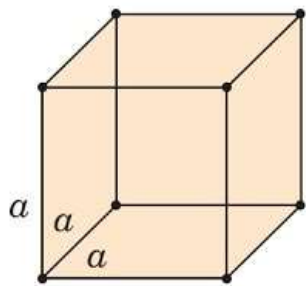
7 κρυσταλλικά συστήματα

14 κρυσταλλικά πλέγματα (ή
πλέγματα Bravais)

a , b , c και α , β , γ παράμετροι πλέγματος

Κρυσταλλικό Σύστημα	Μήκη Αξόνων	Γωνίες Αξόνων	Γεωμετρία Μοναδιαίας Κυψελίδας	Παραδείγματα																																
Κυβικό	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		Fe, Cu, NaCl, NaBr, διαμάντι, σιδηροπυρίτης																																
Εξαγωνικό	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$		Γραφίτης, ZnO, CdS, πάγος, κορούνδιο (ρουμπίνι, ζαφείρι)																																
Τετραγωνικό	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		Sn, SnO2, MnO2, NH4Br, χαλκοπυρίτης																																
Ρομβοεδρικό (ή τριγωνικό)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$		Bi, Al2O3, NaNO3, KNO3, τοπάζιο, αιματίτης, ασβεστίτης, δολομίτης																																
Ορθορομβικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		Ιόδιο, KNO3, ρομβικό θείο, αραγωνίτης , ολιβίνης																																
Μονοκλινές	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$		Ζάχαρη, θείο, βόραξ, Τάλκης, Μελαμίνη																																
Τρικλινές	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	 <table><tr><th>Σύστημα</th><th>Αξόνες</th><th>Γωνίες</th><th>Παραδείγματα</th></tr><tr><td>Κυβικό</td><td>$a=b=c$</td><td>$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$</td><td>Fe, Cu, NaCl, NaBr, διαμάντι, σιδηροπυρίτης</td></tr><tr><td>Εξαγωνικό</td><td>$a=b \neq c$</td><td>$\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$</td><td>Γραφίτης, ZnO, CdS, πάγος, κορούνδιο (ρουμπίνι, ζαφείρι)</td></tr><tr><td>Τετραγωνικό</td><td>$a=b \neq c$</td><td>$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$</td><td>Sn, SnO2, MnO2, NH4Br, χαλκοπυρίτης</td></tr><tr><td>Ρομβοεδρικό</td><td>$a=b=c$</td><td>$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$</td><td>Bi, Al2O3, NaNO3, KNO3, τοπάζιο, αιματίτης, ασβεστίτης, δολομίτης</td></tr><tr><td>Ορθορομβικό</td><td>$a \neq b \neq c$</td><td>$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$</td><td>Ιόδιο, KNO3, ρομβικό θείο, αραγωνίτης, ολιβίνης</td></tr><tr><td>Μονοκλινές</td><td>$a \neq b \neq c$</td><td>$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$</td><td>Ζάχαρη, θείο, βόραξ, Τάλκης, Μελαμίνη</td></tr><tr><td>Τρικλινές</td><td>$a \neq b \neq c$</td><td>$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$</td><td>H3BO3, K2Cr2O7, CuSO4·5H2O, κυανίτης, πλαγιόκλαστα</td></tr></table>	Σύστημα	Αξόνες	Γωνίες	Παραδείγματα	Κυβικό	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Fe, Cu, NaCl, NaBr, διαμάντι, σιδηροπυρίτης	Εξαγωνικό	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	Γραφίτης, ZnO, CdS, πάγος, κορούνδιο (ρουμπίνι, ζαφείρι)	Τετραγωνικό	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Sn, SnO2, MnO2, NH4Br, χαλκοπυρίτης	Ρομβοεδρικό	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	Bi, Al2O3, NaNO3, KNO3, τοπάζιο, αιματίτης, ασβεστίτης, δολομίτης	Ορθορομβικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Ιόδιο, KNO3, ρομβικό θείο, αραγωνίτης, ολιβίνης	Μονοκλινές	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	Ζάχαρη, θείο, βόραξ, Τάλκης, Μελαμίνη	Τρικλινές	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	H3BO3, K2Cr2O7, CuSO4·5H2O, κυανίτης, πλαγιόκλαστα	H3BO3, K2Cr2O7, CuSO4·5H2O, κυανίτης, πλαγιόκλαστα
Σύστημα	Αξόνες	Γωνίες	Παραδείγματα																																	
Κυβικό	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Fe, Cu, NaCl, NaBr, διαμάντι, σιδηροπυρίτης																																	
Εξαγωνικό	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	Γραφίτης, ZnO, CdS, πάγος, κορούνδιο (ρουμπίνι, ζαφείρι)																																	
Τετραγωνικό	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Sn, SnO2, MnO2, NH4Br, χαλκοπυρίτης																																	
Ρομβοεδρικό	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	Bi, Al2O3, NaNO3, KNO3, τοπάζιο, αιματίτης, ασβεστίτης, δολομίτης																																	
Ορθορομβικό	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Ιόδιο, KNO3, ρομβικό θείο, αραγωνίτης, ολιβίνης																																	
Μονοκλινές	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	Ζάχαρη, θείο, βόραξ, Τάλκης, Μελαμίνη																																	
Τρικλινές	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	H3BO3, K2Cr2O7, CuSO4·5H2O, κυανίτης, πλαγιόκλαστα																																	

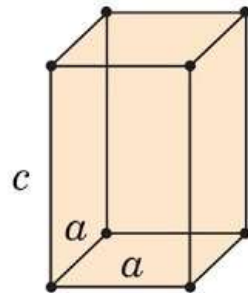
Seven Crystal Systems



Cubic

$$a = b = c$$

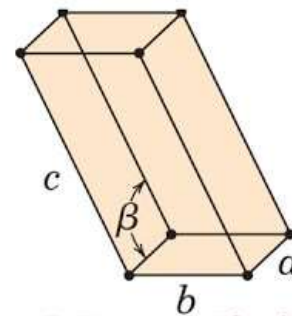
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Tetragonal

$$a = b \neq c$$

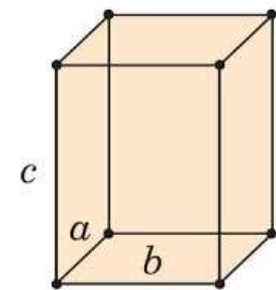
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

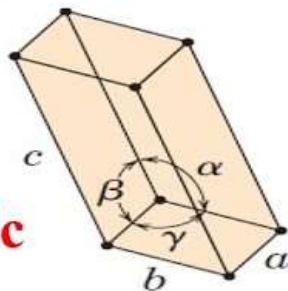
$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



Orthorhombic

$$a \neq b \neq c$$

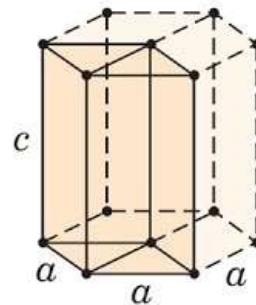
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Triclinic

$$a \neq b \neq c$$

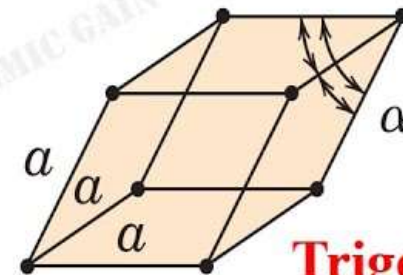
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Hexagonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

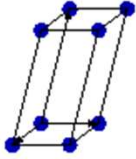
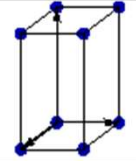
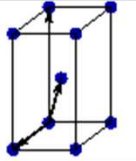
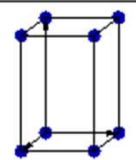
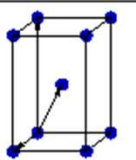
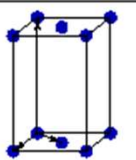
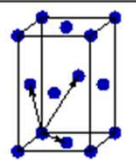
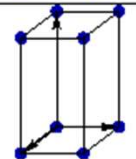
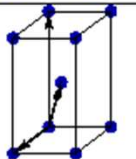
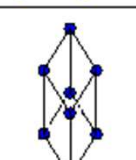
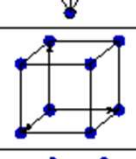
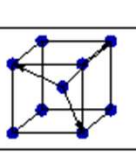
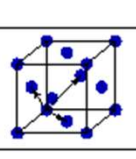
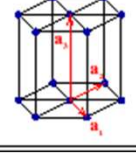


Trigonal

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

Sr. No.	Crystal System	Axial length of Unit Cell	Inter axial angles	Number of Lattice in the system
1	Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3
2	Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2
3	Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	4
4	Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	2
5	Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	1
6	Trigonal	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	1
7	Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \text{ and } \gamma = 120^\circ$	1

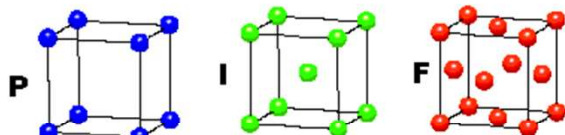
Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				

7 κρυσταλλικά συστήματα και 14 κρυσταλλικά πλέγματα (ή πλέγματα Bravais)

CUBIC

$$a = b = c$$

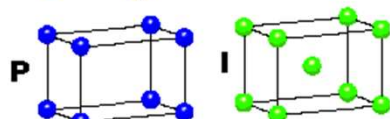
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

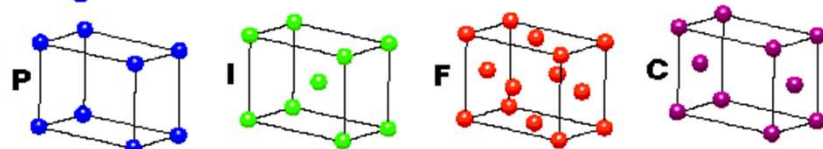
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

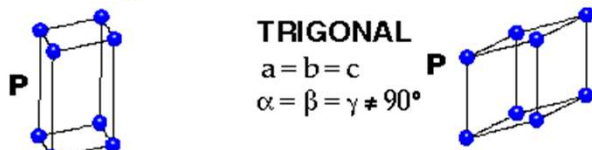


HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

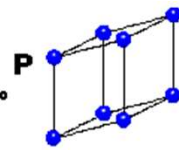
$$\gamma = 120^\circ$$



TRIGONAL

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

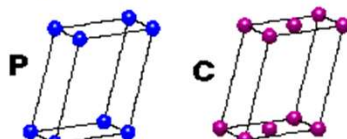


MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

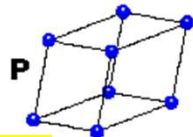
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

P: απλό, βασικό

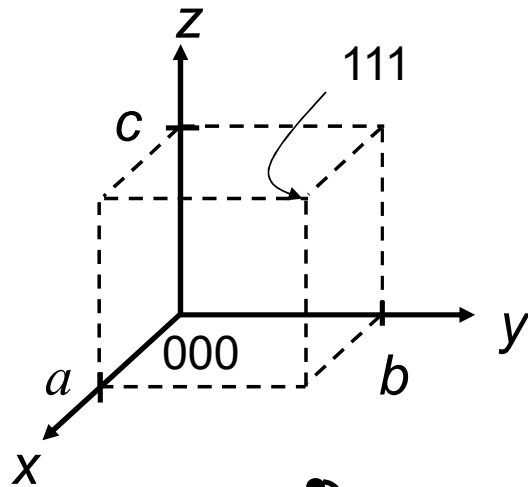
Body-centered: χωροκεντρωμένο ή ενδοκεντρωμένο

Face-centered: εδροκεντρωμένο ή ολοεδρικά κεντρωμένο

Side-centered: πλευροκεντρωμένο ή μονοεδρικά κεντρωμένο

Triclinic	$\bar{1}$				
		$P\bar{1}$			
Monoclinic	$2/m$				
		$P2/m$	$C2/m$		
Orthorhombic	mmm				
		$Pmmm$	$Cmmm$	$Immm$	$Fmmm$
Tetragonal	$4/mmm$				
		$P4/mmm$		$I4/mmm$	
Rhombohedral	$\bar{3}m$				
		$R\bar{3}m$			
Hexagonal	$6/mmm$				
		$P6/mmm$			
Cubic	$m\bar{3}m$				
		$Pm\bar{3}m$		$Im\bar{3}m$	$Fm\bar{3}m$

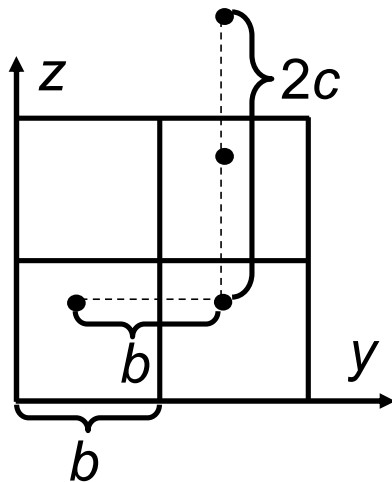
Χαρακτηριστικά μοναδιαίας κυψελίδας



Οι συντεταγμένες του σημείου στο κέντρο της μοναδιαίας κυψελίδας είναι

$$a/2, b/2, c/2 \quad \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$$

Οι συντεταγμένες των σημείων στις γωνίες της μοναδιαίας κυψελίδας είναι 111

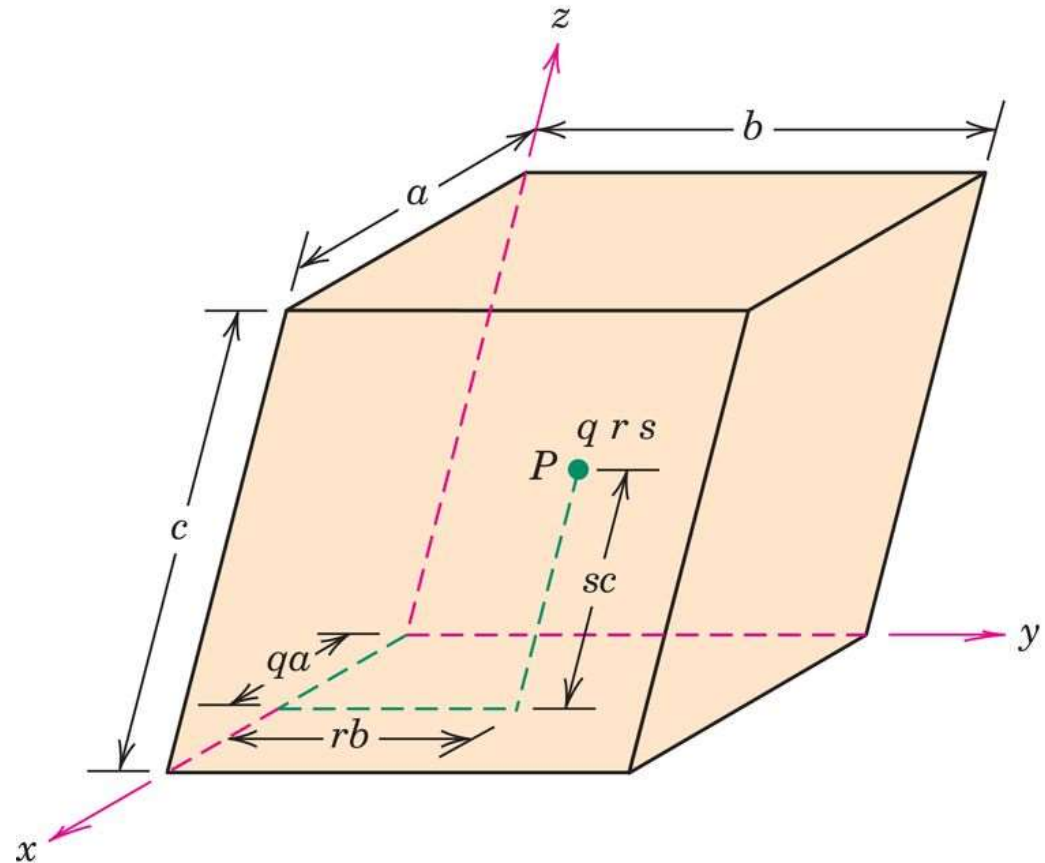


Μετατόπιση κατά ακέραιο πολλαπλάσιο των σταθερών πλέγματος οδηγεί στην ίδια ακριβώς θέση μιας παρακείμενης μοναδιαίας κυψελίδας

Συντεταγμένες σημείων

q, r, s

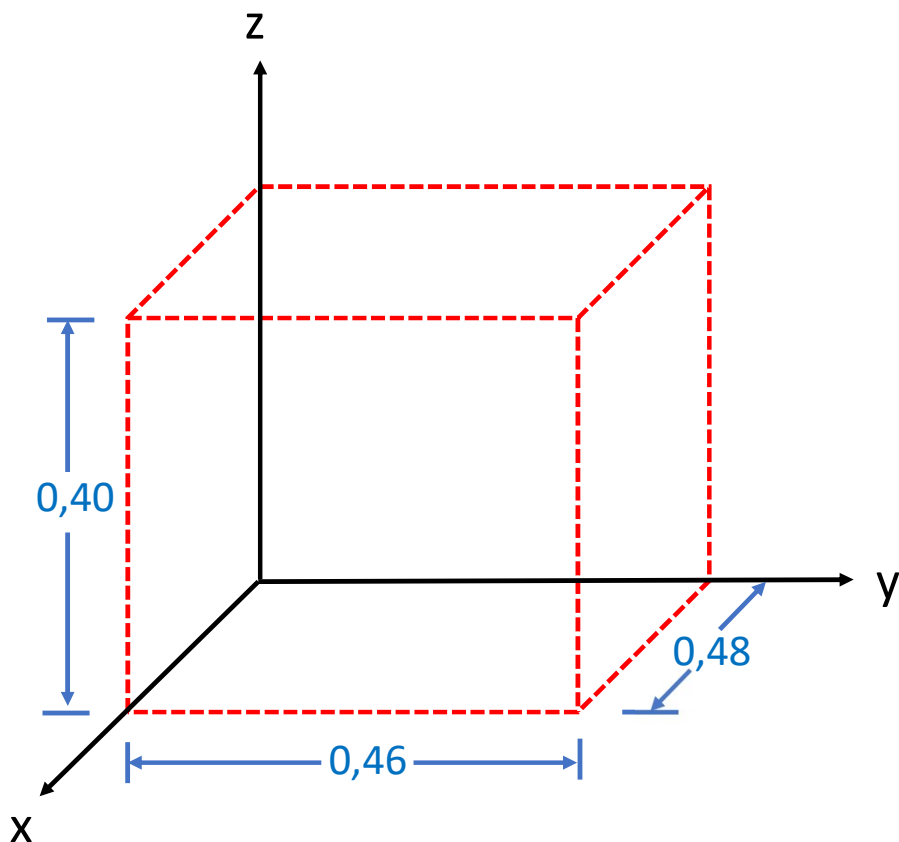
Πλεγματικές θέσεις: qa, rb, sc





Θέση ενός σημείου με καθορισμένες συντεταγμένες

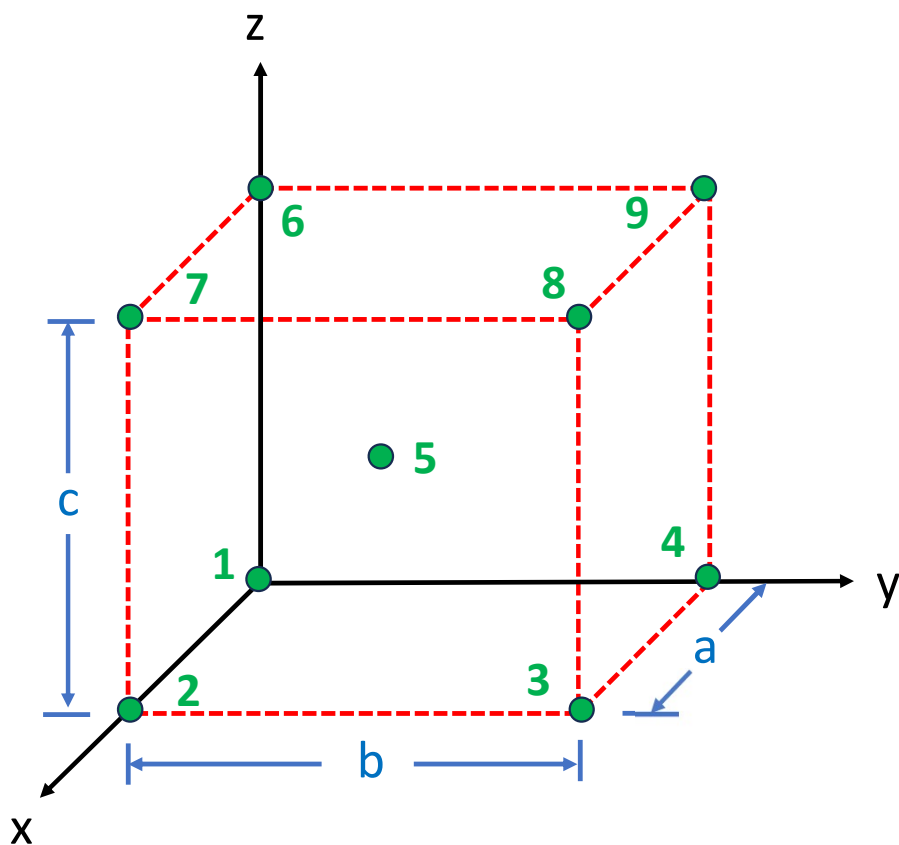
Στην μοναδιαία κυψελίδα που φαίνεται στο σχήμα, τοποθετείστε ένα σημείο με συντεταγμένες $\frac{1}{4}$ $1 \frac{1}{2}$





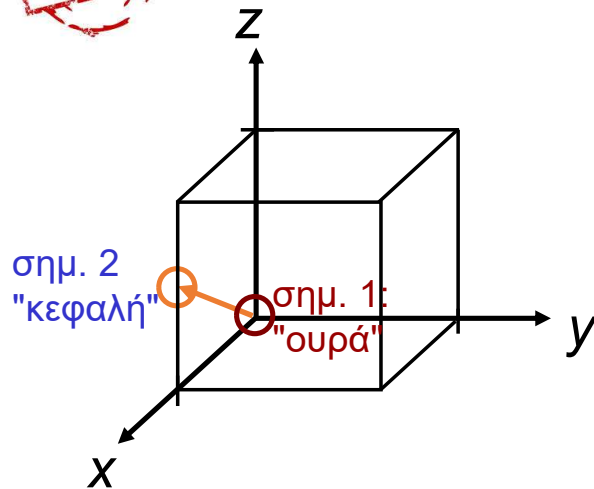
Προσδιορισμός δεικτών συντεταγμένων ενός σημείου

Προσδιορίστε τους δείκτες συντεταγμένων για όλα τα αριθμημένα **σημεία** της μοναδιαίας κυψελίδας του σχήματος



Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις

Αλγόριθμος προσδιορισμού



1. Εύρεση των συντεταγμένων για την "ουρά" και την "κεφαλή" του διανύσματος, σημεία 1 (x_1, y_1, z_1) και 2 (x_2, y_2, z_2), αντίστοιχα.
2. Αφαίρεση των συντεταγμένων του σημείου "ουράς" από αυτές του σημείου "κεφαλής".
3. Κανονικοποίηση των διαφορών των συντεταγμένων βάσει των παραμέτρων πλέγματος a, b , και c :

$$\frac{x_2 - x_1}{a} \quad \frac{y_2 - y_1}{b} \quad \frac{z_2 - z_1}{c}$$

4. Προσαρμογή κάθε τιμής στον μικρότερο ακέραιο
5. Το αποτέλεσμα περικλείεται σε αγκύλες, χωρίς κόμματα

Π.χ.:

σημ. 1 $x_1 = 0, y_1 = 0, z_1 = 0$

σημ. 2 $x_2 = a, y_2 = 0, z_2 = c/2$

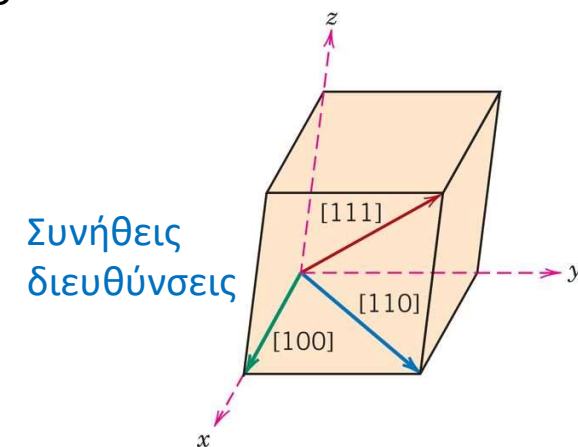
$$\frac{a-0}{a} \quad \frac{0-0}{b} \quad \frac{c/2-0}{c}$$

$[uvw]$

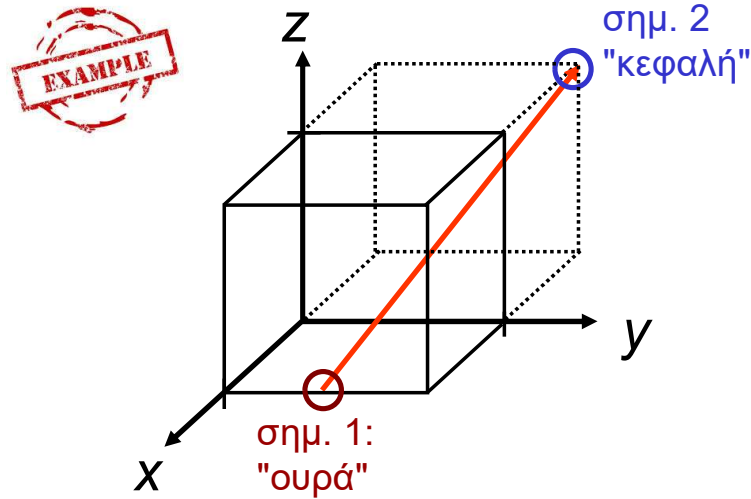
$$\Rightarrow 1, 0, 1/2 \Rightarrow 2, 0, 1$$

$$\Rightarrow [201]$$

Για κάθε ένα από τους άξονες υπάρχουν αρνητικές και θετικές τιμές π.χ.
 $[1\bar{1}1]$



Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις



Παράδειγμα 2:

σημ. 1 $x_1 = a, y_1 = b/2, z_1 = 0$

σημ. 2 $x_2 = -a, y_2 = b, z_2 = c$

$$\frac{-a - a}{a} \quad \frac{b - b/2}{b} \quad \frac{c - 0}{c}$$

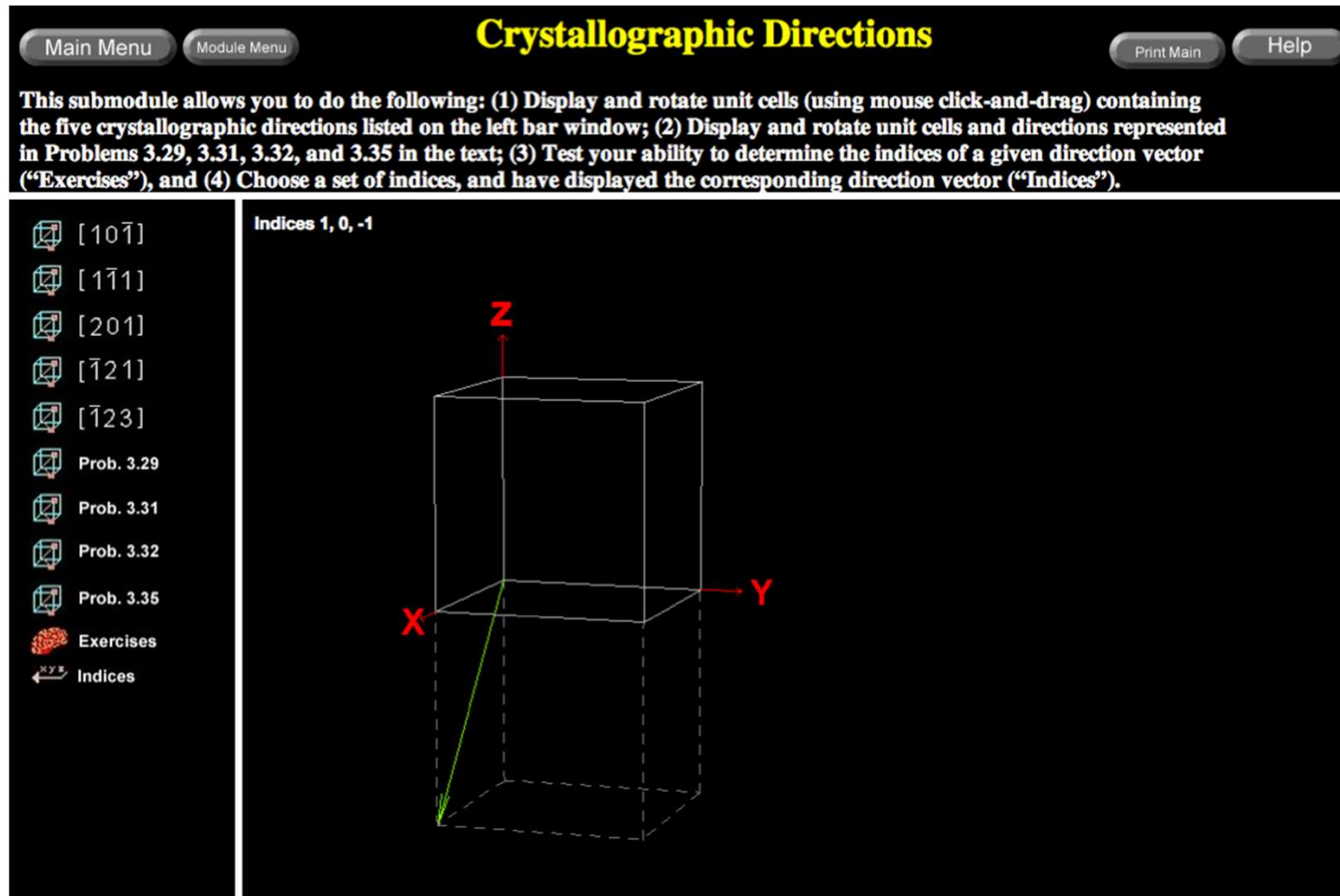
$$\Rightarrow -2, 1/2, 1$$

Πολλαπλασιασμός $\times 2$ για απαλοιφή του κλάσματος

$-4, 1, 2 \Rightarrow [\bar{4}12]$ η υπεργράμμιση στο 4
αναπαριστά αρνητικό δείκτη

“οικογένειες” διευθύνσεων: $\langle uvnw \rangle$

Προσομοίωση* μοναδιαίας κυψελίδας (κρυσταλλογραφική διεύθυνση [101])



* Στο λογισμικό VMSE

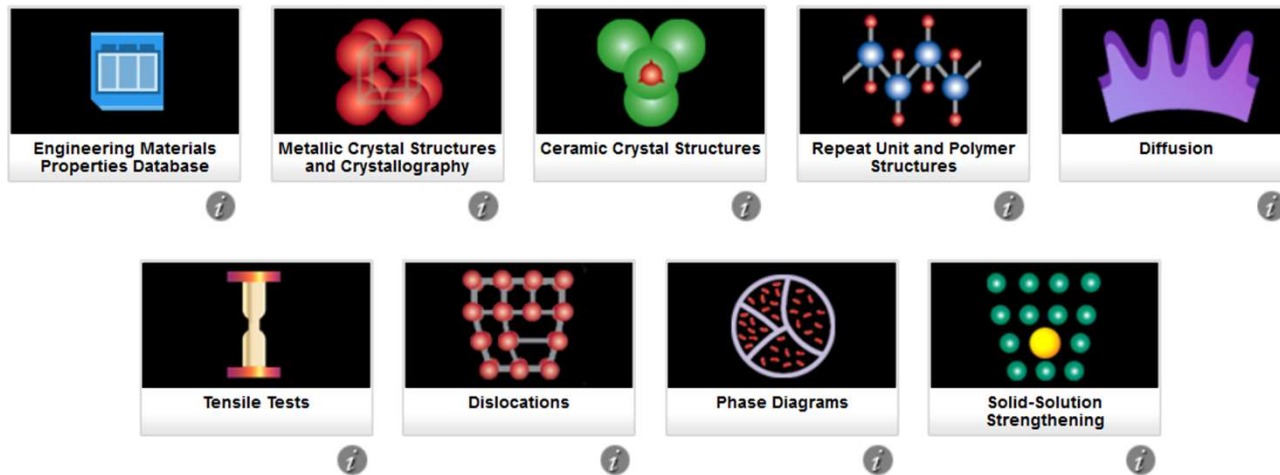
<https://drbuc2jl8158i.cloudfront.net/VMSE/index.html>

<https://drbuc2jl8158i.cloudfront.net/VMSE/index.html>

Virtual Materials Science and Engineering



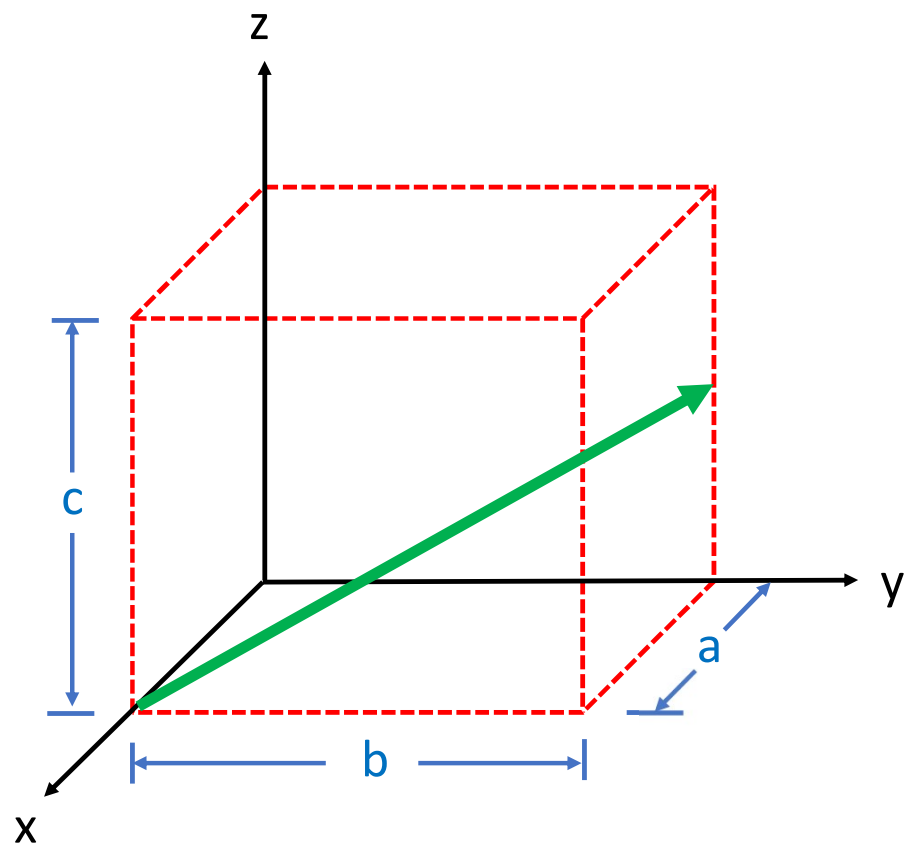
Virtual Materials Science and Engineering (VMSE), is composed of (1) interactive 3-D simulations and animations, and (2) a materials properties/cost database.





Καθορισμός δεικτών διεύθυνσης

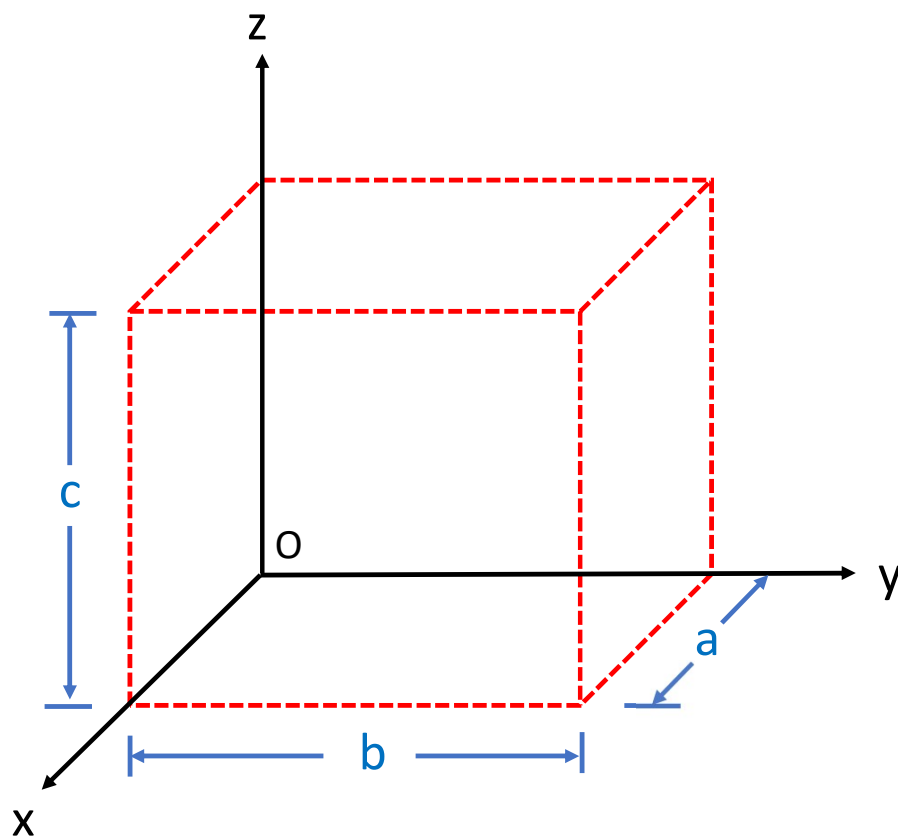
Να οριστούν οι δείκτες της διεύθυνσης του παρακάτω σχήματος





Σχεδιασμός καθορισμένης κρυσταλλογραφικής διεύθυνσης

Να σχεδιαστεί η διεύθυνση $[1\bar{1}0]$ στην μοναδιαία κυψελίδα του σχήματος. Η ουρά είναι το σημείο O (αρχή συντεταγμένων)



Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις

Κρυσταλλογραφικά ισοδύναμες: η απόσταση μεταξύ των ατόμων κατά μήκος της κάθε διεύθυνσης είναι η ίδια.

π.χ. Κυβική συμμετρία:

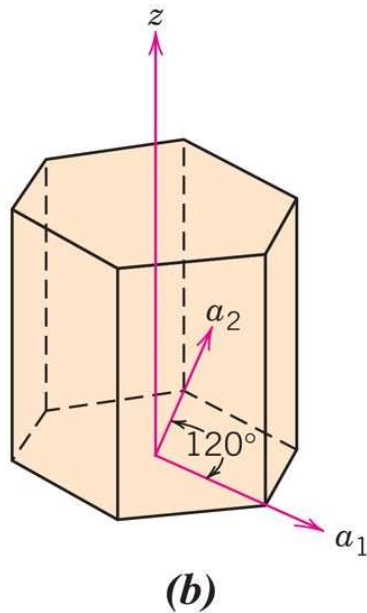
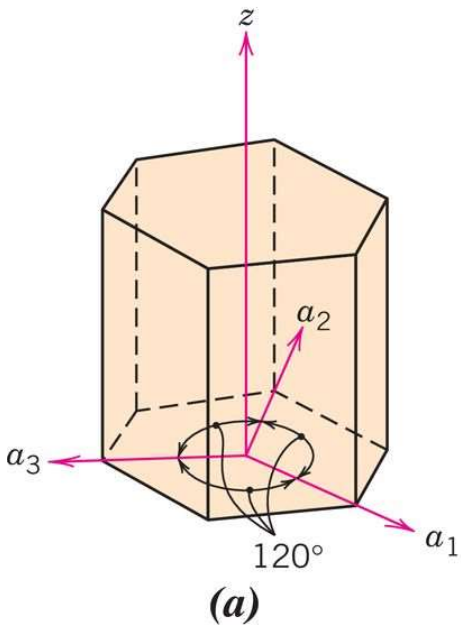
- $[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$, $[00\bar{1}]$ – Οικογένεια $\langle 100 \rangle$

- Στην κυβική συμμετρία διευθύνσεις που έχουν ίδιους δείκτες ανεξαρτήτου σειράς ή προσήμου όπως $[123]$ και $[\bar{2}1\bar{3}]$ είναι ισοδύναμες. Δεν ισχύει στα υπόλοιπα κρυσταλλικά συστήματα π.χ. σε κρυστάλλους με τετραγωνική συμμετρία οι $[100]$ και $[010]$ είναι ισοδύναμες ενώ δεν είναι ισοδύναμες οι $[100]$ και $[001]$.

Διευθύνσεις σε εξαγωνικούς κρυστάλλους

Σε εξαγωνικά κρυσταλλικά συστήματα μερικές κρυσταλλογραφικά ισοδύναμες διευθύνσεις δεν έχουν την ίδια τριάδα δεικτών π.χ. οι $[111]$ και $[\bar{1}01]$

Λύση: Σύστημα συντεταγμένων τεσσάρων αξόνων ή **συντεταγμένες Miller-Bravais**.



$$[UVW] \rightarrow [uvtw]$$

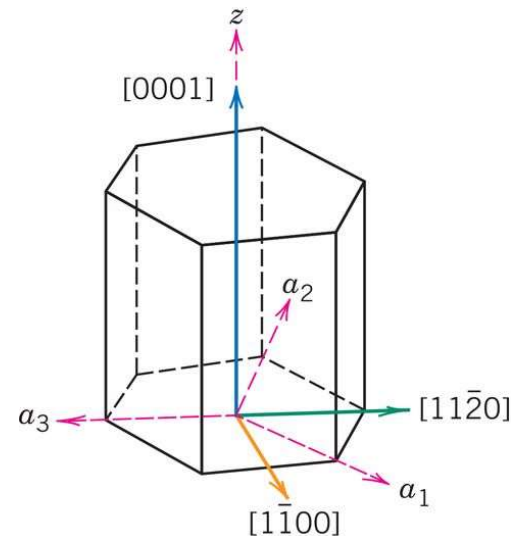
$$u = 1/3 (2U - V)$$

$$v = 1/3 (2V - U)$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = W$$

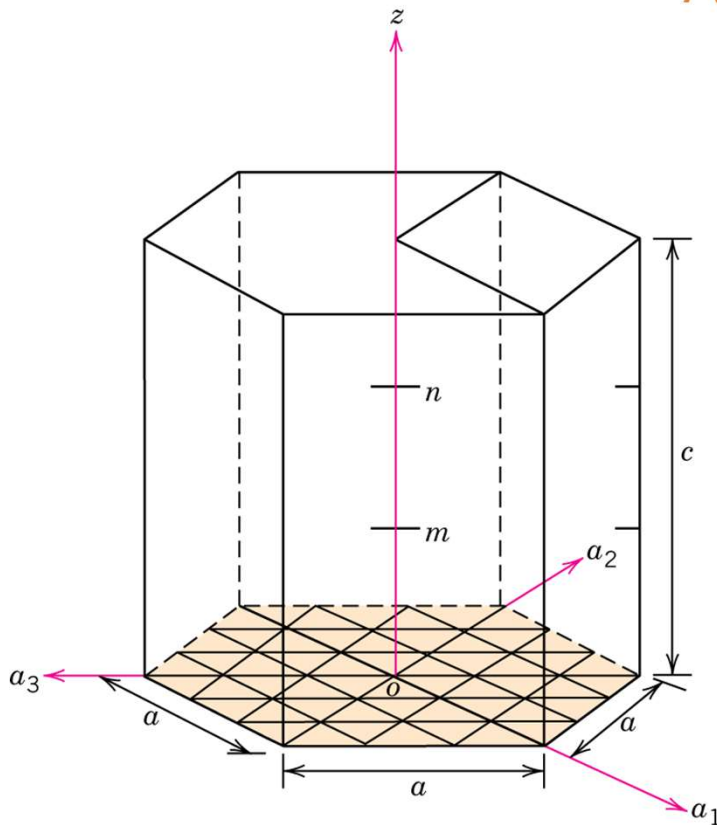
Π.χ. η διεύθυνση $[010]$
γίνεται: $[\bar{1}2\bar{1}0]$



Μεγίστης πυκνότητας εξαγωνική, HCP (Hexagonal Close-Packed)

Σχεδιασμός κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων, δομή HCP (1)

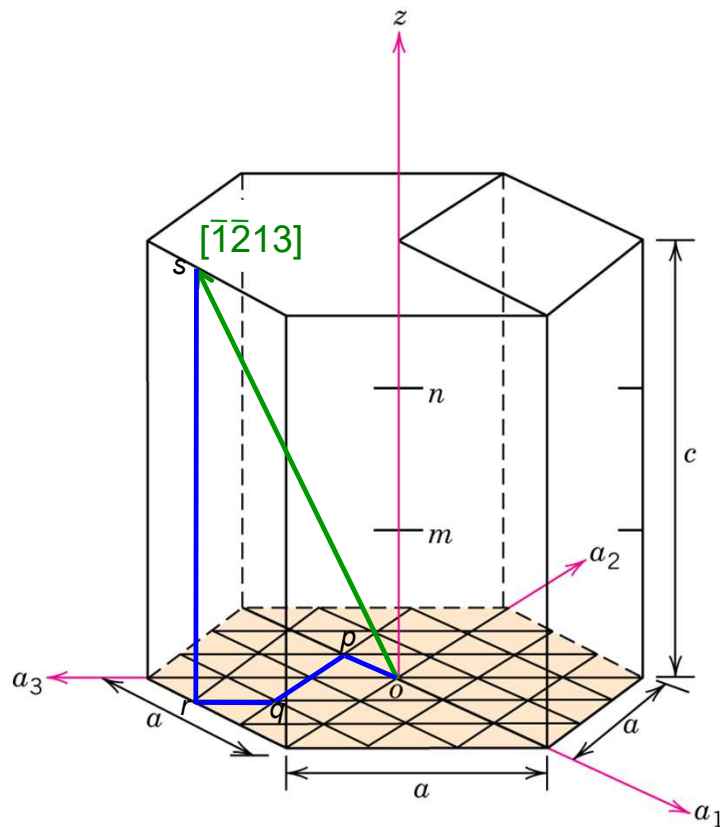
Αλγόριθμος (δείκτες Miller-Bravais)



1. Απαλοιφή των αγκύλων
2. Διαίρεση με τον μεγαλύτερο ακέραιο, έτσι ώστε όλες οι τιμές να είναι ≤ 1
3. Πολλαπλασιασμός όρων με κατάλληλη διάσταση της μοναδιαίας κυψελίδας [δηλ. a για τους άξονες a_1 , a_2 , και a_3 ή c για τον z άξονα] για υπολογισμό προβολών
4. Κατασκευή του διανύσματος με τοποθέτηση της "ουράς" στο σημείο αρχής των αξόνων και επέκταση, βάσει των υπολογισμένων προβολών, για τον εντοπισμό του σημείου "κεφαλής"

Σχεδιασμός κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων, δομή HCP (2)

- Σχεδίαση της διεύθυνσης $[\bar{1}\bar{2}13]$ σε μοναδιαία κυψελίδα πλέγματος εξαγωνικής δομής.



Αλγόριθμος

1. Απαλοιφή αγκύλων

a_1	a_2	a_3	z
-1	-2	1	3

2. Διαίρεση διά 3

$-\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	1
----------------	----------------	---------------	---

3. Υπολογισμός προβολών

$-\frac{a}{3}$	$-\frac{2a}{3}$	$\frac{a}{3}$	c
----------------	-----------------	---------------	-----

4. Κατασκευή διανύσματος

έναρξη στο σημείο o

$-a/3$ μονάδες πάνω στον άξονα a_1 έως το σημείο p

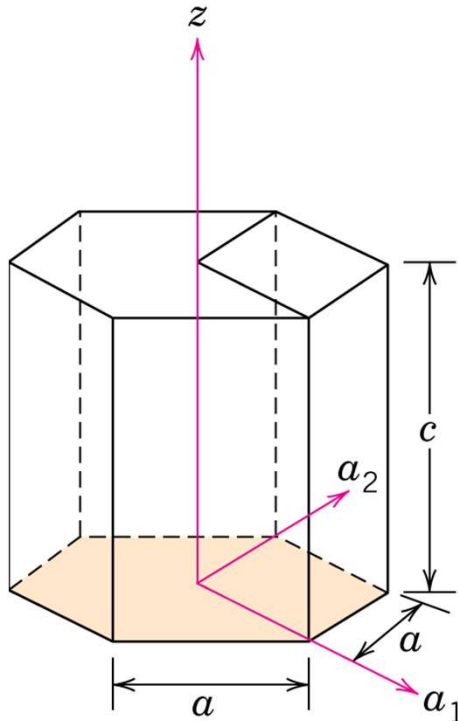
$-2a/3$ μονάδες παράλληλα στον άξονα a_2 έως το σημείο q

$a/3$ μονάδες παράλληλα στον άξονα a_3 έως το σημείο r

c μονάδες παράλληλα στον z άξονα έως το σημείο s

Η διεύθυνση $[\bar{1}\bar{2}13]$ αναπαρίσταται μέσω του διανύσματος από το σημείο o έως το σημείο s

Καθορισμός κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων, δομή HCP (1)



Αλγόριθμος

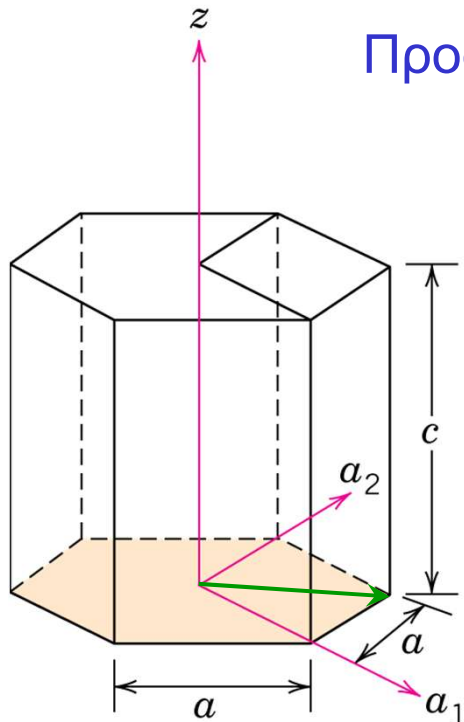
1. Εύρεση συντεταγμένων "ουράς" διανύσματος [σημ. 1: x_1 , y_1 , & z_1] και "κεφαλής" διανύσματος [σημ. 2: x_2 , y_2 , & z_2] βάσει των τριών αξόνων (a_1 , a_2 , z)
2. Αφαίρεση των συντεταγμένων του σημείου "ουράς" από αυτές του σημείου "κεφαλής" και κανονικοποίηση αποτελέσματος βάσει διαστάσεων (a και c) της μοναδιαίας κυψελίδας
3. Προσαρμογή στις πλησιέστερες (μικρότερες) ακέραιες τιμές
4. Η προκύπτουσα τριάδα σημείων (συντεταγμένες σε σύστημα τριών αξόνων) περικλείεται σε αγκύλες, χωρίς κόμματα: [$u'v'w'$]
5. Μετατροπή σε συντεταγμένες πλέγματος Miller-Bravais (τεσσάρων αξόνων) χρησιμοποιώντας τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$u = \frac{1}{3}(2u' - v') \quad v = \frac{1}{3}(2v' - u')$$

$$t = -(u + v) \quad w = w'$$

6. Προσαρμογή αποτελεσμάτων στις πλησιέστερες (μικρότερες) ακέραιες τιμές και τοποθέτηση σε αγκύλες: [$uvtw$]

Καθορισμός κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων, δομή HCP (2)



Προσδιορισμός δεικτών για το πράσινο διάνυσμα

Παράδειγμα

	a_1	a_2	z
1. Θέση "ουράς"	0	0	0
Θέση "κεφαλής"	a	a	$0c$
2. Κανονικοποίηση	1	1	0
3. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές	1	1	0
4. Τοποθέτηση σε αγκύλες	[110]		
5. Μετατροπή σε αντίστοιχες παραμέτρους 4-αξόνων			

$$u = \frac{1}{3} [(2)(1) - (1)] = \frac{1}{3} \quad v = \frac{1}{3} [(2)(1) - (1)] = \frac{1}{3}$$

$$t = -\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right) = -\frac{2}{3} \quad w = 0$$

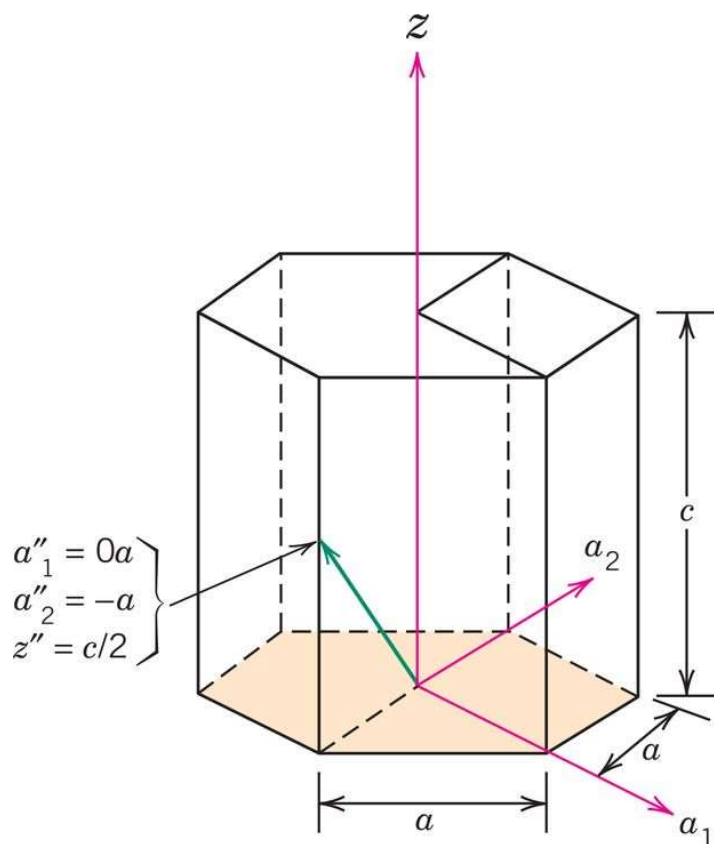
6. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές & τοποθέτηση σε αγκύλες

$$\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, -\frac{2}{3}, 0 \Rightarrow 1, 1, -2, 0 \Rightarrow [11\bar{2}0]$$

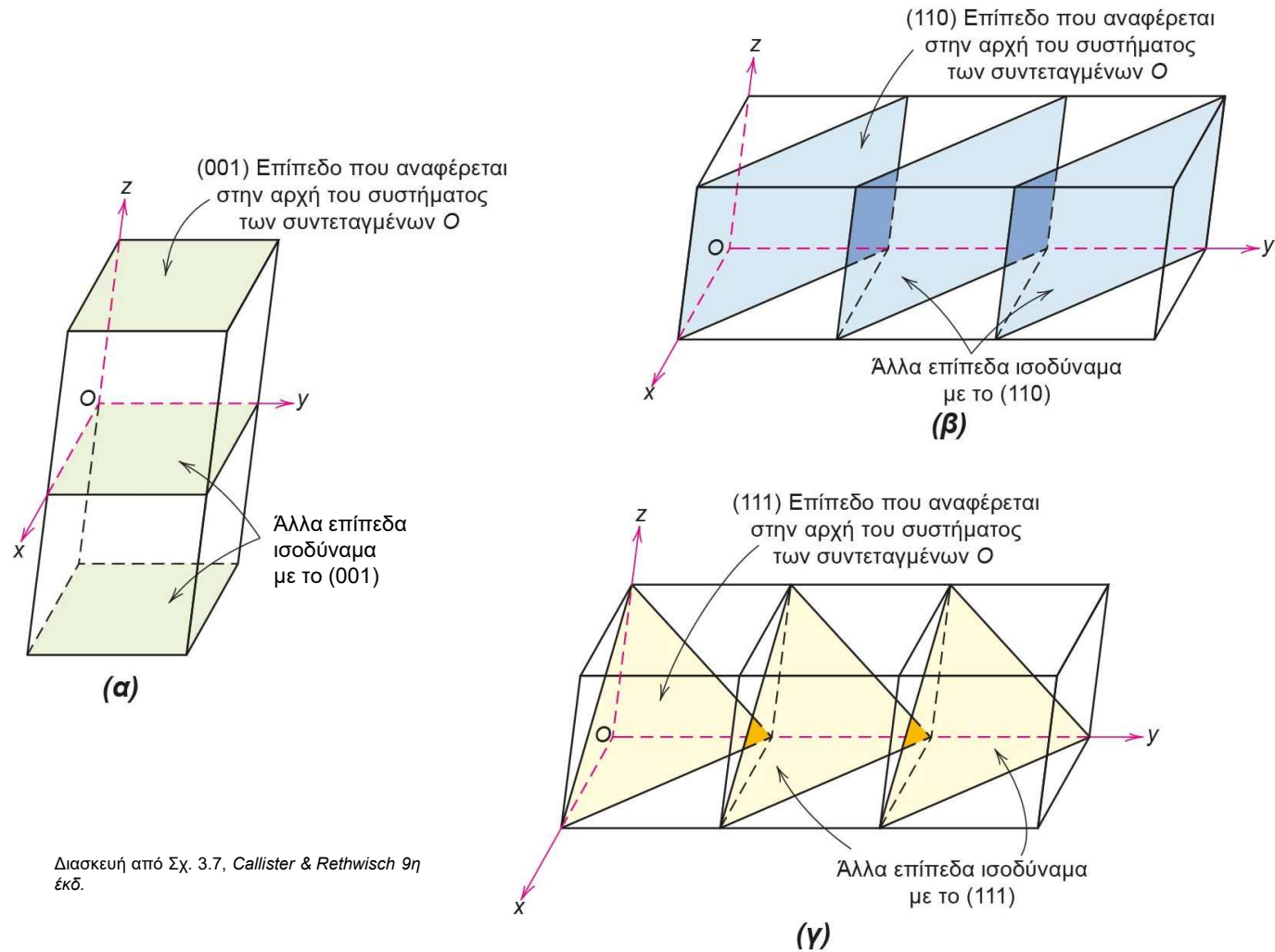


Καθορισμός δεικτών διεύθυνσης σε μια εξαγωνική μοναδιαία κυψελίδα

Να καθοριστούν οι δείκτες (με σύστημα τεσσάρων δεικτών) για την διεύθυνση που φαίνεται στο σχήμα.



Κρυσταλλογραφικά επίπεδα



Διασκευή από Σχ. 3.7, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

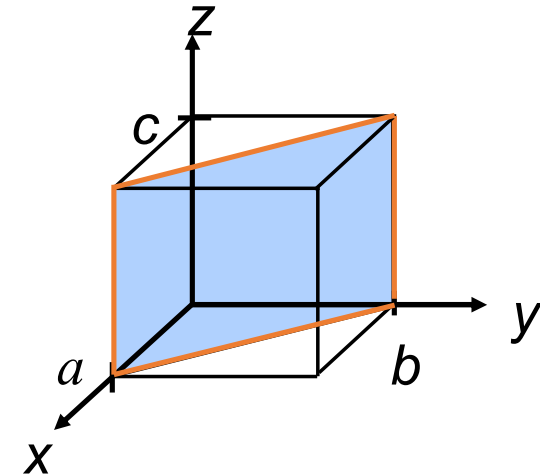
Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

- **Δείκτες Miller (hkl)** : Υπολογισμός μαθ. αντίστροφου για τις συντεταγμένες ενός επιπέδου (σημεία τομής με τους τρεις άξονες), απαλοιφή δεκαδικών & κοινών πολλαπλασίων. Όλα τα παράλληλα επίπεδα έχουν ίδιους δείκτες Miller.
- Αλγόριθμος
 1. Ανάγνωση συντεταγμένων του επιπέδου ως προς άξονες a , b , c
 2. Υπολογισμός αντιστρόφων των συντεταγμένων
 3. Αναγωγή στις πλησιέστερες (μικρότερες) ακέραιες τιμές
 4. Τοποθέτηση αποτελέσματος σε παρενθέσεις, χωρίς κόμματα: **(hkl)**

Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

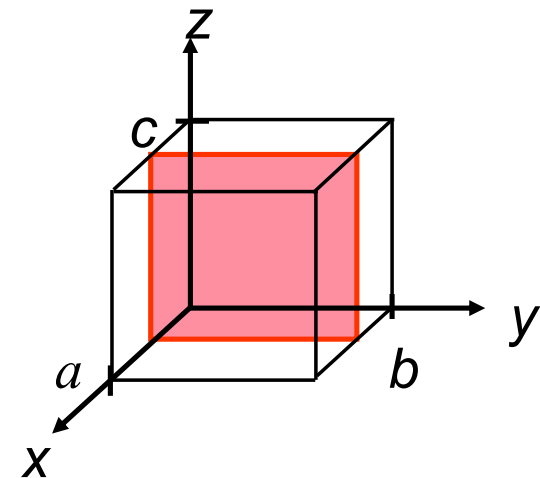
Παράδειγμα

	a	b	c
1. Συντεταγμένες	1	1	∞
2. Υπολογισμός αντιστρόφων	1/1	1/1	1/ ∞
	1	1	0
3. Αναγ. σε ακέραιες τιμές	1	1	0
4. Δείκτες Miller	(110)		



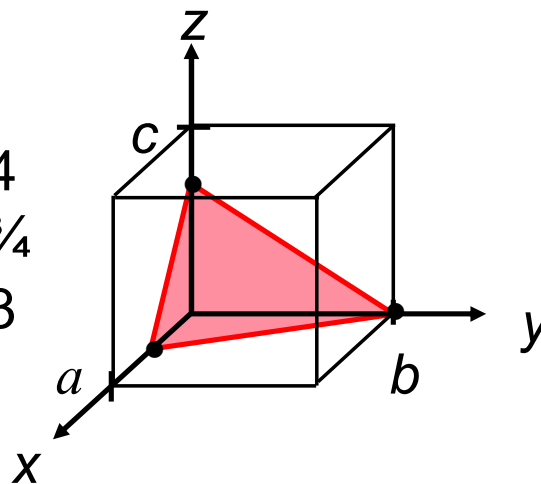
Παράδειγμα

	a	b	c
1. Συντεταγμένες	1/2	∞	∞
2. Υπολογισμός αντιστρόφων	1/1/2	1/ ∞	1/ ∞
	2	0	0
3. Αναγ. σε ακέραιες τιμές	2	0	0
4. Δείκτες Miller	(100)		



Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

<u>Παράδειγμα</u>	a	b	c
1. Συντεταγμένες	$1/2$	1	$3/4$
2. Υπολογισμός αντιστρόφων	$1/1/2$	$1/1$	$1/3/4$
	2	1	$4/3$
3. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές	6	3	4
4. Δείκτες Miller	(634)		



Αναγραφή “οικογένειας” επιπέδων: $\{hkl\}$

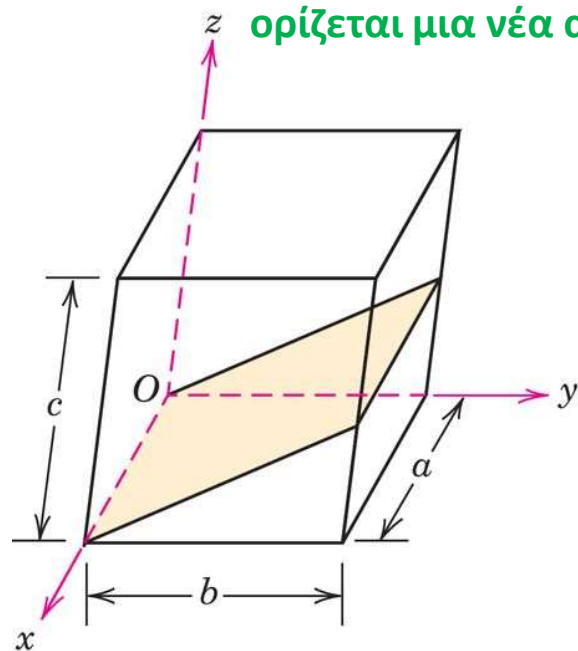
Π.χ.: $\{100\} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$



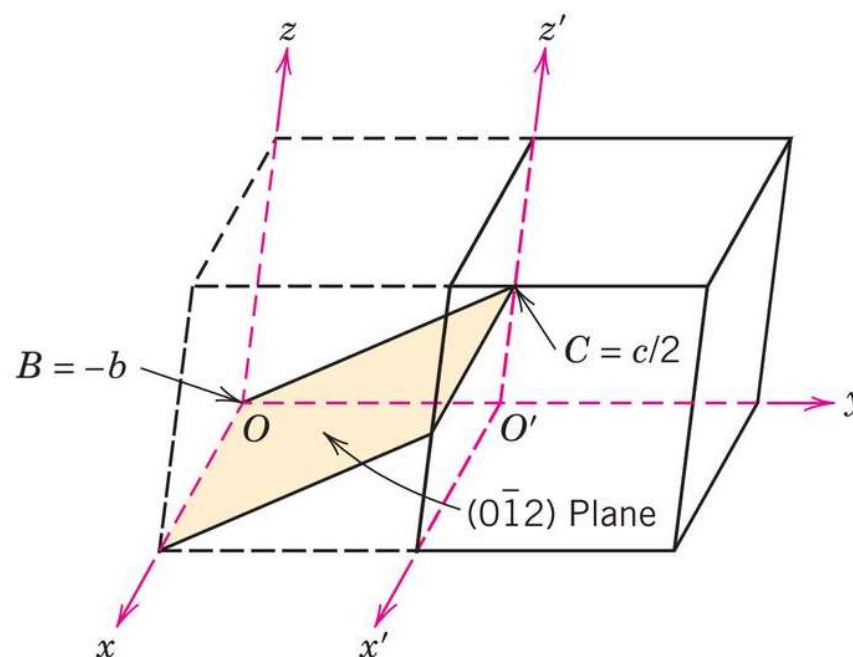
Προσδιορισμός δεικτών Miller ενός επιπέδου

Προσδιορίστε τους δείκτες Miller του επιπέδου του παρακάτω σχήματος

Εάν το επίπεδο διέρχεται από την αρχή του συστήματος των συντεταγμένων τότε κατασκευάζεται άλλο επίπεδο, παράλληλο προς αυτό μέσα στην κυψελίδα με κατάλληλη μετατόπιση. Δηλαδή ορίζεται μια νέα αρχή.



(a)

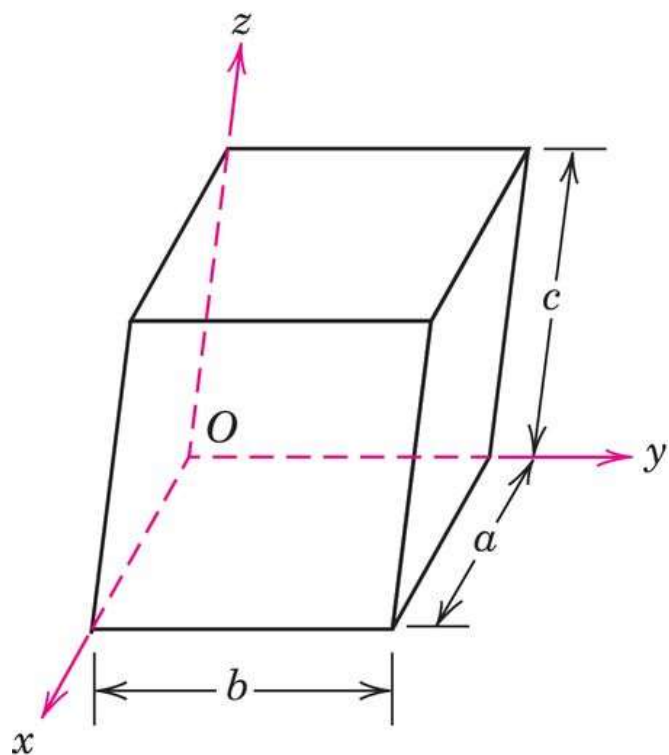


(b)

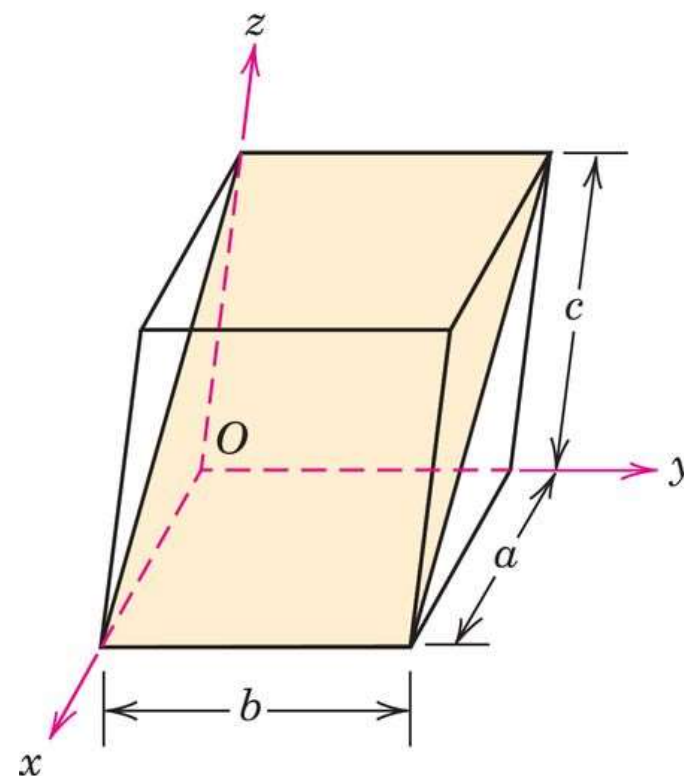
EXAMPLE

Κατασκευή συγκεκριμένου κρυσταλλογραφικού επιπέδου

Κατασκευάστε το επίπεδο (101) μέσα στην ακόλουθη μοναδιαία κυψελίδα



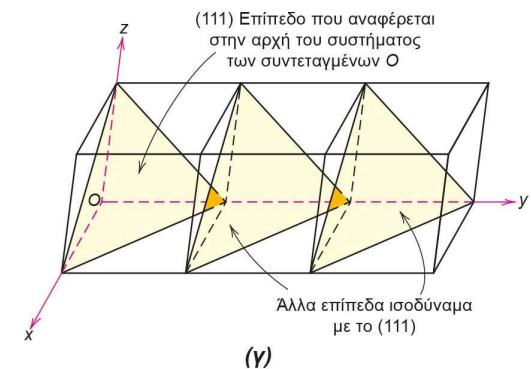
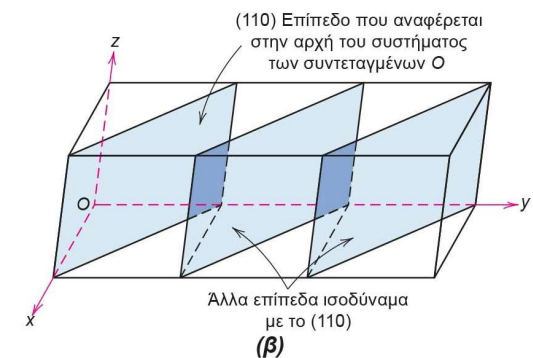
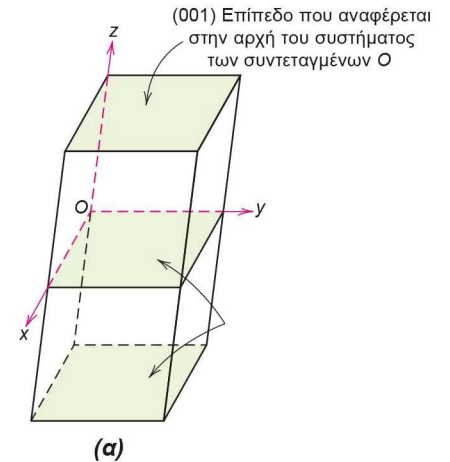
(a)



(c)

Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

- Εάν δύο από τους δείκτες h, k, l είναι μηδενικοί [πχ. (100)] τότε το επίπεδο είναι παράλληλο με μία από τις έδρες της μοναδιαίας κυψελίδας
- Εάν ένας από τους δείκτες h, k, l είναι μηδενικός [πχ. (110)] τότε το επίπεδο είναι παραλληλόγραμμο, έχοντας δύο πλευρές που να συμπίπτουν αντικριστές ακμές της μοναδιαίας κυψελίδας
- Εάν κανένας από τους δείκτες h, k, l δεν είναι μηδενικός [πχ. (111)] τότε όλες οι τομές θα διέρχονται από τις έδρες της μοναδιαίας κυψελίδας



Προσομοίωση κρυσταλλογραφικών επιπέδων (VMSE)

Crystallographic Planes

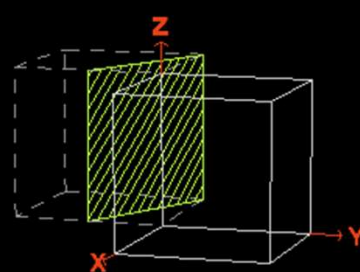
Main Menu Module Menu Help

This submodule allows you to do the following: (1) Display and rotate (using mouse click-and-drag) unit cells containing the five crystallographic planes listed on the left bar window; (2) Display and rotate unit cells and planes represented in Problems 3.40, 3.41, 3.42 and 3.49 in the text; (3) Test your ability to determine the indices of a given plane (“Exercises”), and (4) Choose a set of indices, and have displayed the

Select the correct set of indices for the plane shown.

(0 1 1)
(1 1 $\bar{1}$)
(2 0 1)
($\bar{1}$ 3 0)
(3 $\bar{2}$ 1)
Prob. 3.40
Prob. 3.41
Prob. 3.42
Prob. 3.49
Exercises
Indices

(3 $\bar{1}$ 2)
(0 0 $\bar{1}$)
($\bar{1}$ 1 2)
($\bar{1}$ 3 2)
($\bar{1}$ $\bar{2}$ 0)
(0 $\bar{1}$ 1)

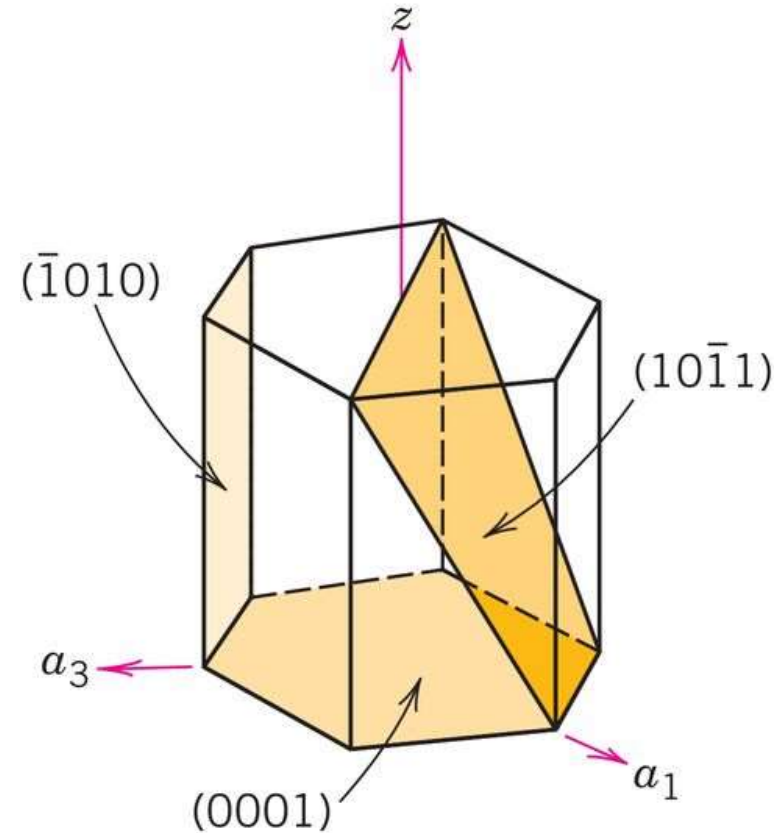


Το λογισμικό VMSE παρέχει επιπλέον δυνατότητες πρακτικής εξάσκησης στη “δεικτοδότηση” κρυσταλλογραφικών επιπέδων

Εξαγωνικοί κρύσταλλοι - Κρυσταλλογραφικά επίπεδα

- Τέσσερις δείκτες h, k, i, l
- Ο i προσδιορίζεται από το άθροισμα των h και k από τη σχέση:

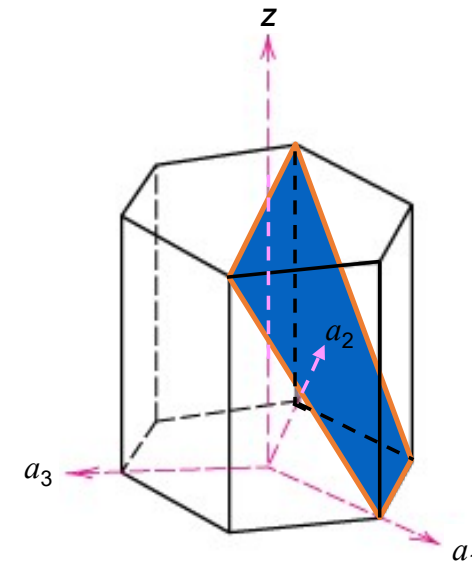
$$i = -(h+k)$$



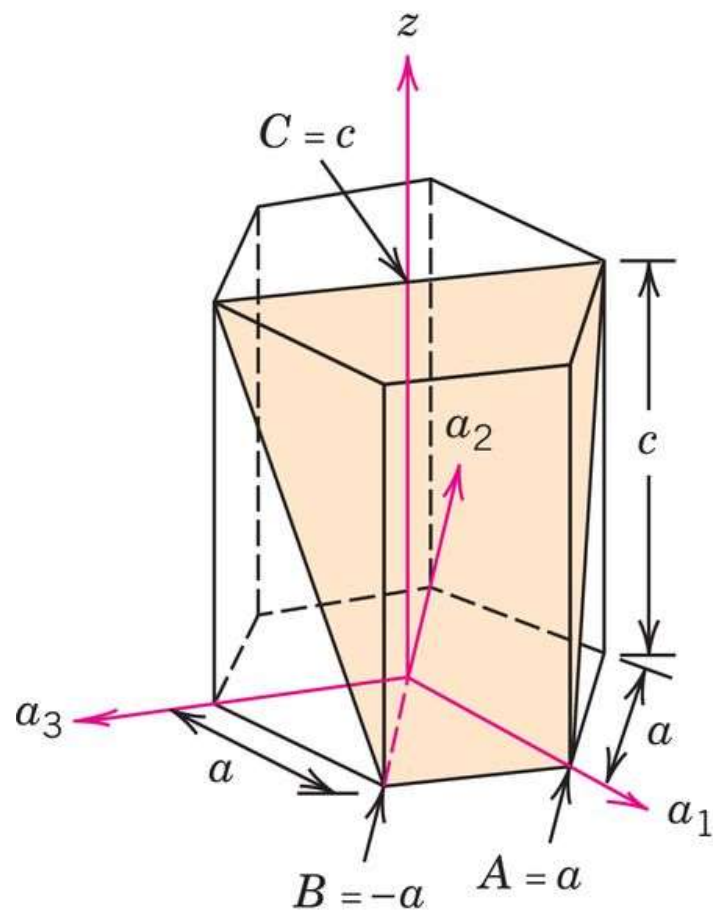
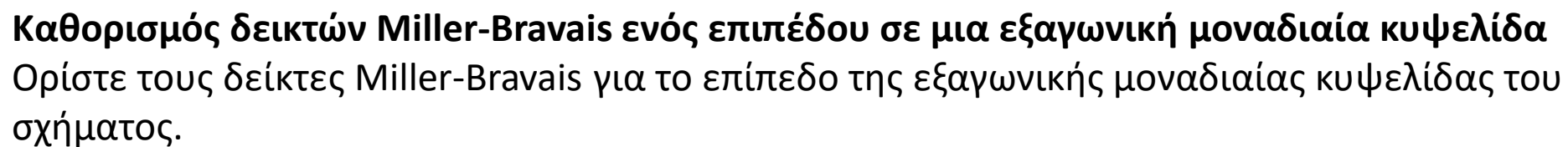
Κρυσταλλογραφικά επίπεδα (δομή HCP)

- Για τη μοναδιαία κυψελίδα σε πλέγματα εξαγωνικής δομής χρησιμοποιείται το ίδιο σκεπτικό

Παράδειγμα	a_1	a_2	a_3	c
1. Συντεταγμένες	1	∞	-1	1
2. Υπολογισμός αντιστρόφων	1	$1/\infty$	-1	1
	1	0	-1	1
3. Αναγωγή σε ακέραιες τιμές	1	0	-1	1
4. Δείκτες Miller-Bravais	$(10\bar{1}1)$			



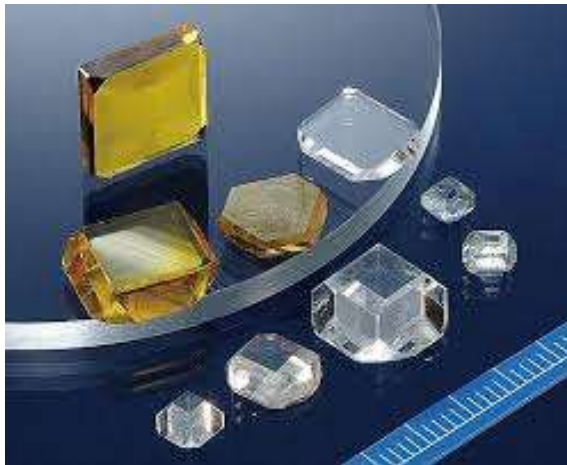
Διασκευή από Σχ. 3.8,
Callister & Rethwisch 9η έκδ.



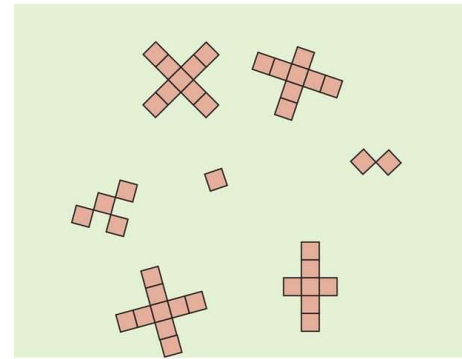
Μονοκρύσταλλοι



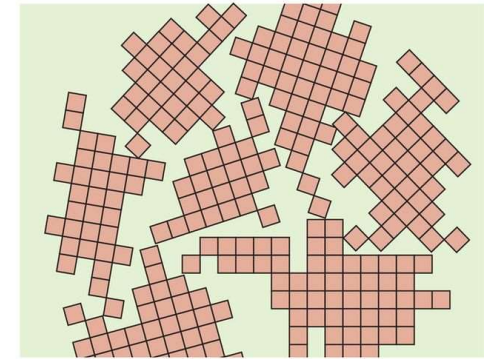
© William D. Callister, Jr.



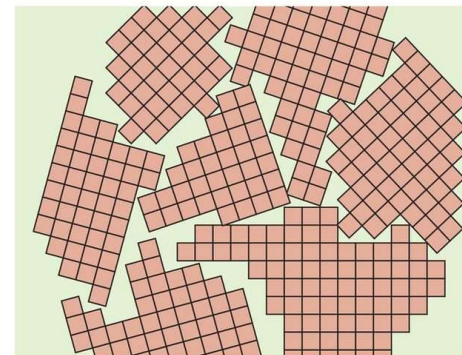
Πολυκρυσταλλικά υλικά



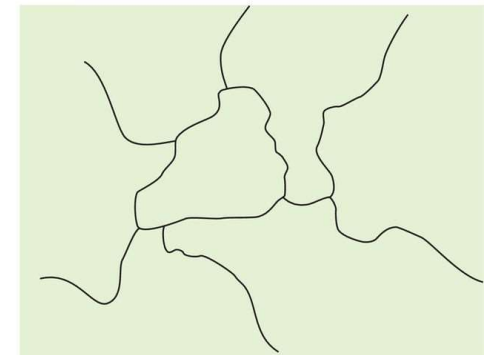
(a)



(b)



(c)



(d)

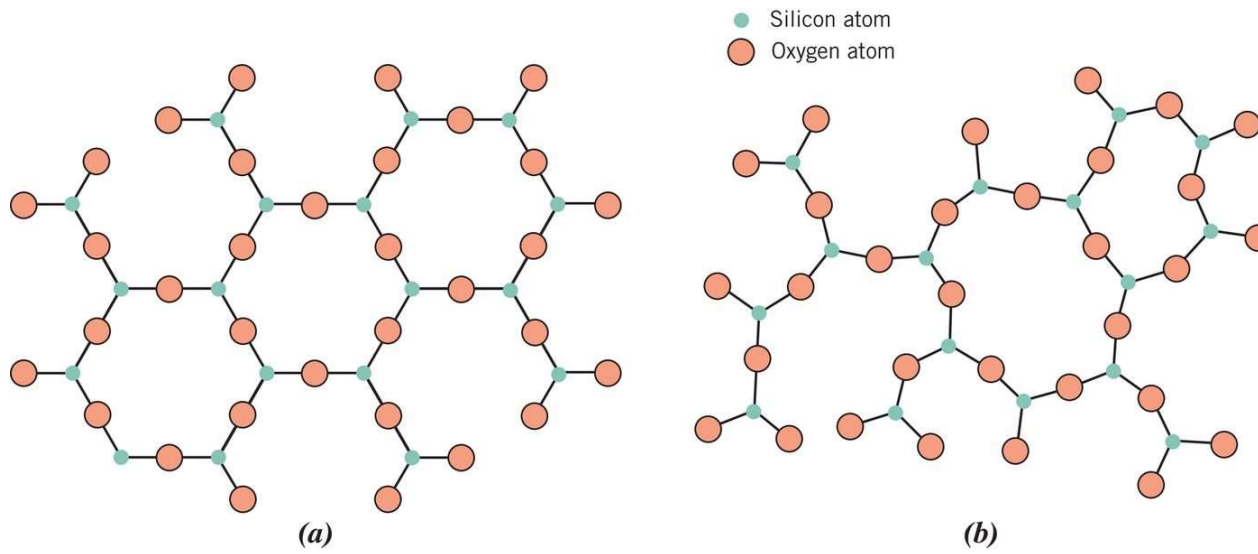
Κατευθυντικότητα και ανισοτροπία

- **Ισοτροπία:** Υλικά στα οποία οι μετρούμενες ιδιότητες είναι ανεξάρτητες από τη διεύθυνση της μέτρησης.
- **Ανισοτροπία:** Κατευθυντικότητα των ιδιοτήτων (εξάρτηση από τη διεύθυνση μέτρησης). *[πχ μέτρο ελαστικότητας, ηλεκτρική αγωγιμότητα ή δείκτης διάθλασης]*
- **Βαθμός ανισοτροπίας:** συνάρτηση της συμμετρίας των κρυσταλλικών δομών – αυξάνεται με τη μείωση της δομικής συμμετρίας (π.χ. τρικλινείς δομές είναι εξαιρετικά ανισοτροπικές)

Μέτρο Ελαστικότητας (Gra)			
Μέταλλο	[100]	[110]	[111]
Αλουμίνιο	63.7	72.6	76.1
Χαλκός	66.7	130.3	191.7
Σίδηρος	125.0	210.5	272.7
Βολφράμιο	384.6	384.6	384.6

Πολυκρυσταλλικά υλικά συμπεριφέρονται πάντα ισοτροπικά

Μη κρυσταλλικά υλικά (ή άμορφα υλικά)



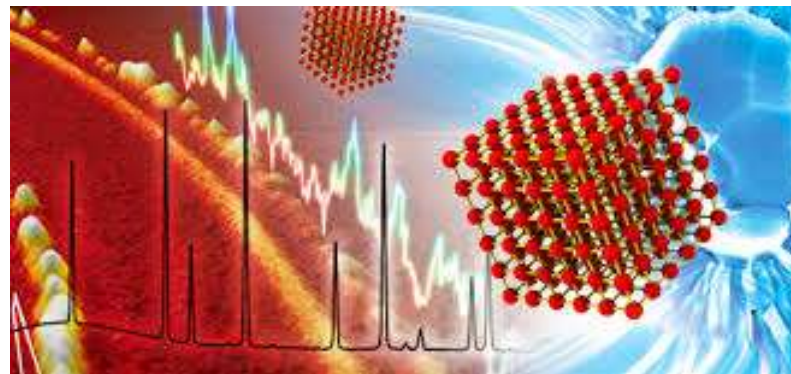


ΣΥΝΟΨΗ



- Σε ένα στερεό, τα άτομα “διευθετούνται” είτε σε **κρυσταλλικές** είτε σε **άμορφες** δομές.
- Σε κρυσταλλικά υλικά, τα **κρυσταλλογραφικά επίπεδα**, **σημεία** και **διευθύνσεις** καθορίζονται βάσει σχημάτων δεικτοδότησης.
 - Κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις: **γραμμική ατομική πυκνότητα**
 - Κρυσταλλογραφικά επίπεδα: **επίπεδη ατομική πυκνότητα**
- Τα κρυσταλλικά υλικά κατηγοριοποιούνται σε **μονοκρυσταλλικά** και **πολυκρυσταλλικά**.
 - **Μονοκρυσταλλικά**: γενικά, οι ιδιότητες μεταβάλλονται ανάλογα με τον προσανατολισμό (δηλ., είναι **ανισότροπα** υλικά).
 - **Πολυκρυσταλλικά**: γενικά, οι ιδιότητες είναι μη-κατευθυντικές (δηλ., είναι **ισότροπα** υλικά), με τυχαίο προσανατολισμό κόκκων.

Δομή κρυσταλλικών στερεών

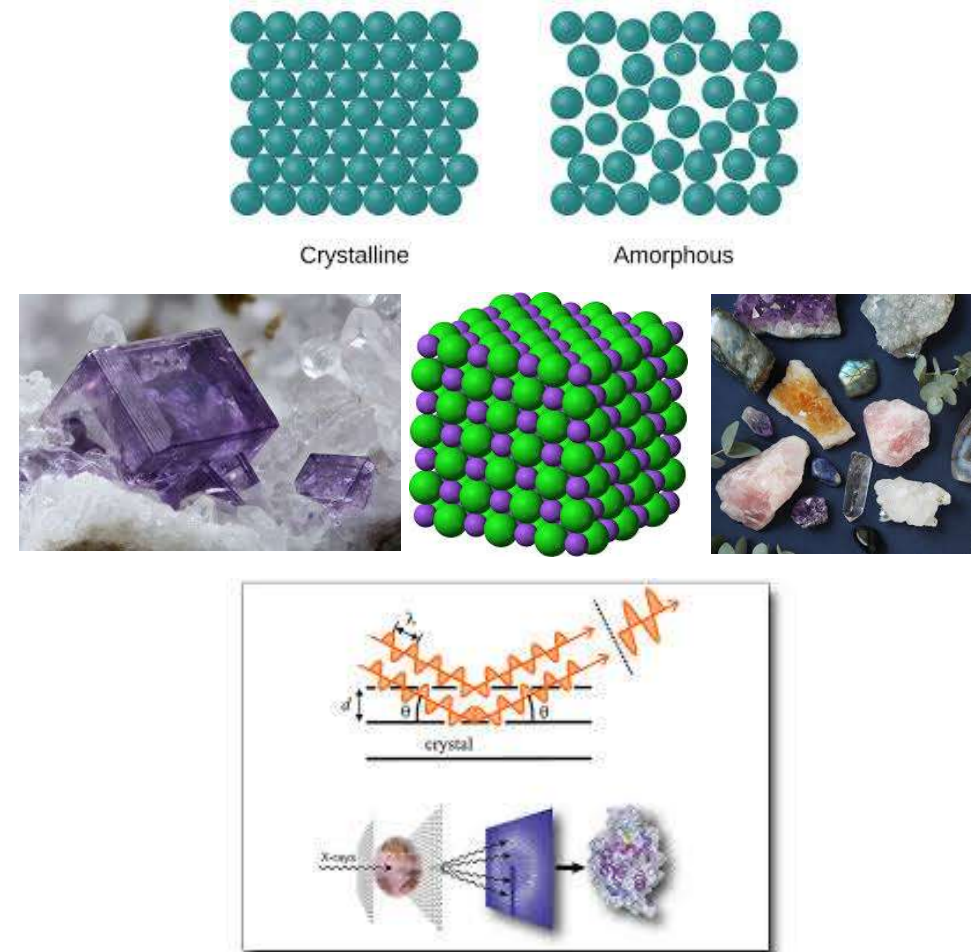


Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- Ποιες είναι οι κοινές κρυσταλλικές δομές για μεταλλικά και κεραμικά υλικά;
- Ποια χαρακτηριστικά της ατομικής δομής ενός μετάλλου/κεραμικού καθορίζουν την πυκνότητά του;
- Πώς διαφέρουν οι κρυσταλλικές δομές των κεραμικών υλικών από αυτές των μετάλλων;

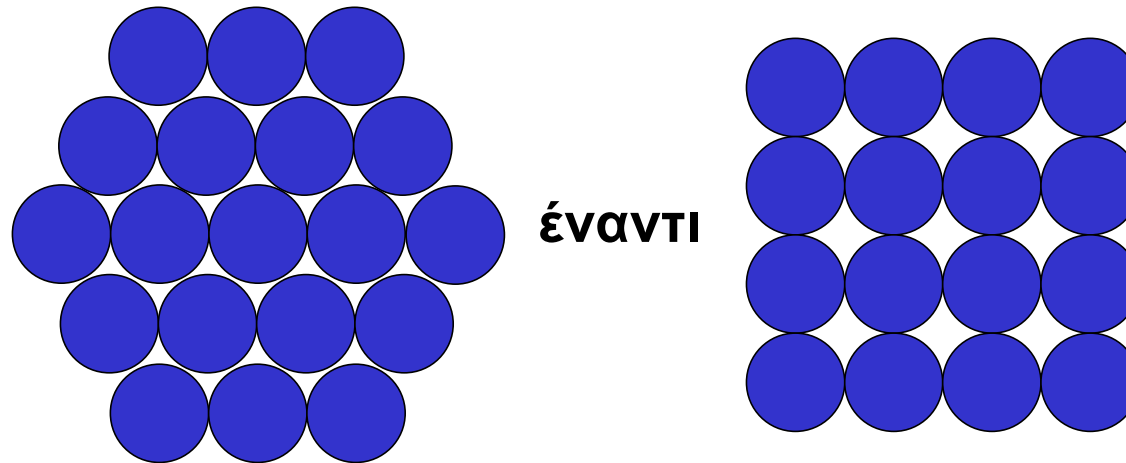


ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΕΣ ΔΟΜΕΣ ΜΕΤΑΛΛΩΝ

Κρυσταλλικές δομές μετάλλων, 1

- 1: Διευθέτηση των ατόμων κατά τρόπο ώστε να ελαχιστοποιείται ο ελεύθερος χώρος ανάμεσά τους
=> μεγιστοποίηση πλήρωσης, πυκνοί 2Δ σχηματισμοί.

2 διαστάσεις



2: Στοίβαση 2Δ σχηματισμών => δημιουργία 3Δ δομών.

Κρυσταλλικές δομές μετάλλων, 2

- Είναι συνήθως *πυκνές*.
- Η πυκνή δομή οφείλεται σε:
 - Παρουσία μόνο ενός στοιχείου (τυπική περίπτωση), οπότε όλες οι ατομικές ακτίνες είναι ίδιες.
 - Μη-κατευθυντικό χαρακτήρα των μεταλλικών δεσμών.
 - Μικρές αποστάσεις μεταξύ γειτονικών ατόμων => μικρότερη ενέργεια δεσμού.
 - Το νέφος ηλεκτρονίων περιβάλλει τους πυρήνες και τους “θωρακίζει” έναντι των υπολοίπων.
- Τα μέταλλα έχουν τις απλούστερες κρυσταλλικές δομές.

Στη συνέχεια θα εξετάσουμε τρεις από αυτές...

Κρυσταλλικές δομές μετάλλων

Μέταλλο	Κρυσταλλική Δομή	Ατομική ακτίνα (nm)	Μέταλλο	Κρυσταλλική Δομή	Ατομική ακτίνα (nm)
Αλουμίνιο	FCC	0.1431	Μολυβδαίνιο	BCC	0.1363
Κάδμιο	HCP	0.1490	Νικέλιο	FCC	0.1246
Χρώμιο	BCC	0.1249	Λευκόχρυσος	FCC	0.1387
Κοβάλτιο	HCP	0.1253	Άργυρος	FCC	0.1445
Χαλκός	FCC	0.1278	Ταντάλιο	BCC	0.1430
Χρυσός	FCC	0.1442	Τιτάνιο	HCP	0.1445
Σίδηρος	BCC	0.1241	Βολφράμιο	BCC	0.1371
Μόλυβδος	FCC	0.1750	Ψευδάργυρος	HCP	0.1332

BCC (Body-centered cubic): χωροκεντρωμένη κυβική

FCC (Face-centered cubic): εδροκεντρωμένη κυβική

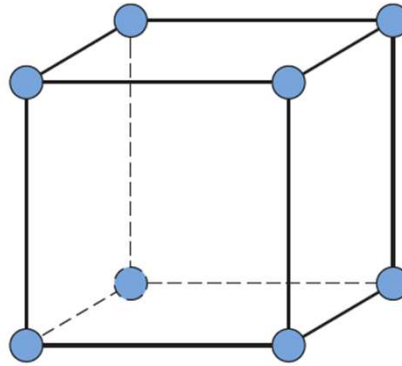
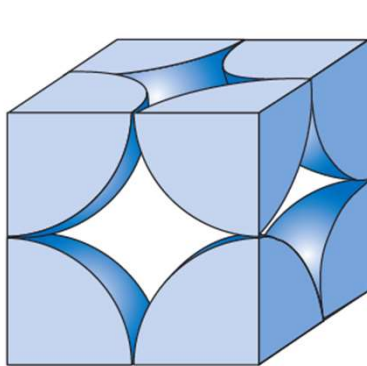
HCP (hexagonal closed-packed): μέγιστης πυκνότητας εξαγωνική

SC (simple cubic): απλή κυβική

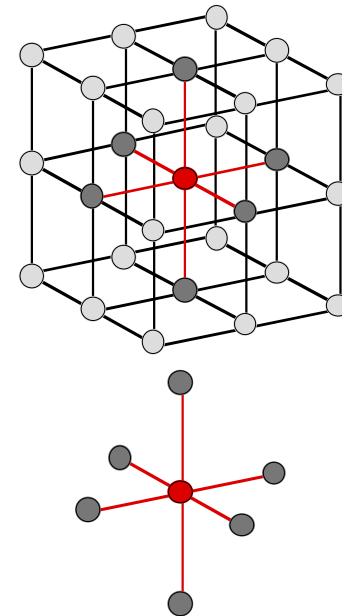
Απλή κυβική δομή (SC)

- Σπάνια, λόγω μικρής πυκνότητας πλήρωσης (απαντάται μόνο στο Po)
- Διευθύνσεις πυκνής πλήρωσης => ακμές κύβου.

- **Αρ. Ένταξης = 6** Coordination number
(# πλησιέστερων γειτόνων)



Σχ. 4.2, Callister & Rethwisch 9η έκδ.



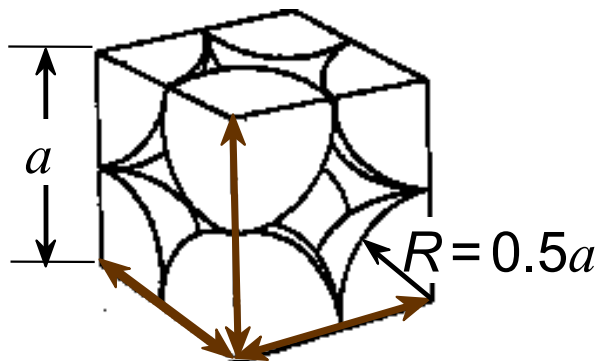
Συντελεστής ατομικής πλήρωσης (APF)

Atomic Packing Factor

$$APF = \frac{\text{Όγκος ατόμων σε MK}^*}{\text{Όγκος MK}}$$

*MK: μοναδιαία κυψελίδα, βάσει του μοντέλου “σκληρών σφαιρών”

- APF για απλή κυβική δομή = 0.52



διευθύνσεις πυκνής πλήρωσης

περιέχει $8 \times 1/8 =$
1 άτομο/MK

Διασκευή από Σχ. 4.2 (α),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

$$APF = \frac{\text{άτομα MK} \cdot \frac{4}{3} \pi (0.5a)^3}{a^3}$$

όγκος
άτομο

όγκος
MK

Αριθμός ατόμων ανά MK

$$N = N_i + N_f/2 + N_c/8$$

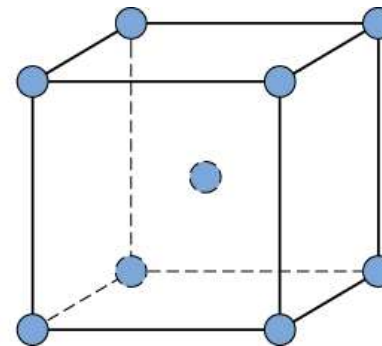
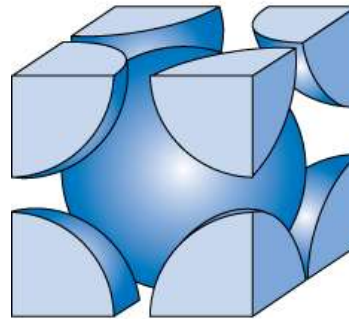
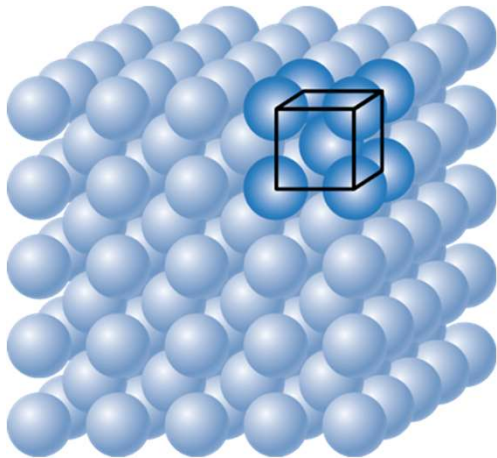
Όπου N_i εσωτερικά, N_f κέντρο εδρών + N_c κορυφές

Χωροκεντρωμένη κυβική δομή (BCC)

- Τα άτομα εφάπτονται κατά μήκος των διαγωνίων του κύβου.
--Σημείωση: όλα τα άτομα είναι πανομοιότυπα· το κεντρικό παρουσιάζεται με διαφορετική σκίαση μόνο για λόγους κατανοησιμότητας.

π.χ.: Cr, W, Fe (α), Ταντάλιο, Μολυβδαίνιο

- Αρ. Ένταξης = 8



Διασκευή από Σχ. 4.1,
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

2 άτομα / ΜΚ: 1 κεντρικό + 8 γωνιακά $\times 1/8$

Μοναδιαία κυψελίδα δομής BCC (προσομοίωση στο VMSE)

Crystal Systems and Unit Cells for Metals

[Main Menu](#) [Module Menu](#) [Print Main](#) [Help](#)

In this submodule you may observe, from a three-dimensional perspective, unit cells for the seven crystal systems, as well as unit cells for face-centered cubic (FCC), body-centered cubic (BCC), and hexagonal close packed (HCP).

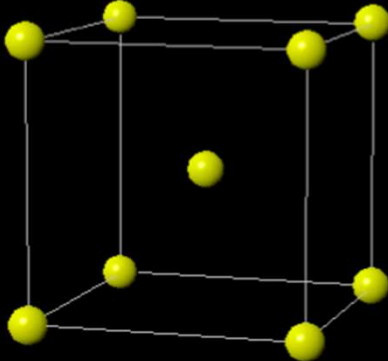
Structures

-  BCC
-  FCC
-  HCP

Systems

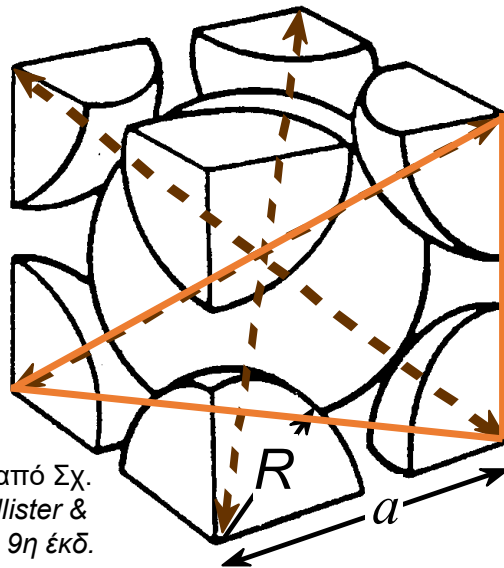
-  Cubic
-  Hexagonal
-  Tetragonal
-  Rhombo
-  Ortho
-  Monoclinic
-  Triclinic

Body-centered Cubic Structure
Change to FULL-SPHERE representation

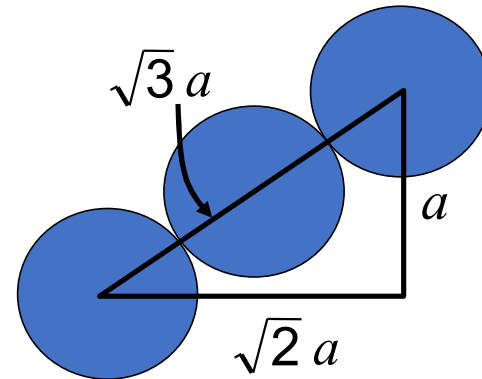


Συντελεστής ατομικής πλήρωσης (BCC)

- APF χωροκεντρωμένης κυβικής δομής (BCC) = 0.68



Διασκευή από Σχ.
4.1(α), Callister &
Rethwisch 9η έκδ.



διευθύνσεις πυκνής πλήρωσης:
μήκος = $4R = \sqrt{3} a$

$$\text{APF} = \frac{\text{άτομα}}{\text{ΜΚ}} \cdot \frac{\text{όγκος}}{\text{άτομο}}}{\frac{\text{όγκος}}{\text{ΜΚ}}}$$

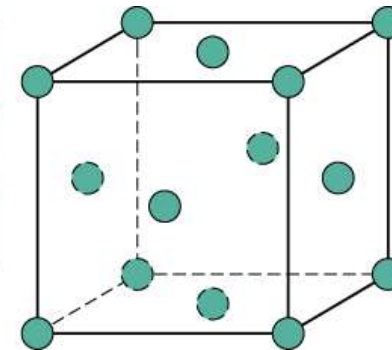
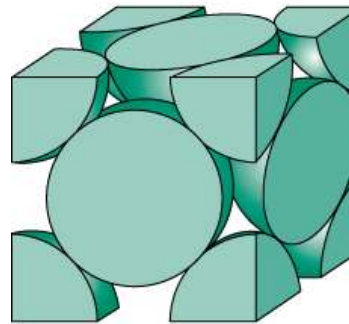
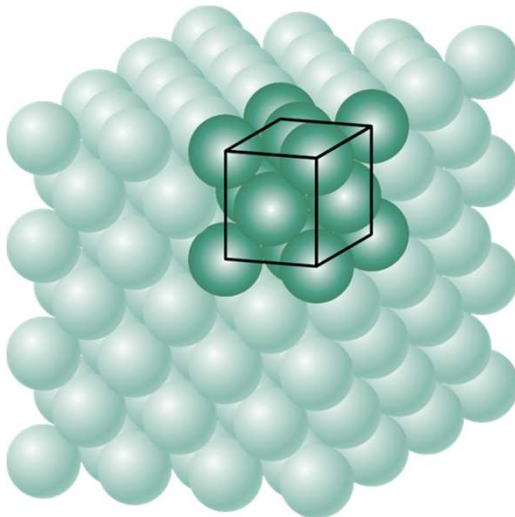
$$\text{APF} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi (\sqrt{3}a/4)^3}{a^3}$$

Εδροκεντρωμένη κυβική δομή (FCC)

- Τα άτομα εφάπτονται κατά μήκος των διαγωνίων των εδρών του κύβου.
 - Σημείωση: όλα τα άτομα είναι πανομοιότυπα· η διαφορετική σκίαση αποσκοπεί στην καλύτερη κατανόηση της εδροκεντρωμένης δομής.

π.χ.: Al, Cu, Au, Pb, Ni, Pt, Ag

- Αρ. Ένταξης = 12

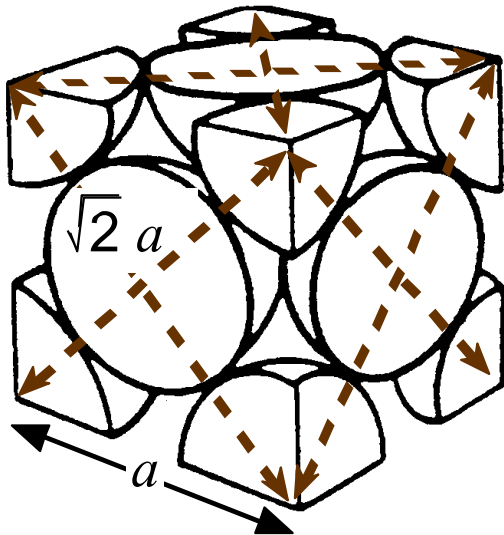


Διασκευή από Σχ. 3.1, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

4 άτομα / ΜΚ: $(6 \text{ έδρες} \times 1/2) + (8 \text{ γωνίες} \times 1/8)$

Δομή FCC, συντελεστής ατομικής πλήρωσης

- APF εδροκεντρωμένης κυβικής δομής (FCC) = 0.74
Ο μέγιστος επιτεύξιμος APF!



Διασκευή από
Σχ. 3.1(α),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Διευθύνσεις πυκνής πλήρωσης:
μήκος = $4R = \sqrt{2} a$

Η μοναδιαία κυψελίδα περιέχει:
 $6 \times 1/2 + 8 \times 1/8$
 $= 4 \text{ άτομα/MK}$

$$\text{APF} = \frac{\frac{\text{άτομα}}{\text{MK}} \cdot 4 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}a}{4}\right)^3}{a^3}$$

← όγκος άτομο

← όγκος MK

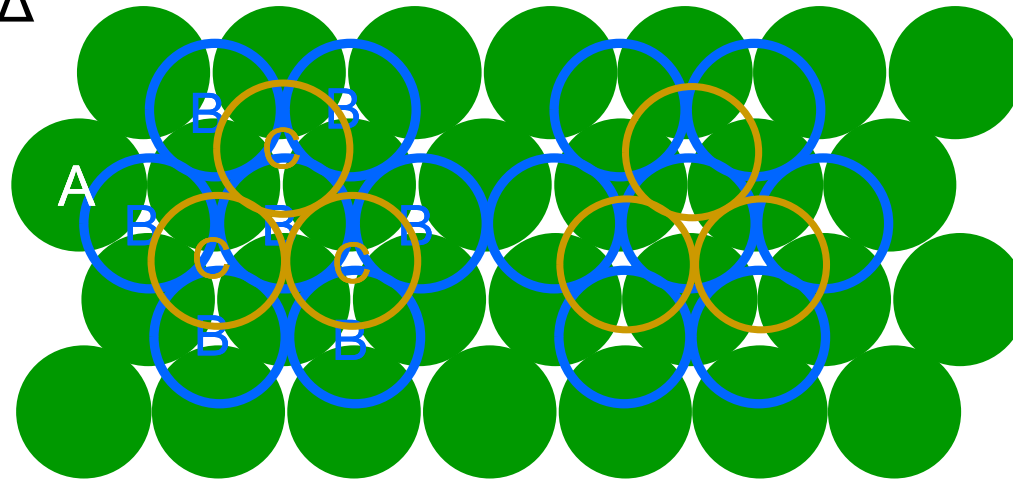
Δομή FCC, ακολουθία επιστοίβασης

- Ακολουθία επιστοίβασης: ABCABC...
- Προβολή στις 2Δ

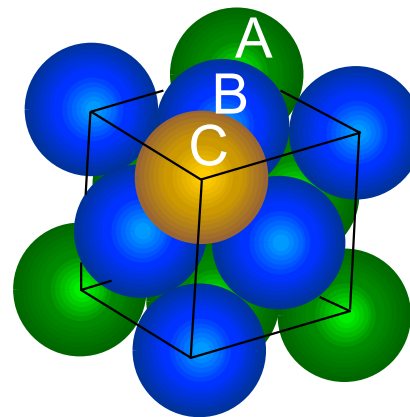
Θέσεις A

Θέσεις B

Θέσεις C

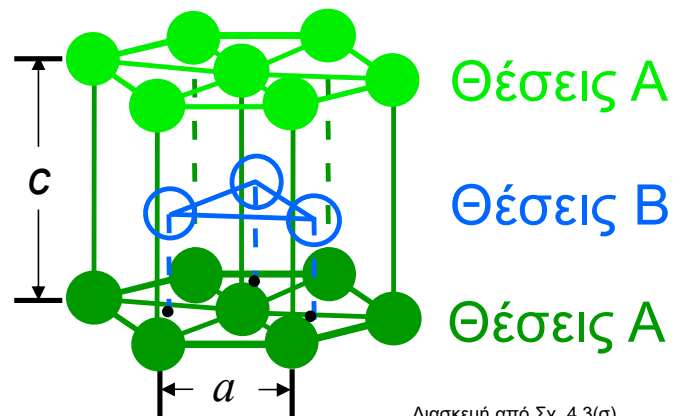


- ΜΚ (μοναδιαία κυψελίδα) δομής FCC



Δομή HCP: Εξαγωνική, μέγιστης πυκνότητας

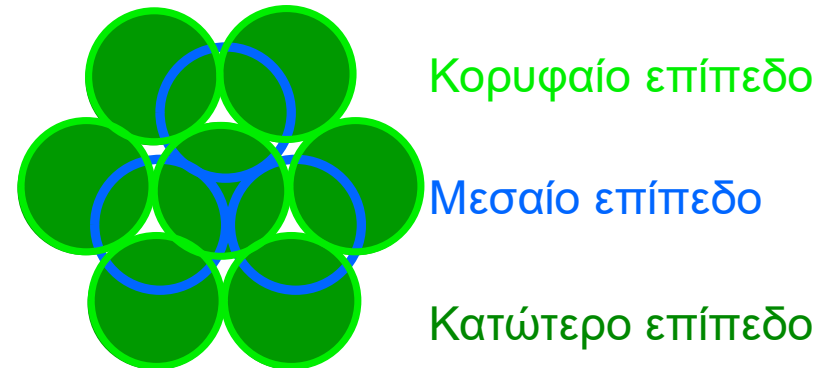
- Ακολουθία επιστοίβασης: ABAB...
- 3Δ Απεικόνιση



Διασκευή από Σχ. 4.3(σ),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

- Αρ. Ένταξης = 12
- $APF = 0.74$
- $c/a = 1.633$

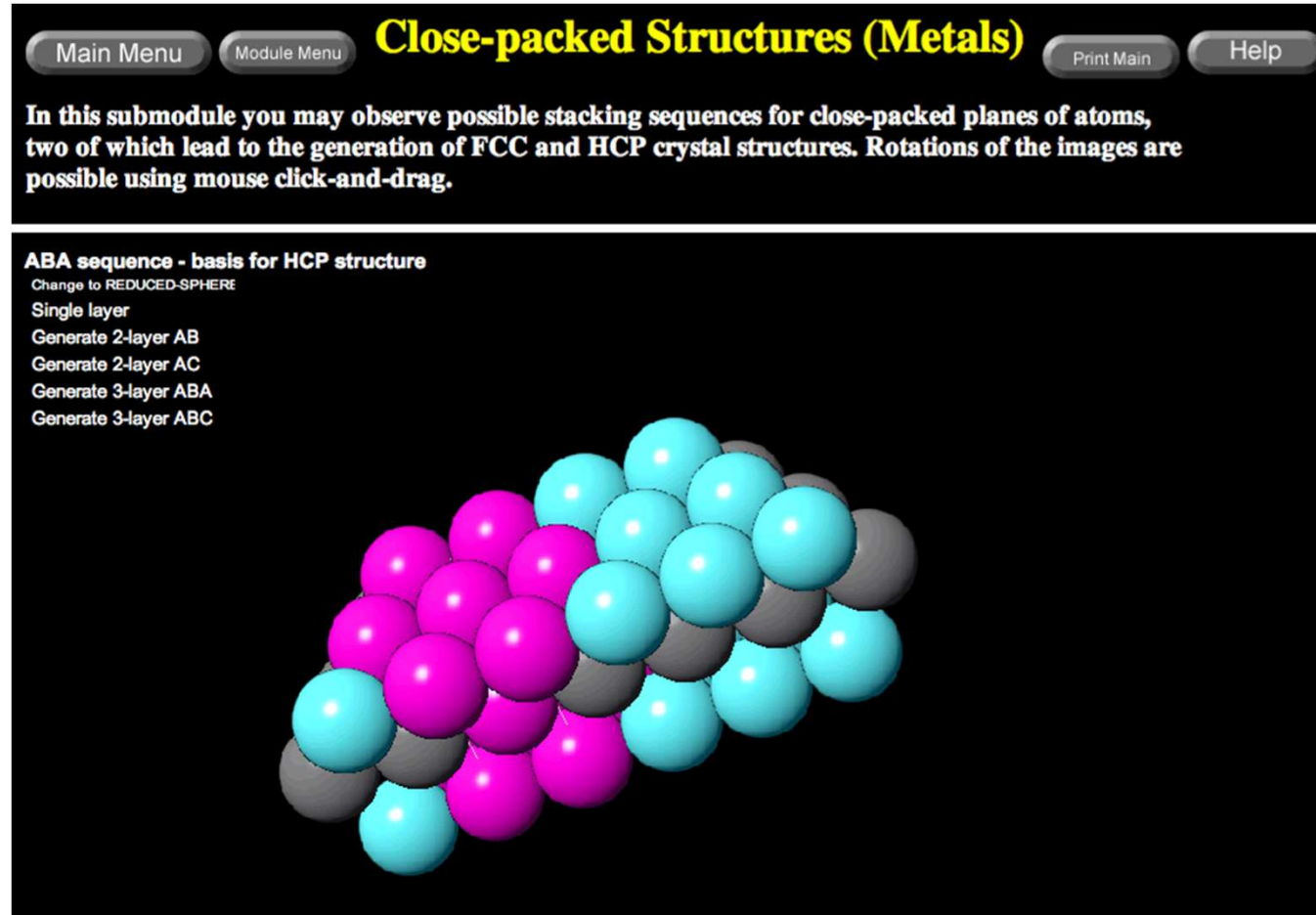
- 2Δ Προβολή



6 άτομα/ΜΚ

π.χ.: Cd, Mg, Ti, Zn

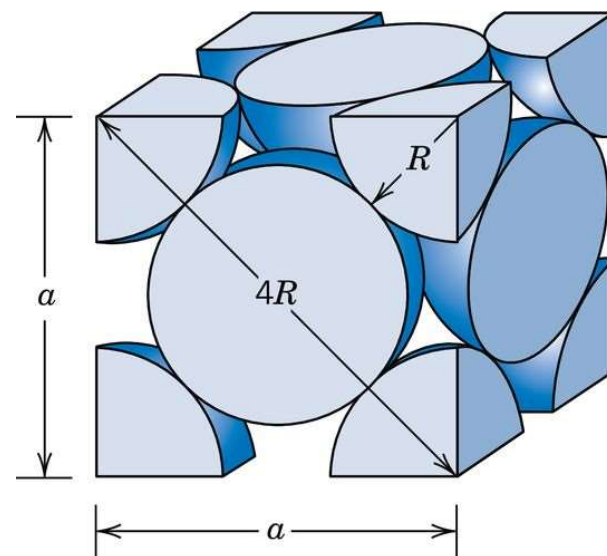
Δομή HCP: Επιστοίβαση & μοναδιαία κυψελίδα (προσομοίωση στο VMSE)





Καθορισμός όγκου FCC μοναδιαίας κυψελίδας

Υπολογίστε τον όγκο μιας μοναδιαίας κυψελίδας FCC με χρήση της ατομικής ακτίνας R





Υπολογισμός του συντελεστή ατομικής πλήρωσης για FCC

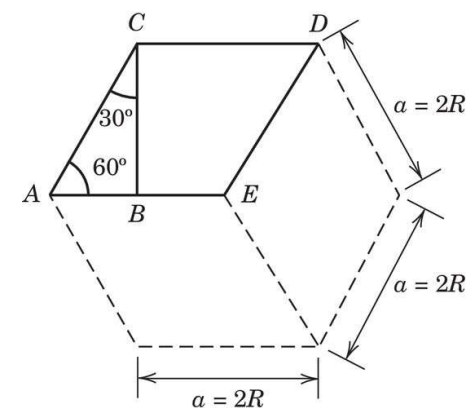
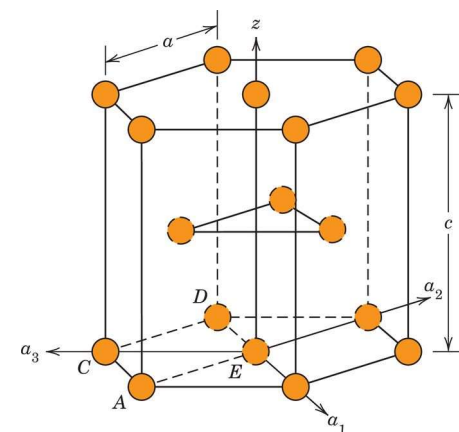
Ναδειχτείότιο συντελεστής ατομικής πλήρωσης μιας κρυσταλλικής δομής FCC είναι 0.74

EXAMPLE

Καθορισμός όγκου HCP μοναδιαίας κυψελίδας

(α) Υπολογίστε τον όγκο μιας μοναδιαίας κυψελίδας HCP με χρήση των παραμέτρων πλέγματος a και c και της ατομικής ακτίνας R

(β) εκφράστε τον παραπάνω όγκο με χρήση της παραμέτρου πλέγματος c και της ατομικής ακτίνας R



Θεωρητική πυκνότητα μετάλλου, ρ

$$\text{Πυκνότητα} = \rho = \frac{\text{Μάζα Ατόμων στη ΜΚ}}{\text{Συνολικός Όγκος ΜΚ}}$$

$$\rho = \frac{n A}{V_C N_A}$$

όπου

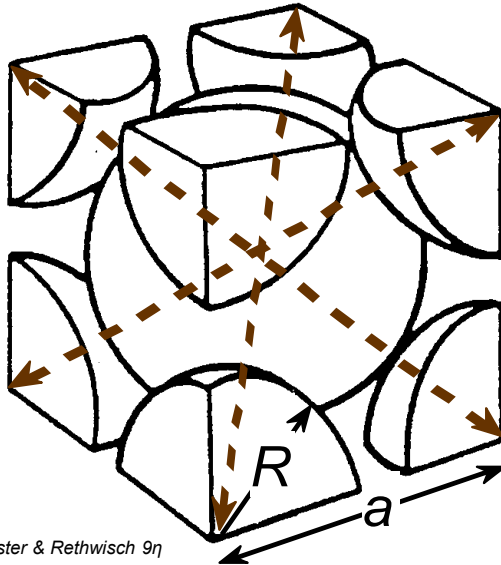
n = πλήθος ατόμων/ΜΚ

A = ατομικό βάρος

V_C = όγκος ΜΚ = a^3 για κυβικές δομές

N_A = αριθμός Avogadro
= 6.022×10^{23} άτομα/mol

Θεωρητική πυκνότητα, ρ



Διασκευή από
Σχ. 4.1(α), Callister & Rethwisch 9η
έκδ.

- π.χ.: Cr (BCC)

$$A = 52.00 \text{ g/mol}$$

$$R = 0.125 \text{ nm}$$

$$n = 2 \text{ άτομα/MK}$$

$$a = 4R/\sqrt{3} = 0.2887 \text{ nm}$$

$$\rho = \frac{\frac{\text{άτομα}}{\text{MK}} \cdot \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{\frac{\text{όγκος}}{\text{MK}} \cdot \frac{\text{άτομα}}{\text{mol}}}$$

$\frac{\text{άτομα}}{\text{MK}} \rightarrow 2$
 $\frac{\text{g}}{\text{mol}} \rightarrow 52.00$
 $\frac{\text{όγκος}}{\text{MK}} \rightarrow a^3$
 $\frac{\text{άτομα}}{\text{mol}} \rightarrow 6.022 \times 10^{23}$

$\rho_{\text{θεωρητική}} = 7.18 \text{ g/cm}^3$
 $\rho_{\text{πειραματική}} = 7.19 \text{ g/cm}^3$



Υπολογισμός θεωρητικής πυκνότητας του χαλκού

Ο χαλκός έχει ατομική ακτίνα 0.128 nm, κρυσταλλική δομή FCC και ατομικό βάρος 63.5 g/mol. Να υπολογίσετε τη θεωρητική του πυκνότητα και στη συνέχεια να την συγκρίνετε με την πειραματική τιμή ($\rho=8.94 \text{ g/cm}^3$)

Πολυμορφισμός και αλλοτροπία

Πολυμορφισμός (polymorphism) είναι το φαινόμενο κατά το οποίο ορισμένα μέταλλα αλλά και αμέταλλα στοιχεία έχουν περισσότερες από μία κρυσταλλικές δομές. Όταν αυτό το φαινόμενο απαντάτε σε στοιχειακά στερεά ονομάζεται **αλλοτροπία (allotropy)**

ΚΕΡΑΜΙΚΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΕΣ ΔΟΜΕΣ

Ατομικοί δεσμοί στα κεραμικά

- Δεσμοί:
 - Μπορούν να είναι ιοντικού και/ή ομοιοπολικού χαρακτήρα.
 - Το (%) ιοντικού χαρακτήρα αυξάνεται αυξανόμενης της διαφοράς στην ηλεκτραρνητικότητα των ατόμων.
- Ο βαθμός ιοντικότητας μπορεί να είναι μεγάλος ή μικρός:

IA																	0
H																	He
2.1	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	-
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
1.0	1.5											2.0	2.5	3.1	3.5	4.1	-
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
1.0	1.3											1.5	1.8	2.1	2.4	2.9	-
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.9	1.1	1.2	1.3	1.5	1.6	1.6	1.7	1.7	1.8	1.8	1.7	1.8	2.0	2.2	2.5	2.8	-
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.3	1.4	1.4	1.5	1.4	1.4	1.5	1.5	1.7	1.8	2.0	2.2	-
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
0.9	0.9	1.1	1.2	1.4	1.4	1.5	1.5	1.6	1.5	1.4	1.5	1.5	1.6	1.7	1.8	2.0	-
Fr	Ra	Ac															
0.9	0.9	1.0															

Λανθανίδες: 1.0-1.2
 Ακτινίδες: 1.0-1.2

CaF₂: μεγάλος
SiC: μικρός

Κρυσταλλικές δομές των κεραμικών

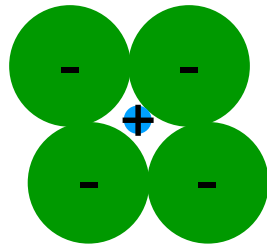
Δομές οξειδίων

- τα ανιόντα οξυγόνου είναι μεγαλύτερα από τα κατιόντα μετάλλου
- πυκνή διάταξη ιόντων οξυγόνου σε πλέγμα (συνήθως FCC)
- τα κατιόντα καταλαμβάνουν θέσεις παρεμβολής ανάμεσα στα ιόντα οξυγόνου

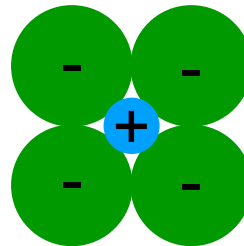
Παράγοντες που επηρεάζουν την κρυσταλλική δομή

1. Σχετικά μεγέθη ιόντων – σχηματισμός σταθερών δομών:

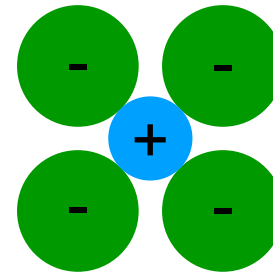
--μεγιστοποίηση αρ. αντίθετα φορτισμένων, γειτονικών ιόντων.



ασταθής



σταθερή



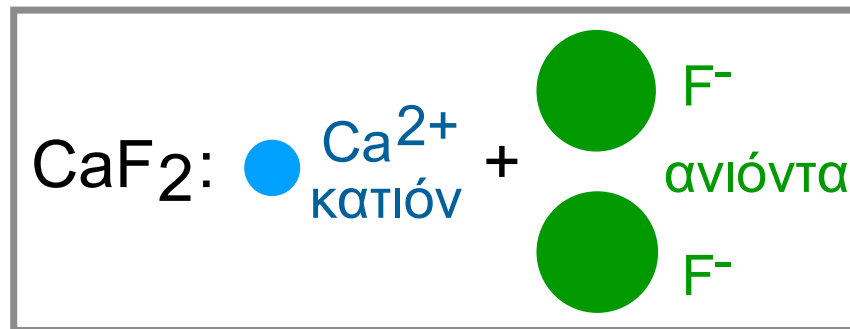
σταθερή

Διασκευή από Σχ. 4.4, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

2. Διατήρηση ουδετερότητας φορτίου:

--Το ολικό φορτίο στο κεραμικό πρέπει να είναι 0.

-- Αντικατοπτρίζεται στον χημικό τύπο:

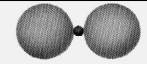
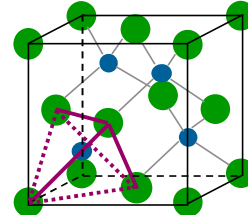
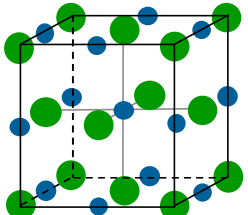
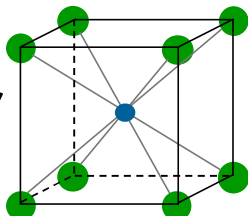
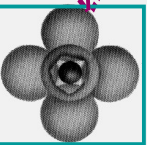
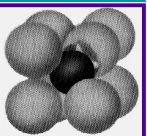


τιμές m , p που επιτυγχάνουν ουδετερότητα φορτίου

Αριθμός ένταξης και ακτίνα ιόντων

- Αριθμός ένταξης (CN): αυξάνεται αναλογικά με το $\frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}}$

Για δημιουργία σταθερής δομής, πόσα ανιόντα μπορούν να περιβάλλουν ένα κατιόν;

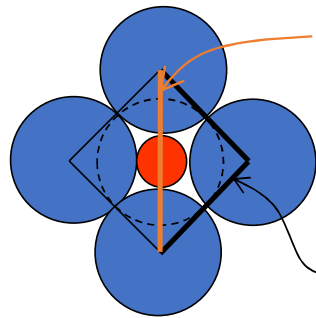
$\frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}}$	Αρ. Ένταξης	Γεωμετρία ένταξης			
< 0.155	2	γραμμική			ZnS (σφαλερίτη)
0.155 - 0.225	3	τριγωνική			NaCl (χλωριούχου νατρίου)
0.225 - 0.414	4	τετραεδρική			CsCl (χλωριούχου καυσίου)
0.414 - 0.732	6	οκταεδρική			
0.732 - 1.0	8	κυβική			

Διασκευή από Πίνακα 4.3, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Από πάνω προς τα κάτω: Διασκευή από τα Σχ. 4.7, 4.5 & 4.6, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Υπολογισμός ελάχιστου λόγου ακτινών κατιόντος/ανιόντος

- Να προσδιοριστεί ο ελάχιστος λόγος ακτινών κατιόντος/ανιόντος $r_{\text{cation}}/r_{\text{anion}}$ για οκταεδρική γεωμετρία με αρ. ένταξης (CN) = 6



$$2r_{\text{anion}} + 2r_{\text{cation}} = \sqrt{2}a$$

$$a = 2r_{\text{anion}}$$

$$2r_{\text{anion}} + 2r_{\text{cation}} = 2\sqrt{2}r_{\text{anion}}$$

$$r_{\text{anion}} + r_{\text{cation}} = \sqrt{2}r_{\text{anion}} \quad r_{\text{cation}} = (\sqrt{2} - 1)r_{\text{anion}}$$

$$\frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}} = \sqrt{2} - 1 = 0.414$$

Υβριδίωση δεσμών

Υβριδίωση [ή υβριδισμός] δεσμών μπορεί να εκδηλωθεί όταν υπάρχει σημαντικός βαθμός ομοιοπολικών δεσμών

- Σχηματίζονται υβριδικά τροχιακά
- Για παράδειγμα, στο SiC
 - $X_{\text{Si}} = 1.8$ και $X_{\text{C}} = 2.5$

$$\% \text{ ιοντικού χαρακτήρα} = 100 \{1 - \exp[-0.25(X_{\text{Si}} - X_{\text{C}})^2]\} = 11.5\%$$

- ~ 89% ομοιοπολικός δεσμός
- Αμφότερα τα Si και C προτιμούν υβριδικούς δεσμούς sp^3
- Επομένως, στο SiC έχουμε τετραεδρική γεωμετρία ένταξης για τα άτομα Si



Παράδειγμα: Πρόβλεψη της δομής του FeO

- Βάσει ιοντικών ακτινών, ποια κρυσταλλική δομή αναμένετε να έχει το FeO;

Κατιόν Ιοντική ακτίνα (nm)

Al³⁺ 0.053

Fe²⁺ 0.077

Fe³⁺ 0.069

Ca²⁺ 0.100

Ανιόν

O²⁻ 0.140

Cl⁻ 0.181

F⁻ 0.133

- Απάντηση:

$$\frac{r_{\text{cation}}}{r_{\text{anion}}} = \frac{0.077}{0.140} = 0.550$$

βάσει λόγου ακτινών,

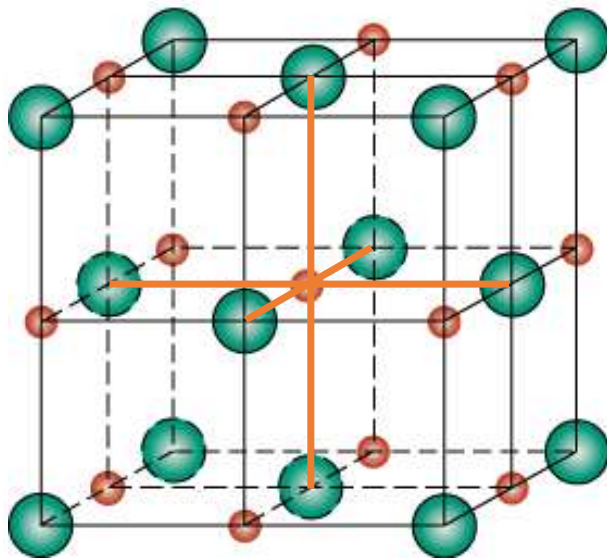
-- αρ.ένταξης = 6 επειδή

$$0.414 < 0.550 < 0.732$$

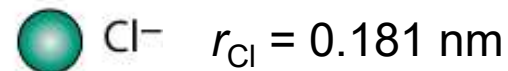
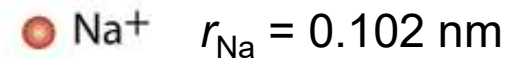
-- κρυσταλλική δομή: NaCl
(ορυκτού άλατος)

Δομές ΑΧ: Δομή του NaCl

Το NaCl (χλωριούχο νάτριο, ορυκτό άλας) έχει την ακόλουθη δομή:



Διασκευή από Σχ. 4.5, Callister & Rethwisch 9η έκδ.



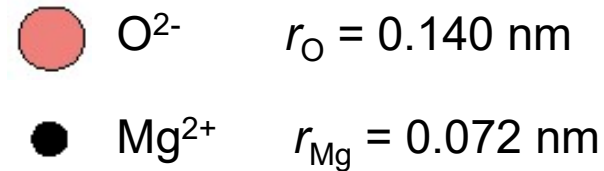
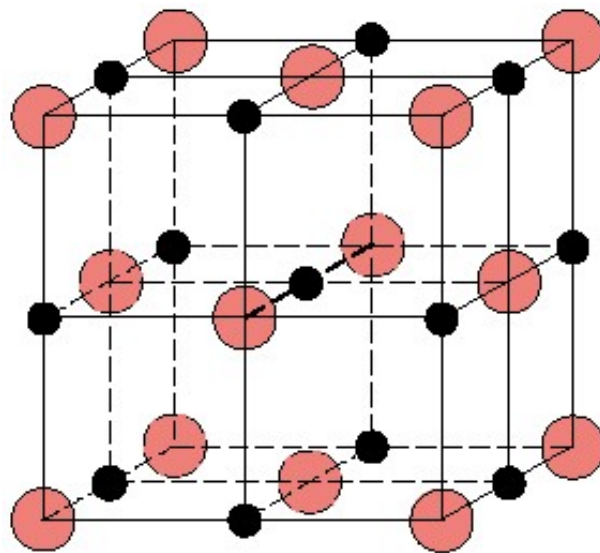
$$r_{\text{Na}}/r_{\text{Cl}} = 0.564$$

∴ κατιόντα (Na⁺) προτιμάται η οκταεδρική δομή

Οι ίδιες βασικές αρχές είναι γενικά εφαρμόσιμες στα ιοντικά στερεά.

Δομή των MgO και FeO

Τα οξείδια MgO και FeO έχουν επίσης τη δομή του NaCl



$$r_{\text{Mg}}/r_{\text{O}} = 0.514$$

∴ κατιόντα: προτιμάται η οκταεδρική δομή

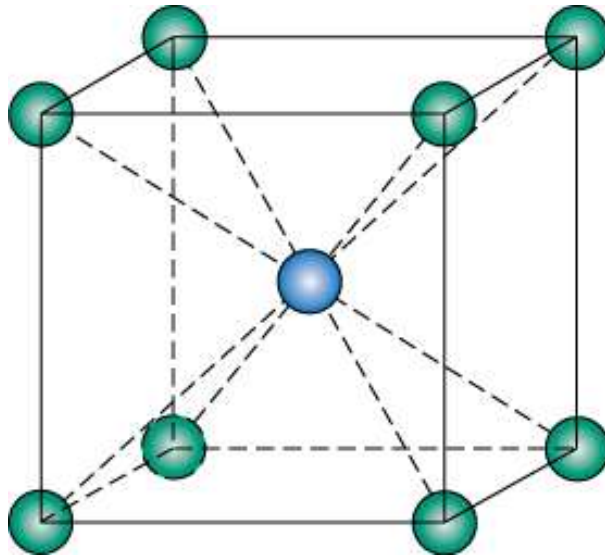
Διασκευή από Σχ. 4.5, Callister & Rethwisch
9η έκδ.

Κάθε Mg^{2+} (ή Fe^{2+}) έχει 6 γειτονικά ιόντα οξυγόνου

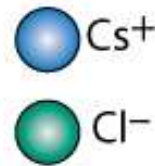
Κρυσταλλικές δομές τύπου AX

Στις κρυσταλλικές δομές τύπου AX περιλαμβάνονται αυτές των NaCl, CsCl και ZnS (*zinc blende*)

Δομή **χλωριούχου καισίου (CsCl)**:



Σχ. 4.6, Callister & Rethwisch 9η έκδ.



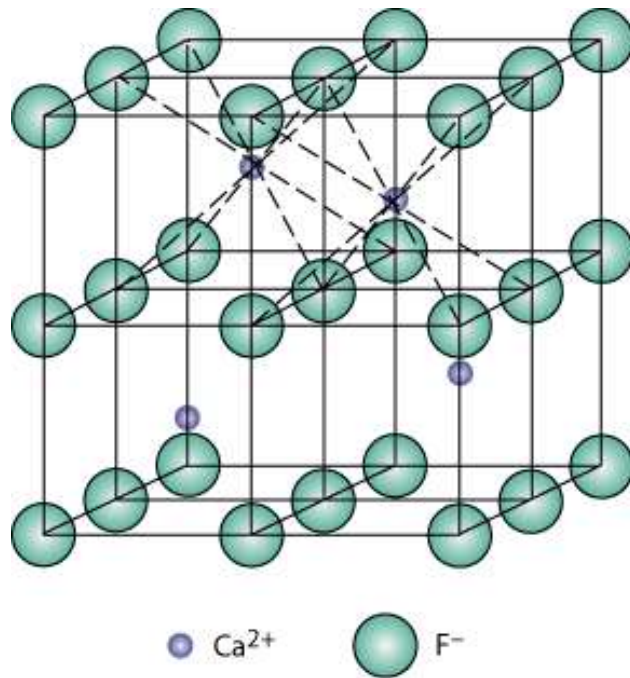
$$\frac{r_{\text{Cs}^+}}{r_{\text{Cl}^-}} = \frac{0.170}{0.181} = 0.939$$

∴ Εφόσον $0.732 < 0.939 < 1.0$,
προτιμάται κυβική δομή

Επομένως, κάθε Cs⁺ έχει 8 γειτονικά Cl⁻

Κρυσταλλικές δομές τύπου AX_2

Δομή **Φθορίτη** (CaF_2 : φθοριούχο ασβέστιο)

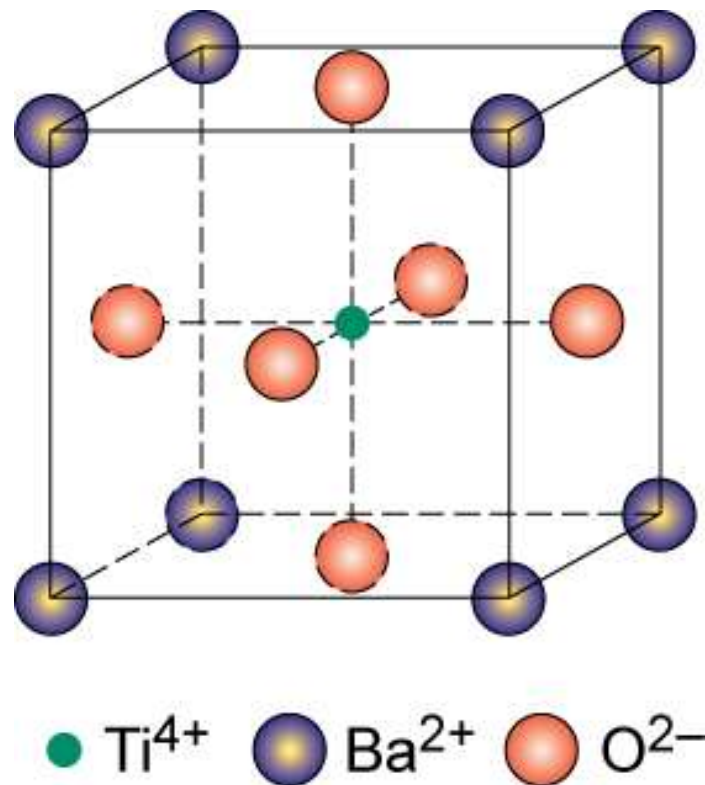


Σχ. 4.8, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

- Κατιόντα: κυβική δομή
- Δομή αντιφθορίτη: αντιστροφή θέσεων των κατιόντων και ανιόντων
- Άλλα υλικά με την ίδια δομή: UO_2 , ThO_2 , ZrO_2 , CeO_2

Κρυσταλλικές δομές τύπου ABX_3

- Δομή Περοβσκίτη
Πολύπλοκο οξείδιο
 $BaTiO_3$:
(τιτανικό βάριο)



Μοναδιαία κυψελίδα δομής Zinc Blende (προσομοίωση στο VMSE)

[Main Menu](#)[Print Main](#)[Help](#)

Ceramic Crystal Structures

This module allows you to observe and rotate (using mouse click-and-drag) unit cells for the seven common ceramic crystal structures listed in the left bar window. For each of these crystal structures, atomic/ionic packing arrangements for several crystallographic planes may be generated, which planes may also be rotated. Spinel and inverse spinel crystal structures may be displayed in terms

Unit Cells

-  NaCl
-  CsCl
-  ZnS
-  Diamond
-  Graphite
-  CaF₂
-  BaTiO₃
- Spinel/Inverse Spinel
- Close-packed Structures
- Molecule Definition Utility

Zinc Blende (ZnS)

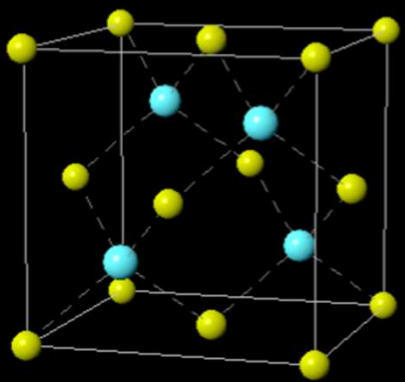
Change to FULL-SPHERE representation

Atomic Packing For:

- (100)
- (110)
- (111)
- (112)
- (122)
- (123)

Reset

-  Sulfur
-  Zinc



Υπολογισμός πυκνότητας κεραμικών

Αριθμός τυπικών μονάδων στη μοναδιαία κυψελίδα

$$\rho = \frac{n'(\Sigma A_C + \Sigma A_A)}{V_C N_A}$$

Αριθμός Avogadro

Όγκος μοναδιαίας κυψελίδας

ΣA_C = άθροισμα ατομικών βαρών όλων των κατιόντων στην τυπική μονάδα

ΣA_A = άθροισμα ατομικών βαρών όλων των ανιόντων στην τυπική μονάδα

Πυκνότητα ανά κατηγορία υλικών

Γενικά...

$\rho_{\text{μετάλλων}} > \rho_{\text{κεραμικών}} > \rho_{\text{πολυμερών}}$

Γιατί;

Τα μέταλλα έχουν...

- πυκνή πλήρωση (μεταλλικός δεσμός)
- συχνά, μεγάλη ατομική μάζα

Τα κεραμικά έχουν...

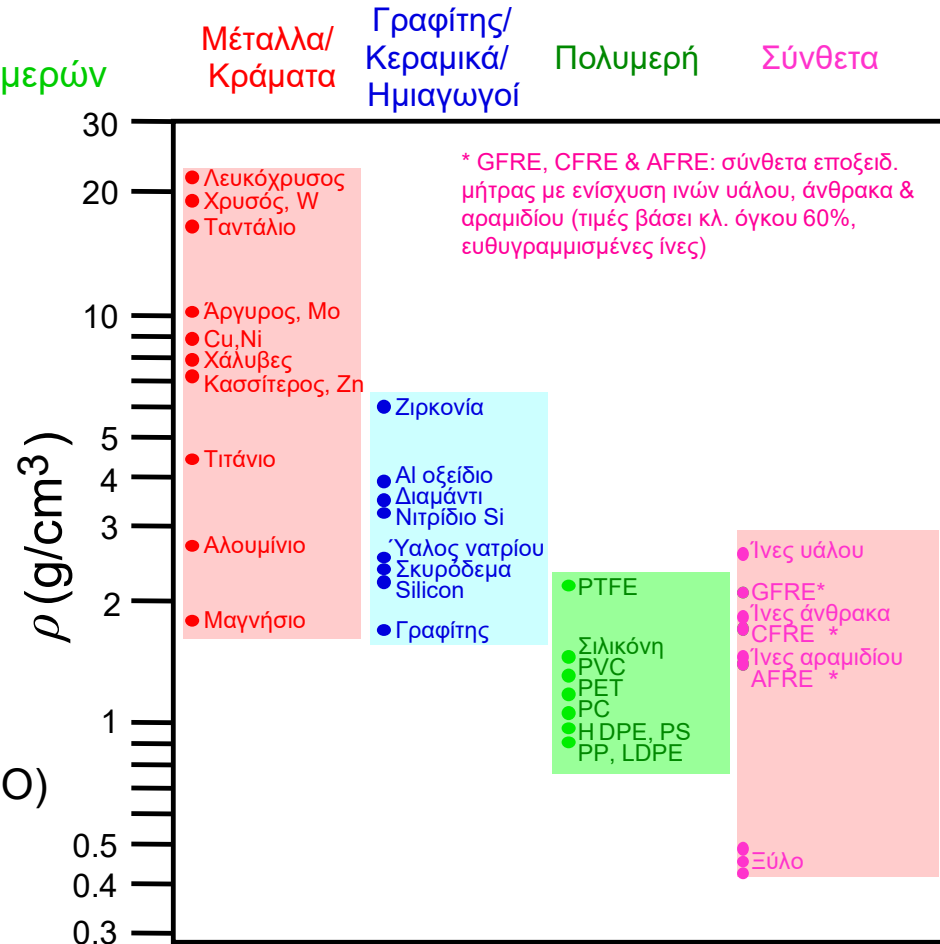
- λιγότερο πυκνή πλήρωση
- συχνά, ελαφρότερα στοιχεία

Τα πολυμερή έχουν...

- μικρή πυκνότητα πλήρωσης (συχνά, άμορφα)
- σχετικά ελαφρά στοιχεία (C, H, O)

Τα σύνθετα έχουν...

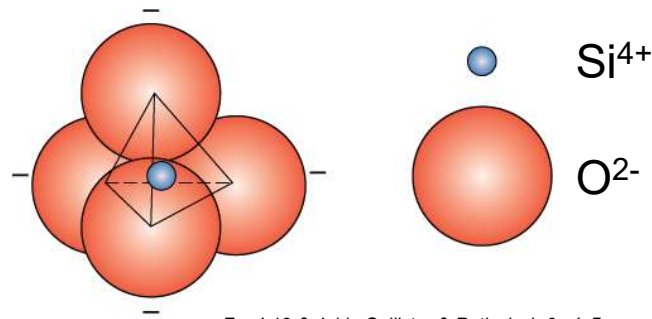
- ενδιάμεσες τιμές



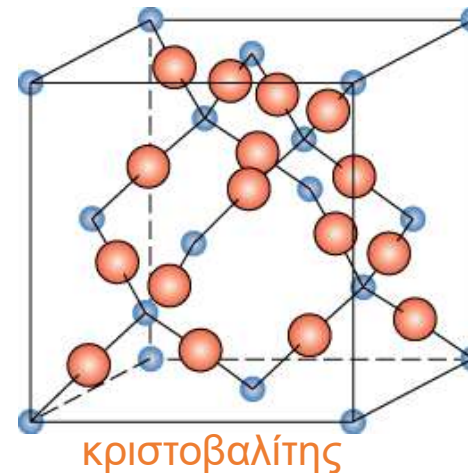
Δεδομένα από τον Πίνακα B.1, Callister & Rethwisch, 9η έκδ.

Πυριτικά κεραμικά

Si και O: Τα πλέον άφθονα στοιχεία στη Γη



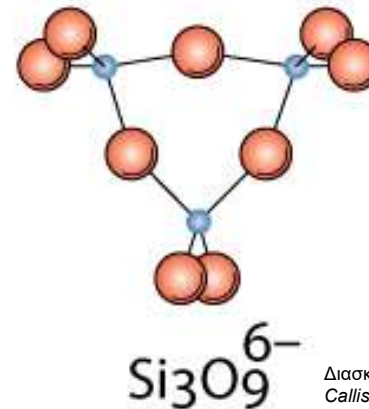
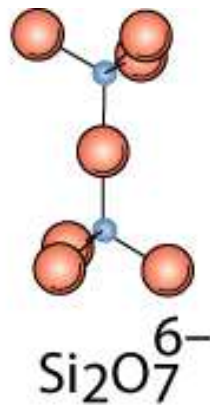
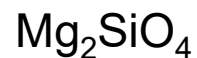
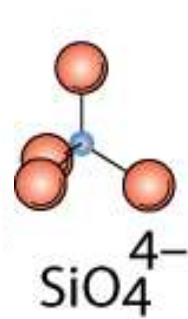
Σχ. 4.10 & 4.11, Callister & Rethwisch 9η έκδ.



- SiO₂ (πυριτία) **πολυμορφικές** μορφές: χαλαζίας, κρυστοβαλίτης, τριδυμίτης
- Ισχυροί δεσμοί Si-O => υψηλή θερμοκρασία τήξης (1710°C) του υλικού

Πυριτικές ενώσεις και ιόντα

Δεσμοί μεταξύ γειτονικών SiO_4^{4-} , επιτυγχάνονται με διαμοιρασμό κοινών γωνιών, ακμών, ή εδρών



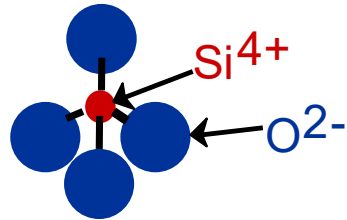
Διασκευή από Σχ. 4.13,
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Παρουσία κατιόντων (όπως Ca^{2+} , Mg^{2+} , & Al^{3+}) οδηγεί σε

1. διατήρηση ουδετερότητας φορτίου
2. σύνδεση των SiO_4^{4-} με ιοντικούς δεσμούς

Πυριτικές ύαλοι – δομή

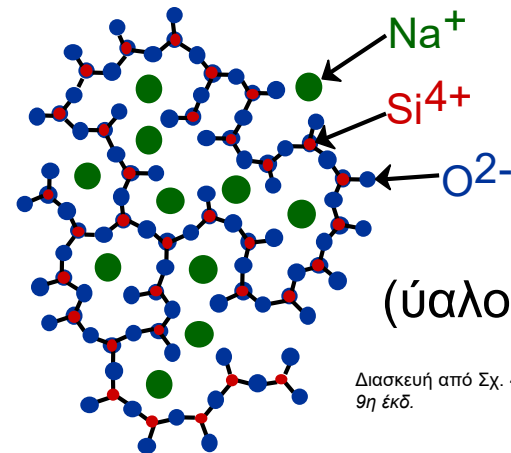
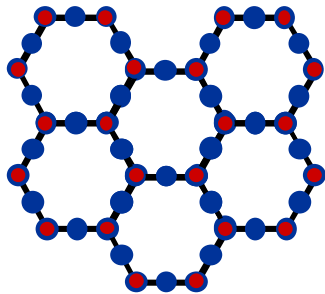
- Βασική μονάδα:
τετράεδρο SiO_4^{4-}



Το κοινό γυαλί είναι μη-κρυσταλλικό (άμορφο)

- Η τετηγμένη πυριτιά είναι SiO_2 στο οποίο δεν έχουν προστεθεί προσμείξεις
- Άλλες κοινές μορφές υάλου περιέχουν ιοντικές προσμείξεις όπως π.χ. Na^+ , Ca^{2+} , Al^{3+} και B^{3+}

- Ο χαλαζίας είναι κρυσταλλική μορφή SiO_2 :

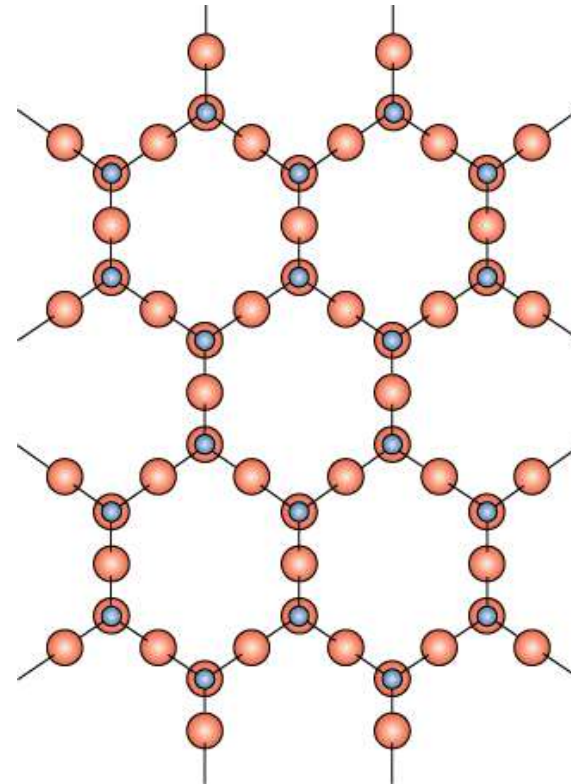


(ύαλος νατρίου)

Διασκευή από Σχ. 4.12, Callister & Rethwisch
9η έκδ.

Φυλλόμορφα (στρωματικά) πυριτικά υλικά, 1

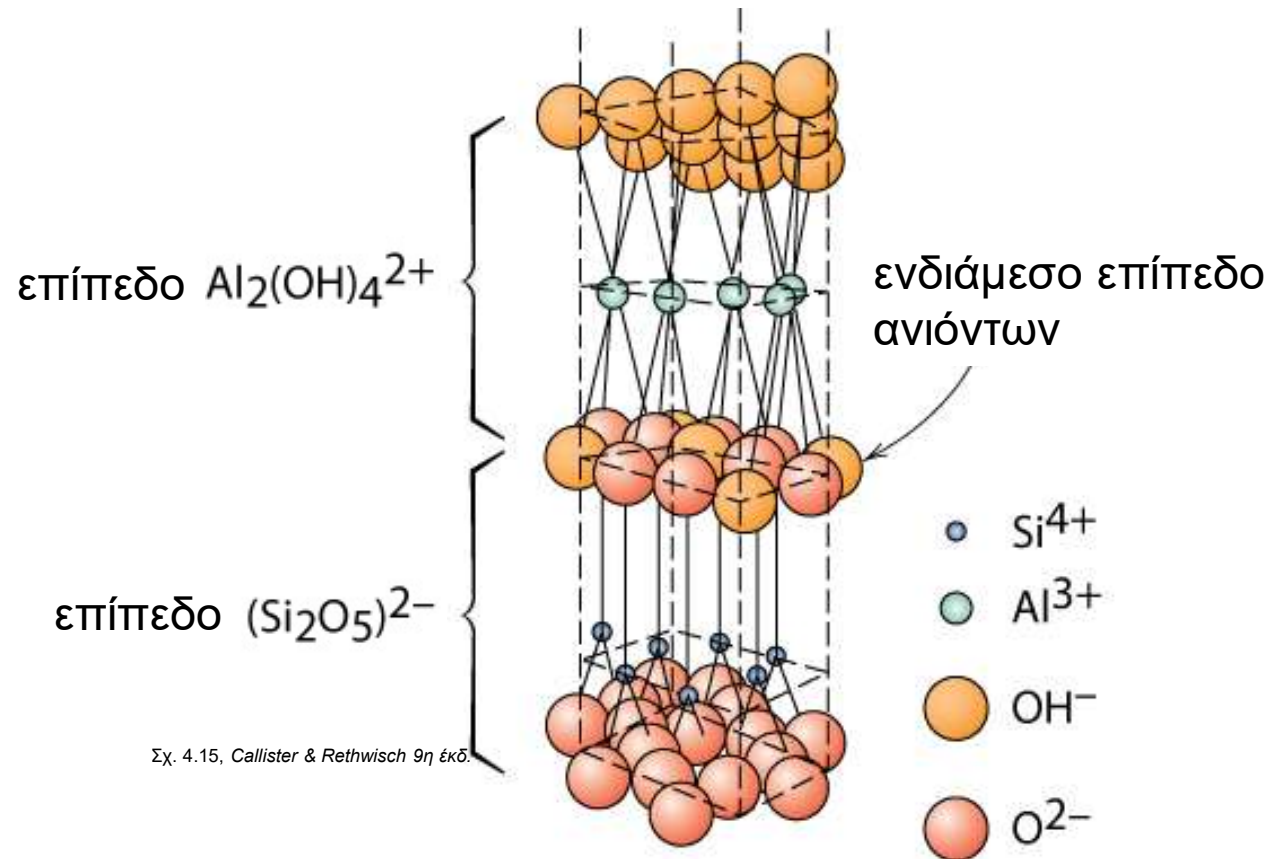
- Στρωματικές πυριτικές ενώσεις (π.χ., πηλοί, μαρμαρυγίες, τάλκης)
 - τετράεδρα SiO_4 ενώνονται και σχηματίζουν επίπεδα (“στρώσεις”)
- Ολικό φορτίο επιπέδου (στρώσης) αρνητικό, λόγω $(\text{Si}_2\text{O}_5)^{2-}$ (επαναλαμβανόμενη μονάδα)
- Το αρνητικό φορτίο εξουδετερώνεται από το πλεόνασμα θετικά φορτισμένων κατιόντων των γειτονικών επιπέδων



Σχ. 4.14, Callister & Rethwisch
9η έκδ.

Φυλλόμορφα (στρωματικά) πυριτικά υλικά, 2

- Καολινίτης: εναλλάξ επίπεδα $(\text{Si}_2\text{O}_5)^{2-}$ και $\text{Al}_2(\text{OH})_4^{2+}$



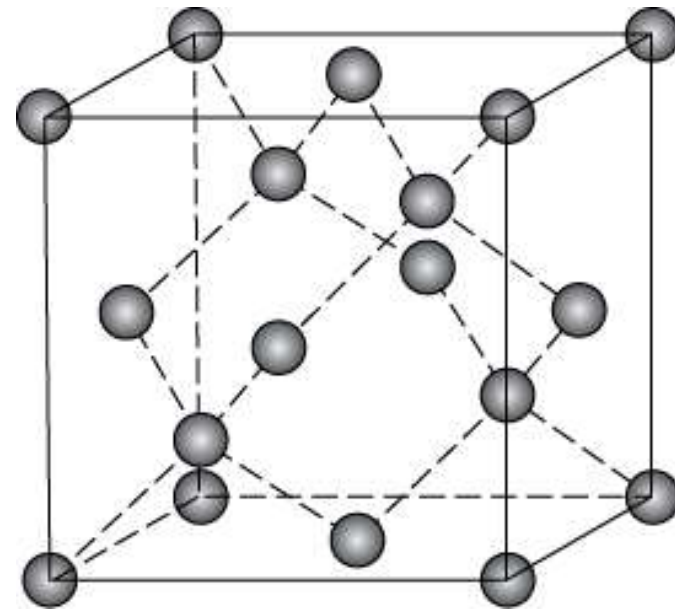
Σχ. 4.15, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Σημείωση: Τα γειτονικά επίπεδα σε αυτό τον τύπο υλικών συνδέονται με ασθενείς δυνάμεις van der Waals.

Πολυμορφικοί τύποι (αλλοτροπικές μορφές) άνθρακα, 1

Διαμάντι

- Τετραεδρικοί δεσμοί άνθρακα
 - το σκληρότερο γνωστό υλικό
 - πολύ υψηλή θερμική αγωγιμότητα
- Μεγάλοι μονοκρύσταλλοι – πολύτιμοι λίθοι
- Μικροί κρύσταλλοι – χρησιμοποιούνται για λείανση/κοπή άλλων υλικών
- Λεπτά υμένια διαμαντιού
 - επιστρώσεις υψηλής σκληρότητας – χρήση σε εργαλεία κοπής, ιατρικά όργανα, κ.λπ.

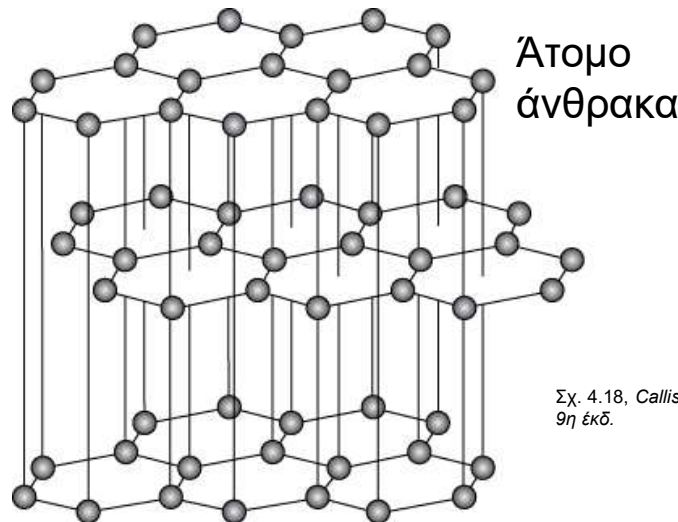


Σχ. 4.17, Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Πολυμορφικοί τύποι (αλλοτροπικές μορφές) άνθρακα, 2

Γραφίτης

- Στρωματική δομή: παράλληλες εξαγωνικές συστοιχίες ατόμων άνθρακα

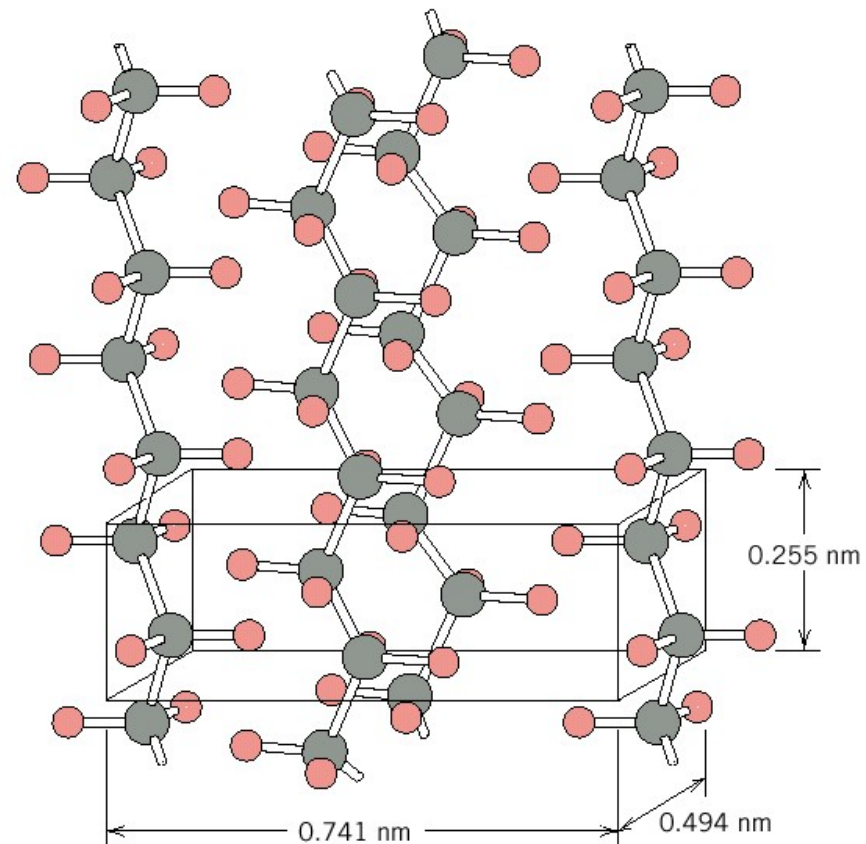


Σχ. 4.18, Callister & Rethwisch
9η έκδ.

- Ασθενείς δυνάμεις van der Waals μεταξύ των επιπέδων
- Ευκολία ολίσθησης των επιπέδων μεταξύ τους, καλή συμπεριφορά λίπανσης (ξηρό λιπαντικό)

Κρυσταλλικότητα πολυμερών

- Κρυσταλλικότητα πολυμερών: επιστοίβαση μοριακών αλυσίδων κατά τρόπο ώστε να σχηματίζουν οργανωμένη διάταξη ατόμων
- Οι κρυσταλλικές δομές καθορίζονται βάσει μοναδιαίας κυψελίδας (ΜΚ)
- Παράδειγμα:
 - ΜΚ πολυαιθυλενίου



Σχ. 4.19, Callister & Rethwisch
9η έκδ.

Κρύσταλλοι ως δομικά στοιχεία

- Ορισμένες τεχνικές εφαρμογές απαιτούν μονοκρυσταλλικά υλικά:

-- μονοκρύσταλλοι διαμαντιού
για λείανση/εκτριβή



(Πηγή: Martin Deakins,
GE Superabrasives, Worthington, OH.
Χρησιμοποιείται με άδεια.)

-- κατασκευή
πτερυγίων
στροβίλων



- Συχνά, οι ιδιότητες των κρυσταλλικών υλικών συσχετίζονται με την κρυσταλλική δομή τους.

-- Π.χ., για τον χαλαζία, η θραύση είναι ευκολότερη κατά μήκος ορισμένων κρυσταλλικών επιπέδων συγκριτικά με άλλα.



(Πηγή: P.M. Anderson)

Πολυκρυσταλλικά υλικά

- Τα περισσότερα τεχνικά υλικά είναι πολυκρυσταλλικά.



Ανισότροπο

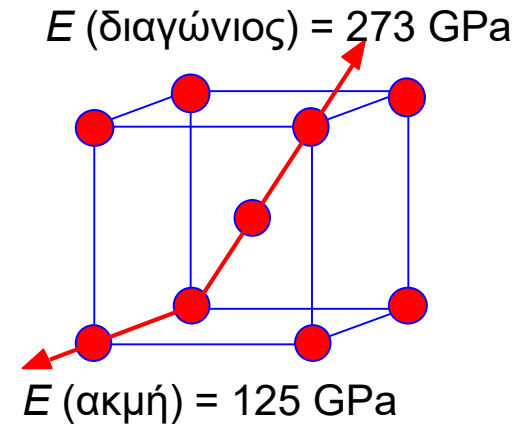
Από το έγχρωμο ένθετο Callister 5e.
(Πηγή: Paul E. Danielson, Teledyne
Wah Chang Albany)

Ισότροπο

- Έλασμα Nb-Hf-W με “ραφή” συγκόλλησης μέσω δέσμης ηλεκτρονίων.
- Κάθε “κόκκος” είναι ένας μονοκρύσταλλος.
- Εάν οι κόκκοι έχουν τυχαίο προσανατολισμό, μη-κατευθυντικός χαρακτήρας ιδιοτήτων
- Τα μεγέθη κόκκων τυπικά κυμαίνονται από 1 nm έως 2 cm (δηλ., από λίγα έως εκατομμύρια ατομικά επίπεδα).

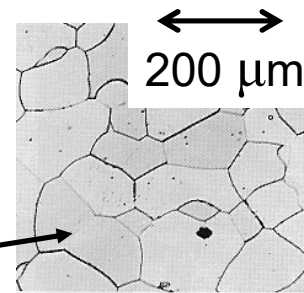
Μονοκρυσταλλικά έναντι πολυκρυσταλλικών υλικών

- Μονοκρυσταλλικά
 - **Ανισότροπα** (μεταβολή ιδιοτήτων ανάλογα με τη διεύθυνση)
 - Παράδειγμα: μέτρο ελαστικότητας σιδήρου δομής BCC

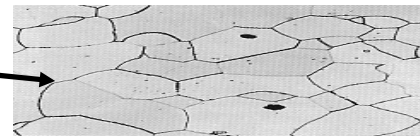


Δεδομένα από τον Πίνακα 3.3,
Callister & Rethwisch 9η έκδ.
(Πηγή: R.W. Hertzberg,
Deformation and Fracture
Mechanics of Engineering
Materials, 3rd ed., John Wiley and
Sons, 1989.)

- Πολυκρυσταλλικά
 - Οι ιδιότητες μπορεί (ή όχι) να μεταβάλλονται με τη διεύθυνση.
 - Εάν οι κόκκοι έχουν τυχαίο προσανατολισμό: **ισότροπα**. ($E_{\text{poly iron}} = 210 \text{ GPa}$)
 - Εάν οι κόκκοι έχουν προτιμητέο προσανατολισμό (**υφή**): ανισότροπα.



Διασκευή από Σχ. 6.19(β),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.
[Πηγή: L.C. Smith and C. Brady,
the National Bureau of Standards,
Washington, DC (now the National
Institute of Standards and
Technology, Gaithersburg, MD).]



Πολυμορφισμός

- Υπαρξη δύο ή περισσότερων, διακριτών κρυσταλλικών δομών για το ίδιο υλικό (αλλοτροπία/πολυμορφισμός)

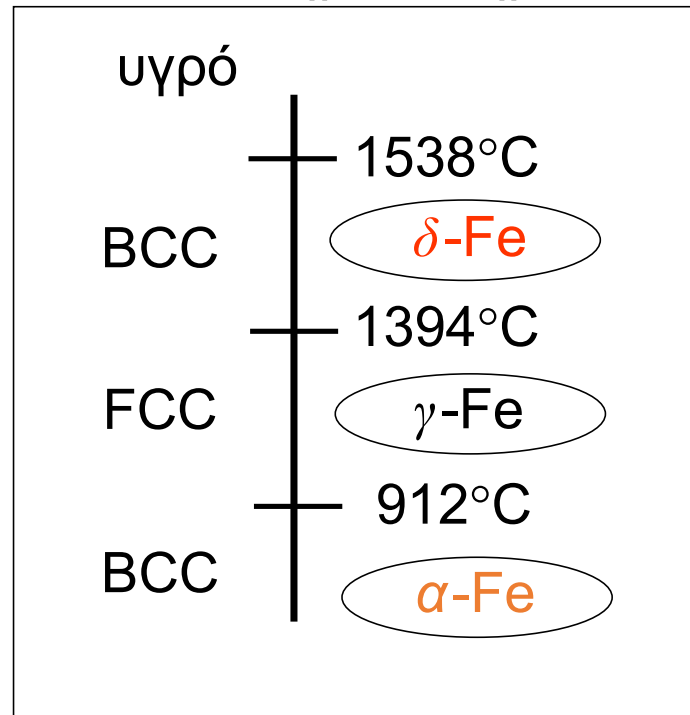
τιτάνιο

α, β -Ti

άνθρακας

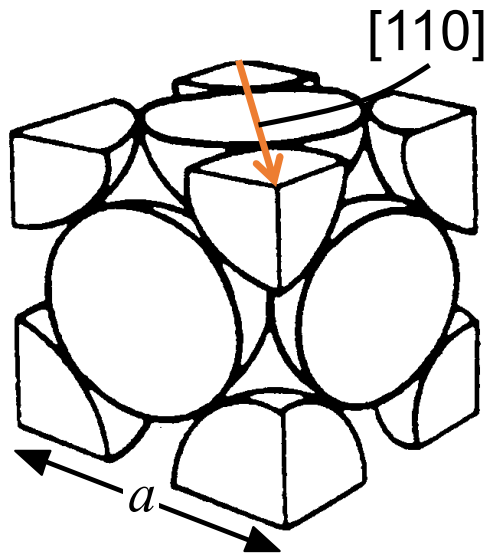
διαμάντι, γραφίτης

σύστημα σιδήρου



Γραμμική πυκνότητα

- Γραμμική πυκνότητα ατόμων $\equiv LD = \frac{\text{Πλήθος ατόμων}}{\text{Μοναδιαίο μήκος διανύσματος διεύθυνσης}}$



Διασκευή από Σχ. 3.1(α),
Callister & Rethwisch 9η έκδ.

Π.χ.: Γραμμική πυκνότητα του Al
στη διεύθυνση [110]

$$a = 0.405 \text{ nm}$$

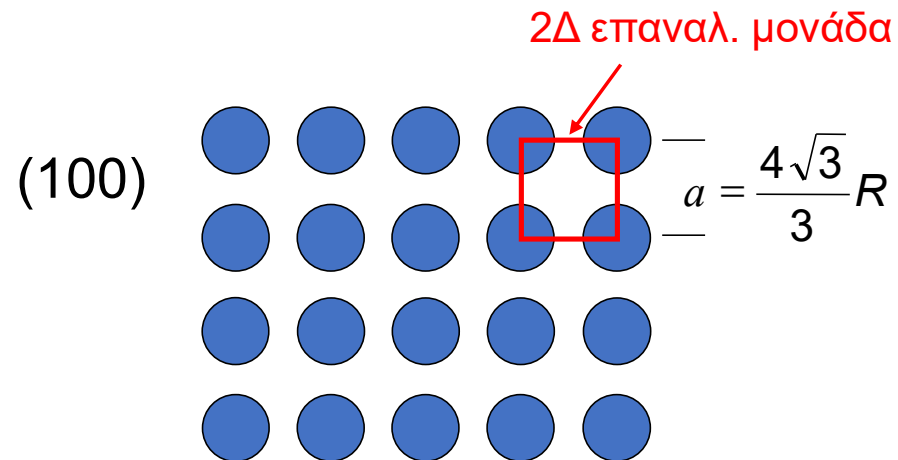
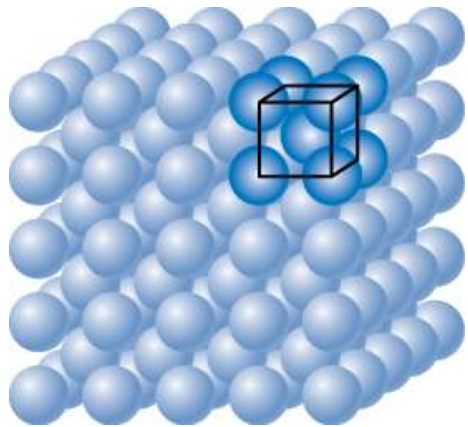
ατόμων $\rightarrow$ 2

μήκος $\rightarrow$ $\sqrt{2}a$

$$LD = \frac{2}{\sqrt{2}a} = 3.5 \text{ nm}^{-1}$$

Επίπεδη πυκνότητα σιδήρου (100)

Σε $T < 912^\circ\text{C}$, ο σίδηρος έχει δομή BCC.



Σχ. 4.2(γ), Callister & Rethwisch 9η έκδ. [Από W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. © 1964 John Wiley & Sons, New York. Αναπαράγεται με άδεια από John Wiley & Sons, Inc.]

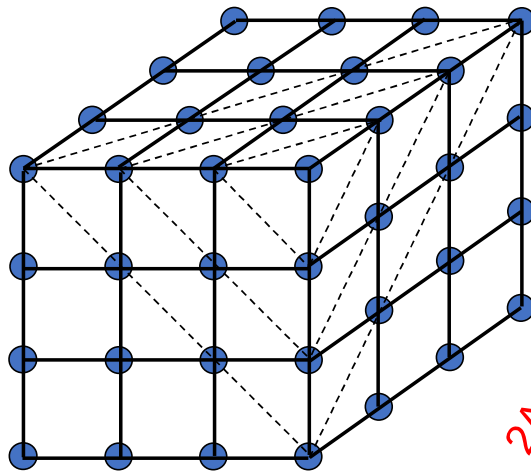
Ακτίνα σιδήρου $R = 0.1241 \text{ nm}$

$$\text{Επίπεδη πυκνότητα} = \frac{\frac{\text{άτομα}}{2\Delta \text{ επαναλ. μονάδα}}}{\frac{\text{επιφάνεια}}{2\Delta \text{ επαναλ. μονάδα}}} = \frac{1}{\left(\frac{4\sqrt{3}}{3}R\right)^2} = 12.1 \frac{\text{άτομα}}{\text{nm}^2} = 1.2 \times 10^{19} \frac{\text{άτομα}}{\text{m}^2}$$

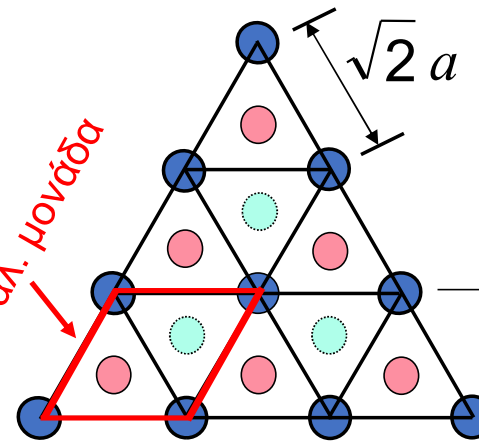
Επίπεδη πυκνότητα σιδήρου (111)

Επίπεδο (111)

1 άτομο στο επίπεδο / ΜΚ επιφάνειας



2Δ επαναλ. μονάδα



- άτομα στο επίπεδο
- άτομα πάνω από το επίπεδο
- άτομα κάτω από το επίπεδο

$$h = \sqrt{\frac{3}{2}} a$$

$$\text{επιφάνεια} = \sqrt{2} a h = \sqrt{3} a^2 = \sqrt{3} \left(\frac{4\sqrt{3}}{3} R \right)^2 = \frac{16\sqrt{3}}{3} R^2$$

άτομα
2Δ επαναλ. μονάδα

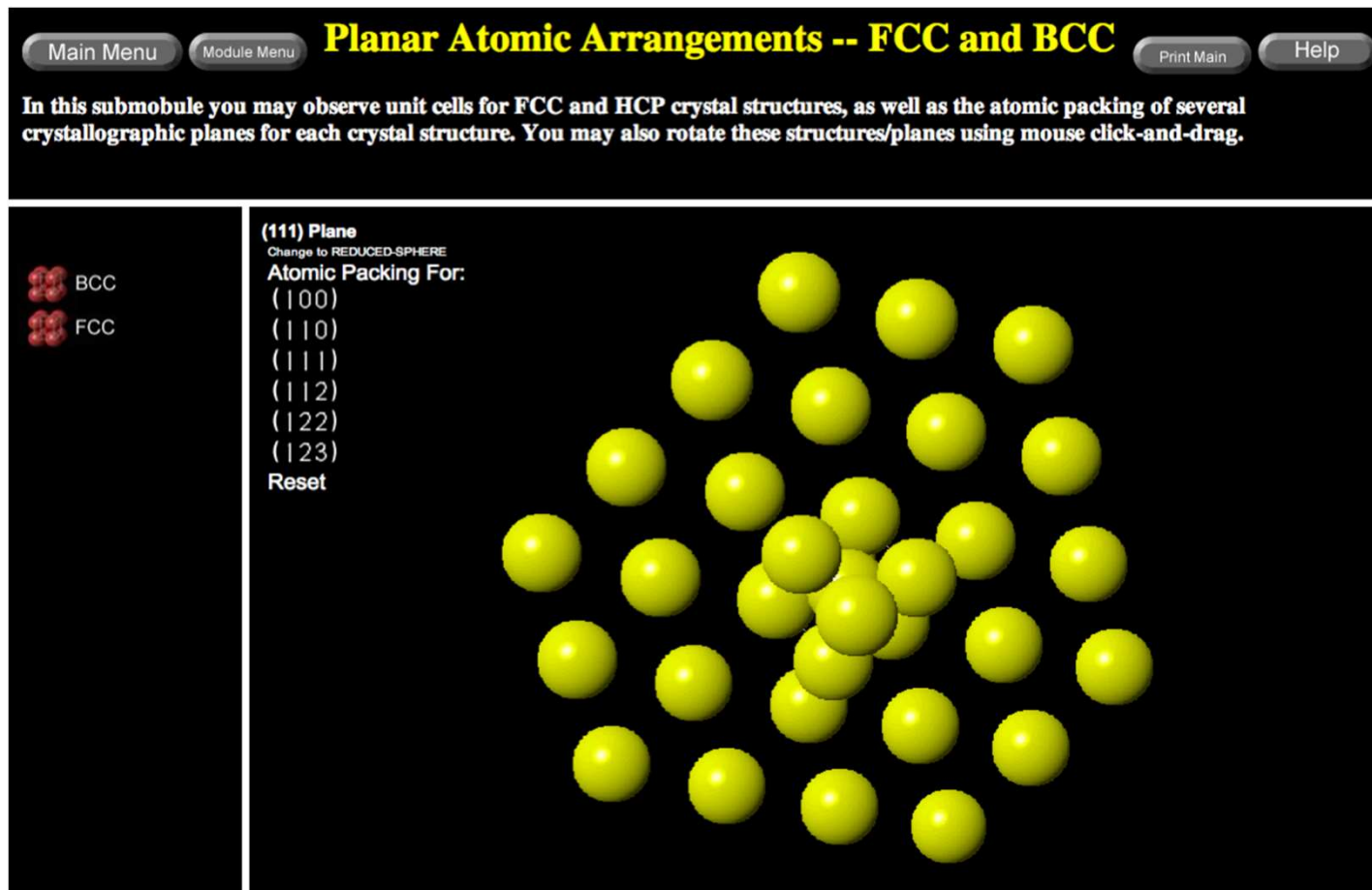
1

$$\text{Επίπεδη πυκνότητα} = \frac{1}{\frac{16\sqrt{3}}{3} R^2} = 7.0 \frac{\text{άτομα}}{\text{nm}^2}$$

επιφάνεια
2Δ επαναλ. μονάδα

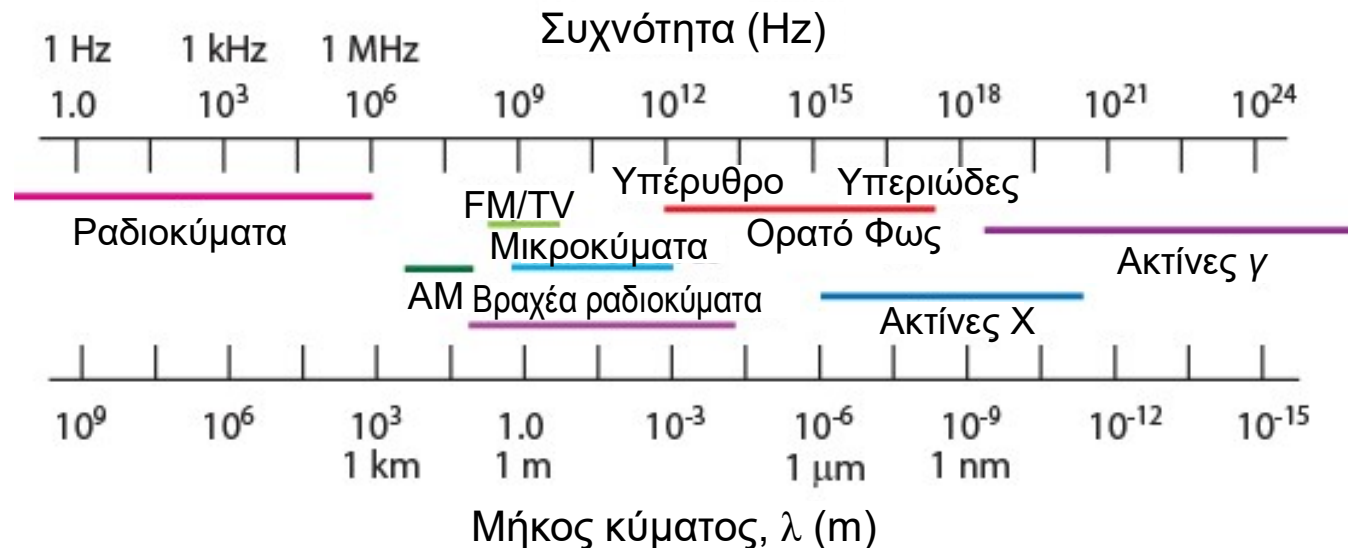
$$0.70 \times 10^{19} \frac{\text{άτομα}}{\text{m}^2}$$

Ατομική διεύθυνση, επίπεδο (111) δομής BCC (προσομοίωση στο VMSE)



Περίθλαση ακτινών X

Φάσμα Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας

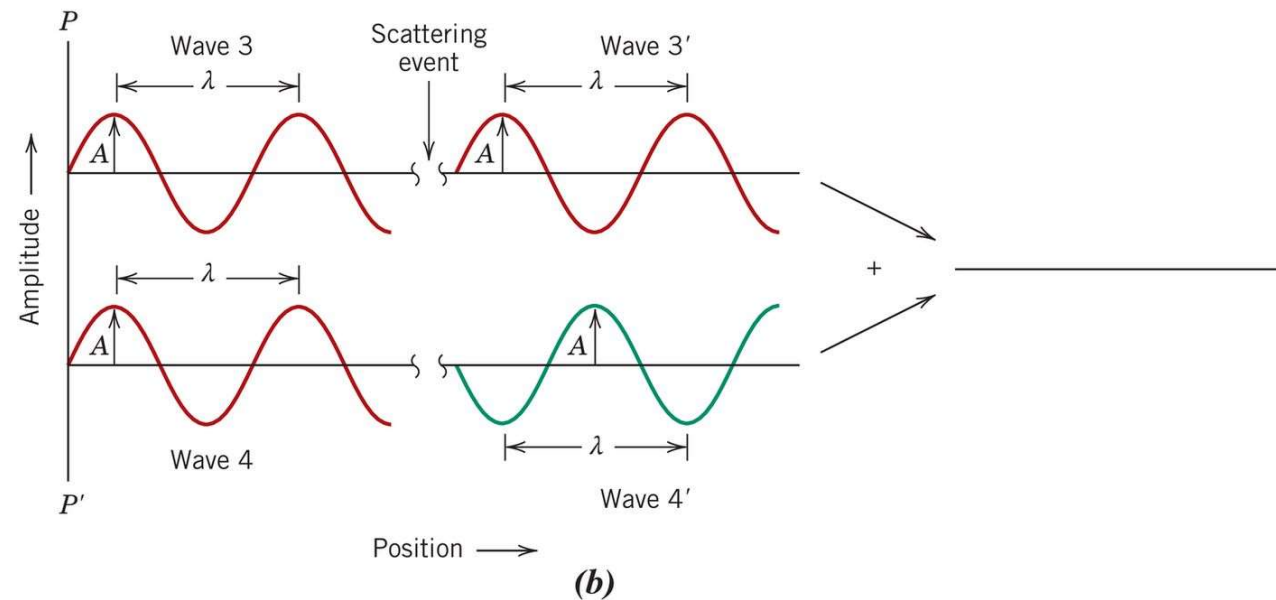
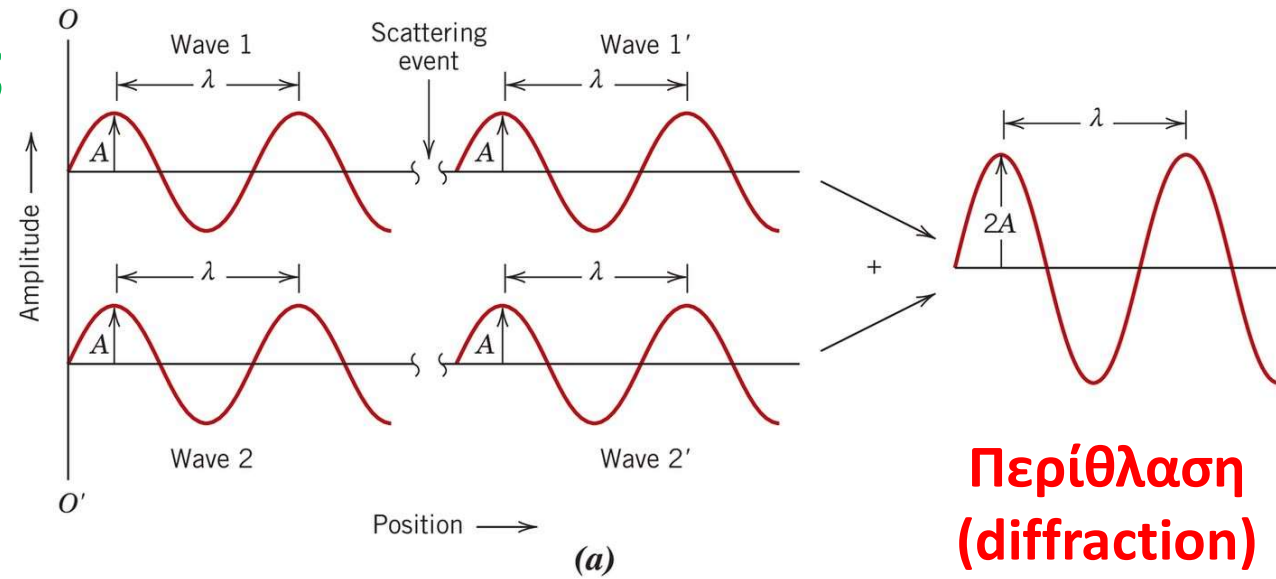


- **Περίθλασιμετρία:** Χρήση ακτινών X για τον προσδιορισμό της κρυσταλλικής δομής και της διατομικής απόστασης.
- **Νόμος Bragg:** $n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$
- **Αναγκαία συνθήκη:** η απόσταση d_{hkl} πρέπει να είναι συγκρίσιμη με το μήκος κύματος της περιθλώμενης ακτινοβολίας
- Δεν είναι δυνατή η μέτρηση διατομικών αποστάσεων $< \lambda$

Το φαινόμενο της περίθλασης

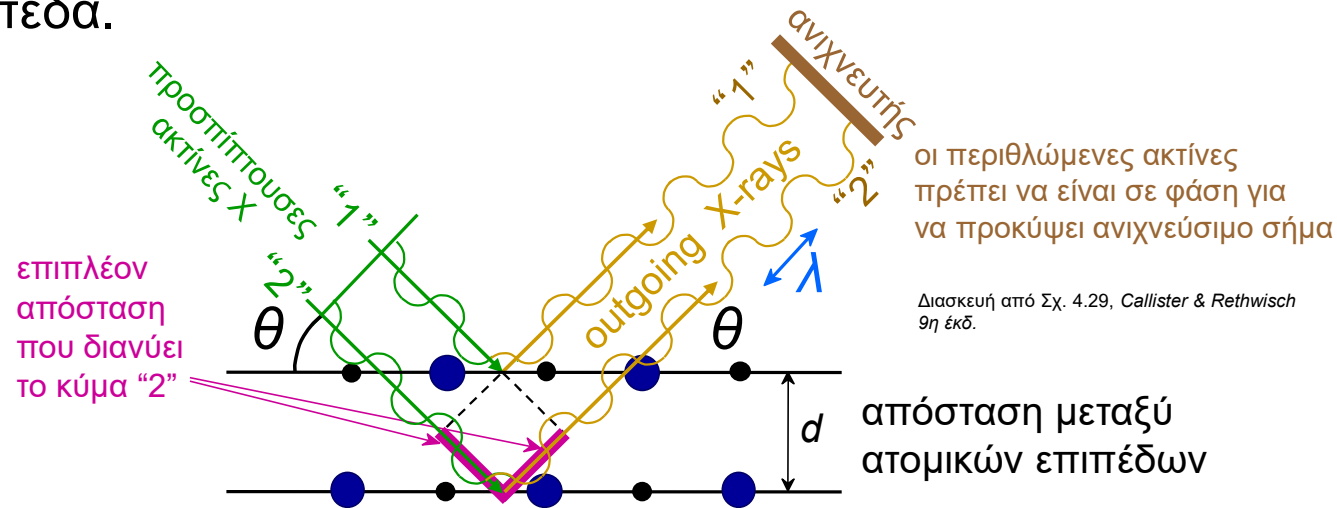
Περίθλαση συμβαίνει όταν ένα κύμα συναντά μία σειρά από εμπόδια τοποθετημένα σε τακτά διαστήματα τα οποία

1. Είναι ικανά να σκεδάσουν το κύμα
2. Έχουν αποστάσεις συγκρίσιμες με το μήκος κύματος (λ) της ακτινοβολίας X



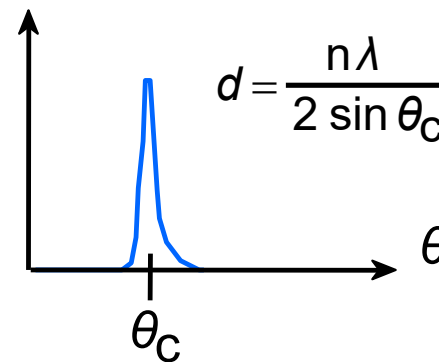
Προσδιορισμός κρυσταλλικής δομής

- Οι προσπίπτουσες ακτίνες X **περιθλώνονται** από τα κρυσταλλικά επίπεδα.

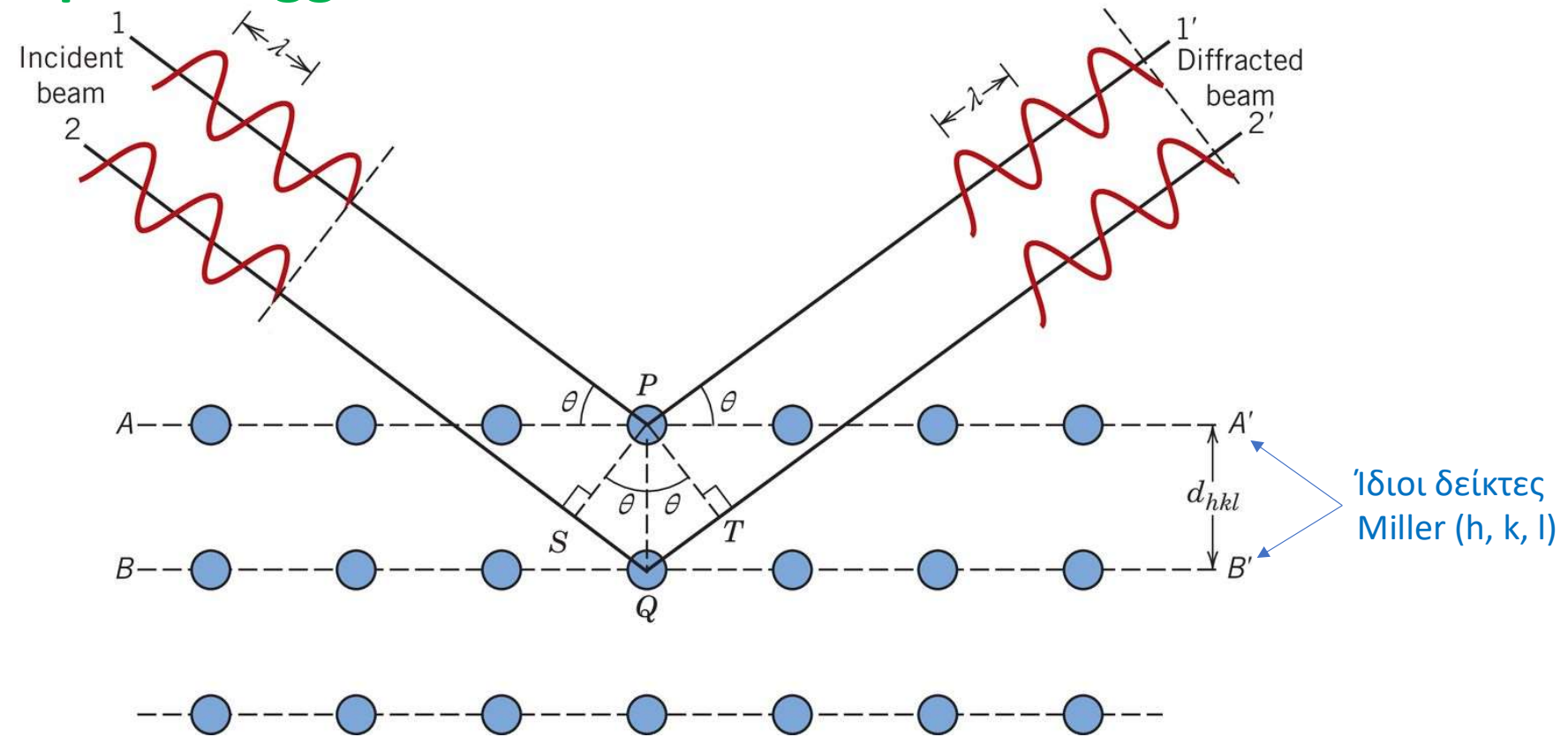


Η μέτρηση της κρίσιμης γωνίας, θ_c , επιτρέπει τον υπολογισμό της απόστασης d μεταξύ ατ. επιπέδων.

Ένταση ακτ.Χ (από τον ανιχνευτή)



Εξήγηση νόμου Bragg



Ενισχυτική συμβολή συμβαίνει όταν η διαφορά μεταξύ των διαδρομών 1-P-1' και 2-Q-2' (δηλαδή SQ+QT) είναι ίση με έναν ακέραιο αριθμό μηκών κύματος, n. Δηλαδή:

$$\begin{aligned} n\lambda &= SQ + QT \text{ ή} \\ n\lambda &= d_{hkl} \sin\theta + d_{hkl} \sin\theta \\ &= 2d_{hkl} \sin\theta \text{ ΝΟΜΟΣ του Bragg} \end{aligned}$$

Κυβική συμμετρία

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Παρόμοιες σχέσεις για τα άλλα έξι κρυσταλλογραφικά συστήματα



- Ο νόμος Bragg είναι μία **αναγκαία αλλά όχι ικανή** συνθήκη για να συμβεί περίθλαση
- Καθορίζει πότε θα συμβεί περίθλαση σε κρυστάλλους των οποίων η μοναδιαία κυψελίδα έχει **άτομα μόνο στις γωνίες** της.
- Τα άτομα που βρίσκονται σε άλλες θέσεις π.χ. **έδρες ή κέντρο**, όπως FCC και BCC, λειτουργούν ως **επιπλέον κέντρα** και προκαλούν σκέδαση εκτός φάσης σε συγκεκριμένες γωνίες Bragg.
- Σαν αποτέλεσμα, **απουσιάζουν ορισμένες περιθλώμενες δέσμες** οι οποίες, σύμφωνα με Bragg, έπρεπε να είναι παρούσες.
- Οι ομάδες που δεν δημιουργούν περιθλώμενες δέσμες εξαρτώνται από την κρυσταλλική δομή.

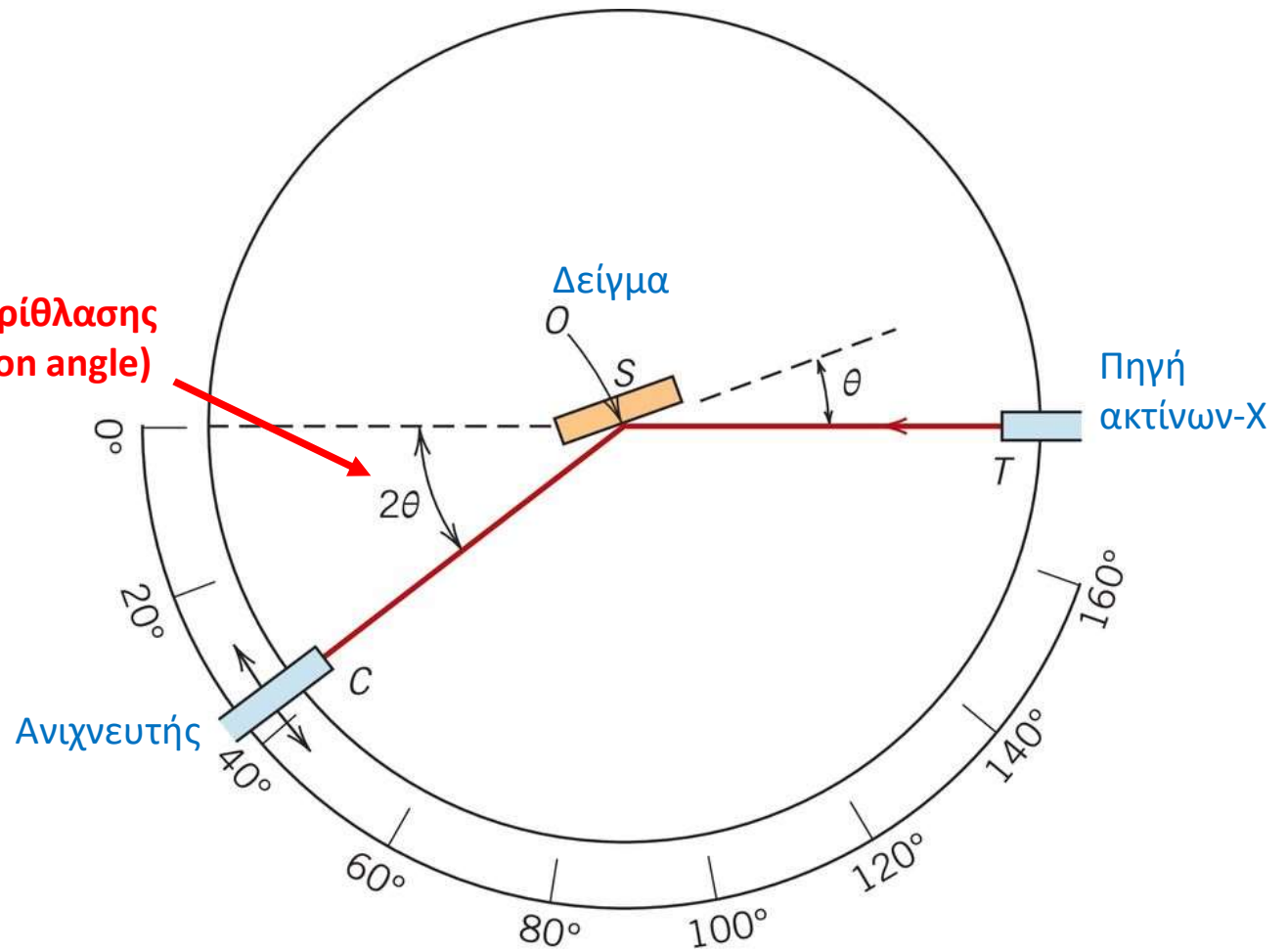
Σαν παράδειγμα.....

Κανόνες περίθλασης

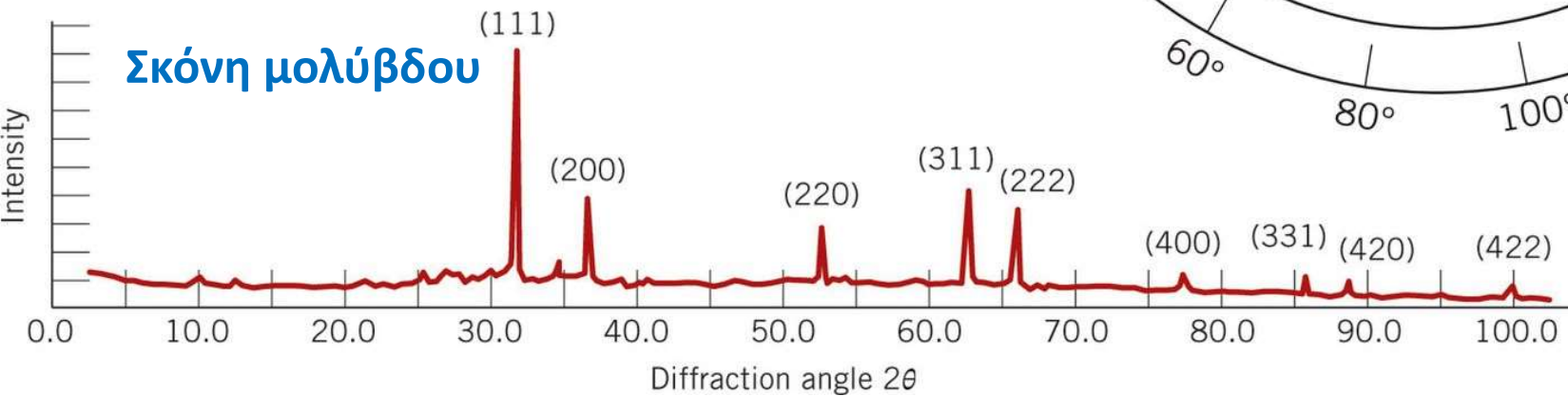
Κρυσταλλική δομή	Παρούσες περιθλώμενες δέσμες	Δείκτες περίθλασης για τα πρώτα έξι επίπεδα
BCC	$(h+k+l)$ άρτιο	110, 200, 211, 220, 310, 222
FCC	h, k, l όλα άρτια ή όλα περιττά	111, 200, 220, 311, 222, 400
Απλή κυβική	Όλες	100, 110, 111, 200, 210, 211

Περιθλασίμετρο (diffractometer)

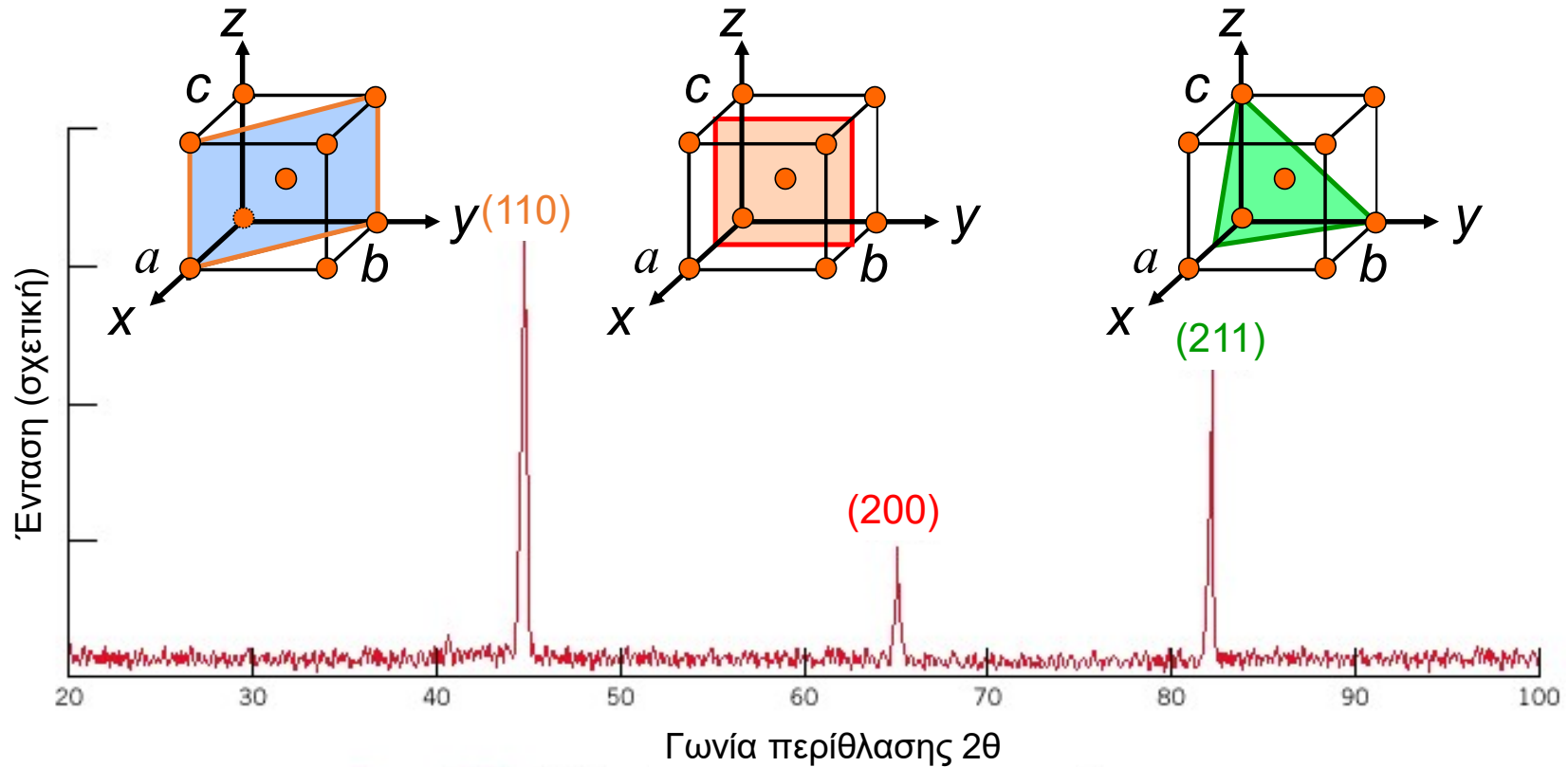
γωνία περίθλασης
(diffraction angle)



Σκόνη μολύβδου



Διάγραμμα περίθλασης ακτινών X



Διάγραμμα (ή μοτίβο) περίθλασης (περιθλασίγραμμα) για πολυκρυσταλλικό α -σίδηρο (δομής BCC)



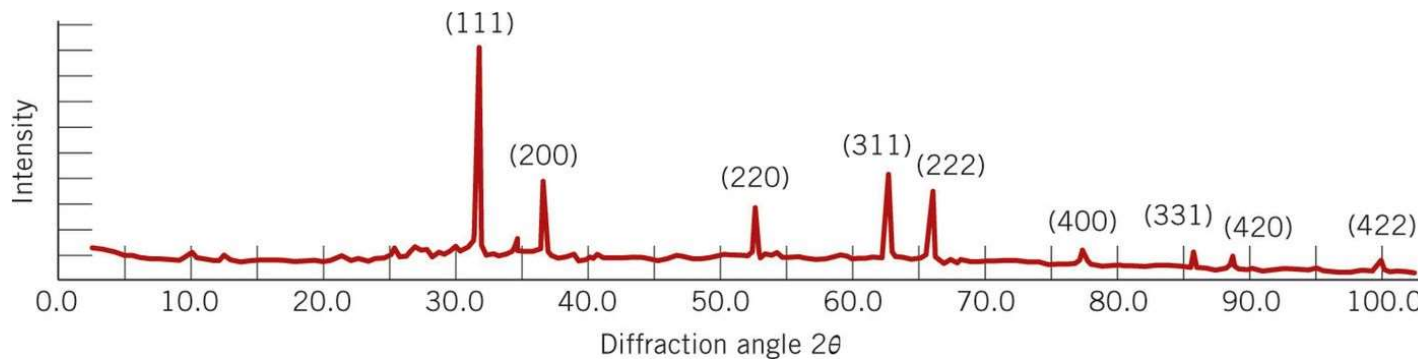
Υπολογισμός απόστασης μεταξύ επιπέδων και γωνίας περίθλασης

Για σίδηρο BCC υπολογίστε (α) την απόσταση μεταξύ επιπέδων και (β) την γωνία περίθλασης για το σύνολο επιπέδων (200). Η παράμετρος πλέγματος για τον Fe είναι 0,2866, ενώ χρησιμοποιείται μονοχρωματική ακτινοβολία με μήκος κύματος $\lambda=0,1790$ nm και η τάξη ανάκλασης είναι 1.

EXAMPLE

Υπολογισμός απόστασης μεταξύ επιπέδων και παραμέτρου πλέγματος για μόλυβδο

Παρακάτω παρουσιάζεται το διάγραμμα περίθλασης ακτίνων-Χ από ένα δείγμα μολύβδου το οποίο πάρθηκε με περιθλασίμετρο μονοχρωματικής ακτινοβολίας-Χ με μήκος κύματος $\lambda = 0,1542 \text{ nm}$ (Cu K α). Υπολογίστε (α) την απόσταση μεταξύ των επιπέδων και (β) την παράμετρο πλέγματος (α) για κάθε κορυφή (για όλες τις κορυφές η τάξη ανάκλασης είναι 1).



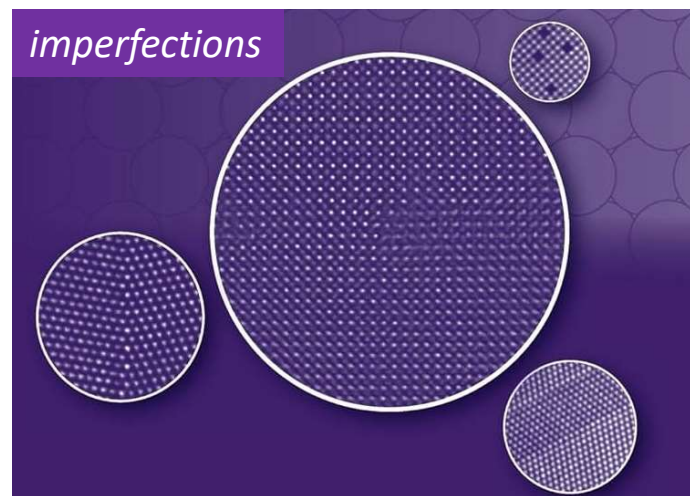


ΣΥΝΟΨΗ



- Κοινές κρυσταλλικές δομές μετάλλων: FCC, BCC και HCP. Ο Αριθμός Ένταξης και ο Συντελεστής Ατομικής Πλήρωσης είναι ίδιοι για τις κρυσταλλικές δομές FCC και HCP.
- Μπορούμε να προβλέψουμε την πυκνότητα ενός υλικού, εφόσον γνωρίζουμε το ατομικό βάρος, την ατομική ακτίνα και τη γεωμετρία του κρυστάλλου (π.χ., FCC, BCC, HCP).
- Διατομικοί δεσμοί στα κεραμικά: ιοντικοί και/ή ομοιοπολικοί.
- Οι κρυσταλλικές δομές των κεραμικών βασίζονται στα εξής:
 - διατήρηση ουδετερότητας φορτίου
 - λόγο ακτινών κατιόντων-ανιόντων
- Ορισμένα υλικά μπορεί να απαντώνται με περισσότερες από μία κρυσταλλικές δομές. Αυτό αναφέρεται ως πολυμορφισμός (ή αλλοτροπία).
- Η περίθλαση ακτινών X χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της κρυσταλλικής δομής και της διατομικής απόστασης υλικών.

Ατέλειες στα στερεά

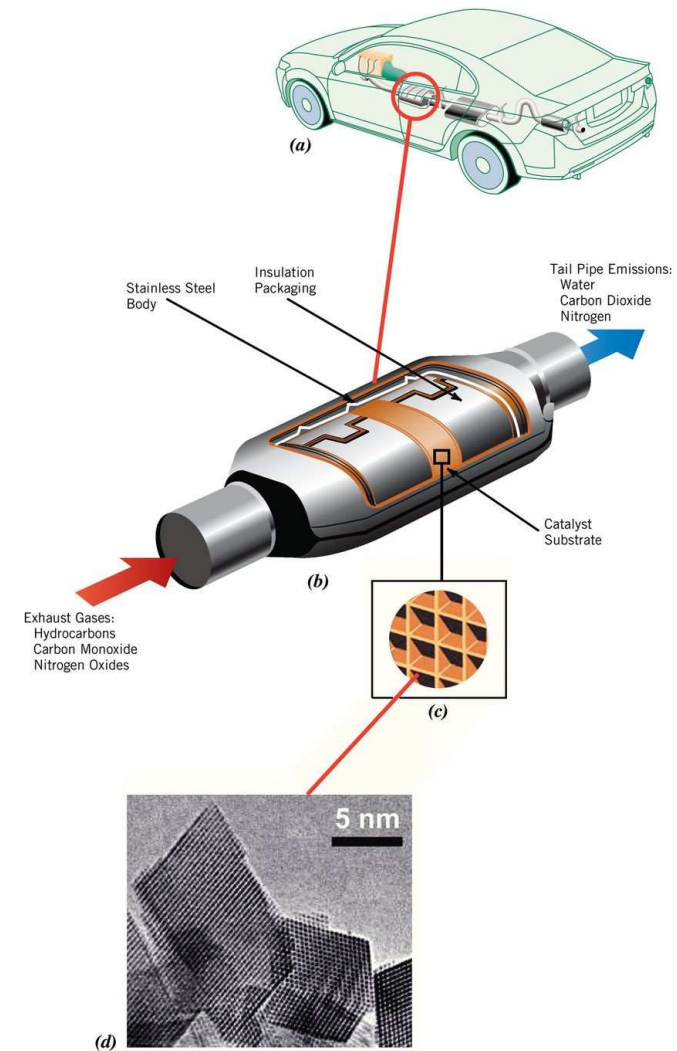


Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

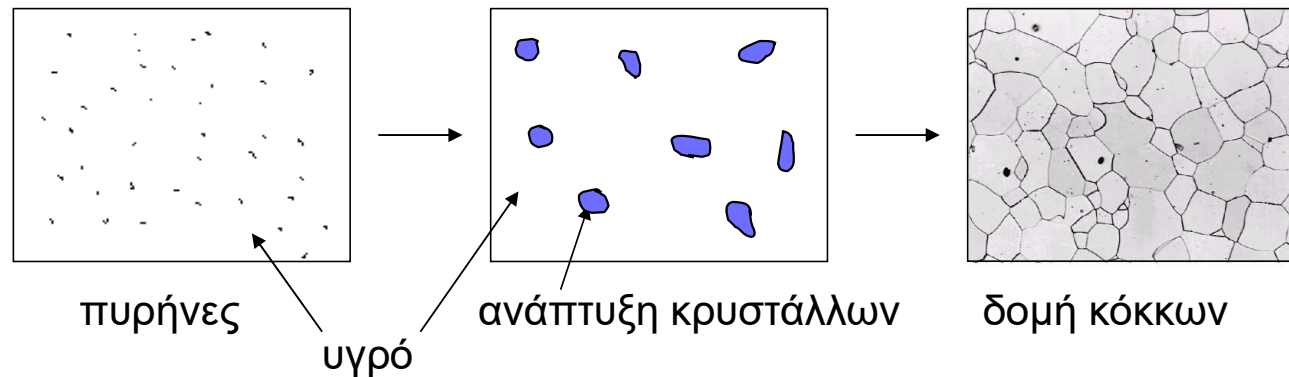
Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- Μηχανισμοί στερεοποίησης και σχηματισμός ατελειών.
- Τα είδη ατελειών που εμφανίζονται στα στερεά.
- Μπορεί να μεταβάλλεται/ελέγχεται το πλήθος και το είδος των ατελειών;
- Πώς επηρεάζουν οι ατέλειες τις ιδιότητες των υλικών;
- Είναι πραγματικά ανεπιθύμητες οι ατέλειες;



Ατέλειες στα στερεά

- **Στερεοποίηση** - αποτέλεσμα χύτευσης τηγμένου υλικού
 - 2 βήματα
 - σχηματισμός πυρήνων
 - ανάπτυξη των πυρήνων => σχηματισμός κρυστάλλων – δομή κόκκων
- Έναρξη από κατάσταση τήξης: υλικό σε υγρή μορφή



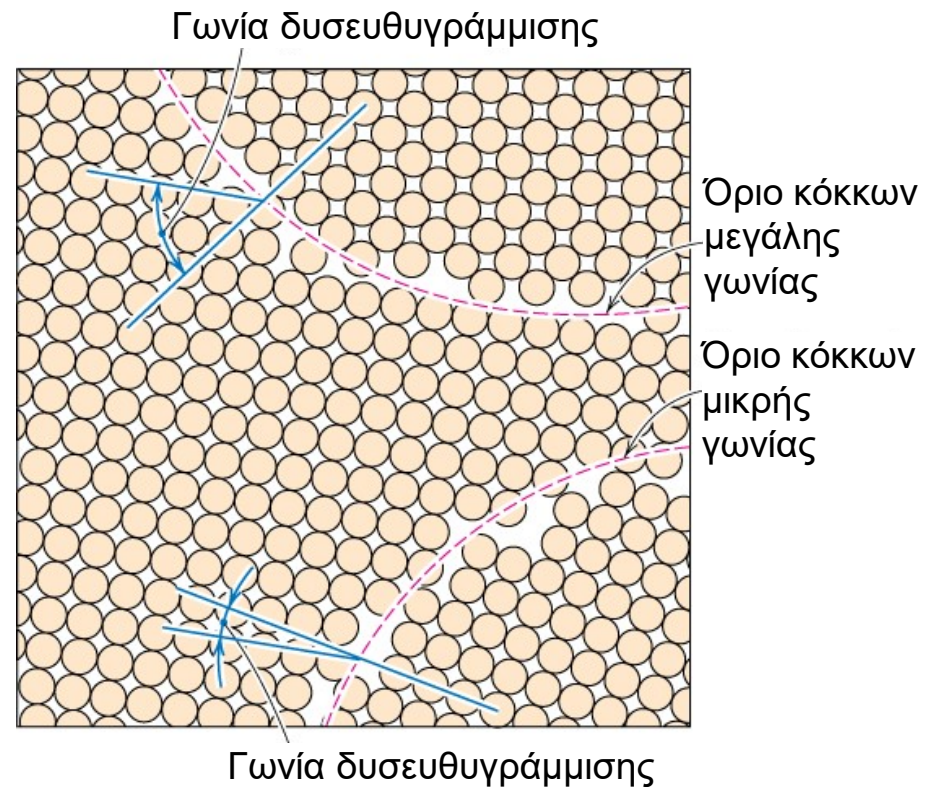
[Φωτογραφία από μικροσκόπιο. Πηγή: L. C. Smith and C. Brady, the National Bureau of Standards, Washington, DC (now the National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.)]

- Η ανάπτυξη των κρυστάλλων συνεχίζεται μέχρι να φτάσουν ο ένας στα όρια του άλλου

Πολυκρυσταλλικά υλικά

Όρια κόκκων

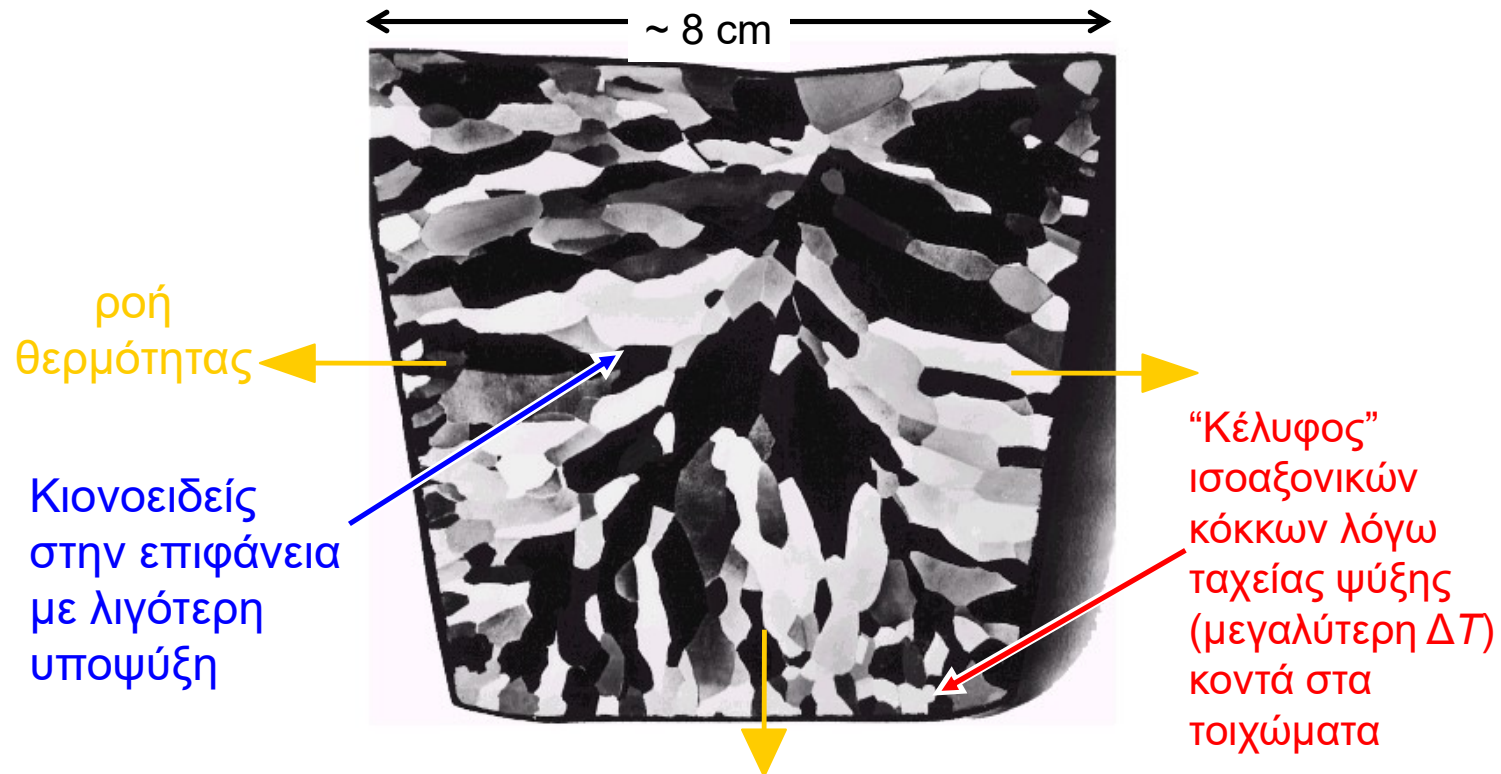
- περιοχές μεταξύ των κρυσταλλων
- μετάβαση μεταξύ διαφορετικών κρυσταλ. προσανατολισμών
- διαταραγμένη διαμόρφωση ατόμων
- χαμηλή πυκνότητα σε όρια κόκκων
 - υψηλή ευκινησία
 - υψηλός συντ. διάχυσης
 - υψηλή χημική δραστηριότητα



Στερεοποίηση

Οι κόκκοι μπορούν να είναι

- ισοαξονικοί (περίπου ίδιο μέγεθος προς όλες τις διευθύνσεις)
- κιονοειδείς (επιμήκεις)



Υλικό (πρόσθετο) εκλέπτυνσης κόκκων – για σχηματισμό ισοαξονικών κόκκων με αυξημένη ομοιομορφία και μικρότερο μέγεθος.

Ατέλειες στα στερεά

Δεν υπάρχει τέλειος κρύσταλλος.

- Ατέλειες – τι ακριβώς είναι;
- Γιατί είναι σημαντικές;

Πολλές από τις σημαντικές ιδιότητες των υλικών οφείλονται στην παρουσία ατελειών.

Τύποι ατελειών

- Πλεγματικά κενά
(κενές θέσεις ατόμων)
 - Άτομα παρεμβολής
 - Άτομα αντικατάστασης
-
- Διαταραχές
 - Όρια κόκκων

Σημειακές ατέλειες

Γραμμικές ατέλειες

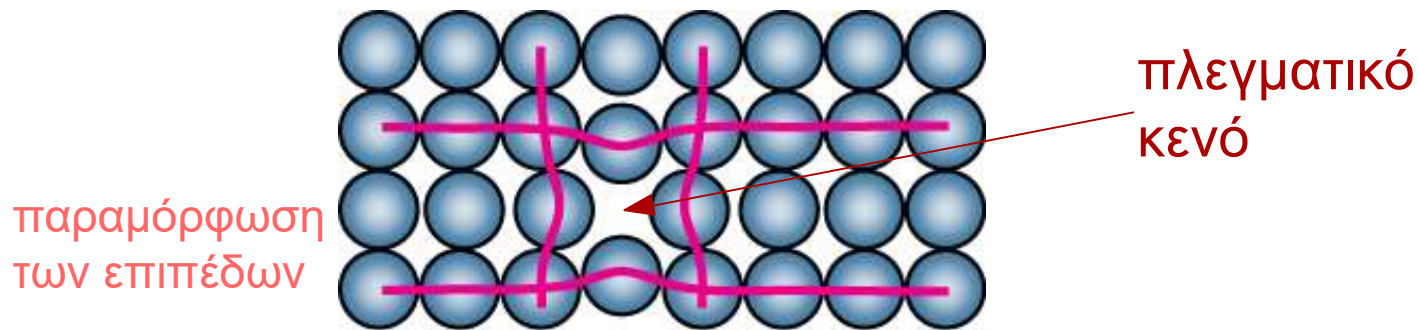
Επιφανειακές ατέλειες

ΣΗΜΕΙΑΚΕΣ ΑΤΕΛΕΙΕΣ

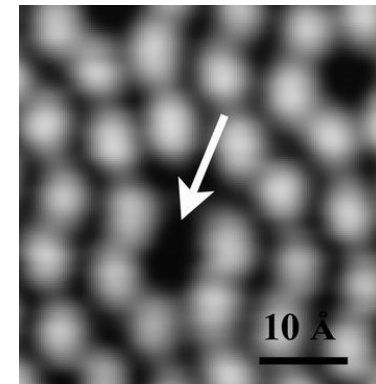
Σημειακές ατέλειες στα μέταλλα

- **Πλεγματικά κενά:**

- κενές ατομικές θέσεις σε μία δομή.



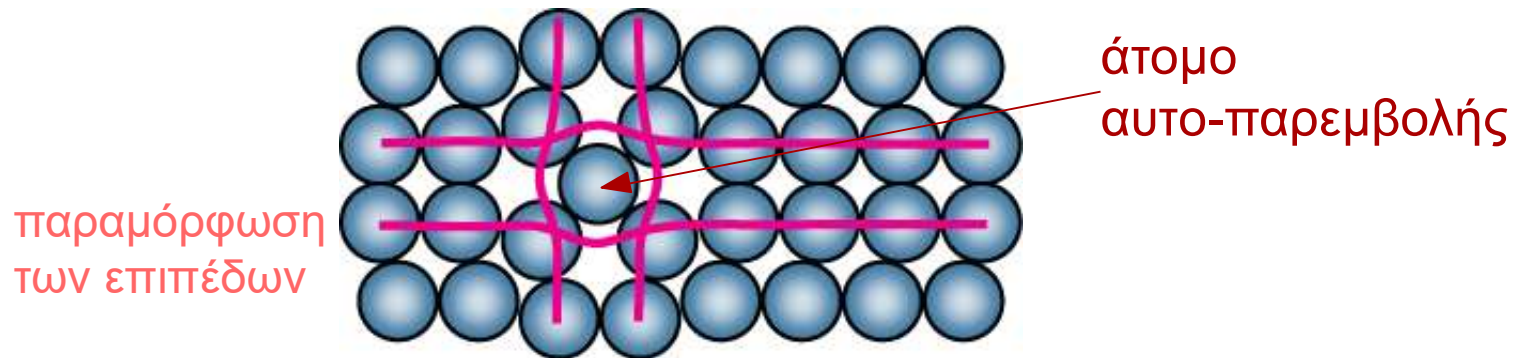
Επίπεδο (111)
επιφάνειας πυριτίου



Μικροσκόπιο
σάρωσης ακίδας
(Scanning Probe
Microscopy, SPM)

- **Άτομο αυτο-παρεμβολής:**

- "επιπλέον" άτομα τοποθετημένα μεταξύ ατομικών θέσεων.



Σημειακές ατέλειες: Συγκέντρωση σε κατάσταση ισορροπίας

- Η συγκέντρωση (αρ. ατελειών/κενών) σε κατάσταση ισορροπίας μεταβάλλεται με τη θερμοκρασία!

Αρ. ατελειών $\rightarrow N_v$

Αρ. ατομ. θέσεων για πιθανές ατέλειες $\rightarrow N$

Ενέργεια ενεργοποίησης (σχημ. κενού) $\rightarrow -Q_v$

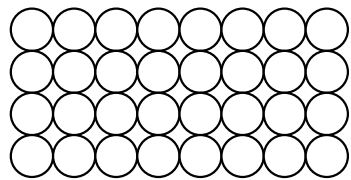
Θερμοκρασία $\rightarrow T$

$$\frac{N_v}{N} = \exp \left(\frac{-Q_v}{kT} \right)$$

Σταθερά Boltzmann

$(1.38 \times 10^{-23} \text{ J/atom-K})$

$(8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/atom-K})$



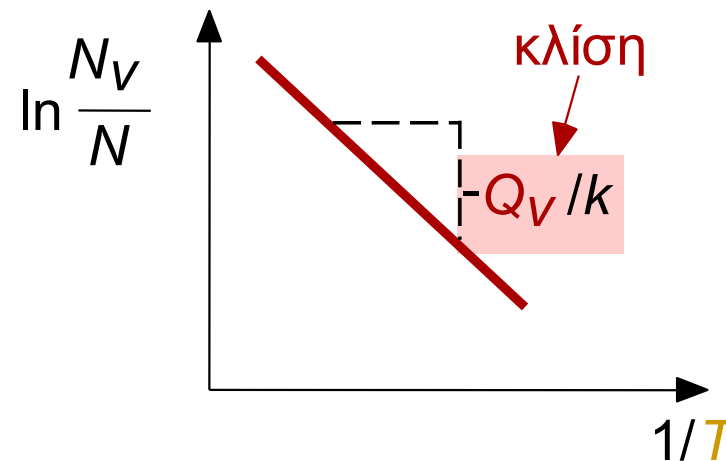
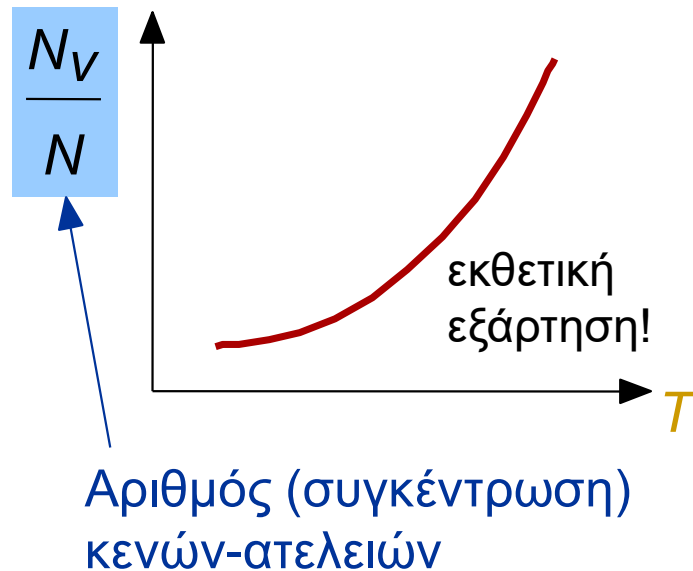
Κάθε πλεγματική θέση είναι ένα εν δυνάμει πλεγματικό κενό

Μέτρηση ενέργειας ενεργοποίησης, Q_v

- Μπορούμε να εξακριβώσουμε την Q_v πειραματικά.
- Μετράμε...

$$\frac{N_v}{N} = \exp \left(\frac{-Q_v}{kT} \right)$$

- Επανασχεδιάζουμε...



Υπολογισμός συγκέντρωσης πλεγμ. κενών

- Να υπολογιστεί ο αριθμός πλεγμ. κενών, σε κατάσταση ισορροπίας, για 1 m³ of Cu σε θερμοκρασία 1000°C.
- Δεδομένα:

$$\rho = 8.4 \text{ g/cm}^3 \quad A_{\text{Cu}} = 63.5 \text{ g/mol}$$

$$Q_V = 0.9 \text{ eV/atom} \quad N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ atoms/mol}$$

$$\frac{N_V}{N} = \exp \left(\frac{-Q_V}{kT} \right) = 2.7 \times 10^{-4}$$

Annotations:
 - Red arrow points to Q_V with label 0.9 eV/atom
 - Yellow arrow points to T with label 1273 K
 - Green arrow points to k with label $8.62 \times 10^{-5} \text{ eV/atom-K}$

Για 1 m³, $N = \rho \times \frac{N_A}{A_{\text{Cu}}} \times 1 \text{ m}^3 = 8.0 \times 10^{28}$ ατομ. θέσεις

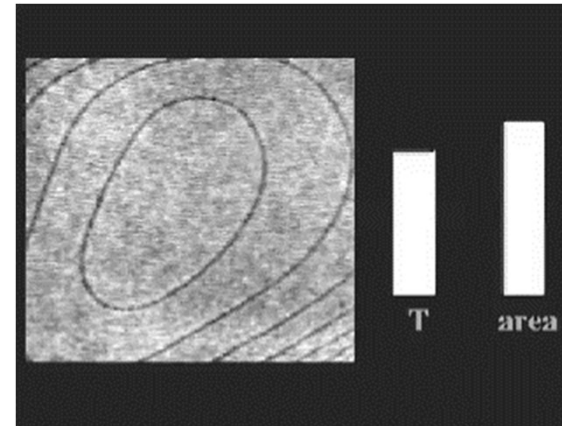
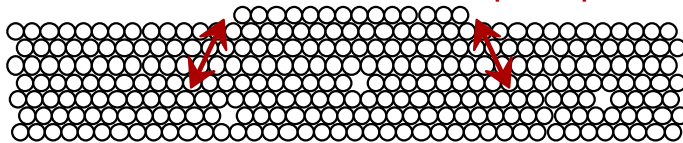
- Απάντηση:

$$N_V = (2.7 \times 10^{-4})(8.0 \times 10^{28}) \text{ θέσεις} = 2.2 \times 10^{25} \text{ πλεγμ. κενά}$$

Εξέταση πλεγμ. Κενών σε κατάσταση ισορροπίας

- Απεικόνιση επιφάνειας (110) του NiAl από ηλεκτρον. μικροσκόπιο χαμηλών ενεργειών.
- Η αύξηση της θερμοκρασίας προκαλεί αύξηση επιφανειακών “νησίδων” ατόμων.
- Γιατί; Η συγκ. κενών/ατελειών σε ισορροπία αυξάνεται λόγω κίνησης ατόμων από τον κρύσταλλο προς την επιφάνεια => προστίθενται στη “νησίδα”.

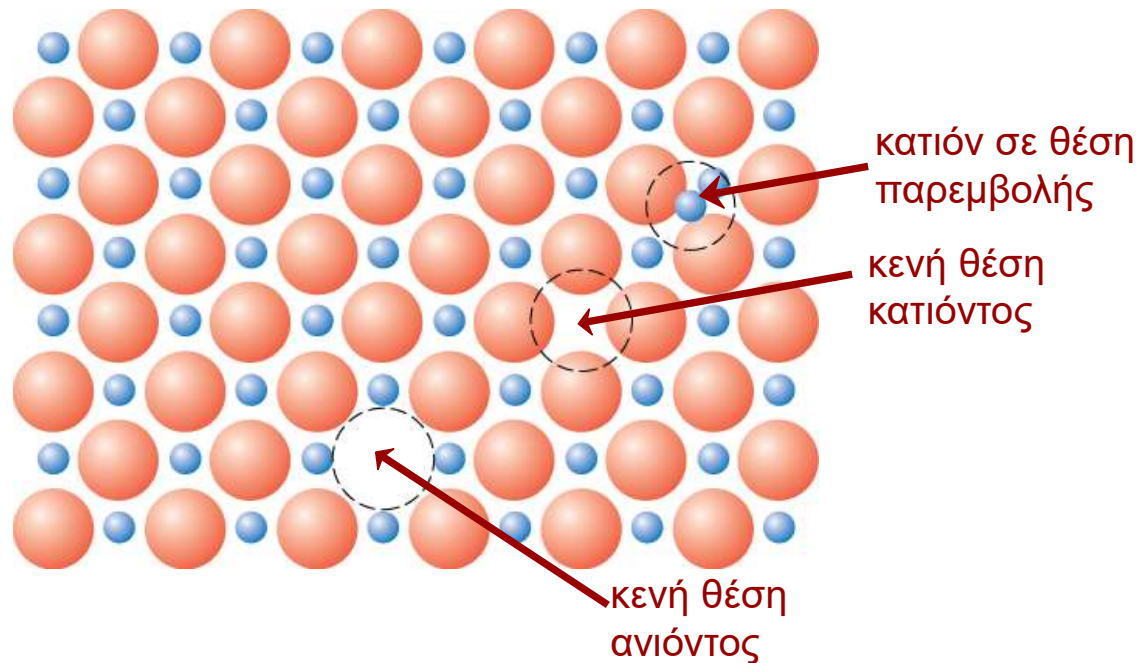
Η “νησίδα” αυξομειώνεται κατάλληλα ώστε να διατηρείται η συγκ. ισορροπίας των κενών/ατελειών στον κύριο όγκο.



Αναπαράγεται με άδεια από Nature (K.F. McCarty, J.A. Nobel, and N.C. Bartelt, "Vacancies in Solids and the Stability of Surface Morphology", Nature, Vol. 412, pp. 622-625 (2001). ΦΩΤΟ: διαστάσεις 5.75 mm x 5.75 mm.) © 2001 Macmillan Publishers, Ltd.

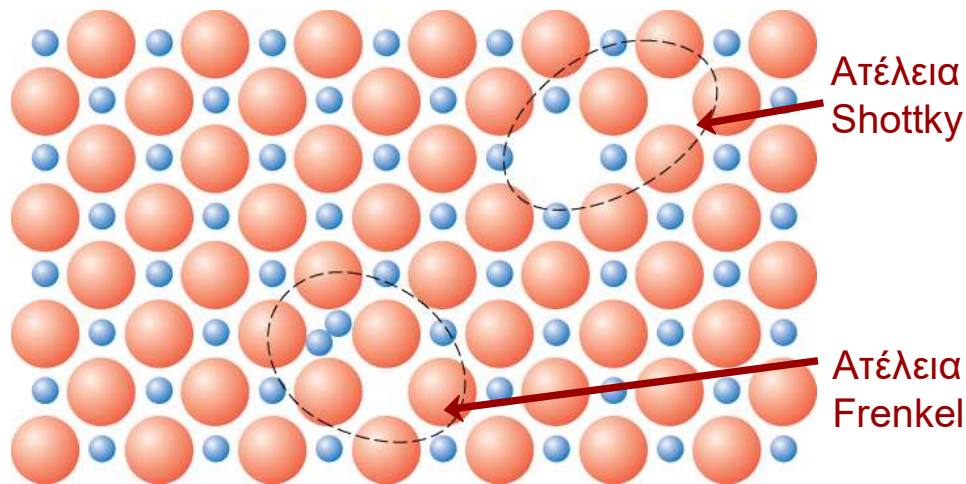
Σημειακές ατέλειες στα κεραμικά, 1

- **Κενές θέσεις**
 - πλεγματικά κενά: μπορούν να καταλαμβάνονται και από κατιόντα και από ανιόντα
- **Θέσεις παρεμβολής**
 - υφίστανται για κατιόντα
 - κατά κανόνα τα ανιόντα είναι μεγαλύτερα από τις θέσεις παρεμβολής



Σημειακές ατέλειες στα κεραμικά, 2

- Ατέλεια Frenkel
 - ζεύγος ατελειών κατιόντος: πλεγμ. κενό + θέση παρεμβολής.
- Ατέλεια Shottky
 - ζεύγος (ατελειών) κενών θέσεων κατιόντος και ανιόντος.

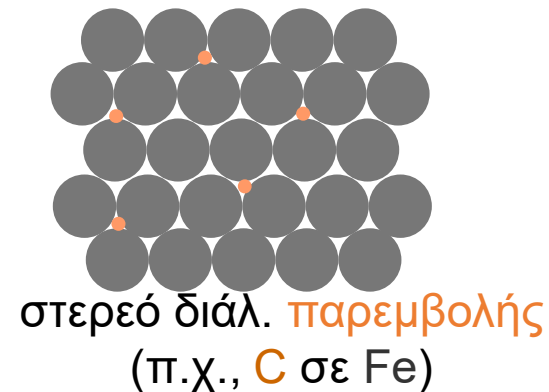
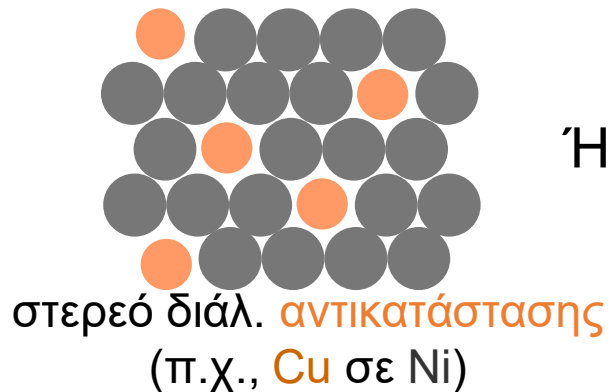


- Αρ. (συγκέντρωση) ατελειών
σε κατάσταση ισορροπίας: $\propto e^{-Q_D/kT}$

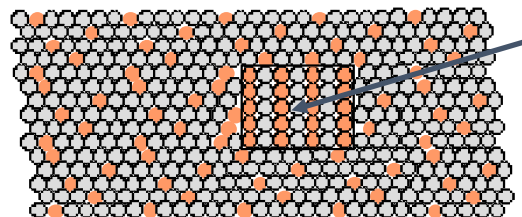
Προσμείξεις σε μέταλλα, 1

Προσθήκη πρόσμειξης (B) σε μητρική δομή (A) – δύο πιθανές εκβάσεις:

- Στερεό διάλυμα του B στο A (δηλ., τυχαία κατανομή σημειακών ατελειών)



- Στερεό διάλυμα του B στο A συν σωματίδια μιας νέας φάσης (συνήθως για μεγαλύτερες ποσότητες του B)



Σωματίδιο δεύτερης φάσης
-- διαφορετική σύσταση
-- συχνά, διαφορετική δομή.

Προσμείξεις σε μέταλλα, 2

Συνθήκες για στερεό διάλυμα αντικατάστασης (S.S.)

- Κανόνες των **Hume-Rothery**

- 1. Δr (ατομική ακτίνα) $< 15\%$
- 2. Εγγύτητα στον περιοδικό πίνακα
 - δηλ., παρόμοιες ηλεκτραρνητικότητες
- 3. Ίδια κρυσταλλική δομή, για καθαρά μέταλλα
- 4. Σθένος
 - με όλους τους άλλους παράγοντες ίδιους, ένα μέταλλο θα επιδεικνύει μεγαλύτερη τάση να διαλύσει μέταλλα μεγαλύτερου σθένους παρά μικρότερου σθένους

Προσμείξεις σε μέταλλα, 3

Εφαρμογή των κανόνων Hume-Rothery:
Στερεά διαλύματα

1. Ποιο αναμένετε να
διαλύεται περισσότερο
στο Zn – το Al ή το Ag;

2. Ποιο αναμένετε να
διαλύεται περισσότερο
στο Cu – το Zn ή Al;

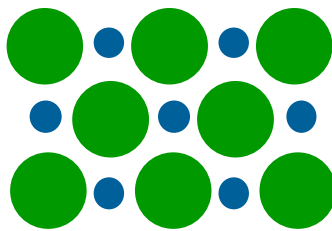
Στοιχείο	Ατομ. Ακτίνα (nm)	Κρυστ. Δομή	Ηλεκτρ- αρνητι- κότητα	Σθένος
Cu	0.1278	FCC	1.9	+2
C	0.071			
H	0.046			
O	0.060			
Ag	0.1445	FCC	1.9	+1
Al	0.1431	FCC	1.5	+3
Co	0.1253	HCP	1.8	+2
Cr	0.1249	BCC	1.6	+3
Fe	0.1241	BCC	1.8	+2
Ni	0.1246	FCC	1.8	+2
Pd	0.1376	FCC	2.2	+2
Zn	0.1332	HCP	1.6	+2

Προσμίξεις σε κεραμικά

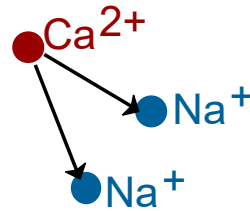
- Διατήρηση ηλεκτροουδετερότητας (**ισορροπία φορτίου**)
εν τη παρουσία προσμίξεων

• π.χ.: NaCl Na^+ ● Cl^- ●

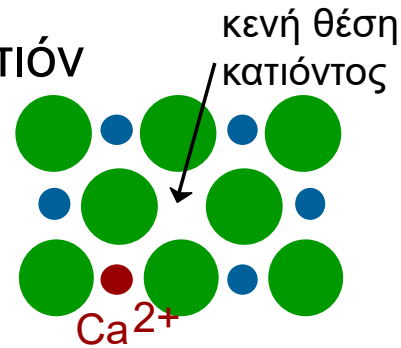
- Πρόσμιξη αντικατάστασης – κατιόν



χωρίς πρόσμιξη

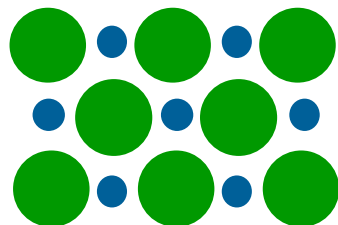


πρόσμιξη Ca^{2+}

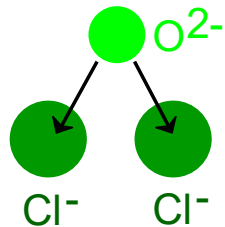


με πρόσμιξη

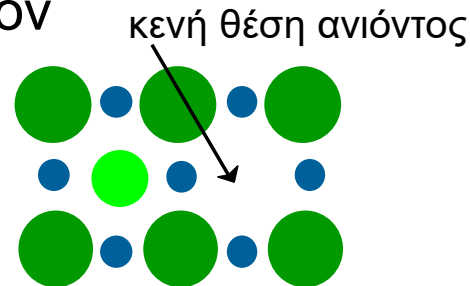
- Πρόσμιξη αντικατάστασης – ανιόν



χωρίς πρόσμιξη



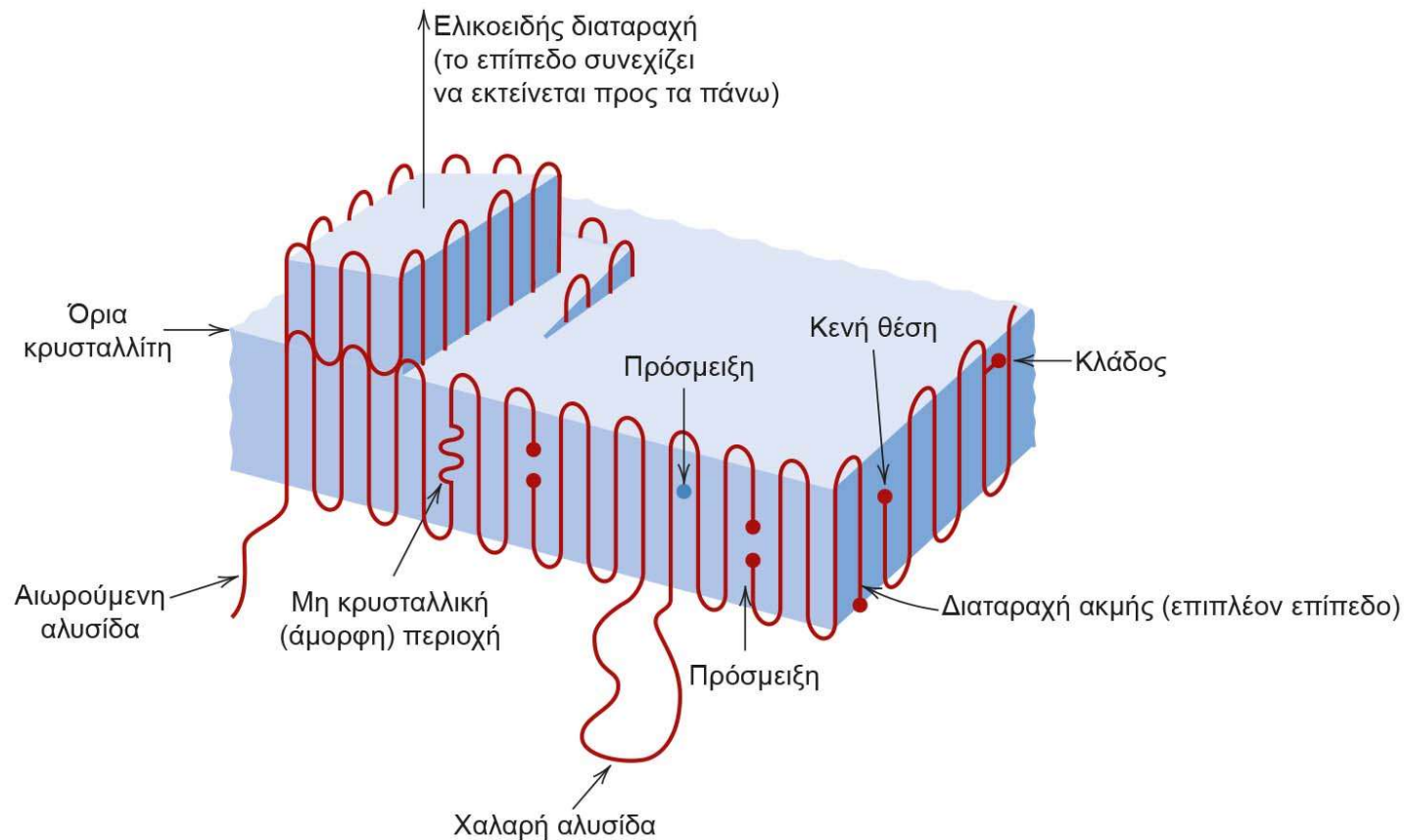
πρόσμιξη O^{2-}



με πρόσμιξη

Σημειακές ατέλειες σε πολυμερή

- Η ύπαρξη ατελειών οφείλεται εν μέρει σε σφάλματα στοίβασης των πολυμερ. αλυσίδων και σε προσμείξεις (π.χ. άκρα αλυσίδων και πλευρικές αλυσίδες)



Σύσταση κραμάτων

- Προσδιορισμός σύστασης

- % κατά βάρος $C_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \times 100$

m_1 = μάζα στοιχείου 1

- % κατ' άτομο $C'_1 = \frac{n_{m1}}{n_{m1} + n_{m2}} \times 100$

n_{m1} = αρ. moles στη μάζα του στοιχείου 1

ΓΡΑΜΜΙΚΕΣ ΑΤΕΛΕΙΕΣ

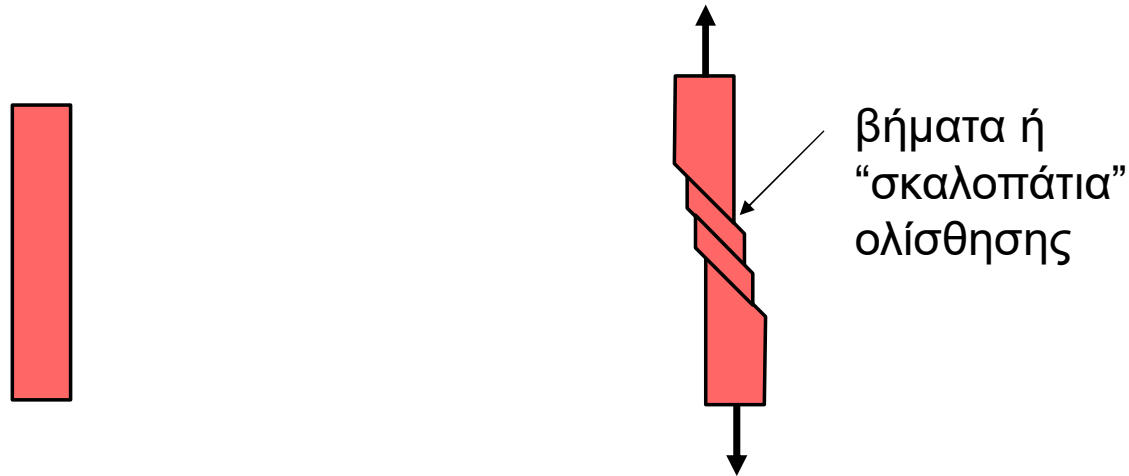
Γραμμικές ατέλειες σε στερεά

Διαταραχές:

- είναι γραμμικές ατέλειες
- η κίνησή τους οδηγεί σε ολίσθηση των κρυσταλλογραφικών επιπέδων
- προκαλούν μόνιμη (πλαστική) παραμόρφωση.

Σχηματική αναπαράσταση για τον ψευδάργυρο (δομή HCP):

- πριν από παραμόρφωση
- μετά από εφελκυστική παραμόρφωση



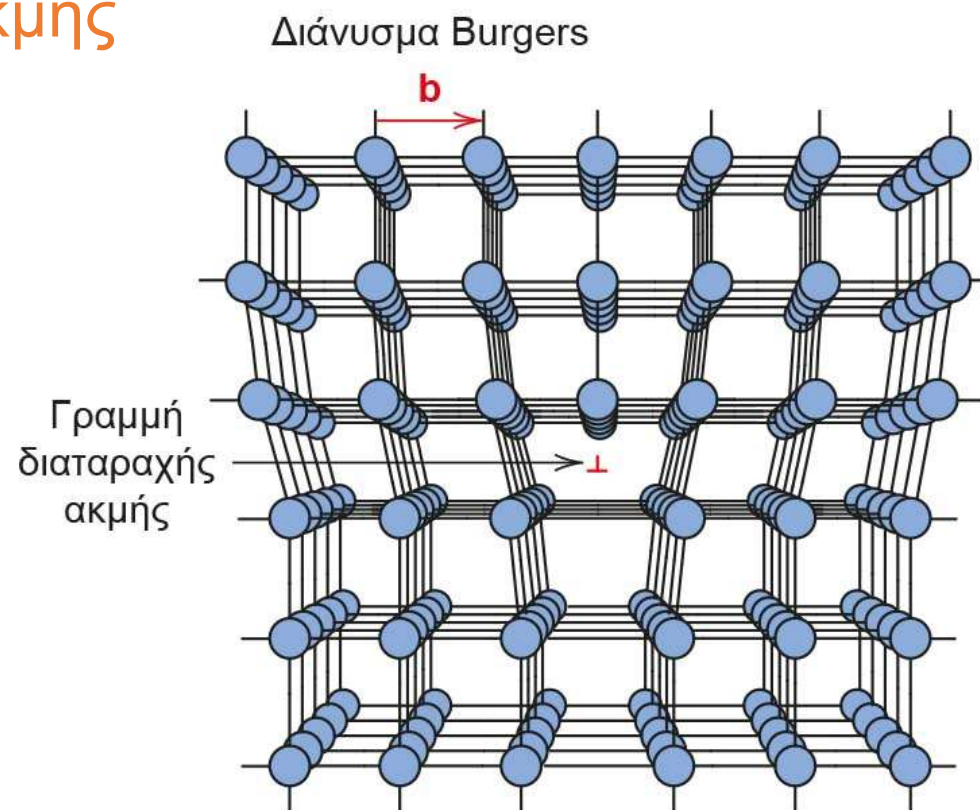
Διαταραχές σε στερεά, 1

Διαταραχές

- Μονοδιάστατες ατέλειες, γύρω από τις οποίες παρατηρείται απευθυγράμμιση των ατόμων
 - Διαταραχή ακμής:
 - εισάγεται επιπλέον ημιεπίπεδο ατόμων στην κρυσταλλική δομή
 - το διάνυσμα Burgers **b** είναι κάθετο ($\perp$) στη γραμμή της διαταραχής
 - Ελικοειδής διαταραχή:
 - ελικοειδής διαδρομή ατομ. επιπέδων εκατέρωθεν της γραμμής διαταραχής, αποτέλεσμα διατμητικής παραμόρφωσης
 - το διάνυσμα Burgers **b** είναι παράλληλο ($\parallel$) στη γραμμή της διαταραχής
- Διάνυσμα Burgers, **b**: μέτρο της πλεγματικής παραμόρφωσης που οφείλεται σε ύπαρξη διαταραχής.

Διαταραχές σε στερεά, 2

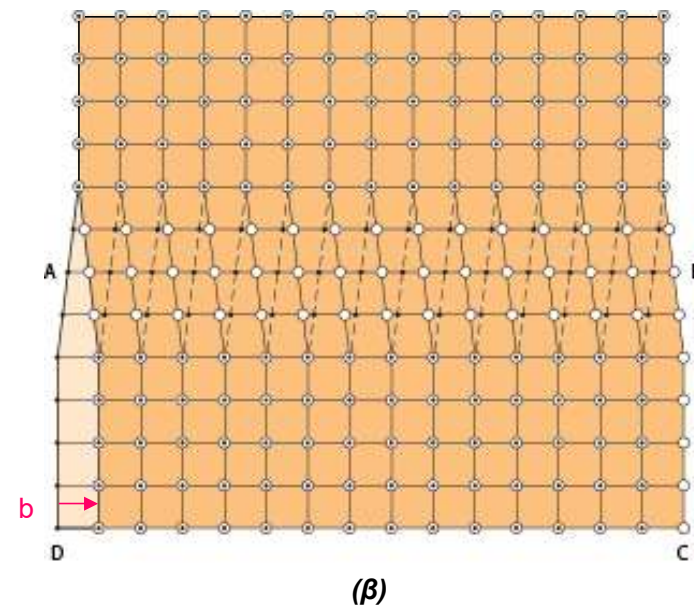
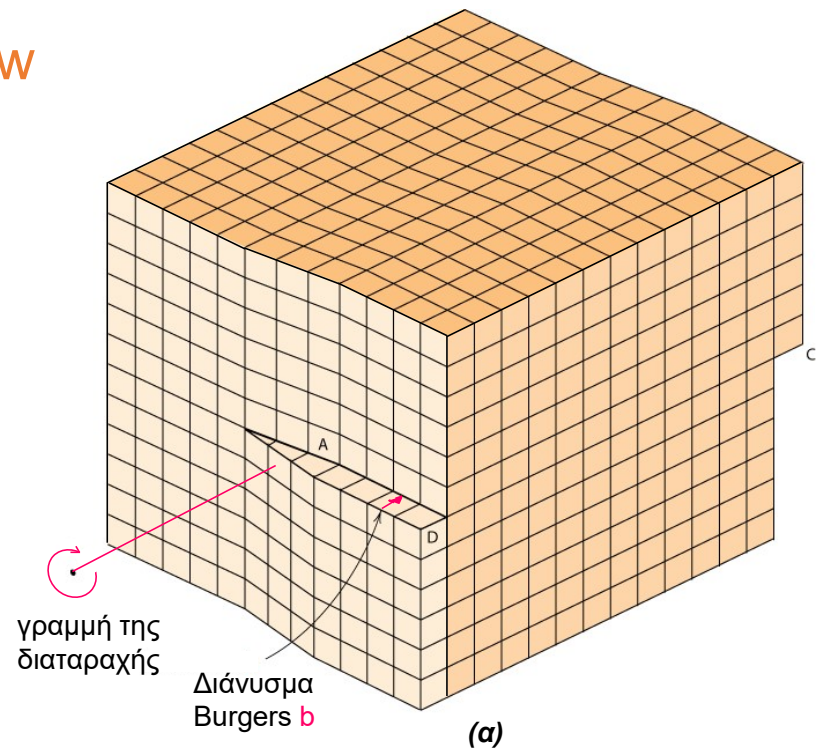
Διαταραχή ακμής



Διαταραχές σε στερεά, 3

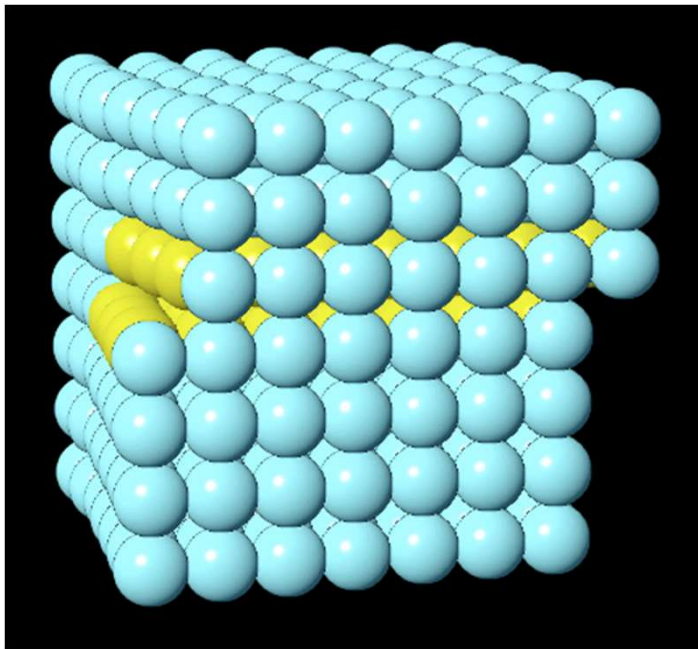
Ελικοειδής διαταραχή

Screw

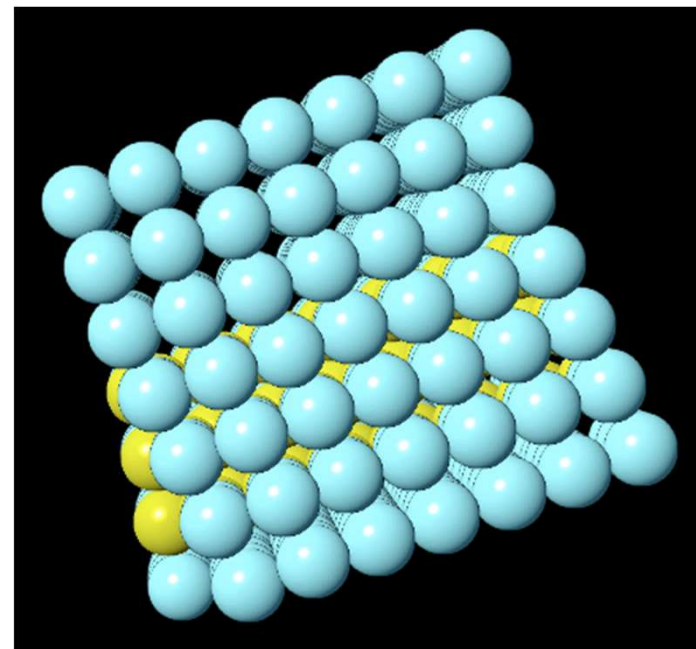


Προσομοίωση ελικοειδούς διαταραχής

- Στο VMSE:
 - δυνατότητα περιστροφής, στις 3 διαστάσεις, οποιασδήποτε περιοχής ενός κρύσταλλου όπου υπάρχει διαταραχή
 - προσομοίωση της κίνησης των διαταραχών (animation)

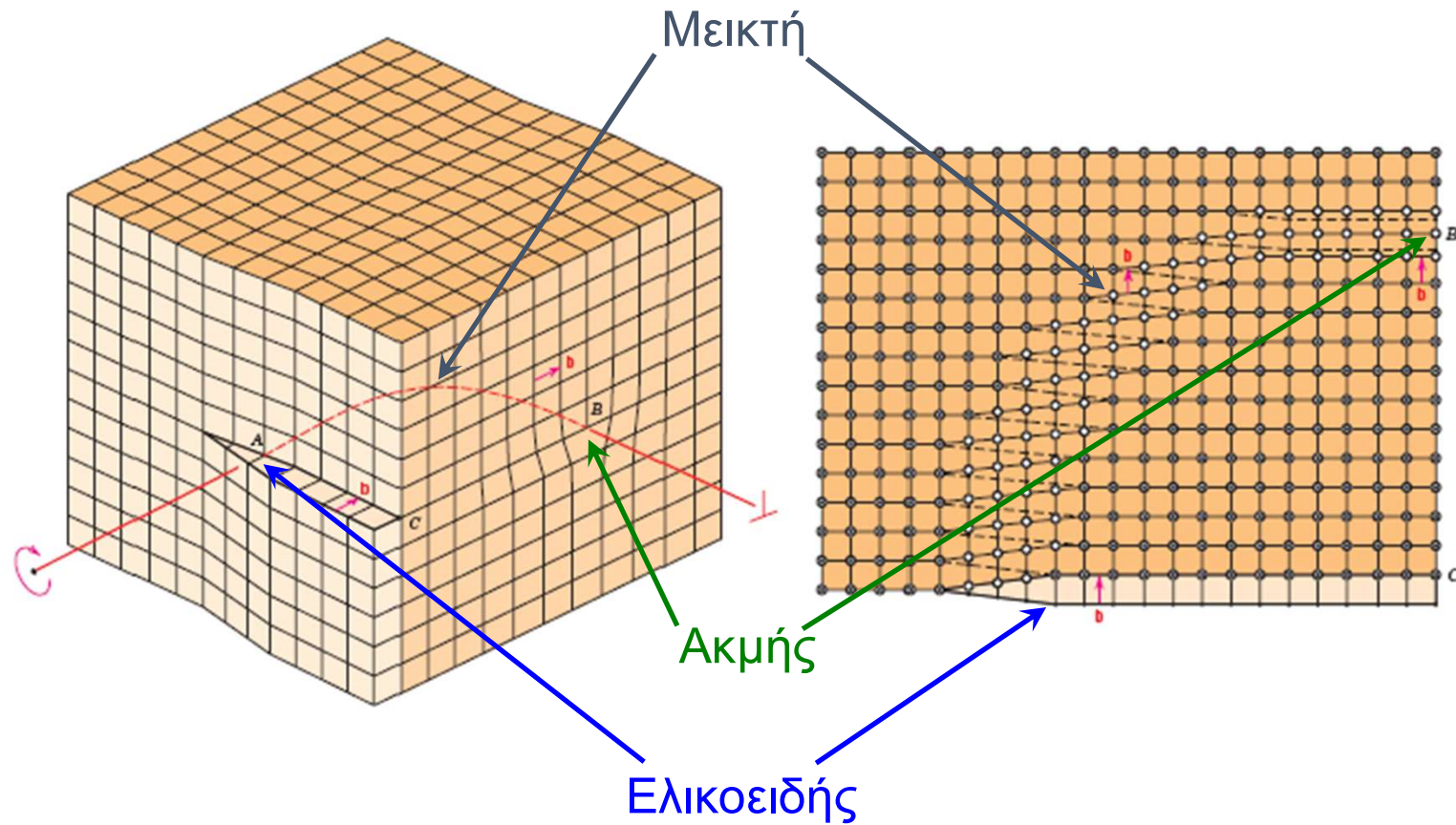


Πρόσοψη



Κάτοψη

Τύποι διαταραχών: Ακμής, ελικοειδείς και μεικτές



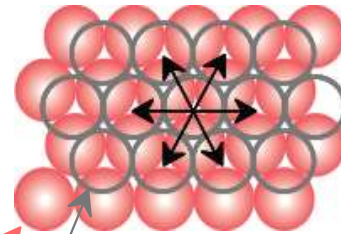
Παρατήρηση διαταραχών σε στερεά

Εμφάνιση διαταραχών σε φωτογραφία από μικροσκόπιο SEM



Διαταραχές & κρυσταλλικές δομές

- Δομή: προτιμώνται επίπεδα & διευθύνσεις **πυκνής διάταξης**.



αναπαράσταση
σε δύο επίπεδα
πυκνής διάταξης.

επ. πυκνής διάταξης (κάτω)

διευθύνσεις πυκνής διάταξης
επ. πυκνής διάταξης (πάνω)

- Σύγκριση μεταξύ κρυσταλλικών δομών:
FCC: πολλά επίπεδα & διευθύνσεις πυκνής διάταξης
HCP: μόνο 1 επίπεδο, 3 διευθύνσεις
BCC: κανένα επίπεδο ή διεύθυνση

- Δοκίμια μετά
από δοκιμή
εφελκυσμού.

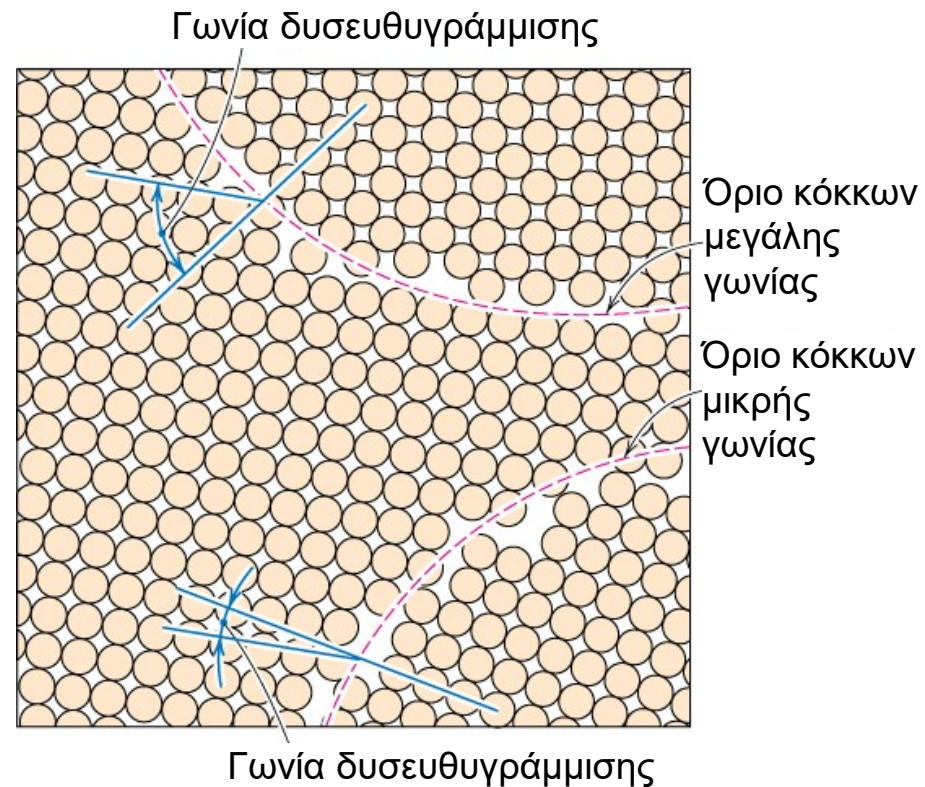


ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΑΚΕΣ ΑΤΕΛΕΙΕΣ

Διεπιφανειακές ατέλειες

Όρια κόκκων

- περιοχές μεταξύ των κρύσταλλων
- μετάβαση μεταξύ διαφορετικών κρυσταλ. προσανατολισμών
- διαταραγμένη διαμόρφωση ατόμων
- χαμηλή πυκνότητα σε όρια κόκκων
 - υψηλή ευκινησία
 - υψηλός συντ. διάχυσης
 - υψηλή χημική δραστηριότητα

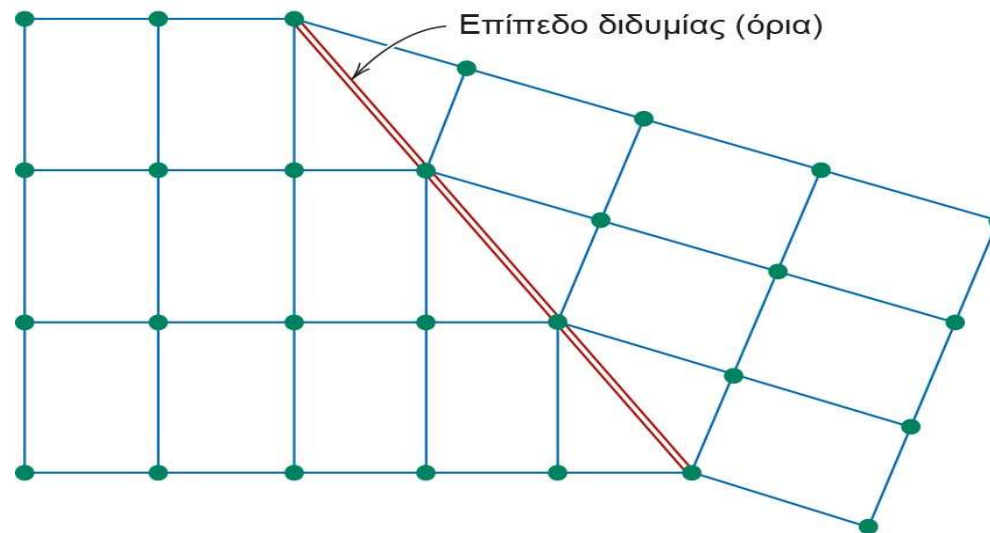


Διεπιφανειακές ατέλειες σε στερεά

2Δ ή επίπεδες ατέλειες – εμφανίζονται στα όρια (διεπιφάνειες) περιοχών του πλέγματος με διαφορετικές κρυσταλλικές δομές και/ή προσανατολισμούς.

- Διδυμίες

- Κατοπτρισμός ατόμων της μιας πλευράς σε θέσεις ατόμων της άλλης πλευράς κατά μήκος του **επιπέδου διδυμίας**.

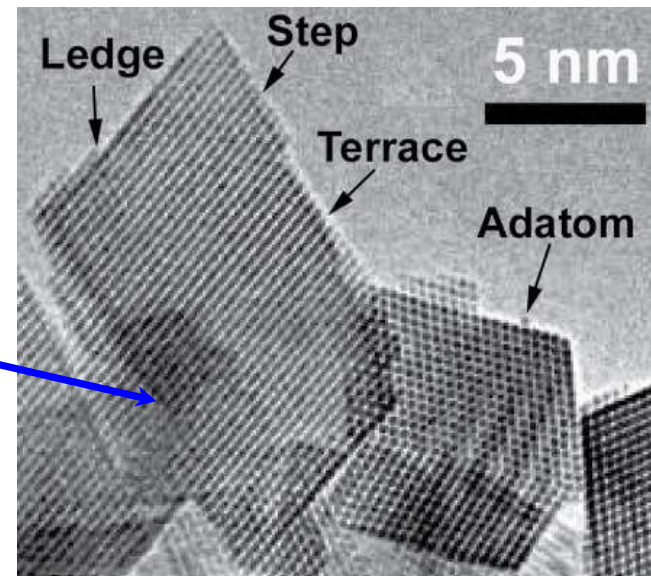
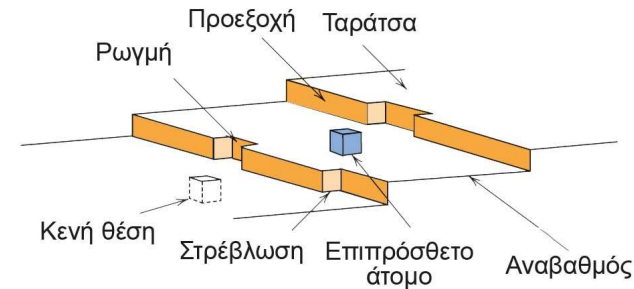


- Σφάλματα επιστοίβασης

- Για μέταλλα δομής FCC, “ανωμαλίες” στην κανονική ακολουθία στοίβασης (ABCABC)
- π.χ.: ABCABABC

Καταλύτες και επιφανειακές ατέλειες

- **Καταλύτης:** ουσία που επιταχύνει μία χημική αντίδραση χωρίς να αναλώνεται κατά τη διάρκειά της
- Οι “ενεργές” θέσεις στους καταλύτες είναι κατά κανόνα επιφανειακές ατέλειες



Μονοκρύσταλλοι
(Ce_{0.5}Zr_{0.5})O₂
από καταλυτικό
μετατροπέα
αυτοκινήτων

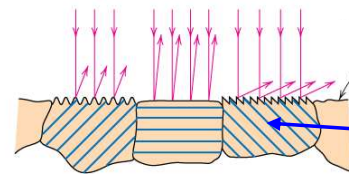
ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΑ

Μικροσκοπική εξέταση

- Κρυσταλλίτες (κόκκοι) και όρια κόκκων:
Επιδεικνύουν σημαντική μεταβλητότητα ως προς το μέγεθος.
- Σε ορισμένες περιπτώσεις έχουν αρκετά μεγάλο μέγεθος.
 - π.χ.: Μεγάλοι μονοκρύσταλλοι χαλαζία, διαμαντιού ή πυριτίου
 - π.χ.: Στύλοι φωτισμού ή κάδοι απορριμμάτων από αλουμίνιο: οι κόκκοι είναι εμφανείς διά γυμνού οφθαλμού
- Σε άλλες περιπτώσεις έχουν αρκετά μικρό μέγεθος – δυνατότητα εξέτασής τους μόνο με μικροσκόπιο.

Οπτική μικροσκοπία

- Χρήσιμη για μεγεθύνσεις έως 2000X.
- Χαρακτηριστικά επιφανειακής υφής (π.χ., χαραγές) μπορούν να αφαιρούνται με κατεργασίες λείανσης
- Διεργασίες χημικής προσβολής (π.χ. εγχάραξη) μεταβάλλουν την ανακλαστικότητα των κόκκων, ανάλογα με τον κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό.



Επιφάνεια δείγματος
μετά από λείανση
και χημική προσβολή

κρυσταλλογραφικά
επίπεδα



Μικροφωτογραφία
ορείχαλκου (κράμα Cu-Zn)

← 0.75 mm →

Οπτική μικροσκοπία

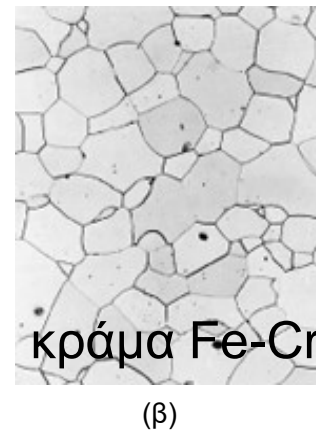
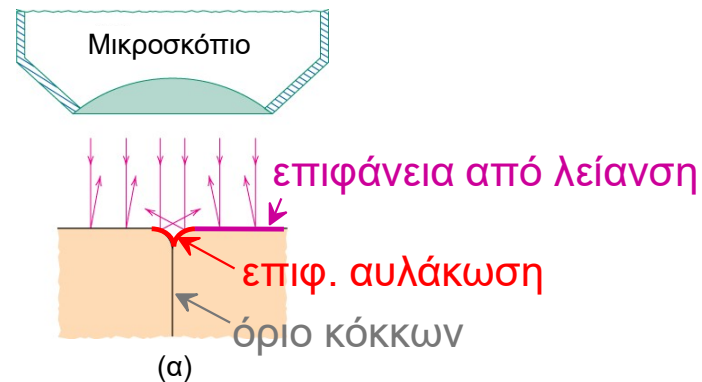
Όρια κόκκων...

- είναι ατέλειες
- περισσότερο ευπαθείς σε χημική προσβολή
- εμφανίζονται ως σκουρόχρωμες γραμμές
- συσχετίζονται με αλλαγή κρυσταλλογραφικού προσανατολισμού.

κοκκομετρία
κατά ASTM

$$N = 2^{n-1}$$

κόκκων/in²
σε μεγέθυνση
100x



Οπτική μικροσκοπία

- Πολωμένο φως
 - Τα οπτικά μικροσκόπια για μεταλλογραφικές έρευνες χρησιμοποιούν συνήθως πολωμένο φως για αύξηση της αντίθεσης (contrast)
 - Πολωμένο φως χρησιμοποιείται επίσης για δείγματα από διαφανή υλικά, όπως π.χ. πολυμερή

Τεχνικές μικροσκοπίας

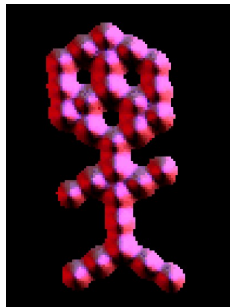
Οπτική ανάλυση (διακριτική ικανότητα) περίπου
 $10^{-7} \text{ m} = 0.1 \text{ } \mu\text{m} = 100 \text{ nm}$

Για μεγαλύτερη διακριτική ικανότητα απαιτούνται
υψηλότερες συχνότητες

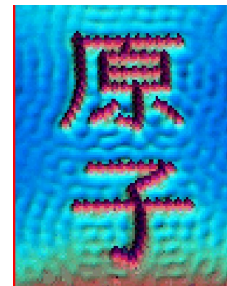
- Ακτίνες Χ; Δυσκολίες στην εστίαση.
- Ηλεκτρόνια
 - μήκη κύματος $\sim 3 \text{ pm}$ (0.003 nm)
 - (δυνατότητα μεγέθυνσης έως $1,000,000\times$)
 - Διακριτική ικανότητα έως το επίπεδο μεμονωμένων ατόμων
 - Εστίαση δέσμης ηλεκτρονίων: επιτυγχάνεται με μαγνητικούς φακούς.

Ηλεκτρονική μικροσκοπία

- Μικροσκόπιο σάρωσης ηλεκτρονίων (SEM)
η δέσμη ηλεκτρονίων σαρώνει την επιφάνεια του δοκιμίου
εξέταση επιφανειακών χαρακτηριστικών του δοκιμίου
- Μικροσκόπιο διέλευσης ηλεκτρονίων (TEM)
η δέσμη ηλεκτρονίων διαπερνά το δοκίμιο
εξέταση εσωτερικών χαρακτηριστικών της μικροδομής



Μόρια μονοξειδίου
άνθρακα πάνω σε
επιφάνεια από
λευκόχρυσο (111).

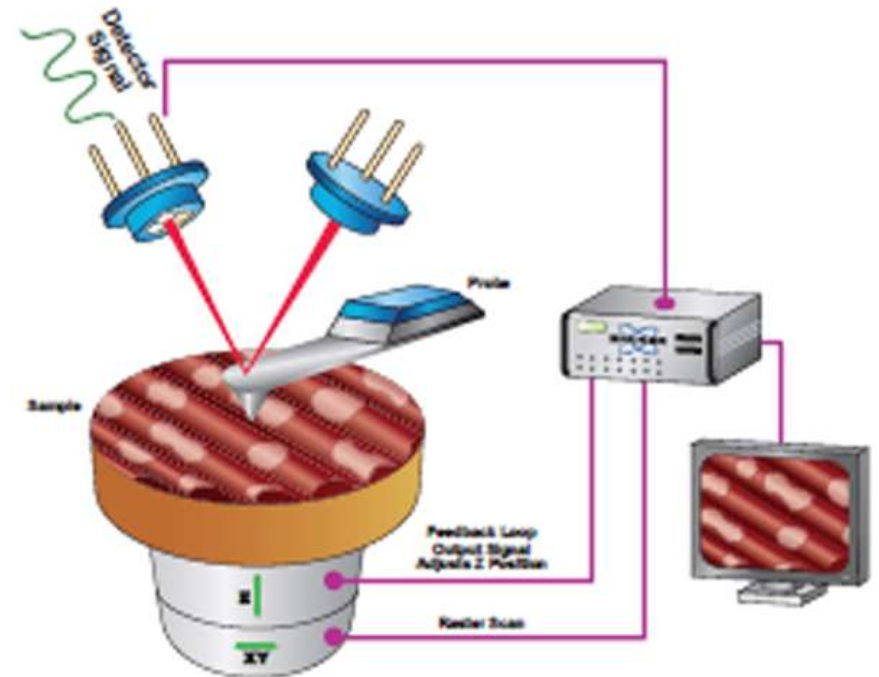


Άτομα σιδήρου πάνω
σε επιφάνεια από χαλκό
(111). (Οι χαρακτήρες
Kanji αναπαριστούν τη
λέξη “άτομο”).

ΦΩΤΟ: Από το έργο των
C.P. Lutz, Zeppenfeld, and
D.M. Eigler. Αναπαράγεται
με άδεια από International
Business Machines
Corporation, © 1995.

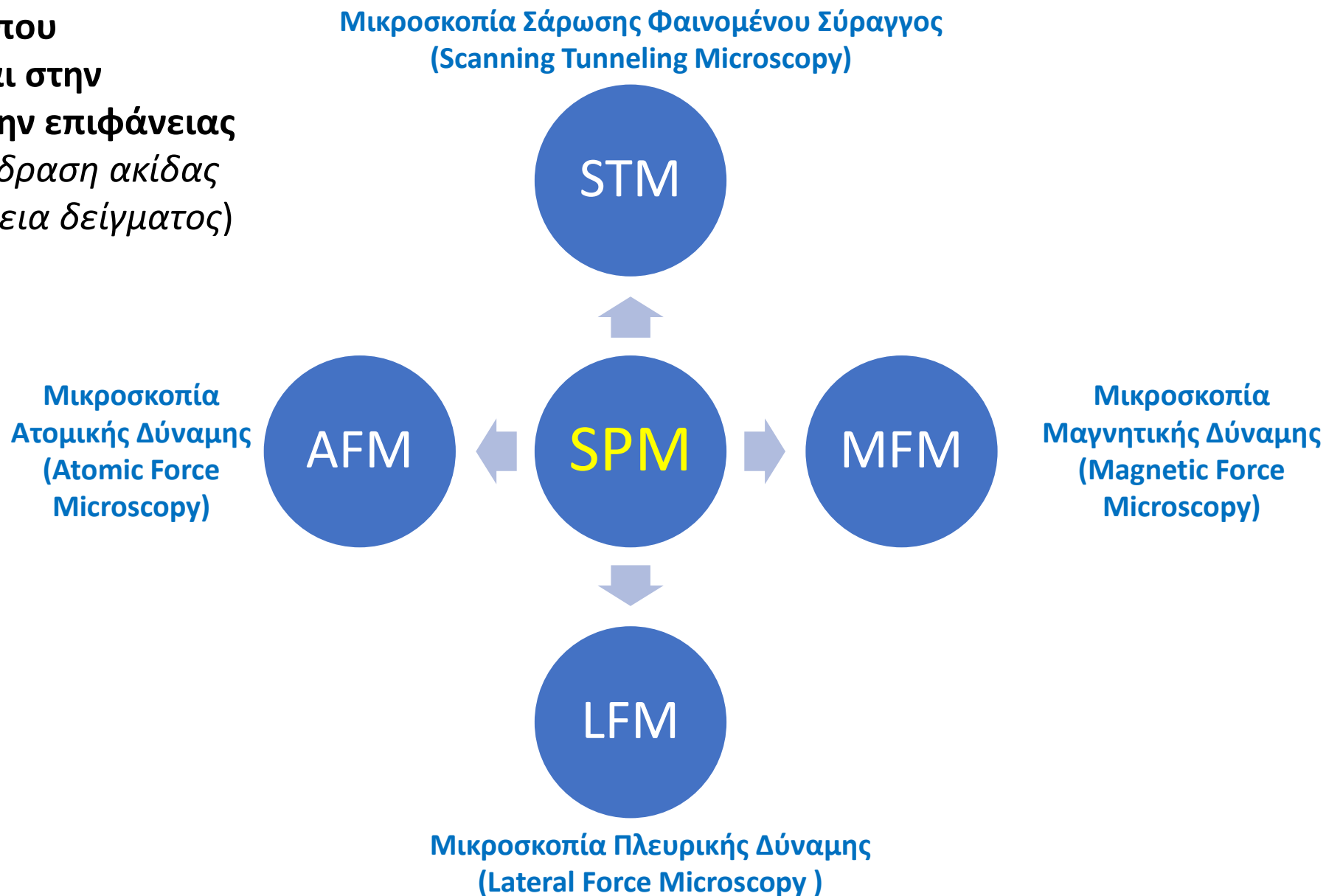
Μικροσκοπία Σάρωσης Ακίδας

Μικροσκόπιο σάρωσης ακίδας (scanning probe microscope, SPM): Σε αντίθεση με οπτικά ή ηλεκτρονικά μικροσκόπια δεν χρησιμοποιεί δέσμη φωτός ή ηλεκτρονίων για σχηματισμό εικόνας. Αντ' αυτού δημιουργεί ένα τοπογραφικό χάρτη, σε ατομική κλίμακα, ο οποίος αποτελεί αναπαράσταση των επιφανειακών στοιχείων και χαρακτηριστικών του υπό εξέταση δοκιμίου. Το SPM σε σχέση με άλλες μικροσκοπίες:



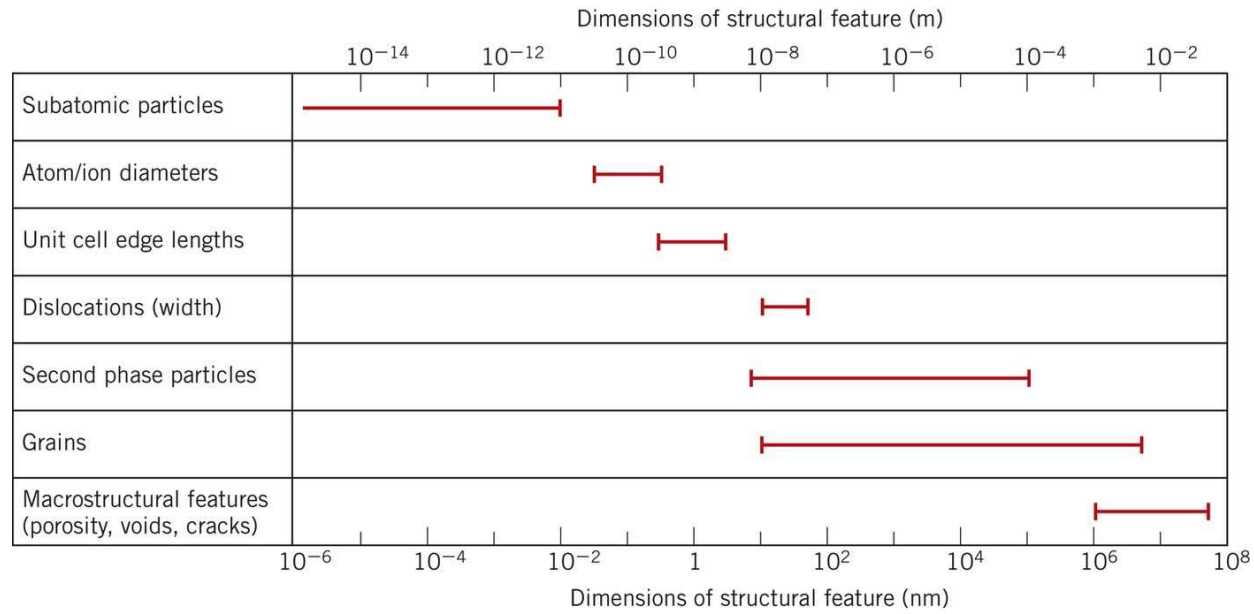
- Παρέχει δυνατότητα εξέτασης σε νανομετρική κλίμακα, δεδομένου ότι επιτυγχάνει **μεγεθύνσεις έως $10^9\times$** και, επιπλέον, **πολύ καλύτερες αναλύσεις εικόνας**
- Σχηματίζονται **τρισδιάστατοι χάρτες** που παρέχουν πληροφορίες τοπογραφικής φύσης
- Μπορεί να λειτουργήσει σε **διάφορα περιβάλλοντα (αέρα, κενό ή υγρό)**, δηλαδή το κάθε δείγμα εξετάζεται στο περιβάλλον του

**Μέθοδοι που
βασίζονται στην
σάρωση την επιφάνειας
(αλληλεπίδραση ακίδας
με επιφάνεια δείγματος)**

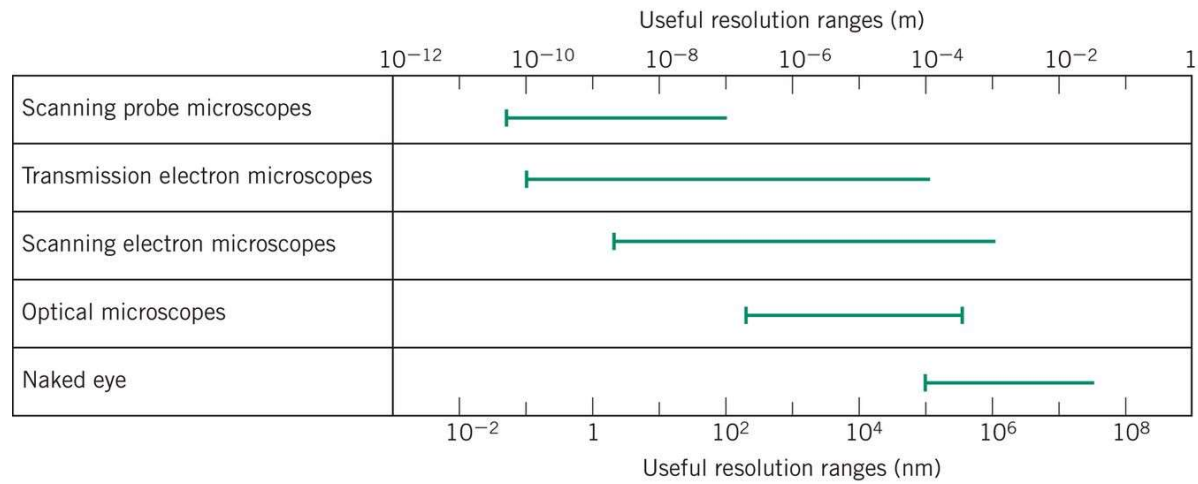




Compare



(a)



(b)



ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΑ: ΑΝΑΛΥΤΙΚΑ

*Περιέχει περιεχόμενο από: Παραδόσεις Πολυμερικών Υλικών,
Α. Αυγερόπουλου, Παν/μιο Ιωαννίνων*



Εισαγωγή στην Μικροσκοπία

- Τα τελευταία 50 χρόνια είχαν αναπτυχθεί 2 είδη ηλεκτρονικών μικροσκοπίων: Το **ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διέλευσης- *transmission electron microscope (TEM)*** και το **ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης-*scanning electron microscope (SEM)***
- Χρησιμοποιούνται **μαγνητικοί φακοί** με σκοπό να εστιάσουν μία δέσμη ηλεκτρονίων στο εξεταζόμενο δείγμα.
- Τα ηλεκτρόνια που χρησιμοποιούνται έτσι έχουν ένα μήκος κύματος ($<0,1\text{nm}$) μέχρι και 100,000 φορές μικρότερο από το ορατό φως ($\sim 560\text{nm}$). Το αποτέλεσμα είναι ότι μπορούν να διακρίνουν αντικείμενα μέχρι 400-1000 φορές καλύτερα από τα απλά οπτικά μικροσκόπια και 200,000 φορές καλύτερα από το ανθρώπινο μάτι, με μεγενθύνσεις 1 εκατομμύριο φορές χωρίς απώλεια λεπτομέρειας!
- Το μόνο πρόβλημα είναι ότι το ανθρώπινο μάτι δεν μπορεί να δει αυτά τα μήκη κύματος, συνεπώς χρειάζεται **μιά οθόνη** (π.χ. σαν τηλεόρασης ή ειδικό φωτογραφικό φιλμ) στο οποίο η πρόσκρουση των ηλεκτρονίων θα μετατρέπεται σε εκπομπή ορατής ακτινοβολίας.
- Η χρήση **ηλεκτρονίων** αντί π.χ. ακτίνων X επιβάλλεται γιατί είναι απαραίτητο να εστιάσουμε την ακτινοβολία και ενώ οι ακτίνες X αλληλεπιδρούν ασθενώς με την ύλη και δεν μπορούν να εστιαστούν, δέσμες ηλεκτρονίων μπορούν να εστιαστούν με τη βοήθεια κατάλληλων μαγνητικών πεδίων.

Εισαγωγή στην Ηλεκτρονική Μικροσκοπία

Η ηλεκτρονική μικροσκοπία (electron microscopy) κάνει **χρήση των ιδιοτήτων των ηλεκτρονίων καθώς αυτά οπισθοσκεδάζονται από ένα σώμα ή διέρχονται μέσα από αυτό**. Η υπεροχή ενός ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σε σχέση με ένα οπτικό στηρίζεται στα εξής:

Ένα οπτικό μικροσκόπιο επιτρέπει μεγέθυνση εκατοντάδων φορές. Ωστόσο η ελάχιστη λεπτομέρεια που μπορεί να διακριθεί είναι περίπου 200 nm, όριο το οποίο το θέτει η κυματική φύση του ορατού φωτός και το ελάχιστο μήκος κύματος του. Αντιθέτως, ένα ηλεκτρονικό μικροσκόπιο εκμεταλλεύεται τη κυματική φύση των ηλεκτρονίων σε μήκη κύματος πολύ μικρότερα. Είναι γνωστό ότι η σχέση μήκους κύματος και ορμής ή ενέργειας δίνεται από τον τύπο:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{E}$$

όπου h η σταθερά του Planck, p η ορμή και E η ενέργεια. Για ηλεκτρόνια ενέργειας 3600 eV και σύμφωνα με τον παραπάνω τύπο το μήκος κύματος ισούται με 0,02 nm. Βέβαια η τελική μέγιστη ανάλυση είναι μικρότερη, της τάξεως του **0,1 nm** καθώς υπεισέρχονται περιορισμοί από τη κατασκευή του οργάνου. Στο επόμενο σχήμα βλέπουμε τις διαφορές μεταξύ οπτικών μικροσκοπίων και ηλεκτρονικών όσων αφορά τη μέγιστη διακριτότητα όπου μπορούν να επιτύχουν.

Εισαγωγή στην Ηλεκτρονική Μικροσκοπία

Μικροσκόπια αυτής της κατηγορίας είναι τα εξής:

- Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης (scanning electron microscope, SEM)
- Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διερχόμενης δέσμης ή διέλευσης ή διαπερατότητας (transmission electron microscope, TEM)
- Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διερχόμενης δέσμης υψηλής ανάλυσης (high resolution transmission electron microscope, HRTEM)
- Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης διερχόμενης δέσμης (scanning transmission electron microscope, STEM)

Σύγκριση διακριτικής ικανότητας οπτικών και ηλεκτρονικών μικροσκοπίων



Εισαγωγή στην Ηλεκτρονική Μικροσκοπία

Στο **TEM** ένα λεπτό δείγμα βομβαρδίζεται με ηλεκτρόνια καί ανάλογα με τη σύσταση διαφόρων τμημάτων του δείγματος, αυτά διαδίδουν (διαπερνούν τα ηλεκτρόνια), σκεδάζουν ή απορροφούν τα ηλεκτρόνια. Η εικόνα που δημιουργείται σε μία φωτογραφική πλάκα είναι η οπτική απεικόνιση αυτών των αλληλεπιδράσεων και χρησιμοποιείται στην βιολογία π.χ. για τη μελέτη υποκυταρρικών δομών (με μέγεθος μικρότερο του κυττάρου), π.χ. για την μελέτη ιών που δεν φαίνονται με κανονικά (ορατού φωτός) μικροσκόπια, καθώς ακόμα και μοριακές δομές.

Το **SEM** λειτουργεί αρκετά διαφορετικά καί βασικό σκοπό έχει να παράγει 3- διάστατες λεπτομερείς εικόνες επιφανειών. Έτσι μία δέσμη ηλεκτρονίων μετατοπίζεται μπρός-πίσω (“σκανάρει” όπως σε μία φωτοτυπία) πάνω σε μία (μεταλλική) επιφάνεια προκαλώντας την δευτερογενή εκπομπή ηλεκτρονίων από το δείγμα. Αυτά τα δευτερογενή ηλεκτρόνια παράγουν τις χαρακτηριστικές εικόνες.

Εισαγωγή στην Ηλεκτρονική Μικροσκοπία

ΧΡΟΝΟΛΟΓΙΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΑΣ ΑΝΑΚΑΛΥΨΗΣ	ΑΝΑΚΑΛΥΨΗ
1897	J. J. Thompson	Ανακάλυψη του ηλεκτρονίου
1924	Louis deBroglie	Ανακαλύπτει ένα μήκος κύματος για την κίνηση των ηλεκτρονίων $\lambda = h/mv$ Όπου λ = μήκος κύματος h = σταθερά του Planck m = μάζα v = ταχύτητα (Για ένα ηλεκτρόνιο στα 60kV, $\lambda = 0.005$ nm)
1926	H. Busch	Μαγνητικά ή ηλεκτρικά πεδία δρουν ως φακοί για τα ηλεκτρόνια
1929	E. Ruska	Διδακτορικό σε μαγνητικούς φακούς
1931	Knoll & Ruska	Κατασκευή του πρώτου Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου
1931	Davissom & Calbrick	Μελέτη ιδιοτήτων σε ηλεκτροστατικούς φακούς
1934	Driest & Muller	Ξεπεράστηκε η διακριτική ικανότητα (resolution) του Οπτικού Μικροσκοπίου
1938	von Borries & Ruska	Πρώτο ερευνητικό TEM (Siemens) - 10 nm resolution
1940	RCA	Εμπορικό TEM με 2.4 nm resolution
1945	Siemens – Philips	1.0 nm resolution
1986	E. Ruska	Nobel Φυσικής

Εισαγωγή στην Ηλεκτρονική Μικροσκοπία

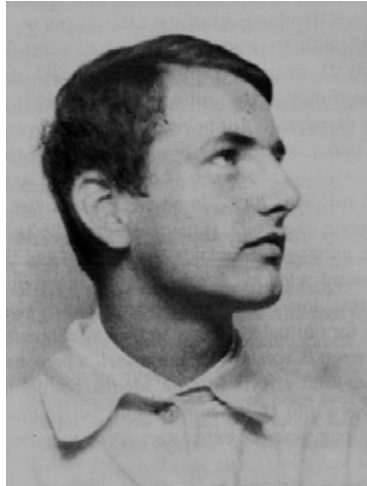
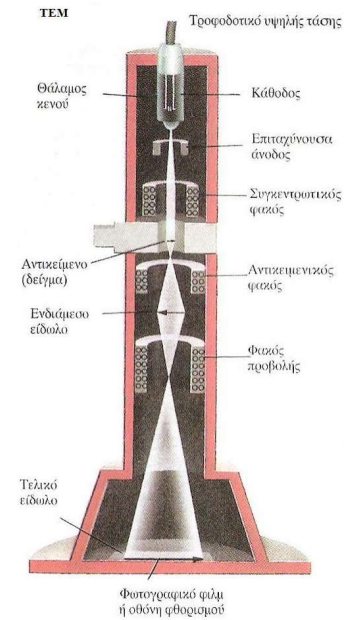


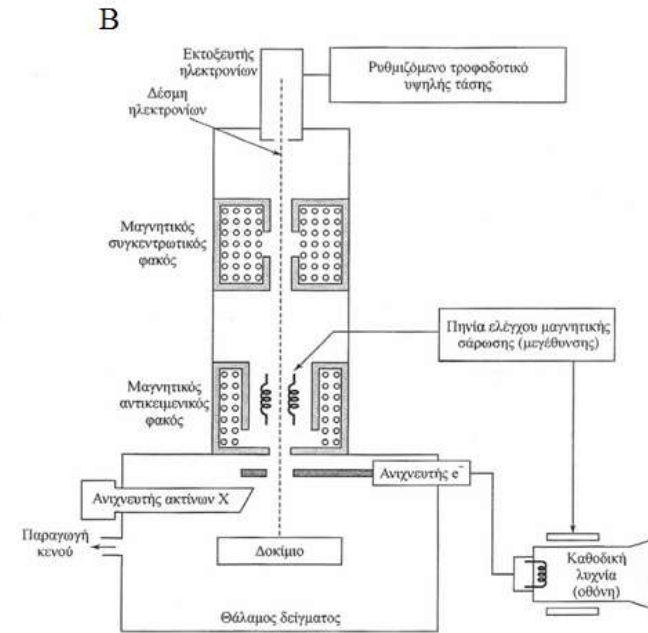
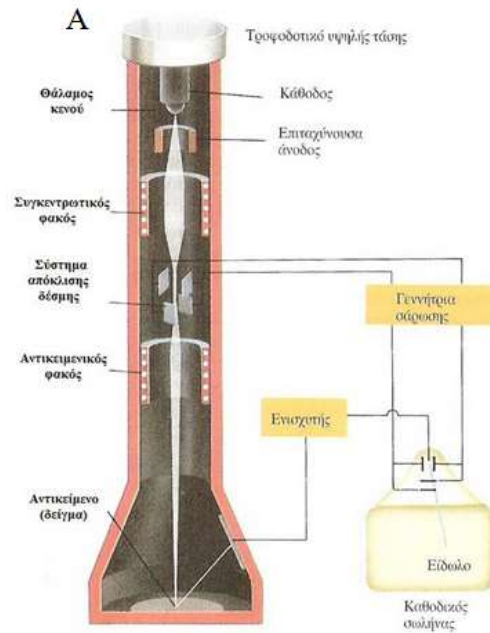
Fig. 6. The first electron microscope. The publication (48) contained only one cross-sectional drawing corresponding to Figure 5. This photograph, reproduced here for the first time, with M. Knoll and the author – was actually taken several years later, on 8 February 1944.



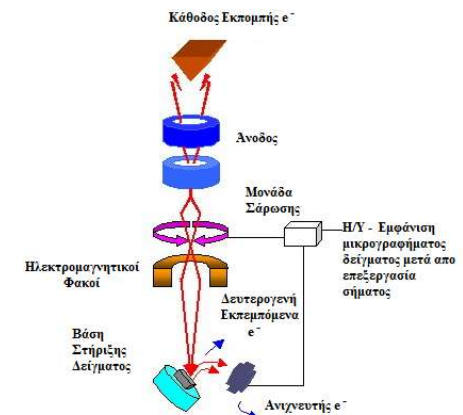
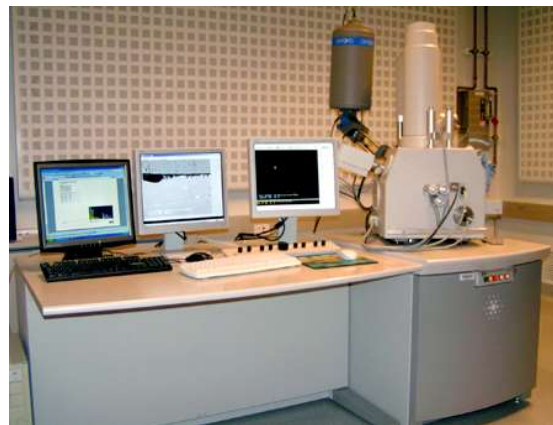
Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Διαπερατότητας



Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Σάρωσης



©Eric B. Workman



Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Σάρωσης

Τα ηλεκτρικώς αγώγιμα δείγματα είναι ευκολότερο να εξετασθούν, επειδή η ανεμπόδιστη ροή ηλεκτρονίων προς τη γείωση ελαχιστοποιεί τα προβλήματα που προκύπτουν από τη συσσώρευση ηλεκτρικού φορτίου. Επιπλέον τα δείγματα που είναι καλοί αγωγοί του ηλεκτρισμού είναι συνήθως καλοί αγωγοί και της θερμότητας, γεγονός που μειώνει την πιθανότητα θερμικής αποσύνθεσης. Δυστυχώς, τα περισσότερα βιολογικά και ορυκτά δείγματα δεν είναι καλοί αγωγοί. Έχουν αναπτυχθεί πολλές τεχνικές για τη λήψη απεικονίσεων SEM μη αγώγιμων δειγμάτων. Στις συνηθέστερες τεχνικές περιλαμβάνεται η επικάλυψη του δείγματος με λεπτό μεταλλικό φιλμ, που παράγεται με επιμετάλλωση ή με εξάχνωση μετάλλου σε κενό. Ανεξάρτητα από τον τρόπο παραγωγής αγώγιμης επικάλυψης, το ζητούμενο είναι η μέγιστη δυνατή ομοιόμορφη επικάλυψη σε βαθμό που δεν θα παρενοχλεί την παρατήρηση των λεπτομερειών της επιφάνειας.

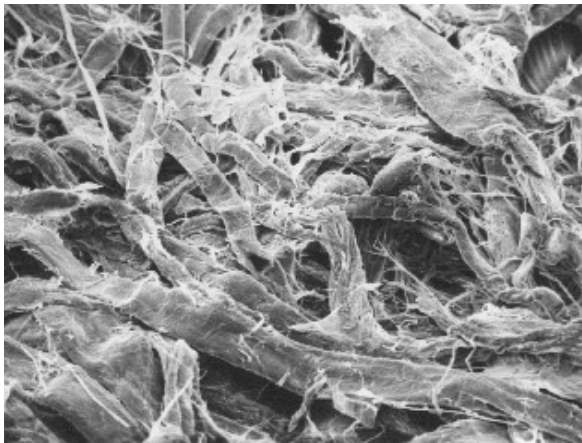


Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Σάρωσης

Τσιμπίδα Αράχνης (Black Widow)

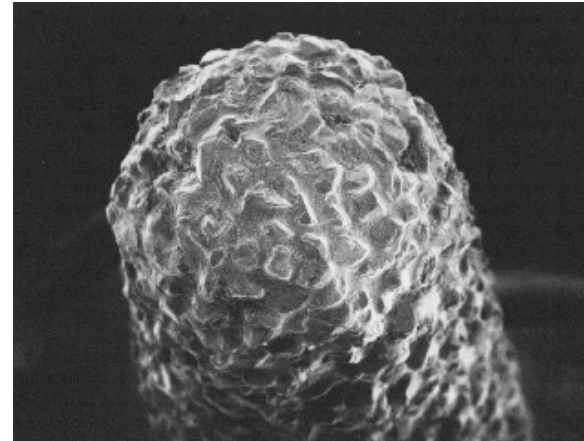


Μεγέθυνση: X 500
Χαρτί Τουαλέτας



Μεγέθυνση: X 500

Τροχός Οδοντιάτρου

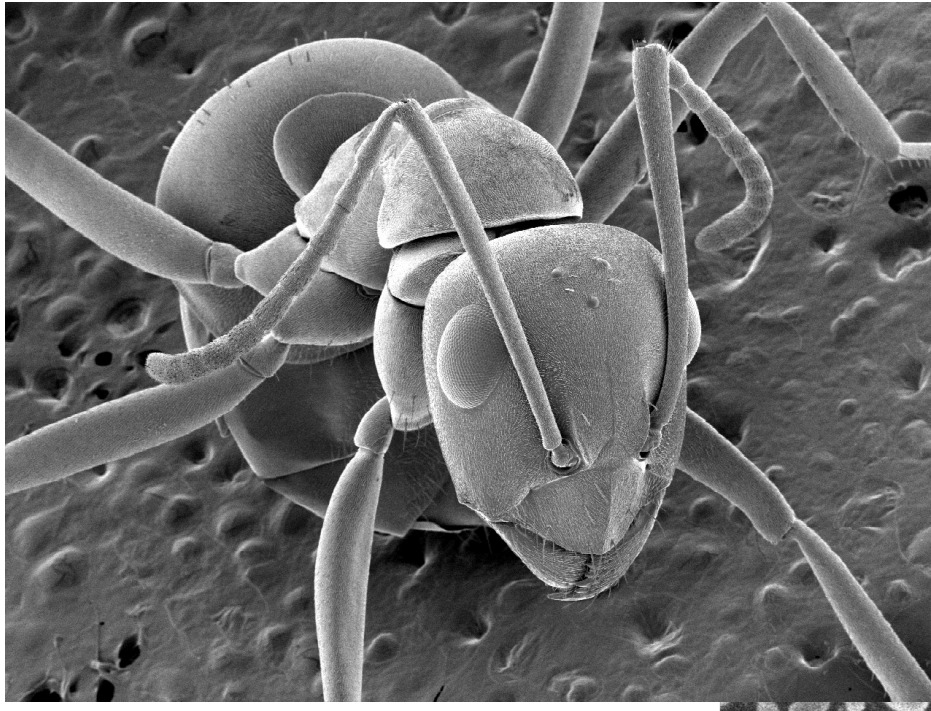


Μεγέθυνση: X 50
Συρραπτικό που έχει διαπεράσει χαρτί



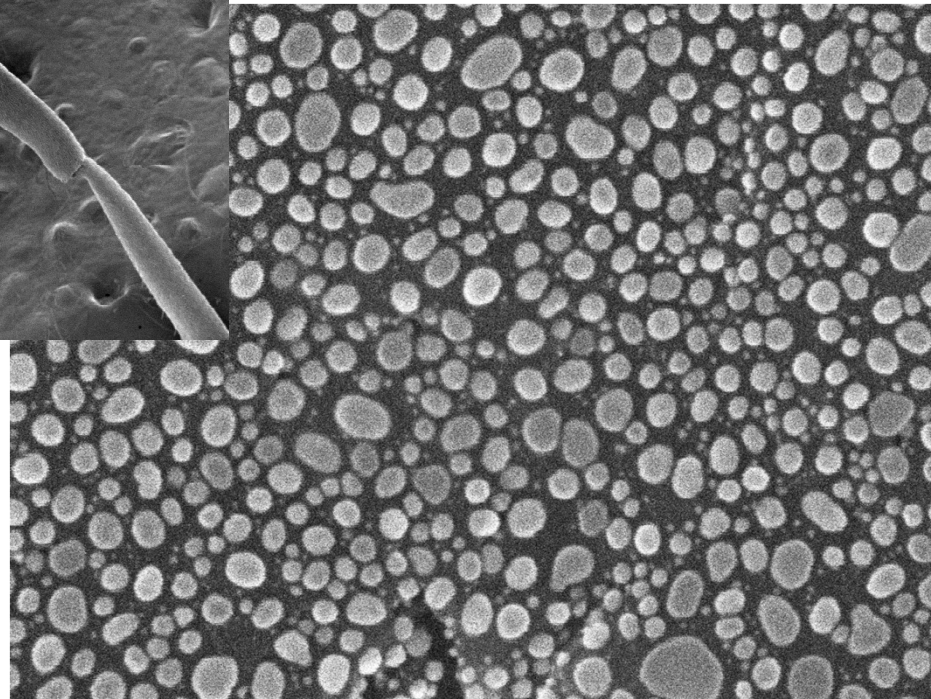
Μεγέθυνση: X 35

Large Magnification Range

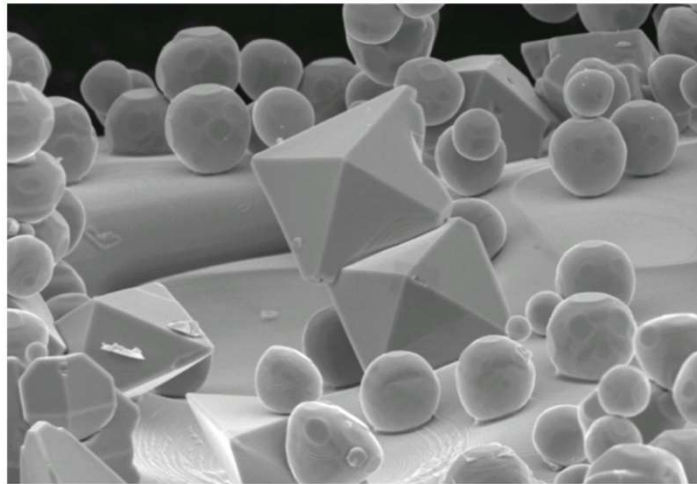


Low magnification

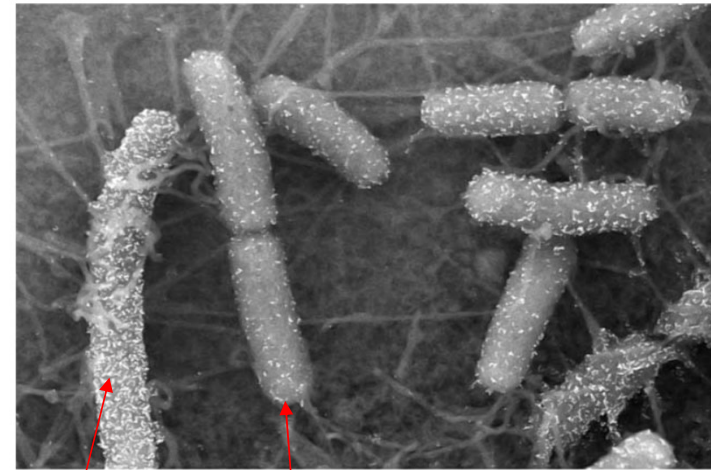
X100,000
Gold evaporated particles



Secondary Electron Image

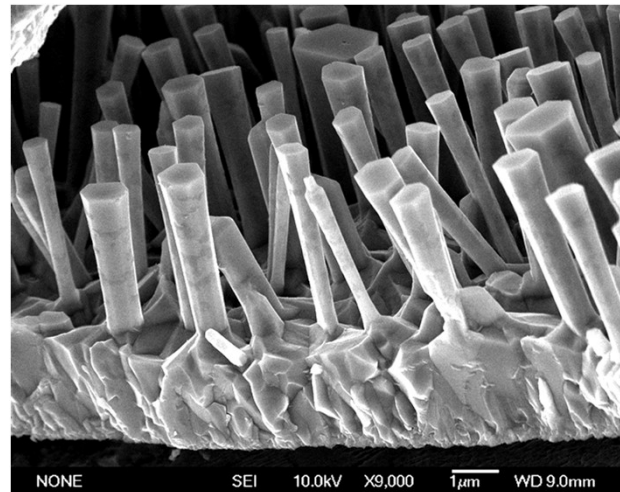
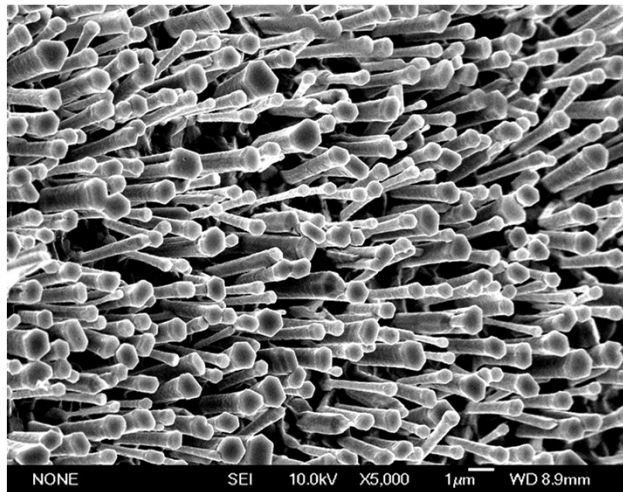


Tungsten oxide



Colloidal Gold
(white particles)

Bacteria



ZnO Nano Crystal

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΙΚΑ: ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΑ

- Η ηλεκτρονική μικροσκοπία είναι η τεχνική που χρησιμοποιεί μια δέσμη ηλεκτρονίων για να μεγεθύνει εικόνες δειγμάτων.
- Το κύριο πλεονέκτημα της χρήσης ηλεκτρονίων αντί φωτός για το σχηματισμό εικόνων είναι ότι παρέχουν τουλάχιστον τρεις τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη ανάλυση (resolution).
- Η ανάλυση που παρέχει ένα οπτικό μικροσκόπιο είναι το πολύ 200 nm, ενώ ένα TEM μπορεί να δώσει λεπτομέρειες της τάξης των 0.2 nm. Για το λόγο αυτό η ηλεκτρονική μικροσκοπία παίζει ένα ολοένα αυξανόμενο ρόλο στη μελέτη της δομής που εμφανίζουν τα πολυμερή σε κλίμακες μικρότερες του μm , από το πακετάρισμα των αλυσίδων σε ατομικό επίπεδο μέχρι τη διάταξη των προσθέτων ενίσχυσης του υλικού (π.χ. ινίδια σε σύνθετα υλικά) της τάξης των μερικών μm .
- Τα ηλεκτρονικά μικροσκόπια είναι διαθέσιμα για μικροσκοπική ανάλυση πολυμερών από το 1930.
- Οι βασικοί τύποι ηλεκτρονικού μικροσκοπίου είναι το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διαπερατότητας (TEM) και το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σαρώσεως (SEM), που παρέχουν μοναδικές και συχνά συμπληρωματικές πληροφορίες.

SEM: Η εικόνα δημιουργείται σαρώνοντας αναλυτικά με εστιασμένη δέσμη ηλεκτρονίων την επιφάνεια του δείγματος. (Η δέσμη e^- αλληλεπιδρά με την λεπτή επιφάνεια του δείγματος, μόλις μερικά μm χωρίς να παρέχονται πληροφορίες για όλο το δείγμα).

TEM: Η εικόνα δημιουργείται όταν δέσμη ηλεκτρονίων διαπερνά μέσα από ολόκληρο το δείγμα, άρα πρέπει αυτό να είναι πολύ λεπτό ανεξάρτητα το είδος αυτού.

ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΜΙΚΡΟΣΚΟΠΙΑ ΔΙΑΠΕΡΑΤΟΤΗΤΑΣ ΓΙΑ ΠΟΛΥΜΕΡΗ

Τα πολυμερή είναι πολύ ευαίσθητα στη δέσμη των ηλεκτρονίων:

Μπορεί να προκαλέσει χημικές αλλαγές (π.χ. δικτύωση ή αποικοδόμηση), καταστροφή της κρυσταλλικότητας, απώλεια μάζας, αύξηση της θερμοκρασίας (προκαλώντας αύξηση της ευαισθησίας του δείγματος στη δέσμη). Μεγάλης σημασίας είναι ακόμα η **χαμηλή αντίθεση** (contrast) που παρουσιάζουν τα πολυμερή που μελετώνται με TEM. Στη περίπτωση TEM φωτεινού πεδίου το contrast προέρχεται από δύο κυρίως παράγοντες: **1) αλλαγή στο πάχος του δείγματος από περιοχή σε περιοχή (thickness contrast) και 2) αλλαγή στον ατομικό αριθμό, δηλαδή στην ηλεκτρονική πυκνότητα.**

Τα περισσότερα πολυμερή περιέχουν ενώσεις με όμοια χημικά συστατικά (κυρίως άνθρακα και υδρογόνο) οπότε οι πυκνότητες τους είναι περίπου ίδιες. Άρα τα πολυμερή εμφανίζουν μειωμένο contrast, οπότε και απαιτείται η χρησιμοποίηση μιας τεχνικής για την αύξησή του και τέλος απαιτείται και διαδικασία λήψης λεπτών υμενίων.

Σε κάθε ηλεκτρόνιο που περνά μέσα από το στερεό δείγμα λόγω των πιθανών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ηλεκτρονίων και του δείγματος μπορούν να συμβούν τα εξής:

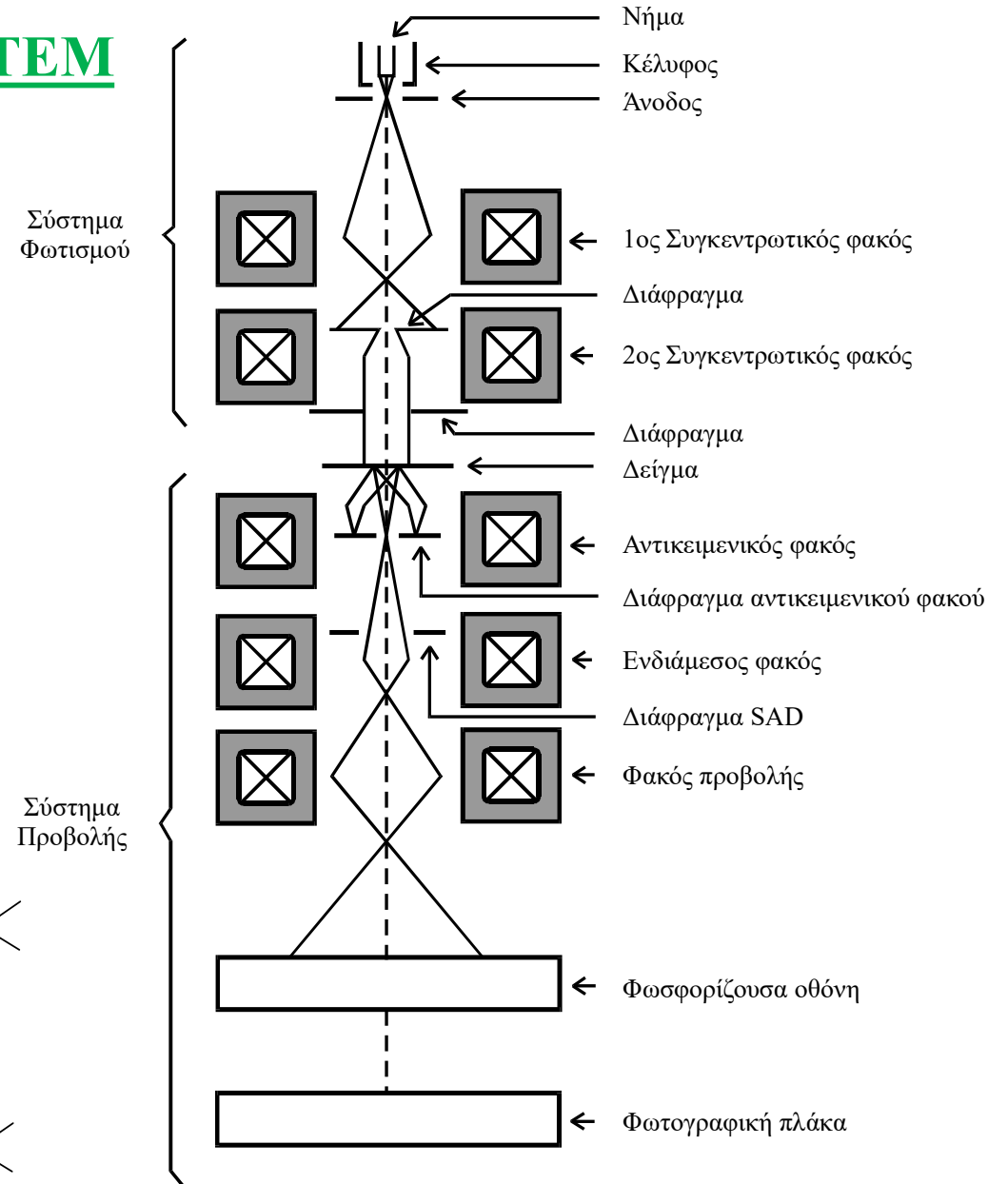
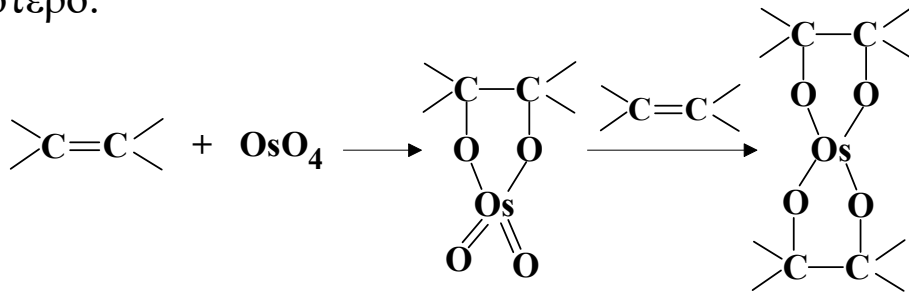
α) το ηλεκτρόνιο δεν εκτρέπεται, δηλαδή διαπερνά το δείγμα χωρίς να αλληλεπιδράσει με αυτό,
β) εκτρέπεται χωρίς απώλεια ενέργειας (ελαστική σκέδαση),
γ) χάνει ένα σημαντικό ποσό ενέργειας και πιθανόν εκτρέπεται (ανελαστική σκέδαση), με αποτέλεσμα εκπομπή δευτερογενούς ακτινοβολίας ηλεκτρονίων ή ακτίνων X.

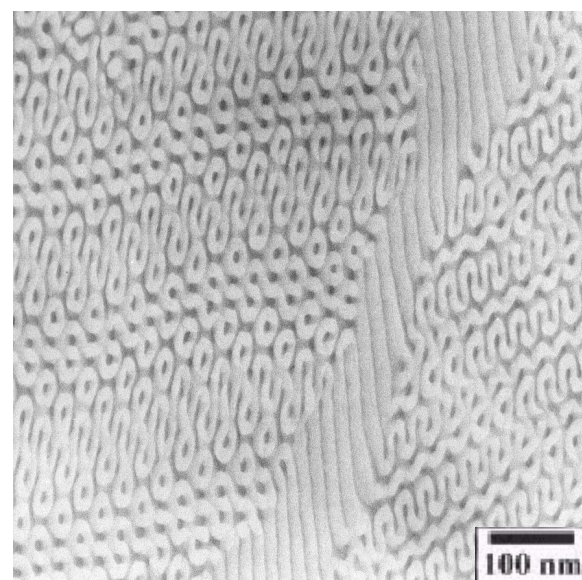
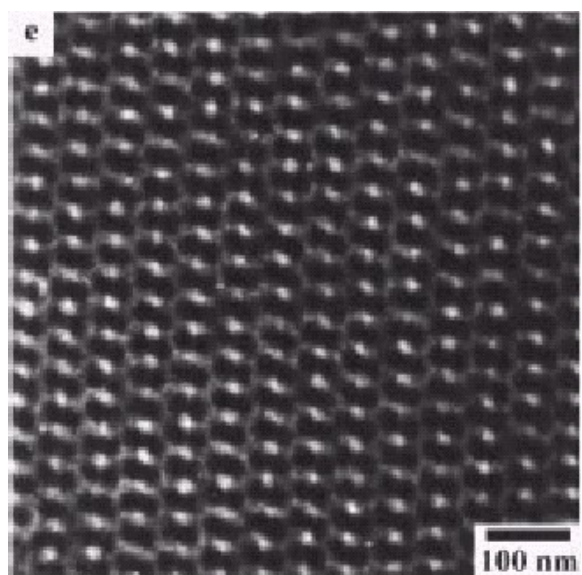
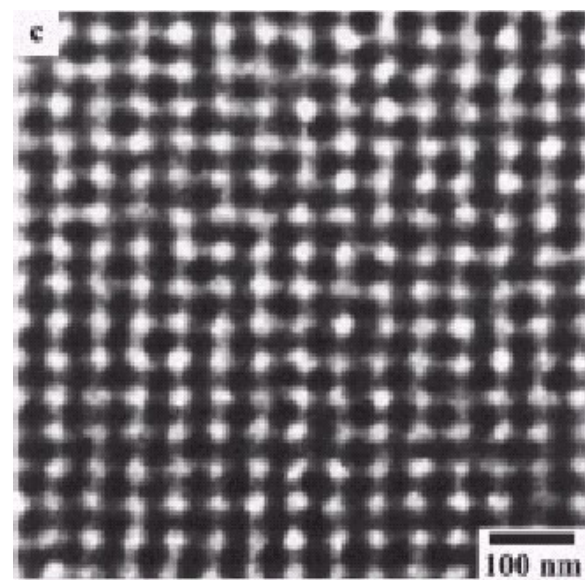
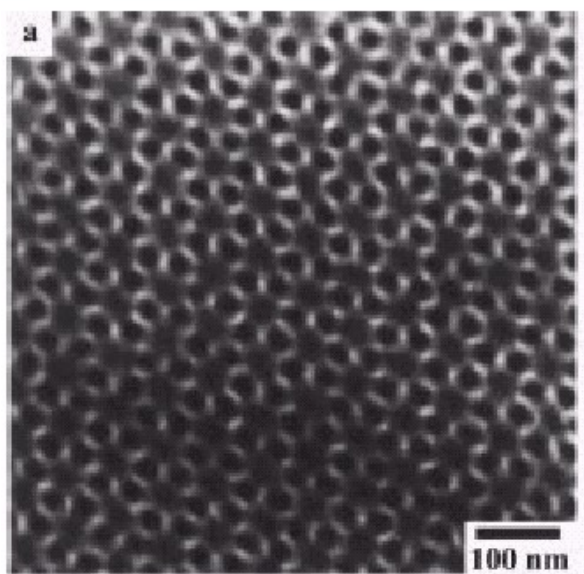
Για να έχουμε contrast πρέπει να διαχωριστούν τα e- που σκεδάζονται (β και γ) από εκείνα που δεν σκεδάζονται (α), με χρήση αντικειμενικού φακού.

Σχηματική αναπαράσταση TEM

Τα ηλεκτρόνια που προσπίπτουν στο δείγμα, αντιδρούν με αυτό και εξέρχονται μεταφέροντας πληροφορίες στο πλάτος και τη φάση της κυματοσυνάρτησης που τα περιγράφει. Οι πληροφορίες αυτές ερμηνεύονται συνήθως με χρήση του τετραγώνου του πλάτος της κυματοσυνάρτησης και η μέθοδος ονομάζεται **contrast πάχους** (amplitude contrast). Το contrast πάχους χαρακτηρίζεται από το **contrast πάχους μάζας** και το **contrast σκέδασης**.

Είναι δυνατός ο χημικός χρωματισμός των δειγμάτων με ενώσεις βαρέων μετάλλων ώστε να αυξηθεί το contrast. Ο λόγος της χρήσης τέτοιων μετάλλων οφείλεται στον αυξημένο μαζικό αριθμό οπότε τα ηλεκτρόνια θα σκεδάζουν πολύ περισσότερο.







ΣΥΝΟΨΗ



- Στα στερεά απαντώνται σημειακές, γραμμικές και επιφανειακές ατέλειες.
- Το πλήθος και το είδος των ατελειών μπορεί να μεταβάλλεται και να ελέγχεται (π.χ., η θερμοκρασία ελέγχει τη συγκέντρωση πλεγμ. κενών).
- Οι ατέλειες επηρεάζουν τις ιδιότητες των υλικών (π.χ., τα όρια κόκκων ελέγχουν την ολίσθηση κρυσταλλικών επιπέδων).
- Η ύπαρξη ατελειών μπορεί να είναι θετική ή αρνητική (για παράδειγμα, οι διαταραχές μπορεί να είναι επιθυμητές ή ανεπιθύμητες, ανάλογα με το εάν είναι επιθυμητή ή όχι πλαστική παραμόρφωση ενός υλικού).

Μηχανικές Ιδιότητες

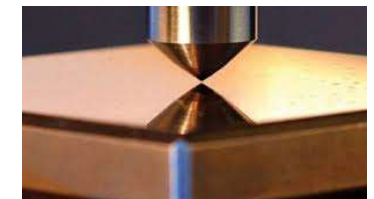


Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

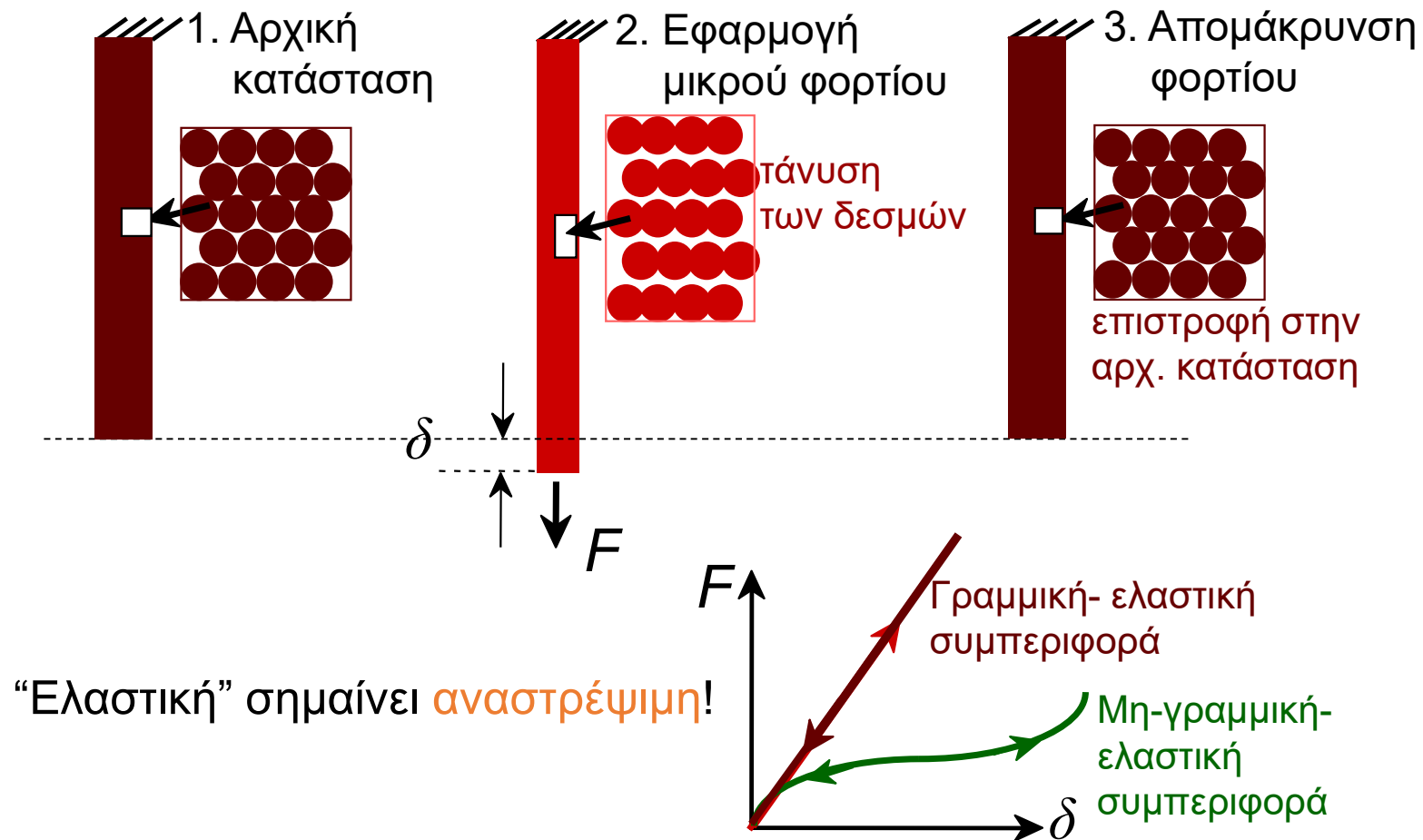
Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- **Τάση, παραμόρφωση** και η σχέση τους με το εφαρμοζόμενο φορτίο.
- **Ελαστική** συμπεριφορά: Όταν τα φορτία είναι μικρά, πόση παραμόρφωση προκύπτει; Ποια υλικά παραμορφώνονται λιγότερο;
- **Πλαστική** συμπεριφορά: Σε ποιο σημείο προκύπτει μόνιμη παραμόρφωση; Ποια υλικά είναι περισσότερο ανθεκτικά σε μόνιμη παραμόρφωση;
- **Δυσθραυστότητα** και **ολκιμότητα**: Τι είναι και πώς τις μετράμε;

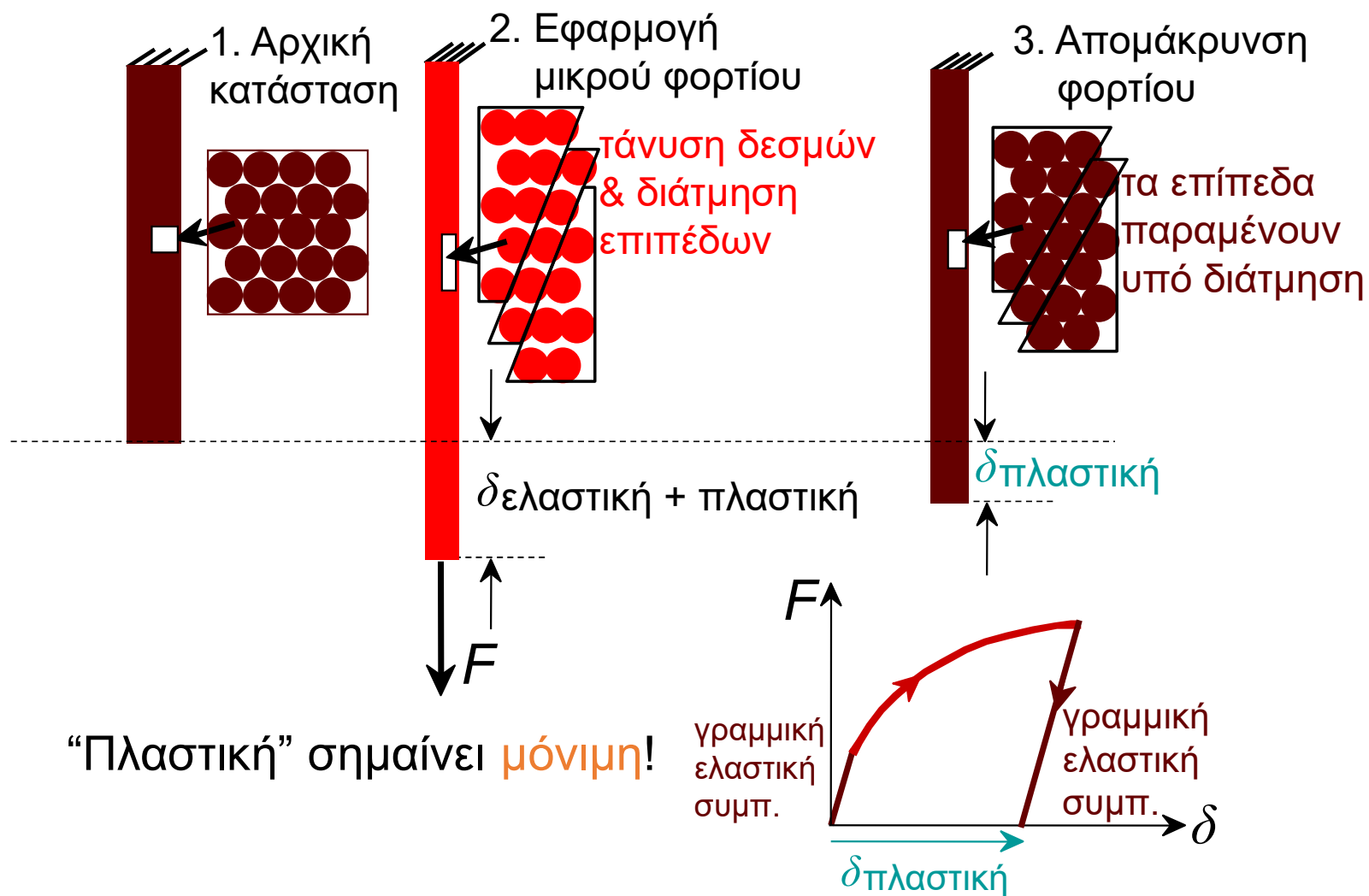


ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΜΕΤΑΛΛΩΝ

Ελαστική παραμόρφωση

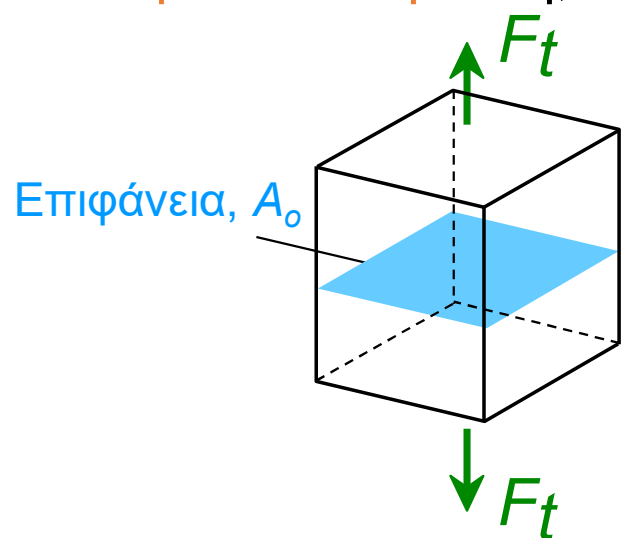


Πλαστική παραμόρφωση (μέταλλα)



Μηχανική ή συμβατική τάση (ή απλώς τάση)

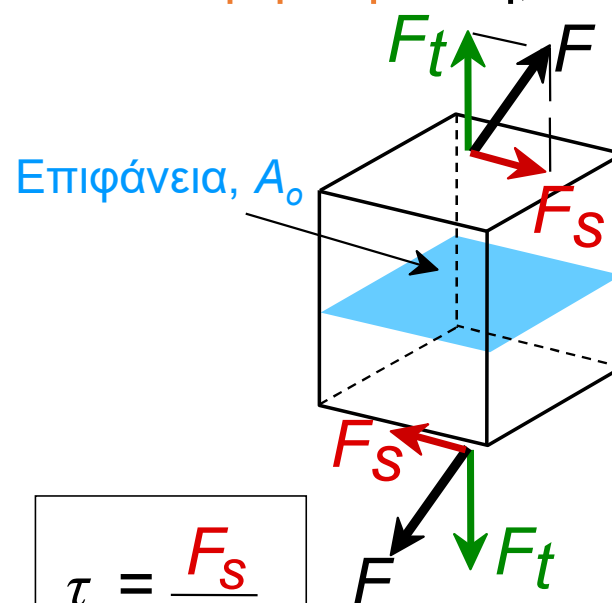
- Εφελκυστική τάση, σ :



$$\sigma = \frac{F_t}{A_o} = \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$$

Αρχική επιφάνεια διατομής
πριν από τη φόρτιση

- Διατμητική τάση, τ :



$$\tau = \frac{F_s}{A_o}$$

∴ Η τάση εκφράζεται
σε μονάδες N/m^2

ΚΟΙΝΕΣ ΕΝΤΑΤΙΚΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ (1)

- **Απλός** εφελκυσμός: καλώδιο



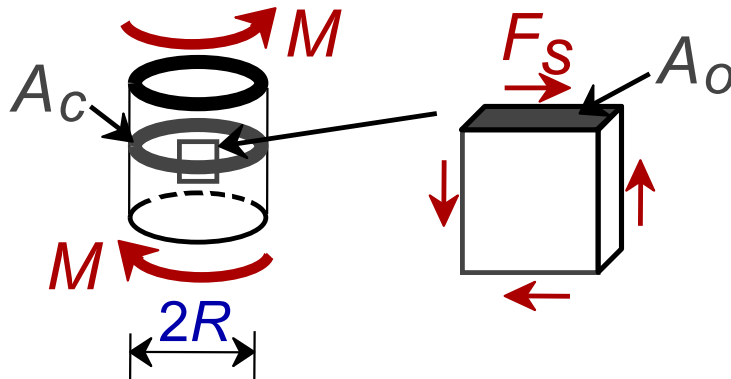
A_0 = επιφάνεια διατομής
(χωρίς φορτίο)

$$\sigma = \frac{F}{A_0}$$

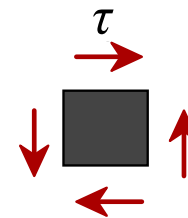


Σύστημα μεταφοράς
σε πίστα σκι (ΦΩΤΟ:
P.M. Anderson)

- **Στρέψη** (μορφή διάτμησης): κινητήριος άξονας



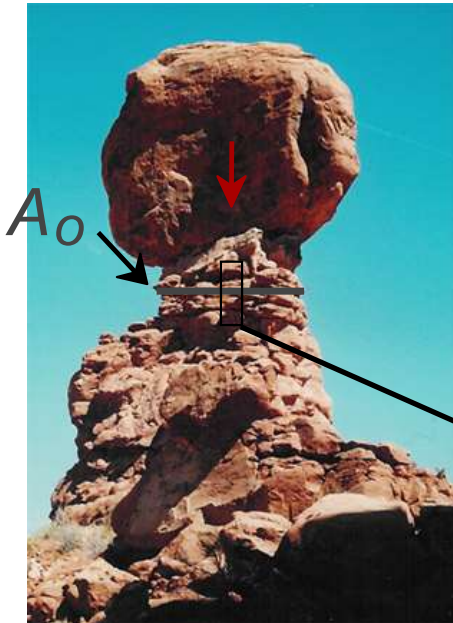
$$\tau = \frac{F_s}{A_0}$$



Σημείωση: τ = εδώ, $M/A_c R$

ΚΟΙΝΕΣ ΕΝΤΑΤΙΚΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ (2)

- **Απλή** θλίψη:



Balanced Rock, Arches National Park
(ΦΩΤΟ: P.M. Anderson)



Canyon Bridge, Los Alamos, NM
(ΦΩΤΟ: P.M. Anderson)

$$\sigma = \frac{F}{A_o}$$



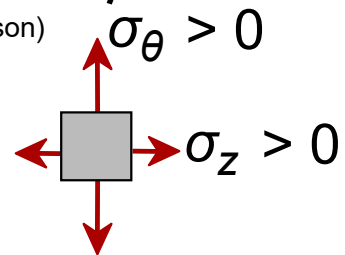
Σημείωση:
Μέλος υπό θλίψη
($\sigma < 0$ εδώ).

ΚΟΙΝΕΣ ΕΝΤΑΤΙΚΕΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ (3)

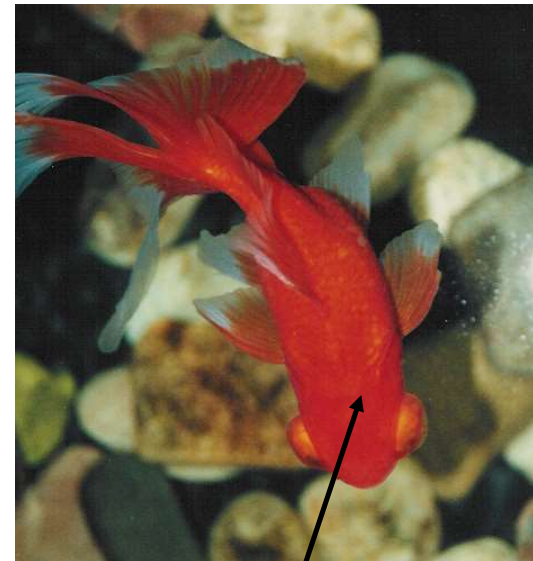
- **Δι-αξονικός** εφελκυσμός:



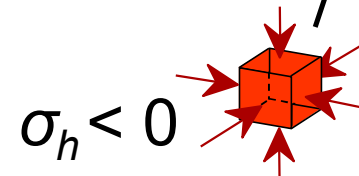
Δοχείο με περιεχόμενο
υπό πίεση
(ΦΩΤΟ: P.M. Anderson)



- **Υδροστατική** συμπίεση:



Ψάρι στο νερό
(ΦΩΤΟ: P.M. Anderson)



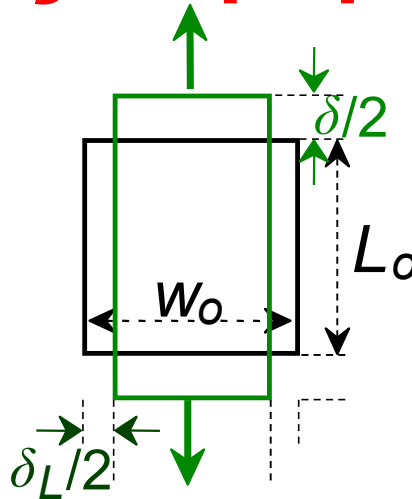
Μηχανική ή συμβατική παραμόρφωση (ή απλώς παραμόρφωση)

- Εφελκυστική παραμόρφωση:

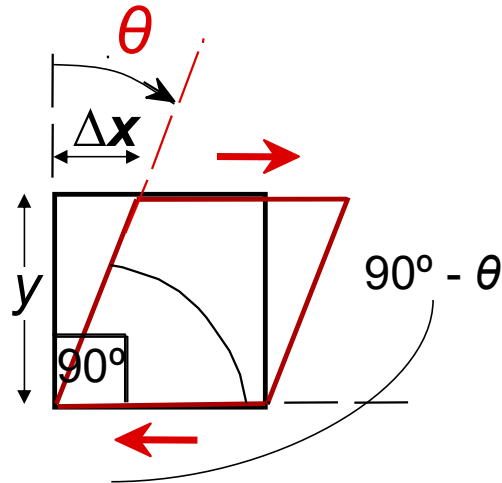
$$e = \frac{\delta}{L_o}$$

- Πλευρική παραμόρφωση:

$$e_L = -\frac{\delta_L}{W_o}$$



- Διατμητική παραμόρφωση:

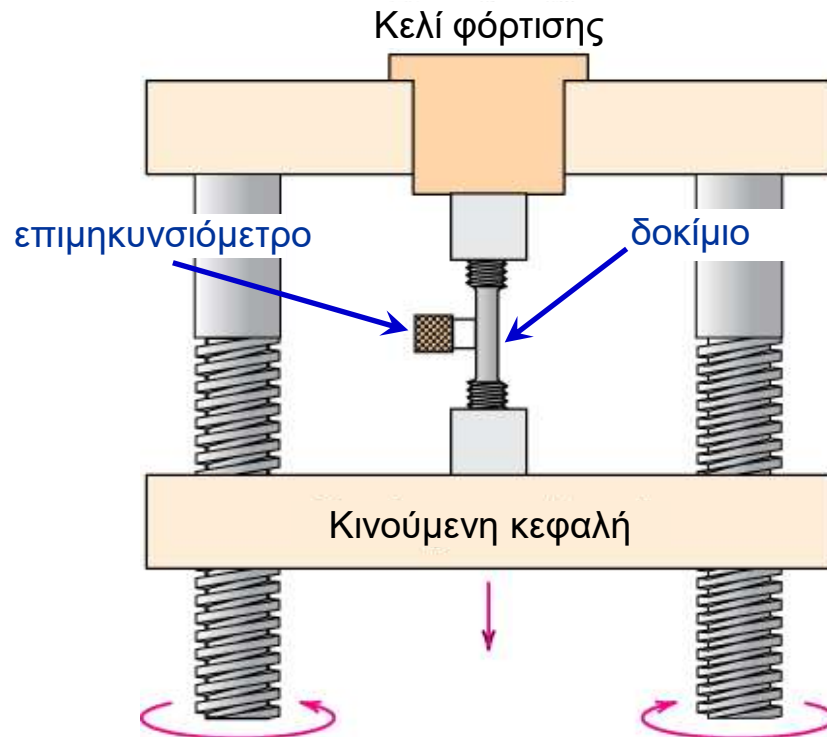


$$\gamma = \Delta x / y = \tan \theta$$

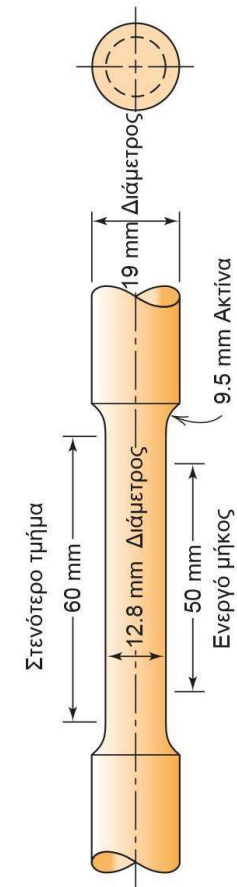
Η παραμόρφωση
είναι πάντοτε
αδιάστατο μέγεθος.

Δοκιμές τάσης-παραμόρφωσης

- Τυπική διάταξη δοκιμών εφελκυσμού



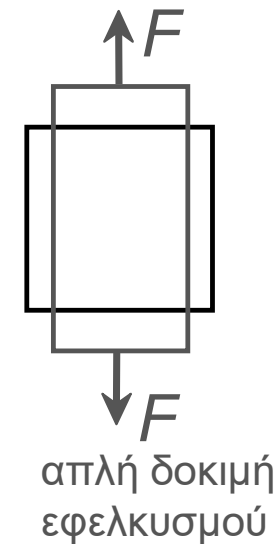
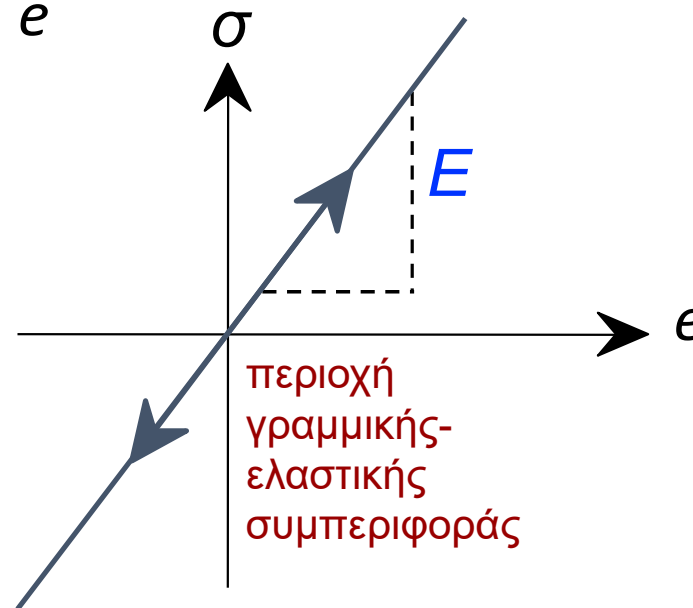
- Τυπικό δοκίμιο εφελκυσμού



Γραμμική-ελαστική συμπεριφορά: Ιδιότητες

- **Μέτρο ελαστικότητας, E :**
(γνωστό επίσης ως μέτρο του Young)
- **Νόμος του Hooke:**

$$\sigma = E e$$



Λόγος Poisson, ν

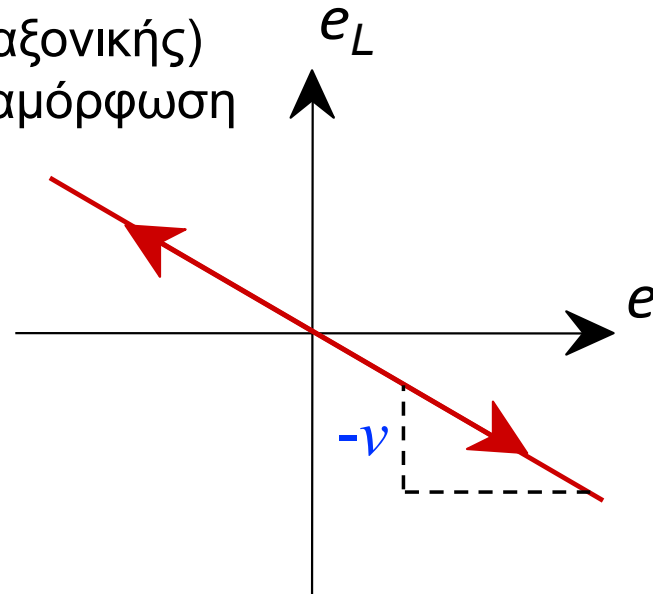
- Ο αρνητικός λόγος διαμήκους (αξονικής) προς εγκάρσια (πλευρική) παραμόρφωση

$$\nu = - \frac{e_L}{e}$$

μέταλλα: $\nu \sim 0.33$

κεραμικά: $\nu \sim 0.25$

πολυμερή: $\nu \sim 0.40$



Μονάδες:

E : [GPa] ή [psi]

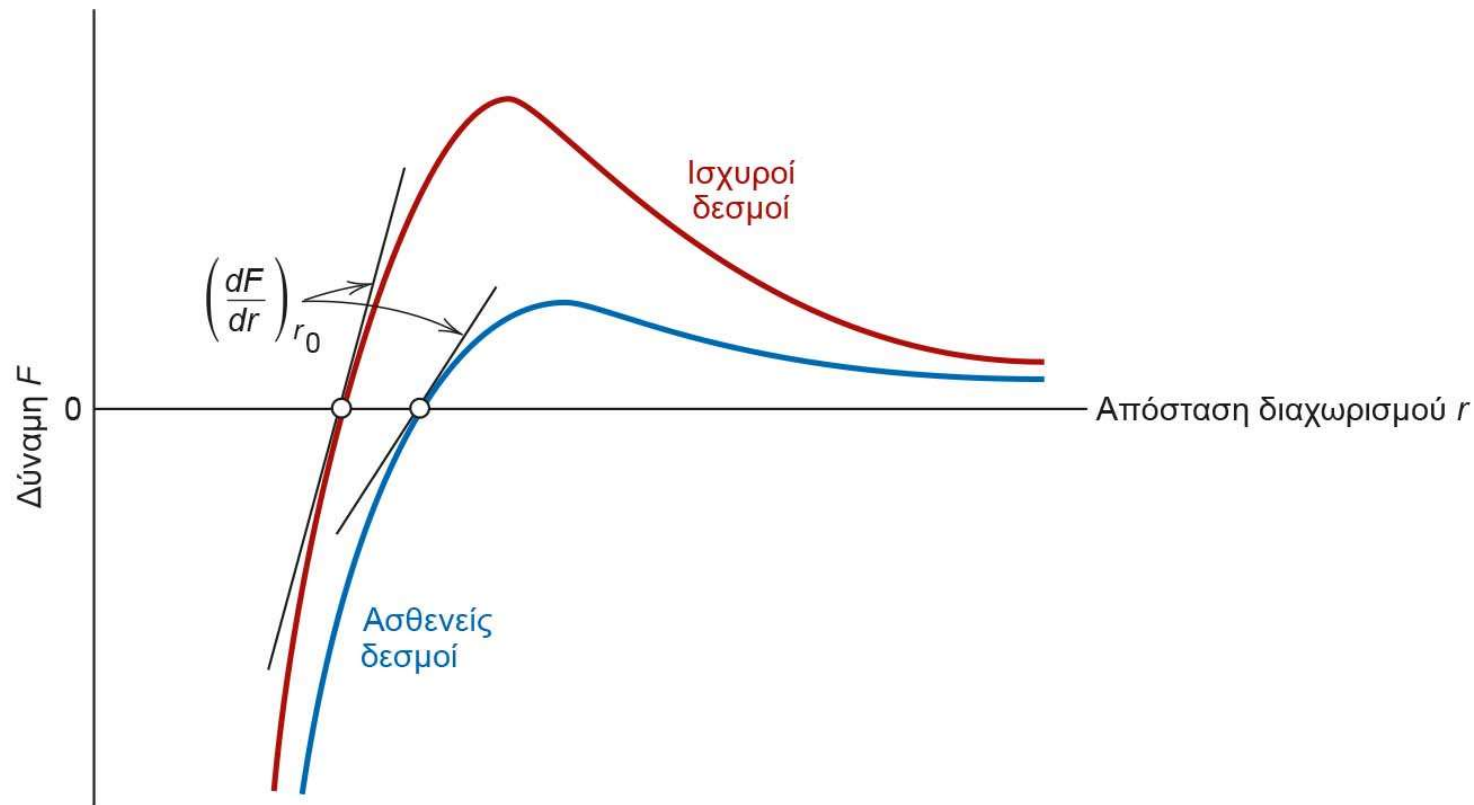
ν : αδιάστατο

$\nu > 0.50$ η πυκνότητα αυξάνεται

$\nu < 0.50$ η πυκνότητα μειώνεται
(σχηματίζονται κενά)

Μηχανικές ιδιότητες

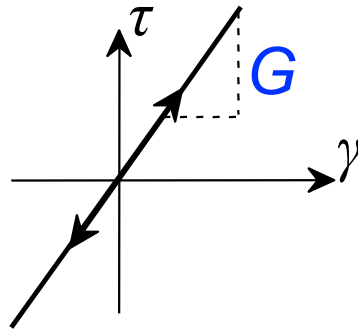
- Η κλίση της καμπύλης τάσης-παραμόρφωσης (η οποία είναι ανάλογη του μέτρου ελαστικότητας) εξαρτάται από την αντοχή των δεσμών του εκάστοτε μετάλλου



Ελαστική συμπεριφορά: Άλλες ιδιότητες

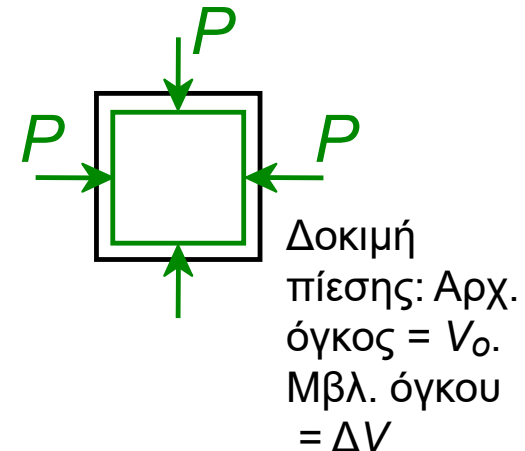
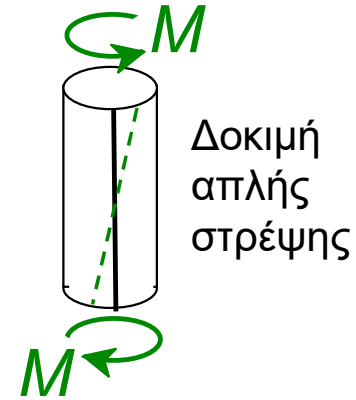
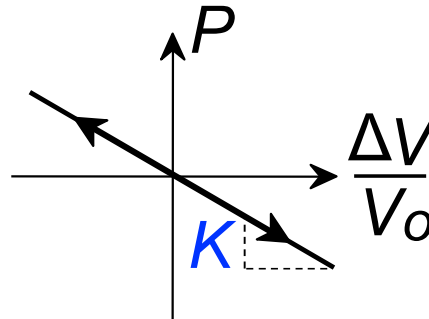
- Μέτρο **διάτμησης**, G :
(μέτρο ελαστικότητας
σε διάτμηση)

$$\tau = G \gamma$$



- Μέτρο **ελαστικότητας
όγκου**, K :

$$P = -K \frac{\Delta V}{V_0}$$

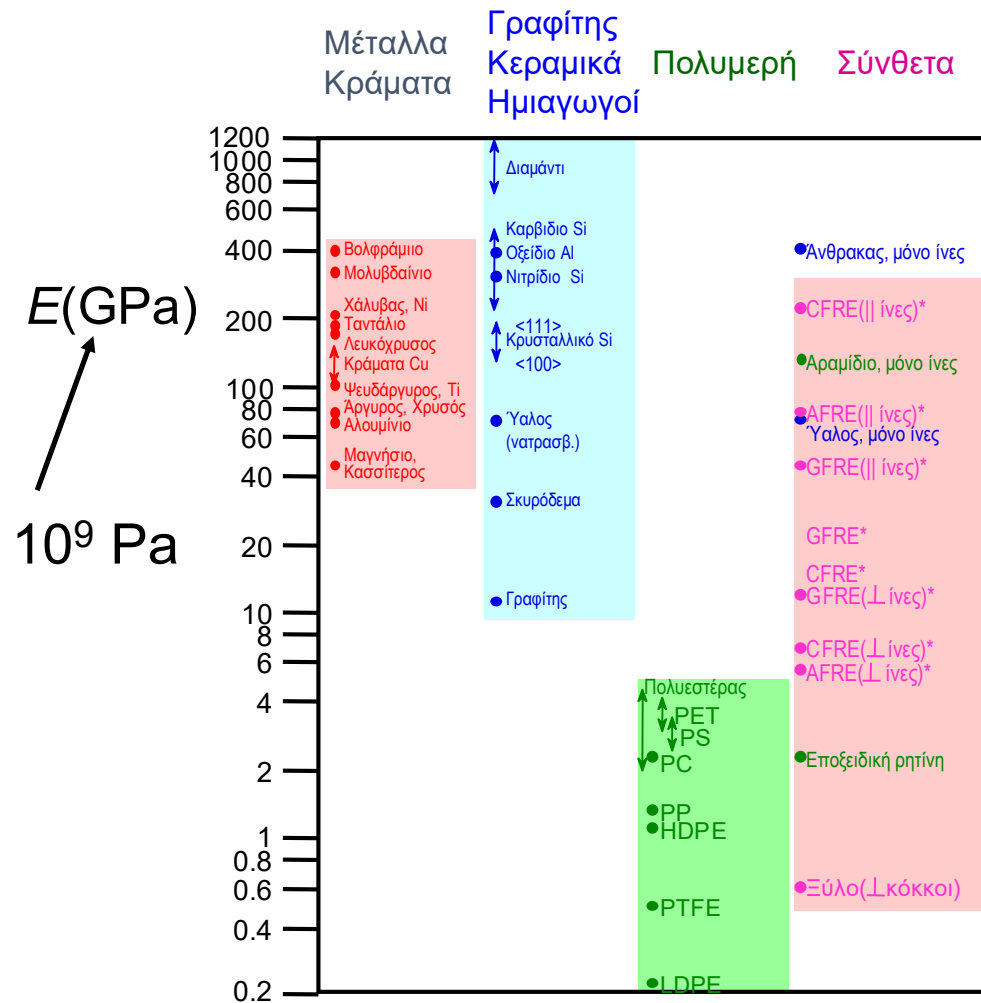


- Ειδικές σχέσεις για ισότροπα υλικά:

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}$$

$$K = \frac{E}{3(1 - 2\nu)}$$

Μέτρο Young: Σύγκριση μεταξύ υλικών



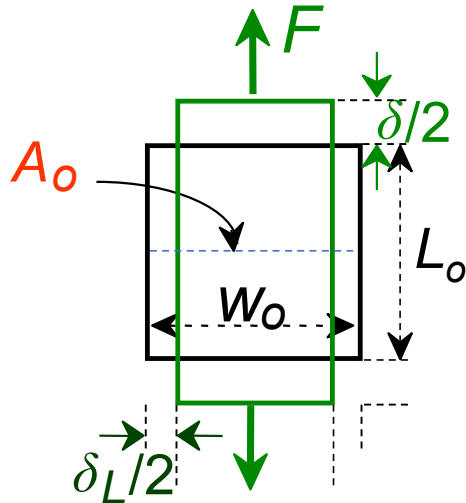
Σύνθετα υλικά: εποξειδική μήτρα ενισχυμένη με ευθυγραμμισμένες ίνες (60% κ.ό) από άνθρακα (CFRE), αραμίδιο (AFRE) & ύαλο (GFRE).

Ελαστική απόκλιση (μετατόπιση)

- Απλός εφελκυσμός:

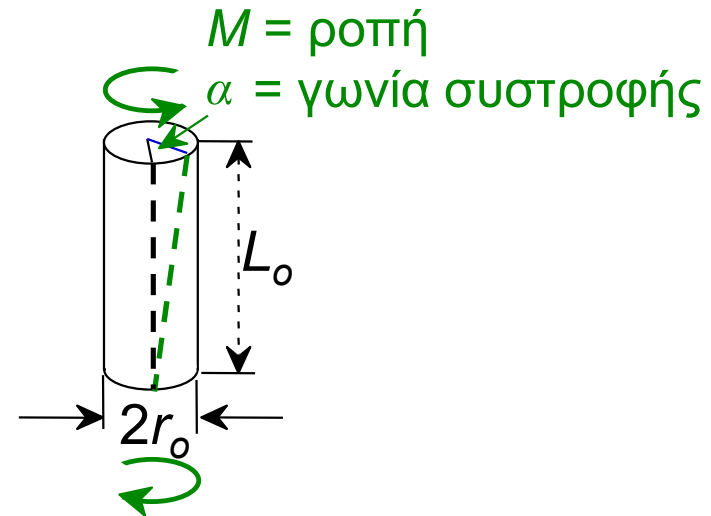
$$\delta = \frac{FL_o}{EA_o}$$

$$\delta_L = -\nu \frac{FW_o}{EA_o}$$



- Απλή στρέψη:

$$\alpha = \frac{2ML_o}{\pi r_o^4 G}$$



- Οι παράμετροι υλικού, γεωμετρίας και φόρτισης συνεισφέρουν στην ελαστική απόκλιση.
- Μεγαλύτερα μέτρα ελαστικότητας => ελαχιστοποίηση ελαστικής απόκλισης.

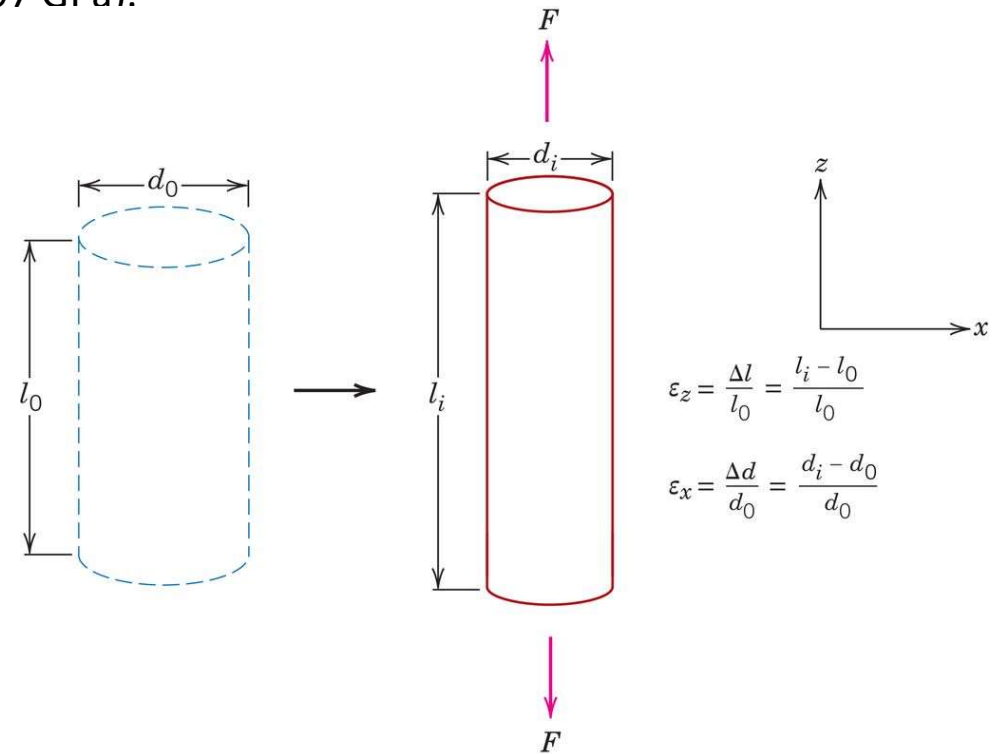


Υπολογισμός (Ελαστικής) Επιμήκυνσης

Ένα κομμάτι χαλκού με αρχικό μήκος 305 mm υφίσταται εφελκυσμό με τάση 276 MPa. Εάν η παραμόρφωση είναι πλήρως ελαστική, να υπολογιστεί η προκύπτουσα επιμήκυνση (δίνεται $E=110 \text{ GPa}$).

EXAMPLE**Υπολογισμός του φορτίου που προκαλεί συγκεκριμένη μεταβολή διαμέτρου**

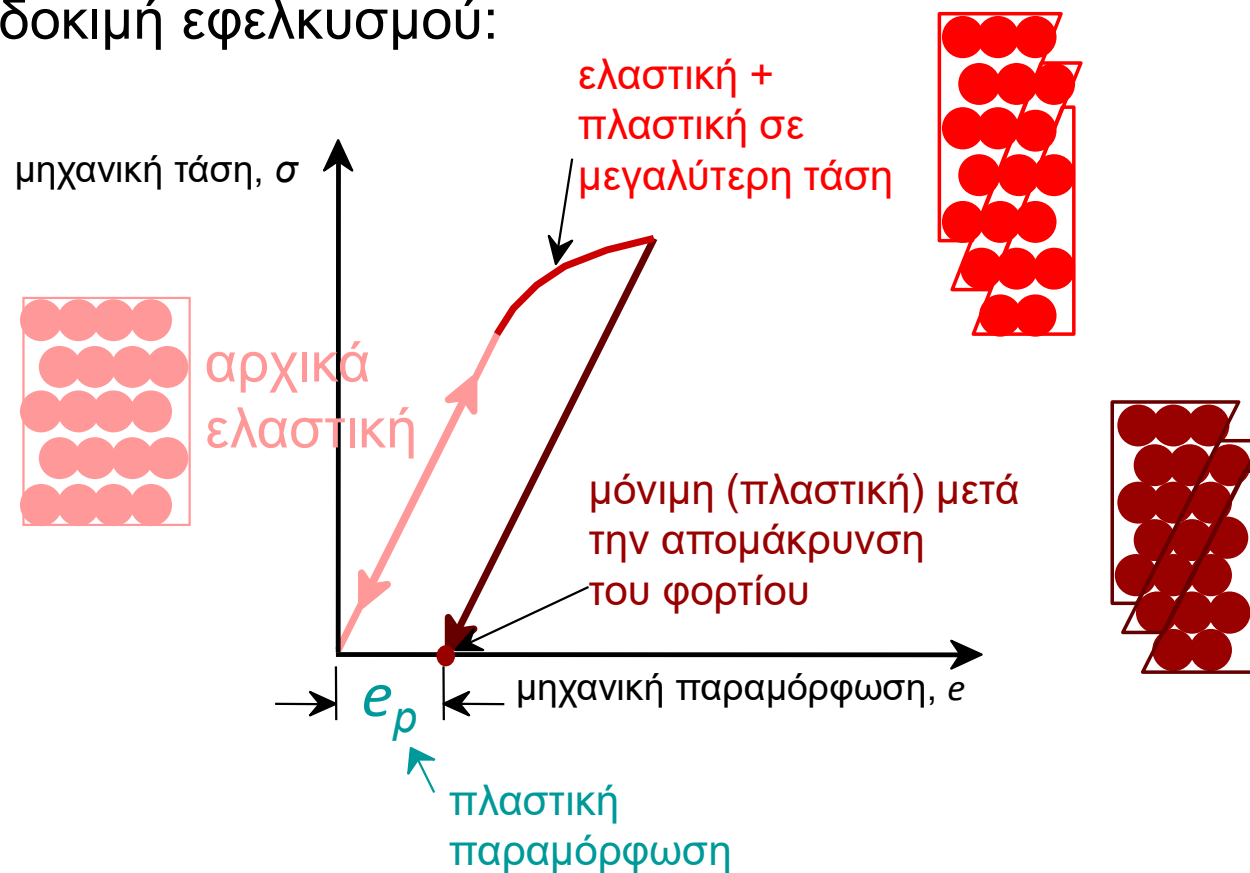
Σε κυλινδρική ράβδο από ορείχαλκο, διαμέτρου 10 mm, πρόκειται να εφαρμοστεί εφελκυστική τάση κατά μήκος του μεγάλου άξονά της. Υποθέτοντας πλήρως ελαστική παραμόρφωση, υπολογίστε το φορτίο που απαιτείται ώστε να προκύψει μεταβολή 2.5×10^{-3} mm στη διάμετρο της ράβδου (δίνεται ο λόγος Poisson για ορείχαλκο 0.34 και το μέτρο ελαστικότητας $E=97$ GPa).



Πλαστική (μόνιμη) παραμόρφωση

(σε χαμηλότερες θερμοκρασίες, δηλ. $T < T_{\text{τήξης}}/3$)

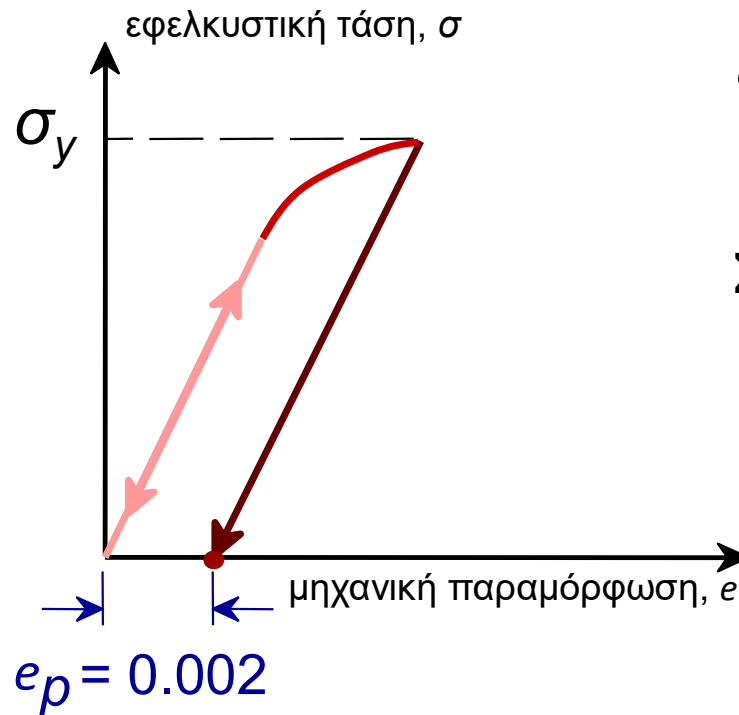
- Απλή δοκιμή εφελκυσμού:



Αντοχή (όριο) διαρροής, σ_y

- Τάση στην οποία συμβαίνει **παρατηρήσιμη** πλαστική παραμόρφωση.

όταν $e_p = 0.002$



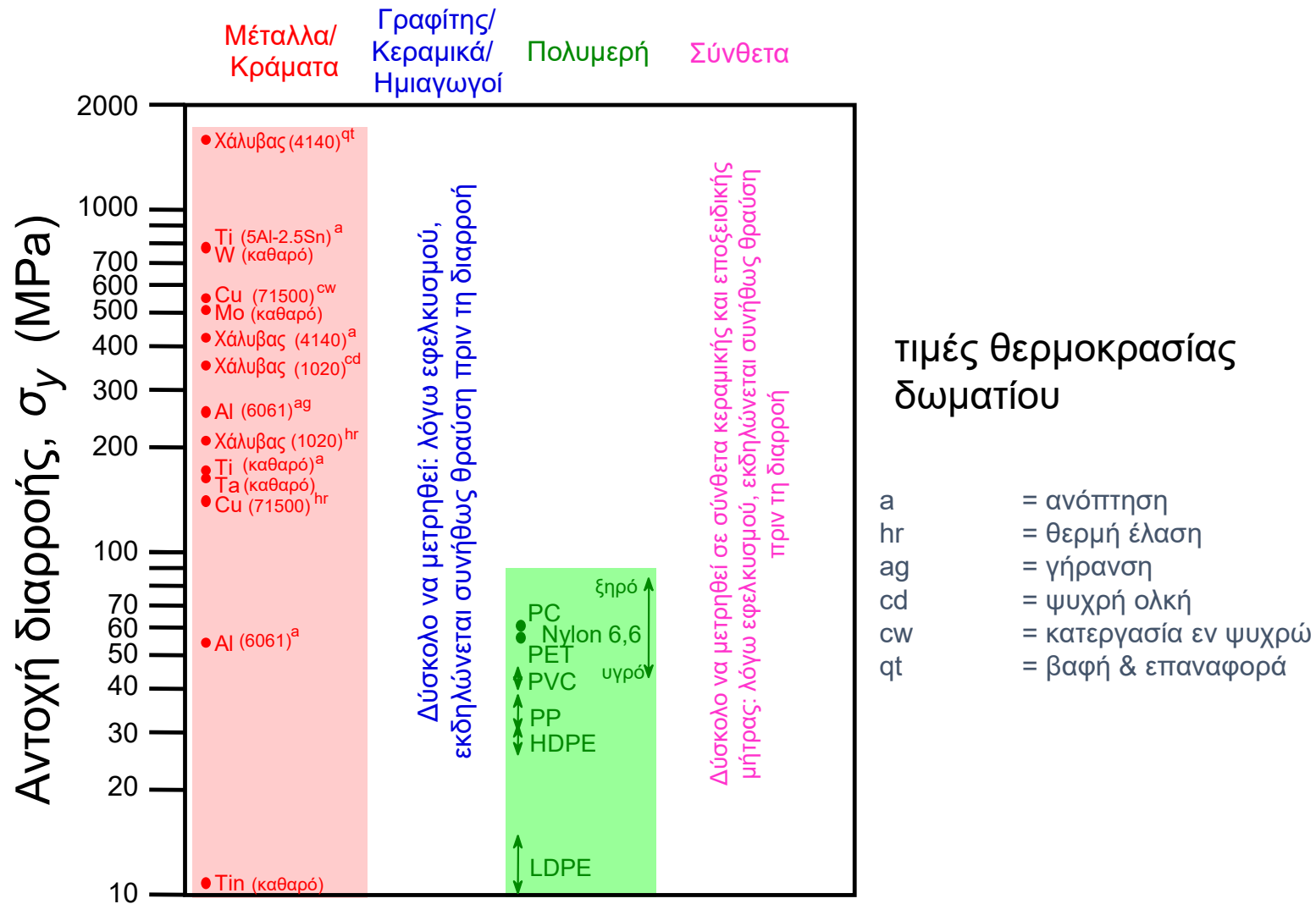
σ_y = αντοχή διαρροής

Σημείωση: για δείγμα 2 ιντσών

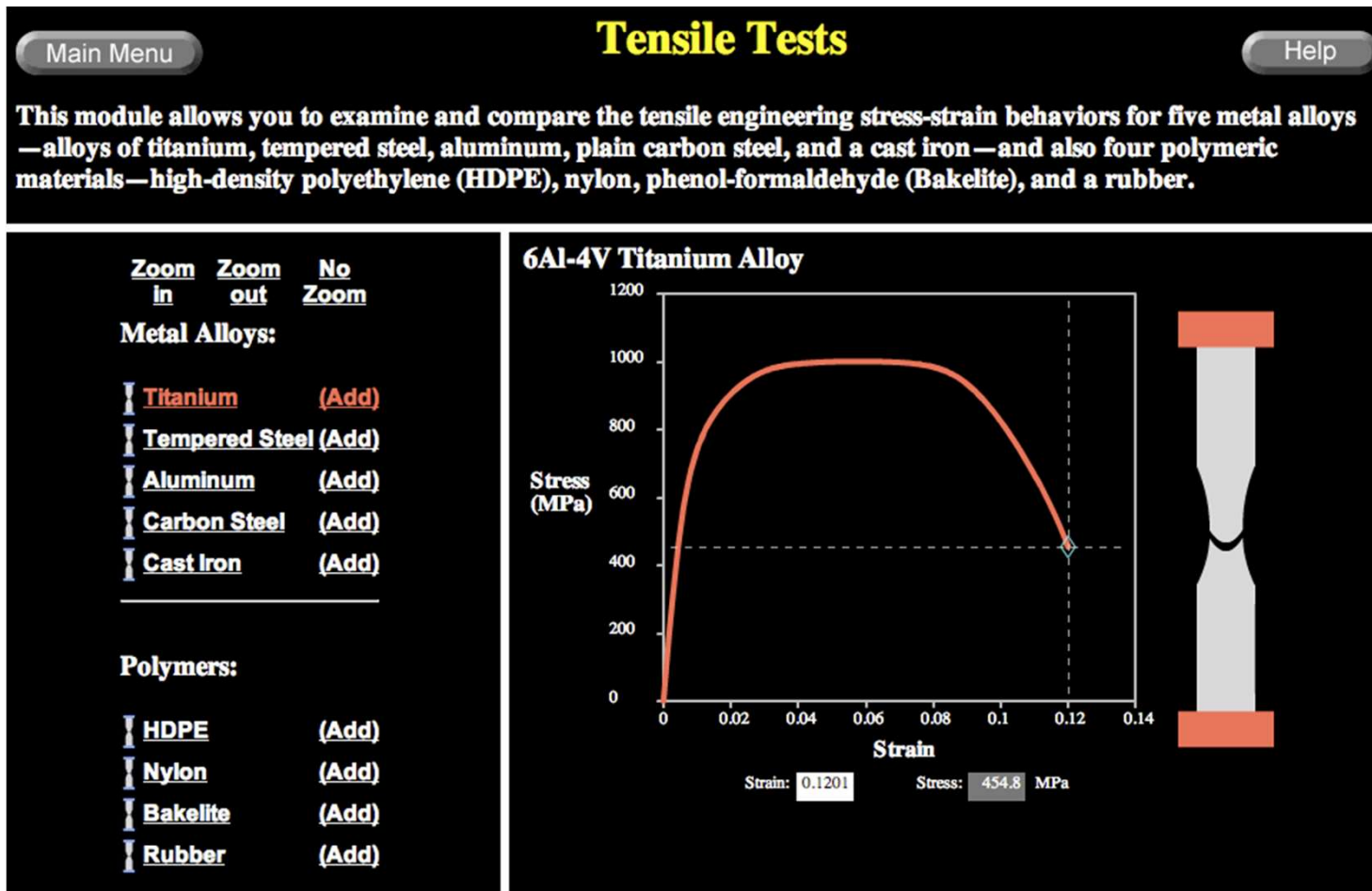
$$e = 0.002 = \Delta z / z$$

$$\therefore \Delta z = 0.004 \text{ in}$$

Αντοχή διαρροής: Σύγκριση μεταξύ υλικών

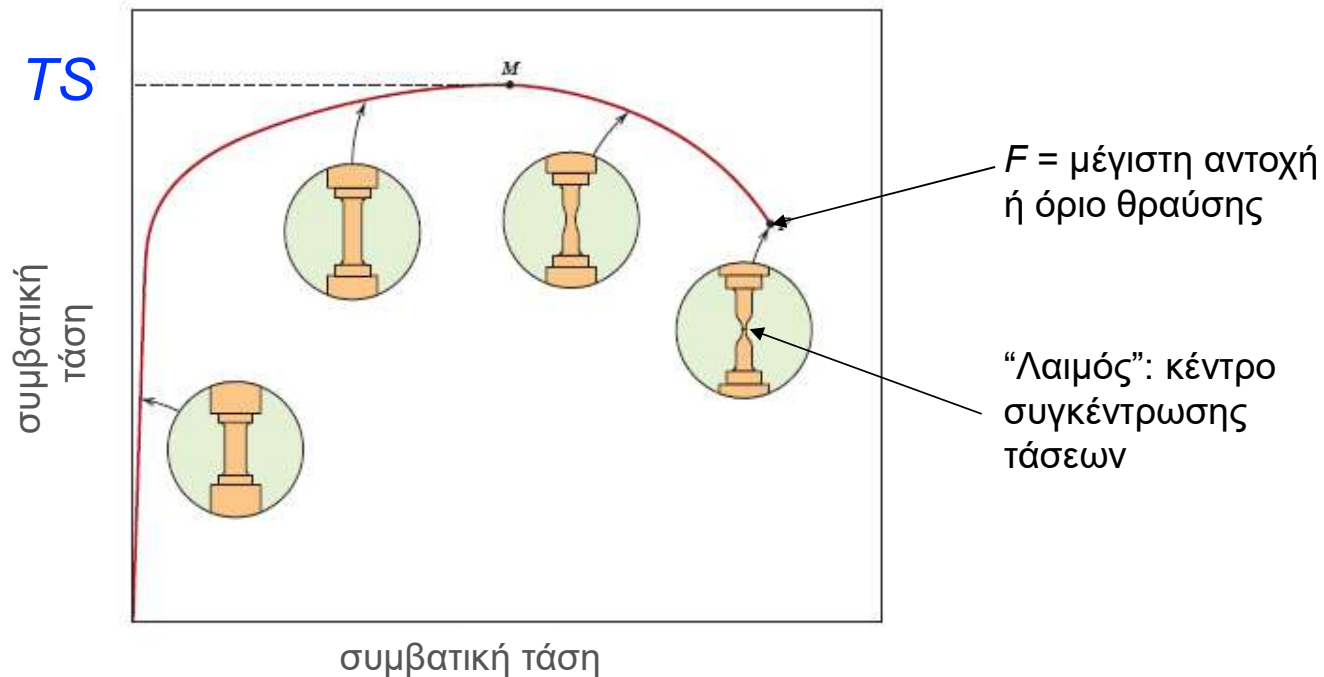


Δοκιμή εφελκυσμού (προσομοίωση στο VMSE)



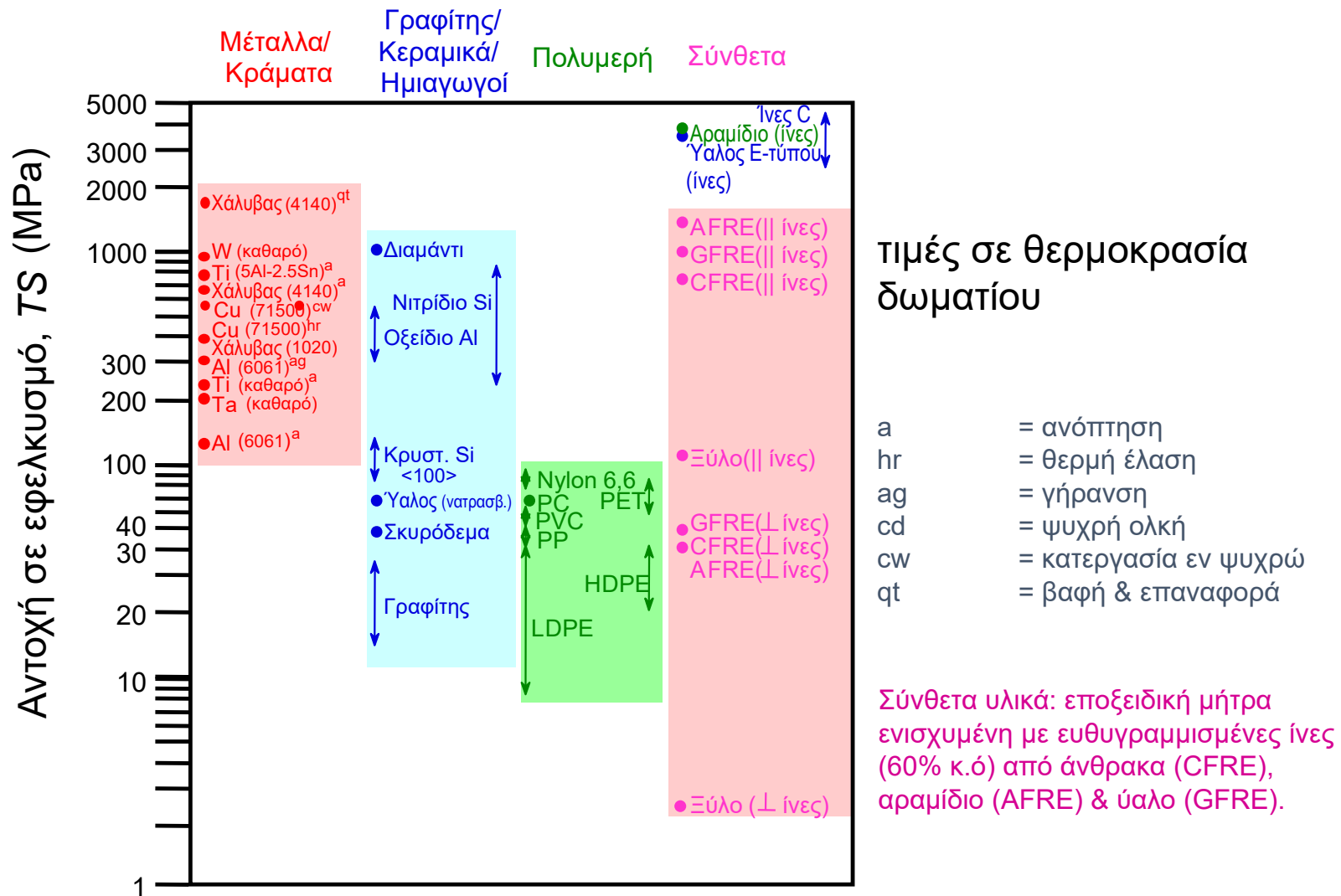
Αντοχή σε εφελκυσμό, TS

- Μέγιστη τάση στην καμπύλη μηχανικής (συμβατικής) τάσης-παραμόρφωσης.



- Μέταλλα:** όταν αρχίζει να είναι ευδιάκριτος ο **σχηματισμός λαιμού**.
- Πολυμερή:** όταν οι **αλυσίδες του πολυμερικού κορμού** είναι ευθυγραμμισμένες και έτοιμες να "σπάσουν".

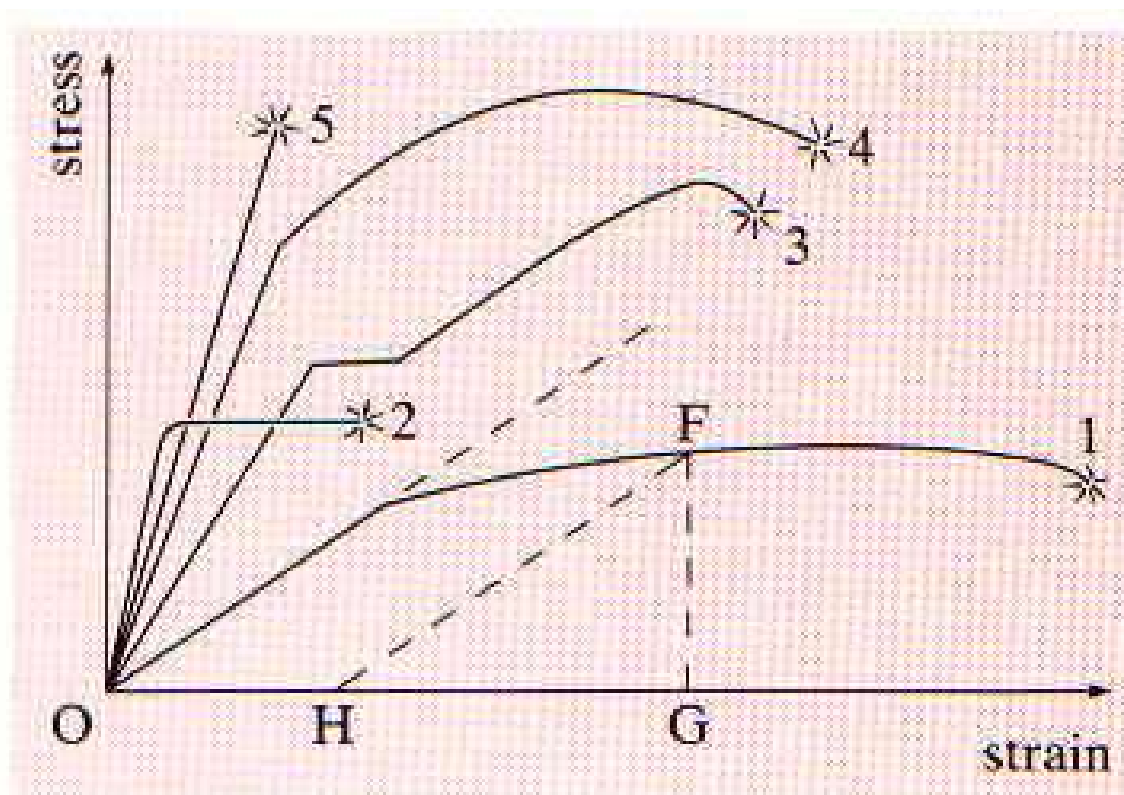
Αντοχή σε εφελκυσμό: Σύγκριση μεταξύ υλικών





Προσδιορισμός μηχανικών ιδιοτήτων από το διάγραμμα τάσης-παραμόρφωσης

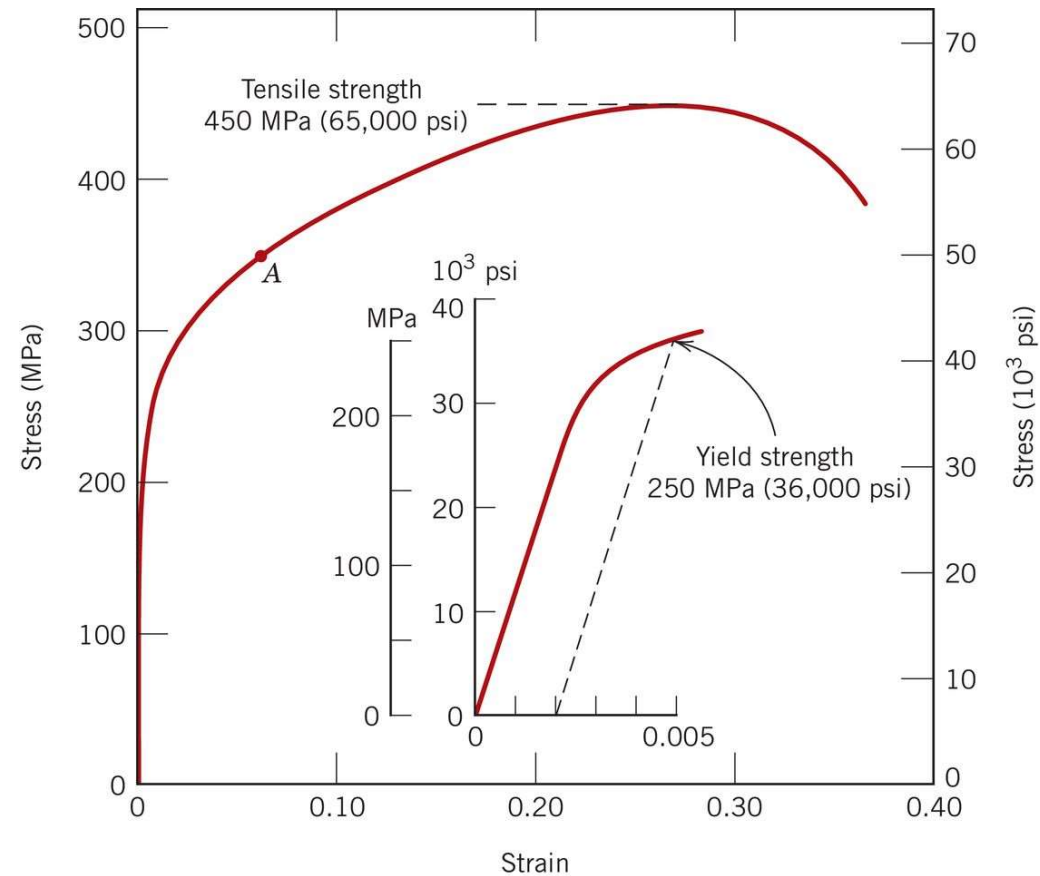
Από τα υλικά που δίνονται στο παρακάτω σχήμα τάσης-παραμόρφωσης (stress-strain), βρείτε (και εξηγήστε!) ποιο υλικό παρουσιάζει το υψηλότερο: (i) μέτρο ελαστικότητας (E), (ii) μέγιστη αντοχή στον εφελκυσμό, (iii) όριο διαρροής (σ_y) και (iv) παραμόρφωση θραύσης (ϵ_f) του πολυμερούς.



EXAMPLE

Προσδιορισμός μηχανικών ιδιοτήτων από το διάγραμμα τάσης-παραμόρφωσης

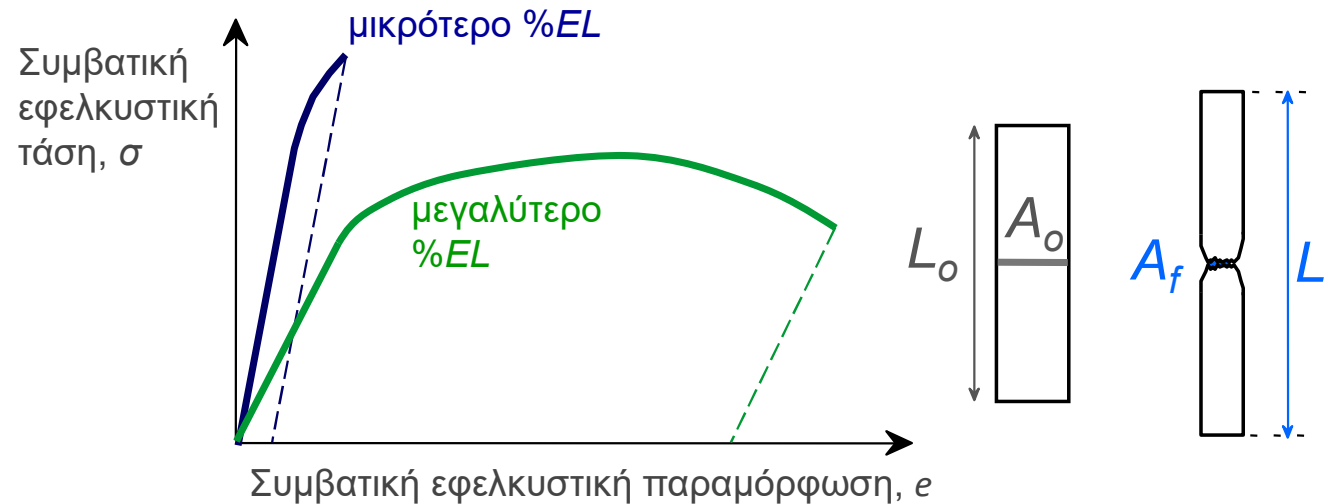
Από την συμπεριφορά τάσης-παραμόρφωσης που φαίνεται στο Σχήμα για ένα δοκίμιο ορείχαλκου υπό εφελκυσμό με αρχικό μήκος 250 mm, προσδιορίστε: (α) μέτρο ελαστικότητας, (β) αντοχή διαρροής, υπολογισμένη στην συμβατική τιμή παραμόρφωσης 0.002, (γ) το μέγιστο φορτίο που μπορεί να φέρει το κυλινδρικό δοκίμιο, εάν η αρχική του διάμετρος είναι 12.8 mm, (δ) τη μεταβολή στο μήκος του δοκιμίου, όταν υποβάλλεται σε εφελκυστική τάση 345 MPa.



Ολκιμότητα

- $\%EL$ (ποσοστιαία επιμήκυνση):
Μέτρο της πλαστικής παραμόρφωσης που υφίσταται ένα υλικό στο όριο θραύσης:

$$\%EL = \frac{L_f - L_o}{L_o} \times 100$$

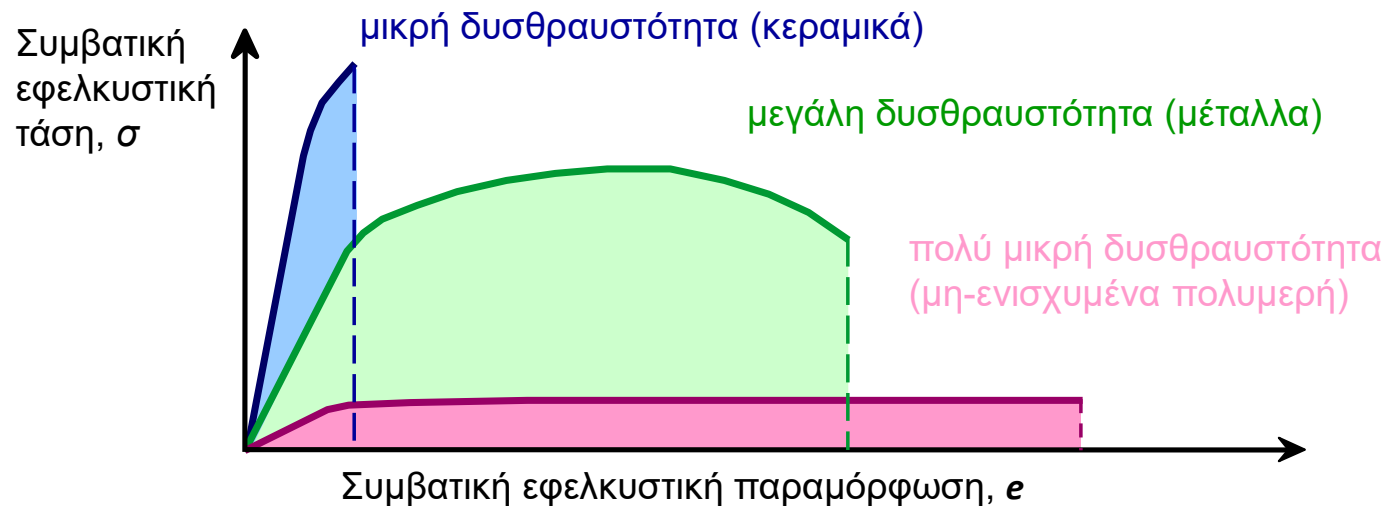


- $\%RA$ (ποσοστιαία μείωση επιφάνειας):
Εναλλακτικό μέτρο της ολκιμότητας:

$$\%RA = \frac{A_o - A_f}{A_o} \times 100$$

Δυσθραυστότητα

- Ενέργεια που απαιτείται για να οδηγηθεί σε θραύση μοναδιαίος όγκος ενός υλικού
- Προσεγγιστικά ίση με την επιφάνεια κάτω από την καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης.

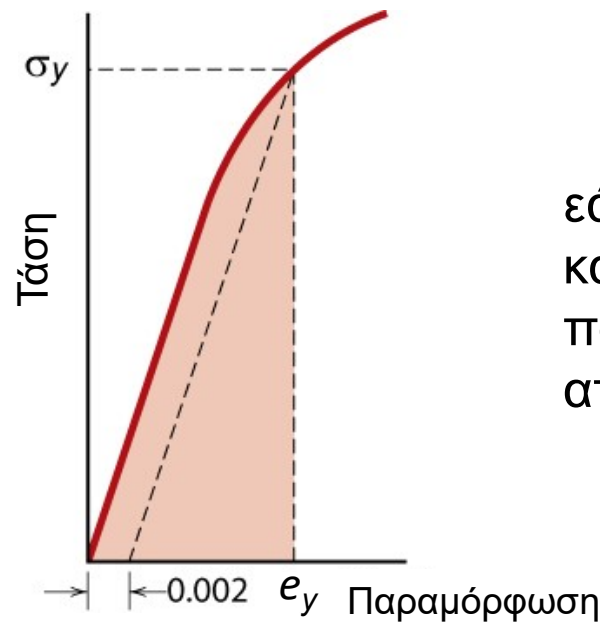


ψαθυρή θραύση: ελαστική ενέργεια

όλκιμη θραύση: ελαστική + πλαστική ενέργεια

Επανάταξη, U_r

- Ικανότητα ενός υλικού να αποθηκεύει ενέργεια
 - βέλτιστη αποθήκευση ενέργειας στην ελαστική περιοχή

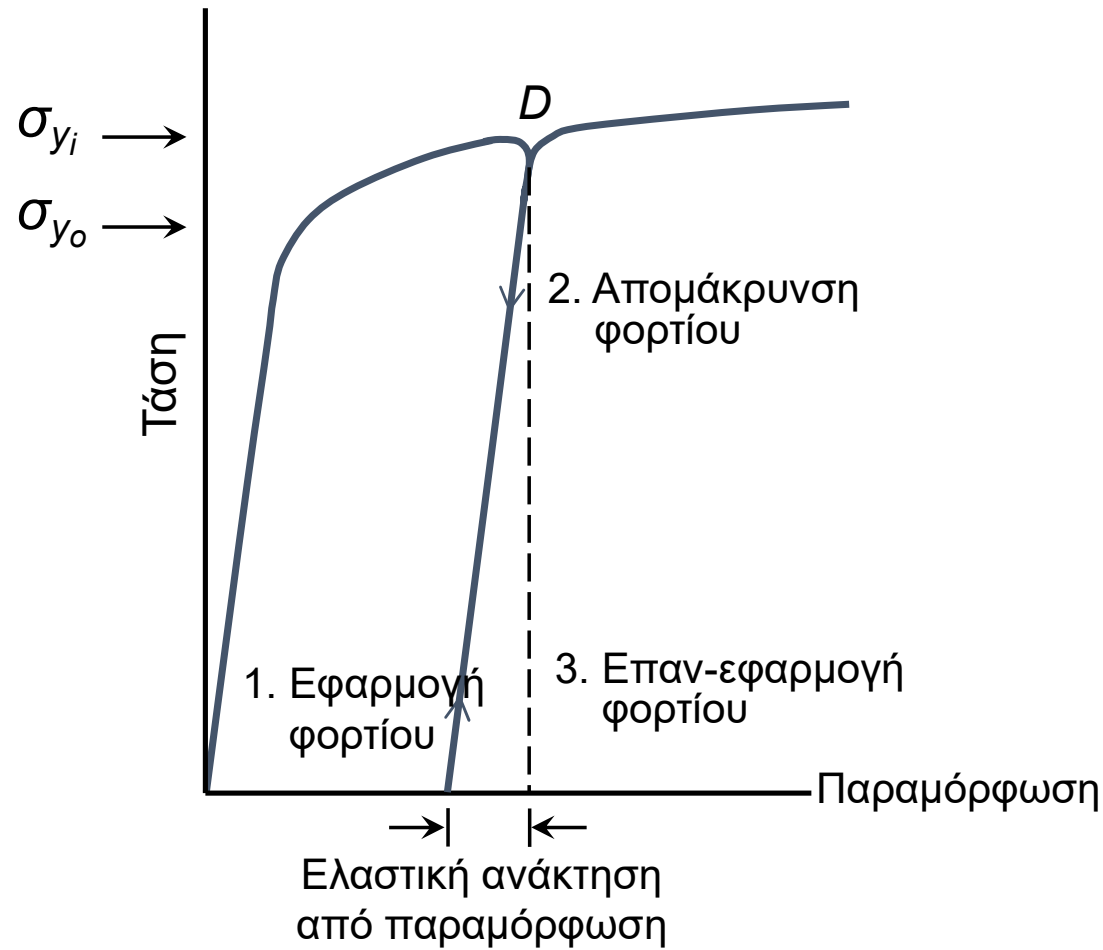


$$U_r = \int_0^{\epsilon_y} \sigma \, d\epsilon$$

εάν υποθέσουμε γραμμική
καμπύλη τάσης-
παραμόρφωσης, η σχέση
απλοποιείται στην

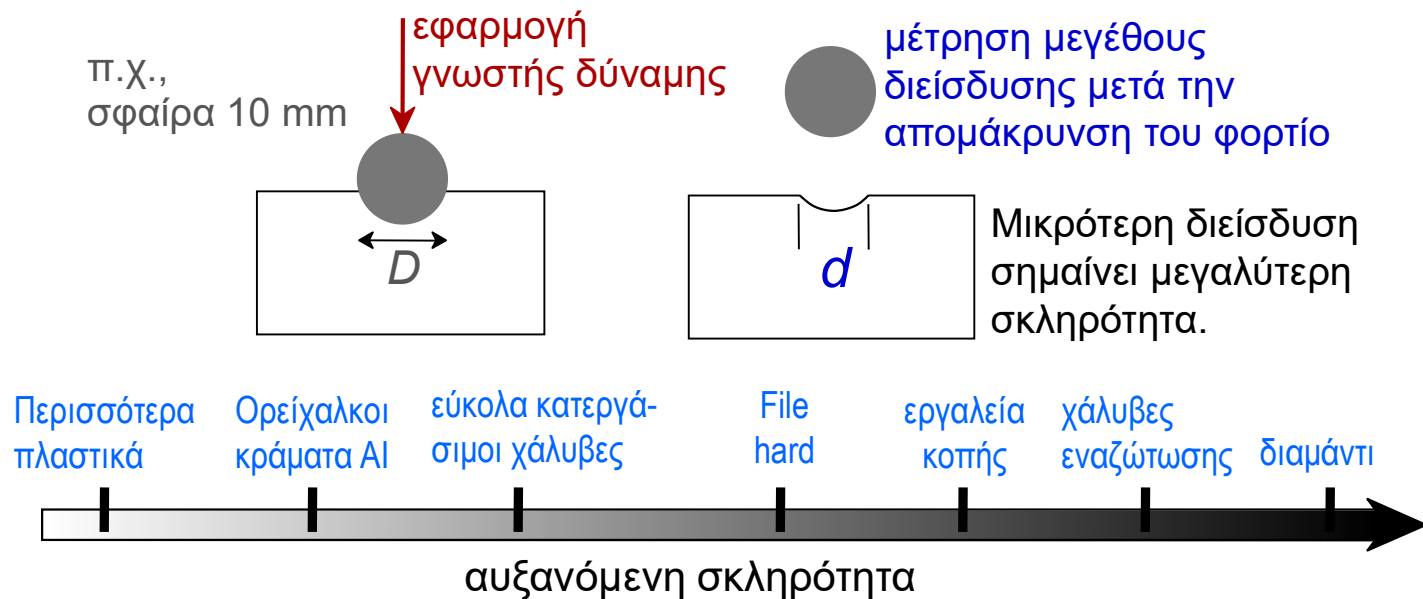
$$U_r \cong \frac{1}{2} \sigma_y \epsilon_y$$

Ελαστική ανάκτηση από παραμόρφωση



Σκληρότητα

- Αντίσταση σε μόνιμη παραμόρφωση (διείσδυση) της επιφάνειας.
- Μεγάλη σκληρότητα σημαίνει:
 - αντίσταση σε πλαστική παραμόρφωση ή σχηματισμός ρωγμών in θλίψη.
 - καλύτερες ιδιότητες ως προς τη φθορά.



Μέτρηση σκληρότητας

- Δοκιμή Rockwell

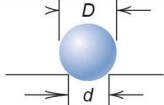
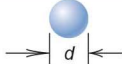
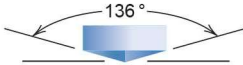
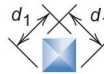
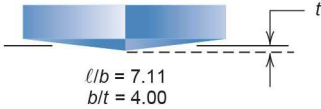
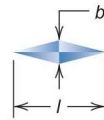
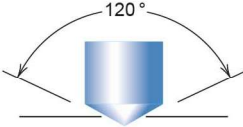
- Δεν προκαλεί εκτεταμένη καταστροφή του δείγματος
- Κάθε κλίμακα φτάνει έως το 130, αλλά είναι χρήσιμη μόνο στο εύρος τιμών 20-100.
- Μικρότερο φορτίο 10 kg
- Μεγαλύτερο φορτίο 60 (α), 100 (β) & 150 (γ) kg
 - Α = διαμάντι, Β = χαλύβδ. σφαίρα 1/16 in., Γ = διαμάντι

- HB = Σκληρότητα Brinell

- $TS \text{ (psia)} = 500 \times HB$
- $TS \text{ (MPa)} = 3.45 \times HB$

Μέτρηση σκληρότητας (συνέχεια)

Πίνακας 6.5

Δοκιμή	Διεσδυτής	Σχήμα αποτύπωσης		Φορτίο	Μαθηματικοί τύποι για τον αριθμό σκληρότητας ^a
		Πλάγια όψη	Κάτοψη		
Brinell	Σφαίρα 10 mm από χάλυβα ή καρβίδιο βολφραμίου			P	$HB = \frac{2P}{\pi D [D - 2 \sqrt{D^2 - d^2}]}$
Vickers μικροσκληρότητα	Διαμαντένια πυραμίδα			P	$HV = 1.854 P/d_1^2$
Κnoop μικροσκληρότητα	Διαμαντένια πυραμίδα			P	$HK = 14.2 P/l^2$
Rockwell και επιφανειακή Rockwell	Διαμαντένιος κώνος: χαλύβδινες σφαίρες διαμέτρου 1.588, 3.175, 6.350 και 12.70mm	 	 	60 kg } 100 kg } Rockwell 150 kg } 15 kg } 30 kg } Επιφανειακή Rockwell 45 kg }	

Πραγματική τάση & πραγματική παραμόρφωση

- Πραγματική τάση

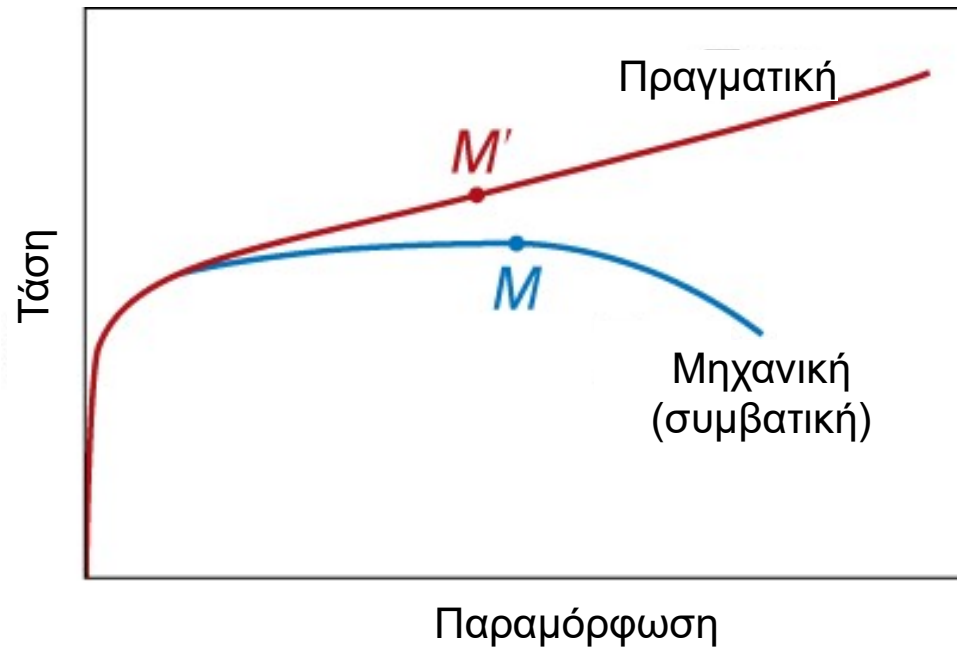
$$\sigma_T = F/A_i$$

- Πραγματική παραμόρφωση

$$\epsilon_T = \ln(\ell_i/\ell_o)$$

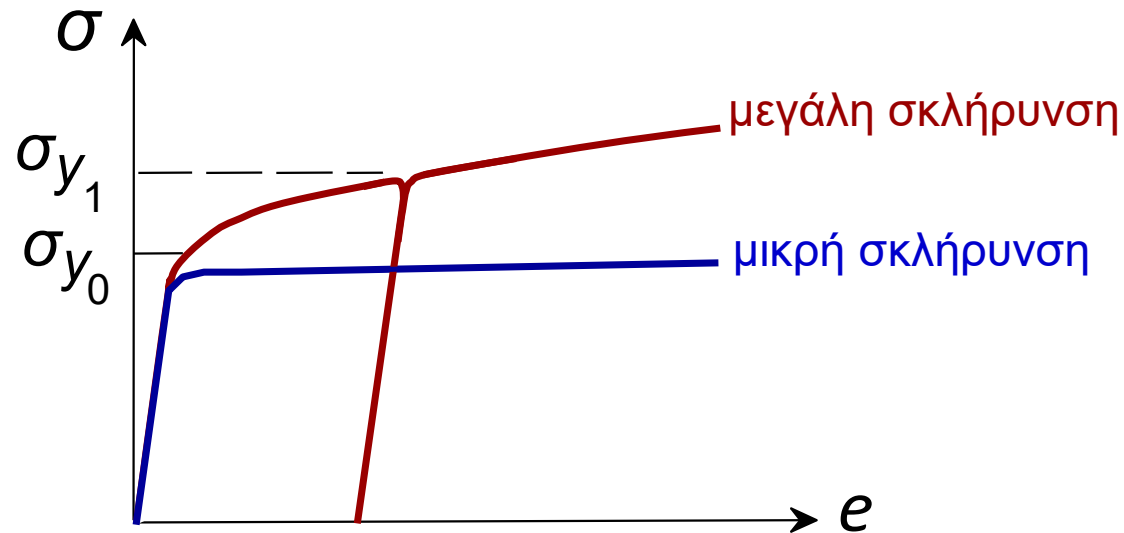
$$\sigma_T = \sigma(1 + \epsilon)$$

$$\epsilon_T = \ln(1 + \epsilon)$$



Σκλήρυνση με ενδοτράχυνση (κράτυνση)

- Αύξηση της σ_y λόγω πλαστικής παραμόρφωσης.



- Προσαρμογή καμπύλης στην απόκριση τάσης-παραμόρφωσης:

$$\sigma_T = K(e_T)^n$$

εκθέτης ενδοτράχυνσης (κράτυνσης):
 $n = 0.15$ (ορισμένοι χάλυβες)
έως $n = 0.5$ (ορισμένοι χαλκοί)

“πραγματική” τάση (F/A)

“πραγματική” παραμόρφωση: $\ln(\ell/\ell_0)$

Μεταβλητότητα των ιδιοτήτων των υλικών

- Το μέτρο ελαστικότητας είναι μία ιδιότητα των υλικών
- Οι “κρίσιμες” ιδιότητες εξαρτώνται, σε μεγάλο βαθμό, από τις ατέλειες του εκάστοτε δείγματος υλικού.
- Πιθανή μεγάλη μεταβλητότητα από δείγμα σε δείγμα.
- Συνυπολογίζεται μέσω στατιστικών μεγεθών

- Μέση τιμή

$$\bar{X} = \frac{\sum_{n=1}^n X_n}{n}$$

- Τυπική απόκλιση

$$S = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{X})^2}{n-1} \right]^{\frac{1}{2}}$$

όπου n το πλήθος των σημείων δεδομένων

Σχεδιασμός και παράγοντες ασφαλείας

- Αβεβαιότητες στη φάση του σχεδιασμού, ανάγκη προστασίας έναντι αναπάντεχης αστοχίας.
- Παράγοντας ασφαλείας, N

$$\sigma_{\text{λειτουργίας}} = \frac{\sigma_y}{N}$$

συνήθως μεταξύ 1.2 και 4

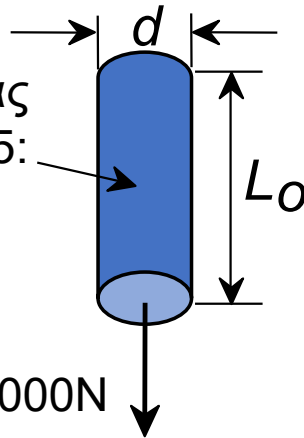
- Παράδειγμα: Να υπολογιστεί η απαιτούμενη διάμετρος για τη ράβδο από ανθρακοχάλυβα 1045, ώστε να αποκλειστεί πιθανή διαρροή, χρησιμοποιώντας παράγοντα ασφαλείας 5.

$$\frac{220,000\text{N}}{\pi(d^2/4)} = \frac{\sigma_y}{5}$$

ανθρακοχάλυβας 1045:
 $\sigma_y = 310 \text{ MPa}$
 $TS = 565 \text{ MPa}$

$F = 220,000\text{N}$

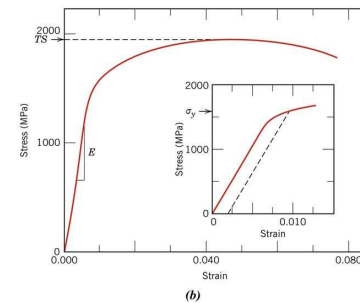
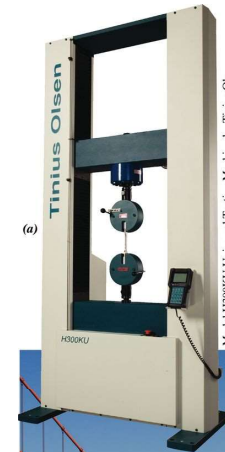
$d = 0.067 \text{ m} = 6.7 \text{ cm}$





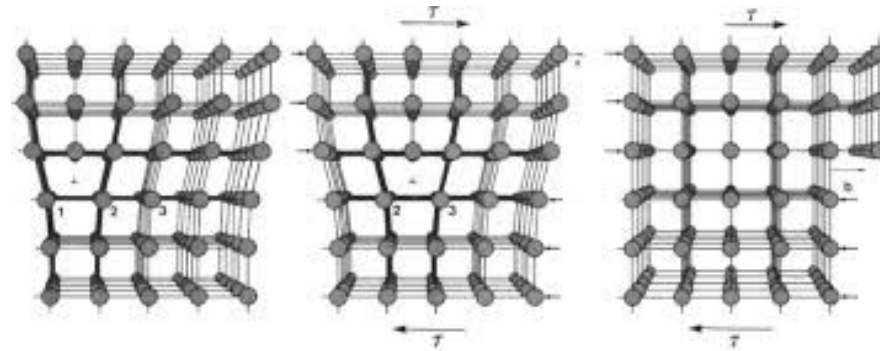
ΣΥΝΟΨΗ

- **Τάση** και **παραμόρφωση**: Ανεξάρτητα από το μέγεθος μέτρα του φορτίου (καταπόνηση) και της απόκλισης (μετατόπισης), αντίστοιχα.
- **Ελαστική** συμπεριφορά: Αντιστρεπτή συμπεριφορά, συνήθως εκφράζεται με γραμμική σχέση μεταξύ τάσης και παραμόρφωσης. Για ελαχιστοποίηση της παραμόρφωσης, θα πρέπει να επιλέγεται υλικό με μεγάλο μέτρο ελαστικότητας (E ή G).
- **Πλαστική** συμπεριφορά: Μόνιμη παραμόρφωση, εμφανίζεται όταν η εφελκυστική (ή θλιπτική) μονοαξονική τάση φτάνει στο όριο σ_y .
- **Δυσθραυστότητα**: Η ενέργεια που απαιτείται για θραύση μοναδιαίου όγκου ενός υλικού.
- **Ολκιμότητα**: Βαθμός πλαστικής παραμόρφωσης ενός υλικού στο όριο θραύσης.



(c)

Διαταραχές και Μηχανισμοί Ισχυροποίησης

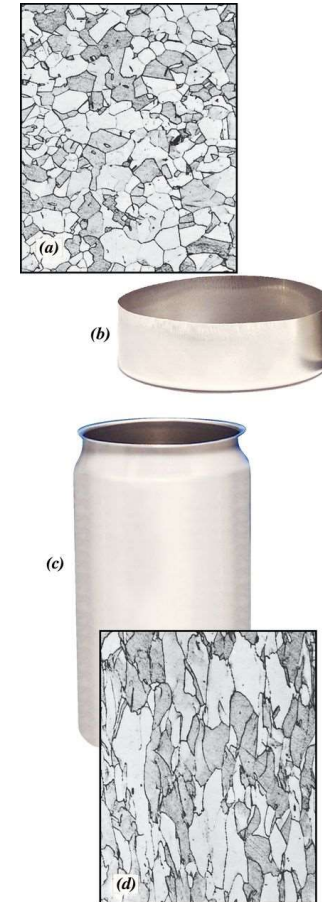


Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- Γιατί το πλήθος των διαταραχών είναι μεγαλύτερο στα μέταλλα;
- Πώς σχετίζεται η αντοχή των υλικών με την κίνηση των διαταραχών;
- Γιατί η θερμότητα μεταβάλλει την αντοχή και άλλες ιδιότητες των υλικών;



The photomicrographs in figures (a) and (d) are taken from W. G. Moffatt, G. W. Pearsall, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. 1, Structure, John Wiley & Sons, 1964. Reproduced with permission of Janet M. Moffatt. Figures (b) and (c) © William D. Callister, Jr.

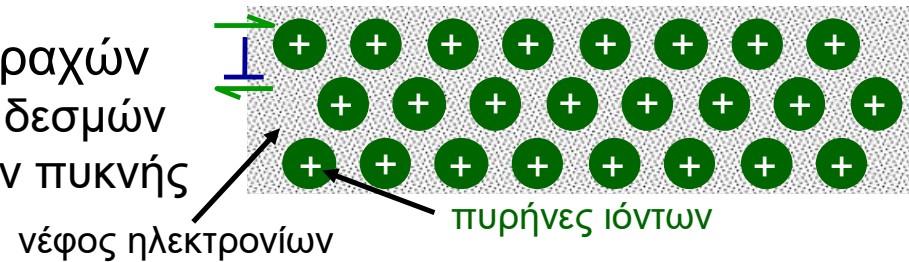
ΔΙΑΤΑΡΑΧΕΣ

Διαταραχές & κατηγορίες υλικών

- Μέταλλα (Cu, Al):

Ευκολότερη κίνηση διαταραχών

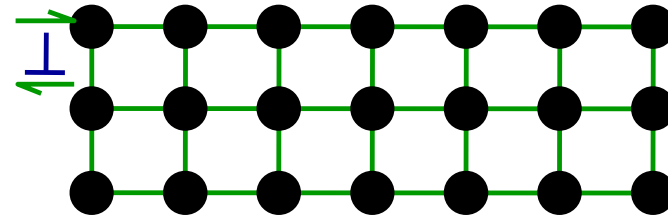
- ύπαρξη μη-κατευθυντικών δεσμών
- διαθεσιμότητα διευθύνσεων πυκνής διάταξης για ολίσθηση



- Κεραμικά (ομοιοπολ. δεσμοί)

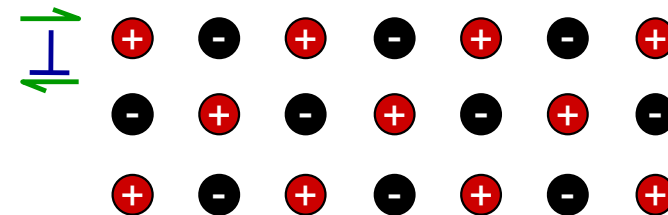
(Si, διαμάντι):

- δύσκολη κίνηση
- κατευθυντικοί δεσμοί



- Κεραμικά (ιοντικοί δεσμοί NaCl):

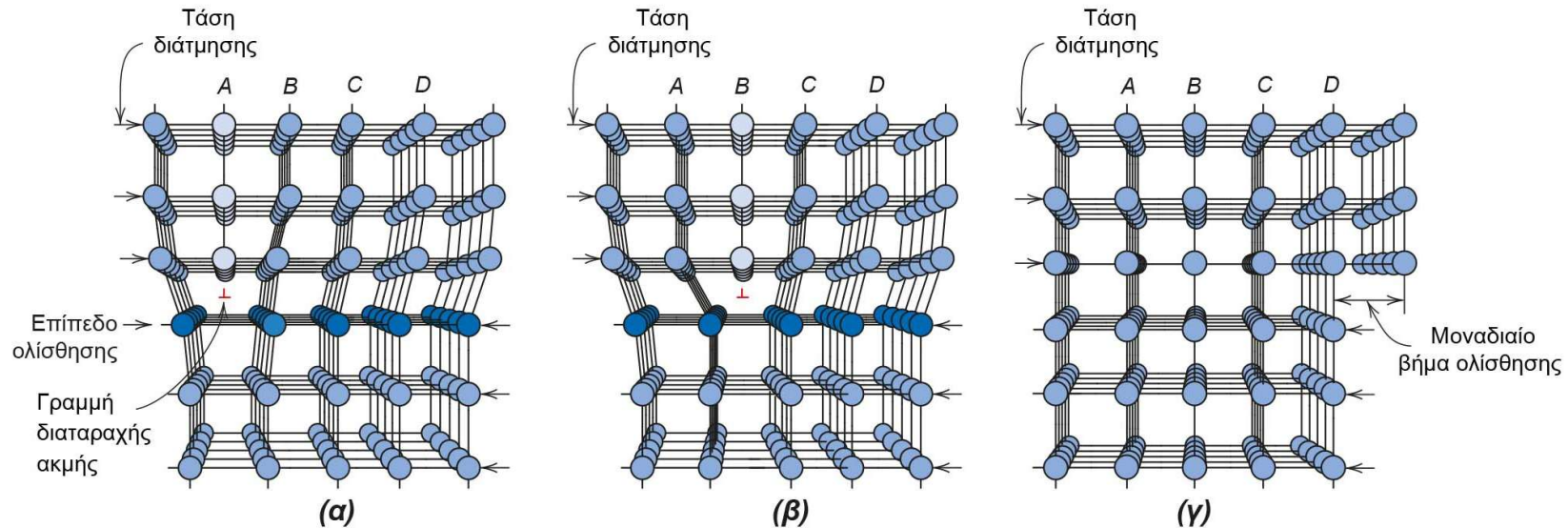
- δύσκολη κίνηση
- απαιτείται αποφυγή πλησιέστερων γειτόνων ίδιου φορτίου (-, +)



Κίνηση διαταραχών

Πλαστική παραμόρφωση: Κίνηση μεγάλου αριθμού διαταραχών

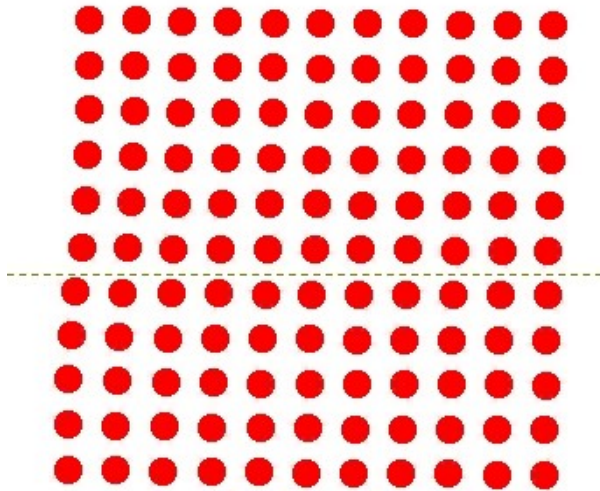
- Μέταλλα – πλαστική παραμόρφωση συμβαίνει λόγω **ολίσθησης** – μία διαταραχή ακμής (πρόσθετο ημιεπίπεδο ατόμων) μετακινείται, ολισθαίνοντας, σε παρακείμενα ημιεπίπεδα ατόμων.



- Εάν δεν υπάρχει δυνατότητα μετακίνησης των διαταραχών, δεν συμβαίνει πλαστική παραμόρφωση!

Κίνηση διαταραχών ακμής

- Η μετακίνηση διαταραχών συνίσταται στη διαδοχική “ώθηση” ενός ημιεπιπέδου ατόμων (από αριστερά προς τα δεξιά στο σχήμα).
- Στα διαδοχικά ολισθαίνοντα επίπεδα, οι δεσμοί “σπάνε” και αναδημιουργούνται.

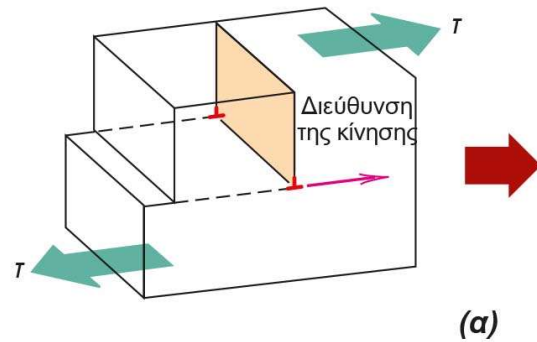


Σχηματική αναπαράσταση, σε επίπεδο ατόμων, της μετακίνησης μιας διαταραχής ακμής από αριστερά προς τα δεξιά υπό την επίδραση διάτμησης.

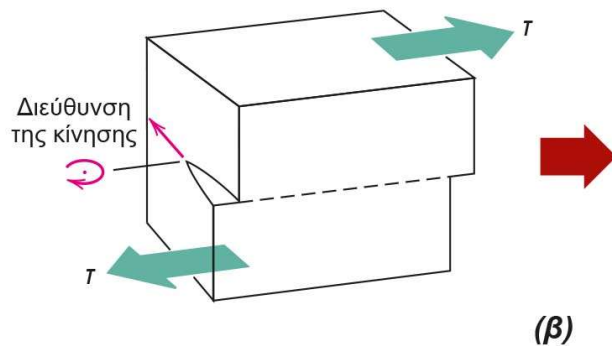
(Πηγή: P.M. Anderson)

Κίνηση διαταραχών

- Μία διαταραχή μετακινείται κατά μήκος ενός **επιπέδου ολίσθησης**, σε **διεύθυνση ολίσθησης** κάθετη προς τη γραμμή της διαταραχής
- Η διεύθυνση ολίσθησης είναι ίδια με τη διεύθυνση του **διανύσματος Burgers**



Διαταραχή ακμής

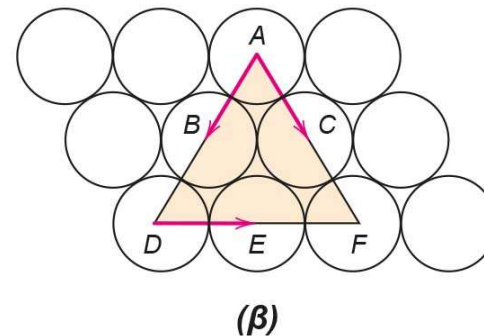
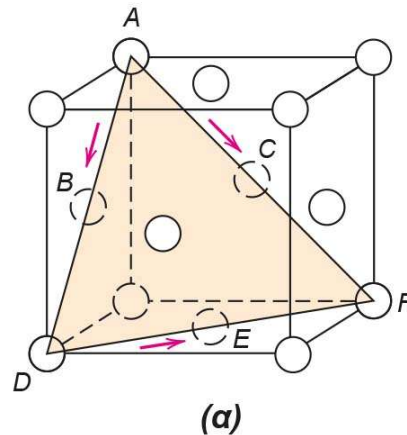


Ελικοειδής διαταραχή

Μηχανισμοί παραμόρφωσης

Σύστημα ολίσθησης

- **Επίπεδο ολίσθησης** - επίπεδο στο οποίο συμβαίνει ευκολότερα ολίσθηση
 - Μέγιστες επίπεδες πυκνότητες (και μεγάλες αποστάσεις μεταξύ επιπέδων)
- **Διευθύνσεις ολίσθησης** - διευθύνσεις κίνησης
 - Μέγιστες γραμμικές πυκνότητες

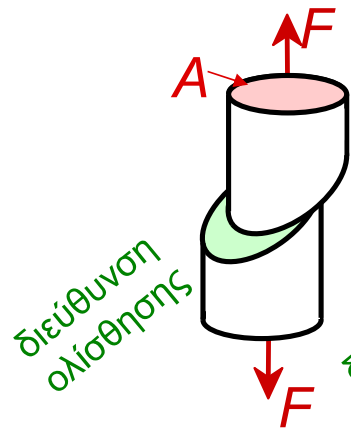


- Δομή FCC: Ολίσθηση συμβαίνει σε κρυσταλλογραφικά επίπεδα $\{111\}$, στις διευθύνσεις $\langle 110 \rangle$ (αμφότερα πυκνής διάταξης)
 - => συνολικά 12 συστήματα ολίσθησης σε κρυστάλλους FCC
- Δομές BCC & HCP: υπάρχουν άλλα συστήματα ολίσθησης

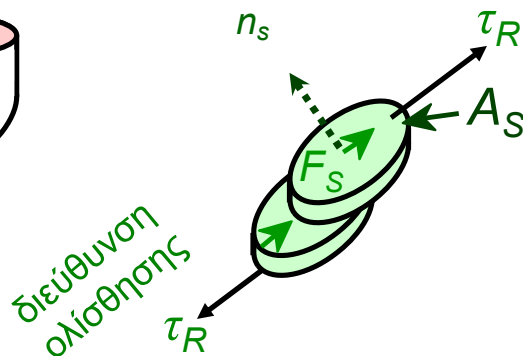
Τάση και κίνηση διαταραχών

- Ανηγμένη διατμητική τάση, τ_R
 - προκύπτει από εφαρμοζόμενες εφελκυστικές τάσεις

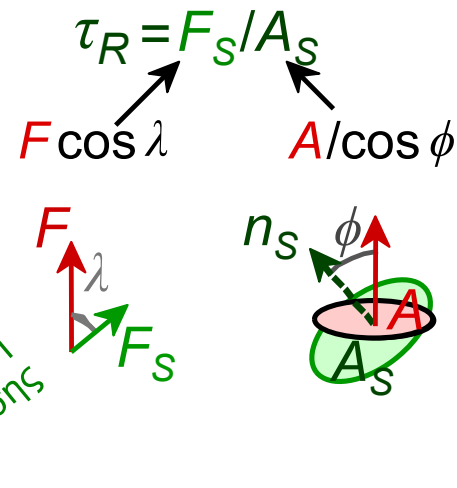
Εφαρμοζόμενη
εφελκυστική
τάση: $\sigma = F/A$



Ανηγμένη διατμ.
τάση: $\tau_R = F_S/A_S$



Σχέση μεταξύ
 σ και τ_R



$$\tau_R = \sigma \cos \lambda \cos \phi$$

Κρίσιμη ανηγμένη διατμητική τάση

- Συνθήκη για κίνηση διαταραχών:
- Η ευκολία κίνησης διαταραχών εξαρτάται από τον κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό

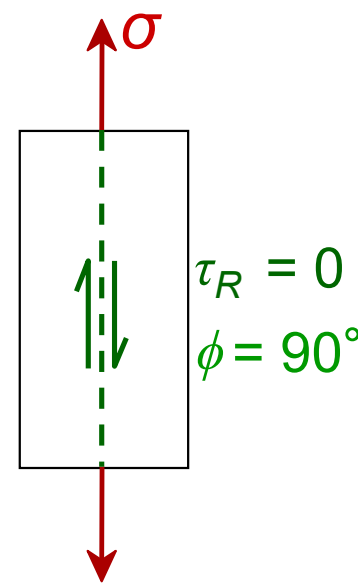
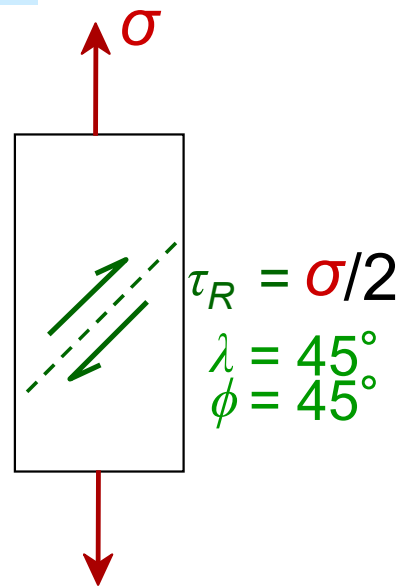
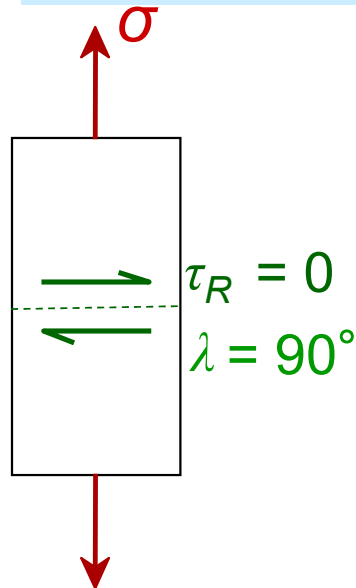
κρίσιμη αναλυμένη
διατμητική τάση
(critical resolved
shear stress)

$$\tau_R > \tau_{CRSS}$$

↑
ΤΥΠΙΚΑ

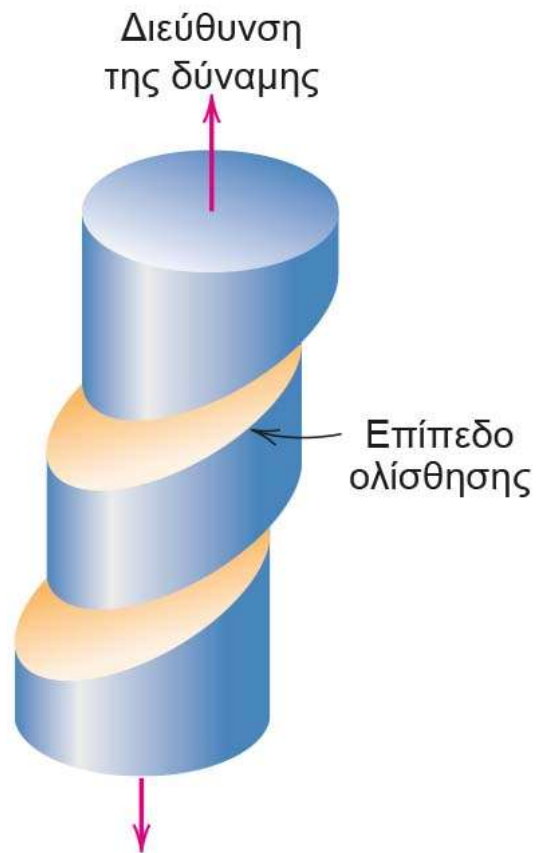
10^{-4} GPa έως 10^{-2} GPa

$$\tau_R = \sigma \cos \lambda \cos \phi$$

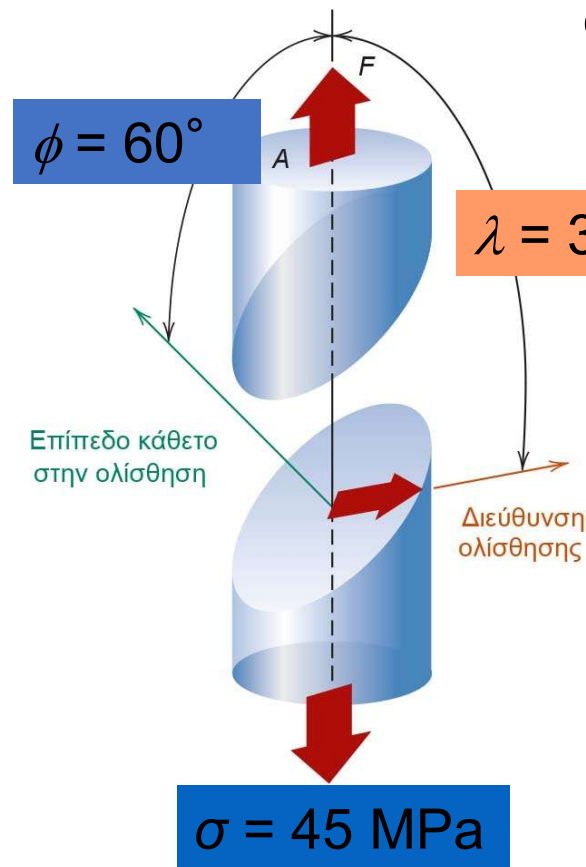


τ μέγιστη σε $\lambda = \phi = 45^\circ$

Ολίσθηση σε μονοκρυστάλλους



Παράδειγμα: Παραμόρφωση μονοκρυστάλλου



- α) Θα υποστεί διαρροή ο μονοκρύσταλλος;
β) Εάν όχι, πόση τάση απαιτείται;

$$\tau_{\text{crss}} = 20.7 \text{ MPa}$$

$$\tau = \sigma \cos \lambda \cos \phi$$

$$\sigma = 45 \text{ MPa}$$

$$\begin{aligned} \tau &= (45 \text{ MPa}) (\cos 35^\circ) (\cos 60^\circ) \\ &= (45 \text{ MPa}) (0.41) \end{aligned}$$

$$\tau = 18.4 \text{ MPa} < \tau_{\text{crss}} = 20.7 \text{ MPa}$$

Επομένως, εφαρμοζόμενη τάση 45 MPa δεν προκαλεί διαρροή στον κρύσταλλο.

Παράδειγμα: Παραμόρφωση μονοκρυστάλλου

Πόση τάση απαιτείται (δηλ., πόση είναι η τάση διαρροής, σ_y);

$$\tau_{\text{crss}} = 20.7 \text{ MPa} = \sigma_y \cos \lambda \cos \phi = \sigma_y (0.41)$$

$$\therefore \sigma_y = \frac{\tau_{\text{crss}}}{\cos \lambda \cos \phi} = \frac{20.7 \text{ MPa}}{0.41} = \underline{\underline{50.5 \text{ MPa}}}$$

Επομένως, για να συμβεί παραμόρφωση, η εφαρμοζόμενη τάση πρέπει να είναι μεγαλύτερη από, ή ίση με την τάση διαρροής

$$\sigma \geq \sigma_y = 50.5 \text{ MPa}$$

Ολίσθηση σε πολυκρυσταλλικά υλικά

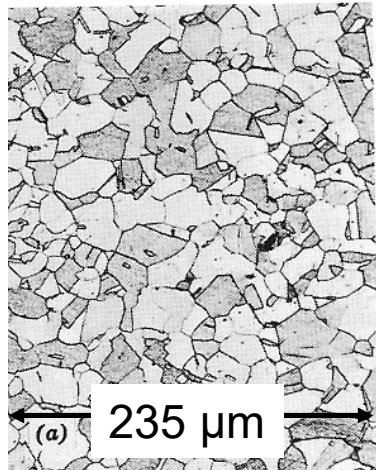
- Τα πολυκρυσταλλικά υλικά είναι ανθεκτικότερα από τα μονοκρυσταλλικά – τα όρια κόκκων παρεμποδίζουν την κίνηση των διαταραχών.
- Διαφοροποίηση επιπέδων & διευθύνσεων ολίσθησης (λ , ϕ) μεταξύ των κόκκων.
- Μεταβολή της τ_R μεταξύ των κόκκων.
- Διαρροή υφίστανται πρώτα οι κόκκοι με τη μεγαλύτερη τ_R .
- Διαρροή επέρχεται αργότερα για κόκκους με λιγότερο ευνοϊκό προσανατολισμό.



Ανισοτροπία χαρακτηριστικών: σ_y

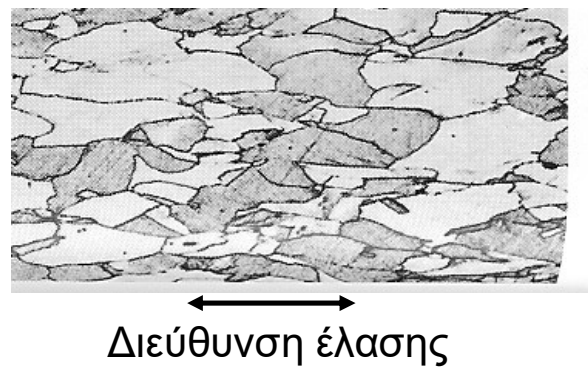
- Μπορεί να προκληθεί από έλαση πολυκρυσταλλικού μετάλλου

- προ έλασης



- ισότροπη
επειδή οι κόκκοι
είναι ισοαξονικοί
& τυχαίου
προσανατολισμού

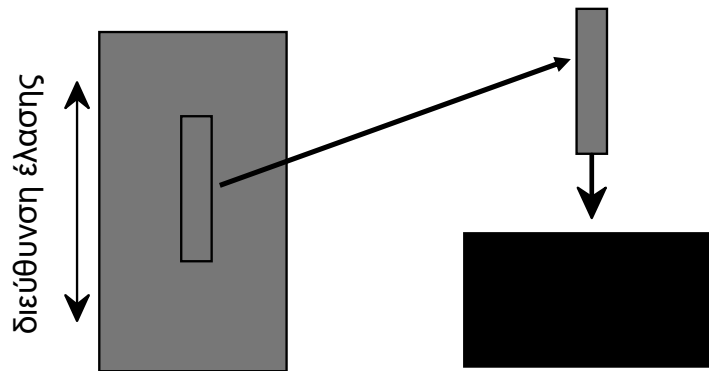
- μετά από έλαση



- ανισότροπη
επειδή η έλαση επηρεάζει
προσανατολισμό & σχήμα
κόκκων.

Ανισοτροπία χαρακτηριστικών: Παραμόρφωση

1. Κυλινδρικό
βλήμα, κοπή
από έλασμα
τανταλίου:

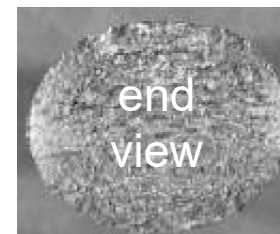


2. Εκτόξευση
βλήματος
σε στόχο.

3. Παραμόρφωση
κυλινδρικού σχήματος



ΦΩΤΟ: Πηγή:
G.T. Gray III, Los
Alamos National Labs.
Χρησιμοποιείται με
άδεια.



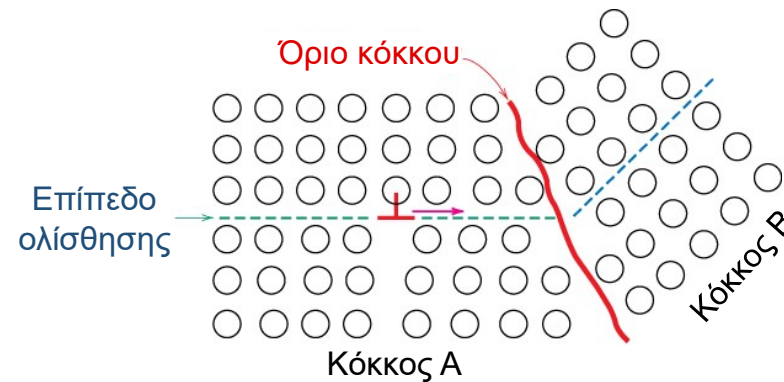
διεύθυνση
πάχους
ελάσματος

- Το μη-κυκλικό σχήμα του άκρου πρόσκρουσης υποδεικνύει ανισότροπη παραμόρφωση του υλικού.

ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΙ ΙΣΧΥΡΟΠΟΙΗΣΗΣ

Στρατηγικές ισχυροποίησης, 1: Μείωση μεγέθους κόκκων

- Τα όρια κόκκων λειτουργούν ως εμπόδια για την ολίσθηση.
- Η "ισχύς" των εμποδίων αυξάνεται αυξανόμενης της διαφοράς προσανατολισμού.
- Μικρότερο μέγεθος κόκκων: περισσότερα εμπόδια για την ολίσθηση.

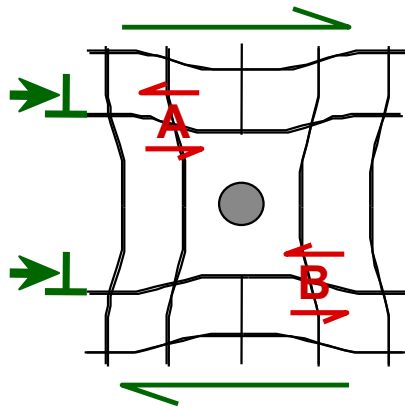


- Εξίσωση Hall-Petch:

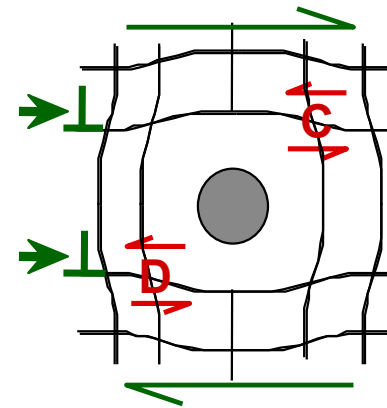
$$\sigma_{yield} = \sigma_0 + k_y d^{-1/2}$$

Στρατηγικές ισχυροποίησης, 2: Δημιουργία στερεών διαλυμάτων

- Τα άτομα πρόσμειξης ασκούν εφελκυστικές ή θλιπτικές τάσεις στα γειτονικά τους & εισάγουν παραμορφώσεις στο πλέγμα.
- Αυτές οι παραμορφώσεις λειτουργούν ως εμπόδια στην κίνηση των διαταραχών.
- Μικρότερο άτομο πρόσμειξης (αντικατάστασης)
- Μεγαλύτερο άτομο πρόσμειξης (αντικατάστασης)

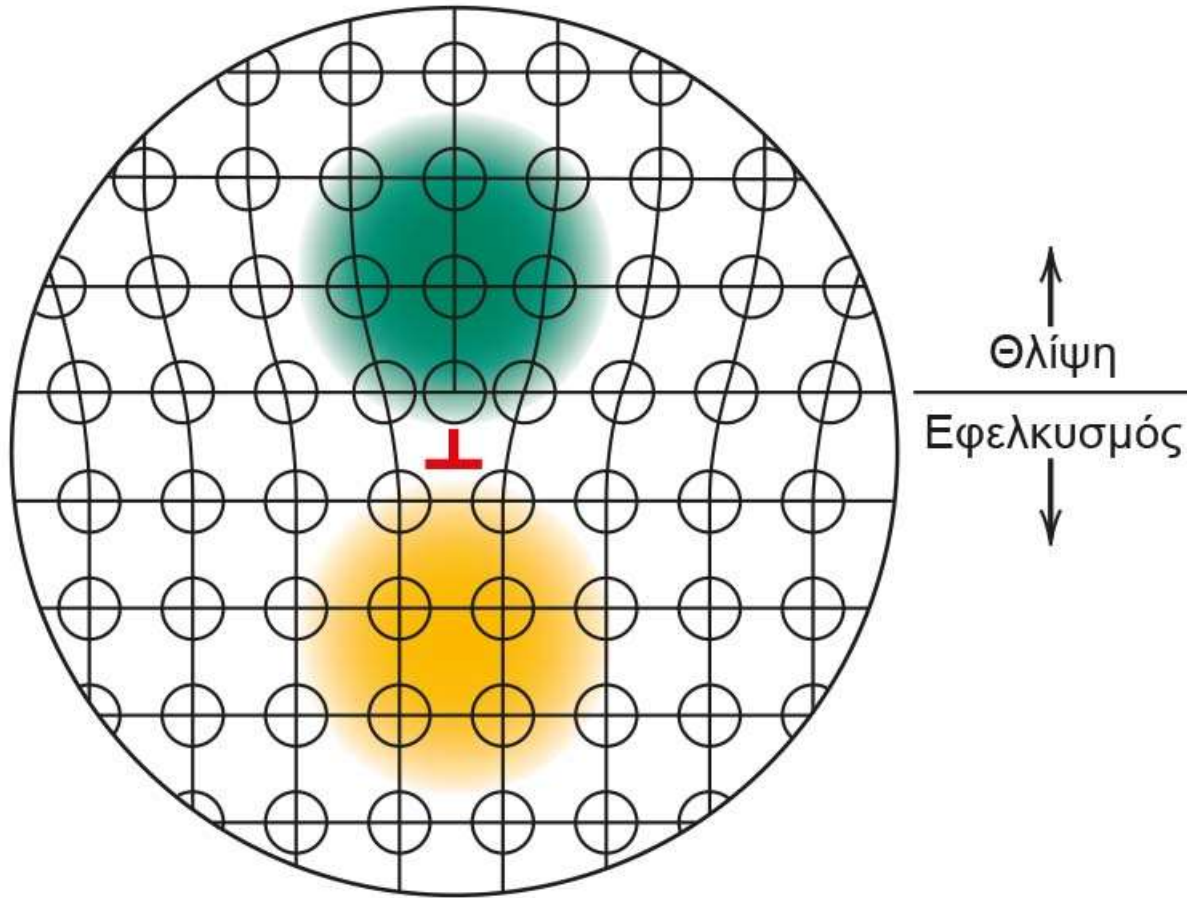


Το άτομο πρόσμειξης προκαλεί τοπική τάση στα **A** και **B** η οποία αντενεργεί στην κίνηση των διαταραχών προς τα δεξιά.



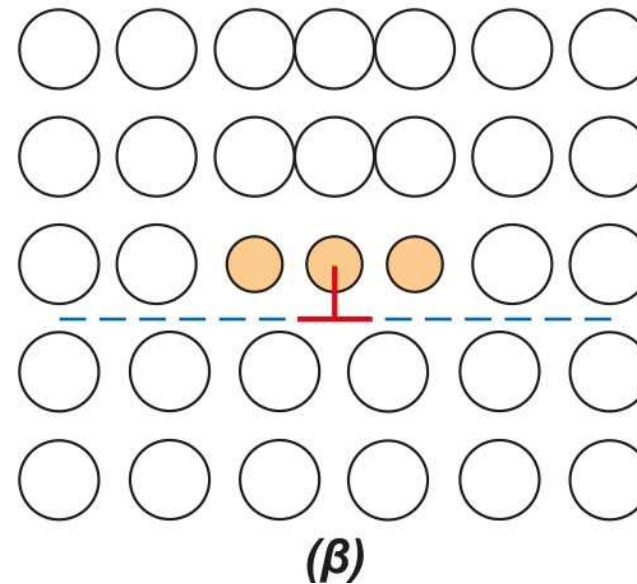
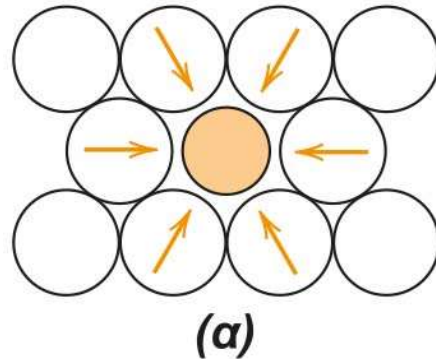
Το άτομο πρόσμειξης προκαλεί τοπική τάση στα **C** και **D** η οποία αντενεργεί στην κίνηση των διαταραχών προς τα δεξιά.

Παραμόρφωση του πλέγματος γύρω από τις διαταραχές



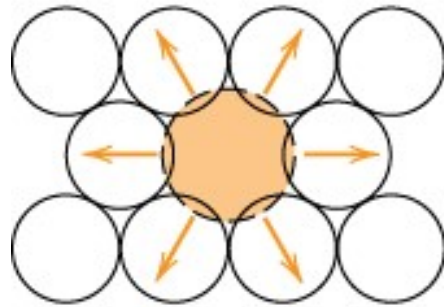
Ισχυροποίηση μέσω κραμάτωσης (στερεά διαλύματα)

- Μικρά άτομα πρόσμειξης τείνουν να συγκεντρώνονται στις διαταραχές (περιοχές θλιπτικής παραμόρφωσης)
 - μερική ακύρωση των θλιπτικών παραμορφώσεων από τις διαταραχές και των εφελκυστικών παραμορφώσεων από τα άτομα πρόσμειξης
- Μείωση της ευκινησίας των διαταραχών και αύξηση αντοχής

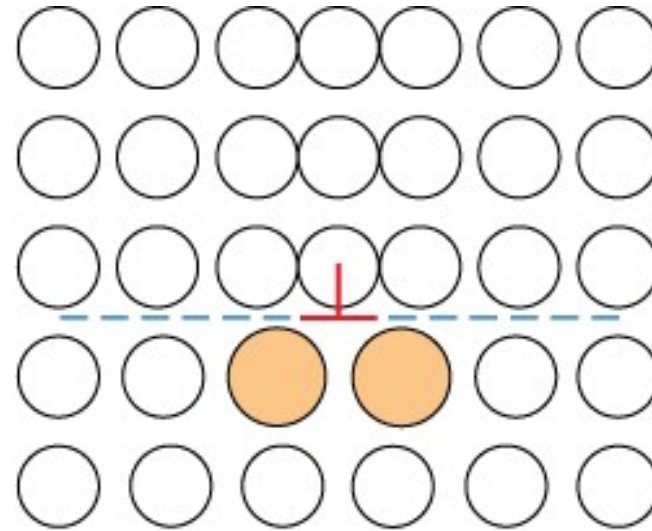


Ισχυροποίηση μέσω κραμάτωσης (στερεά διαλύματα)

- Μεγάλα άτομα πρόσμειξης τείνουν να συγκεντρώνονται στις διαταραχές (περιοχές εφελκυστικής παραμόρφωσης)



(α)



(β)

Ισχυροποίηση στερεού διαλύματος (προσομοίωση στο VMSE)

[Main Menu](#)

Solid-Solution Strengthening

[Help](#)

This module allows you to observe the mechanism of solid solution strengthening by viewing animations, which are accompanied with voice-overs.



Pure



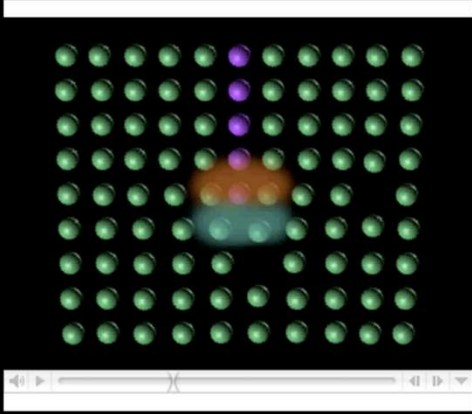
Larger



Smaller



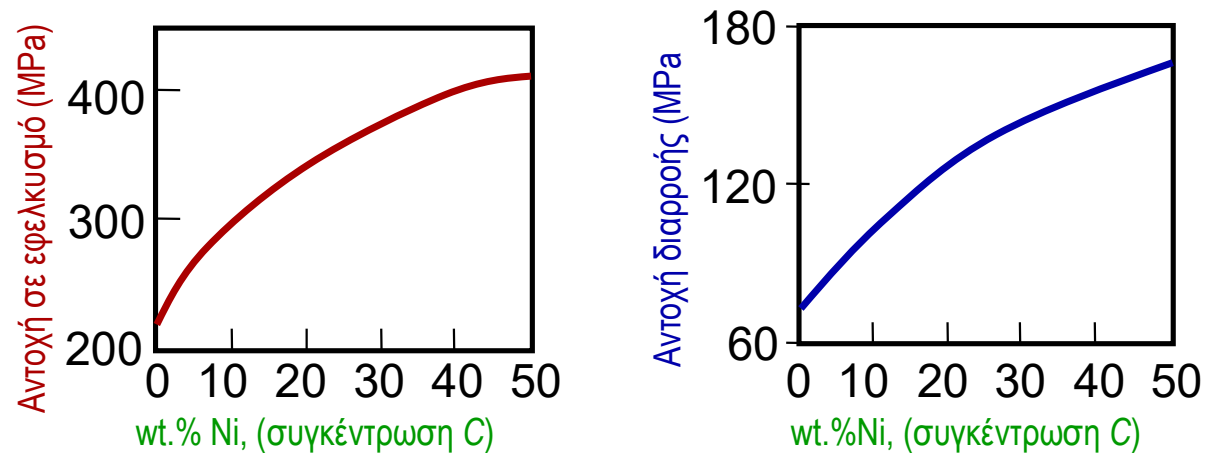
Interstitial



Please be patient. This may take a few minutes to load depending on your connection speed.

Παράδειγμα: Ισχυροποίηση χαλκού με κραμάτωση

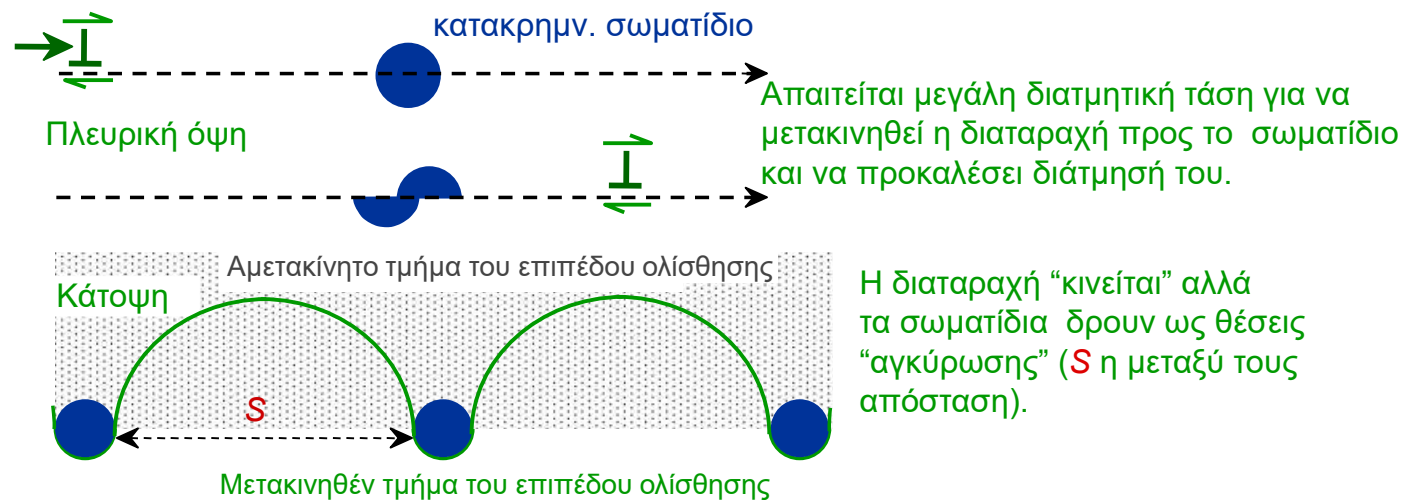
- Η αντοχή σε εφελκυσμό και η αντοχή διαρροής αυξάνονται με την αύξηση της περιεκτικότητας σε Ni.



- Εμπειρική σχέση: $\sigma_y \sim C^{1/2}$
- Η κραμάτωση αυξάνει τα σ_y και TS .

Στρατηγικές ισχυροποίησης, 3: Σκλήρυνση με κατακρήμνιση

- Ανάπτυξη κατακρημνισμένων σωματιδίων από υλικό μεγάλης σκληρότητας (π.χ. κεραμικό) καθιστά δύσκολη τη διάτμηση. Π.χ.: Καρβίδιο πυριτίου (SiC) σε σίδηρο ή αλουμίνιο.



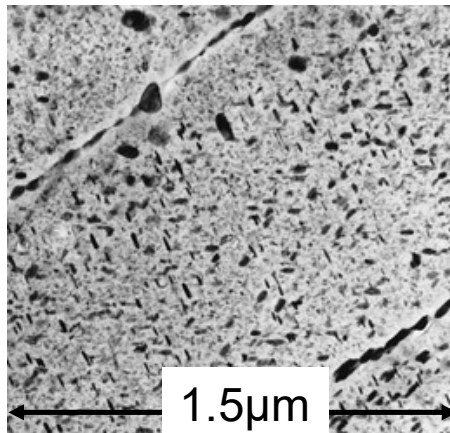
- Αποτέλεσμα: $\sigma_y \sim \frac{1}{S}$

Εφαρμογή: Σκλήρυνση με κατακρήμνιση

- Κύρια πτέρυγα αεροσκαφών Boeing 767



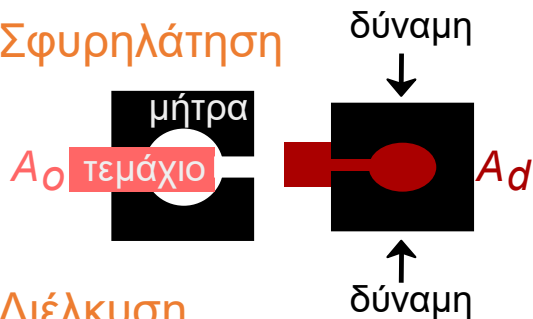
- Η εσωτερική δομή του αλουμινίου ισχυροποιείται με σωματίδια (κατακρημνίσματα), τα οποία σχηματίζονται με κραμάτωση.



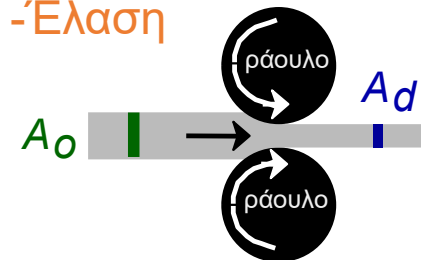
Στρατηγικές ισχυροποίησης, 4: Σκλήρυνση με ενδοτράχυνση (ψυχρηλασία)

- Πλαστική παραμόρφωση σε θερμοκρασία δωματίου (για τα περισσότερα μέταλλα).
- Τυπικές κατεργασίες μορφοποίησης μειώνουν την επιφάνεια διατομής του κατεργαζόμενου τεμαχίου:

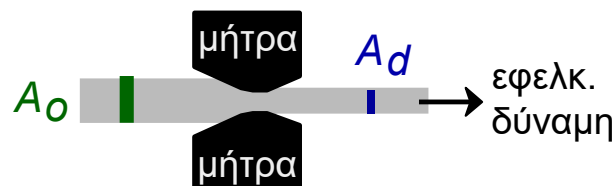
-Σφυρηλάτηση



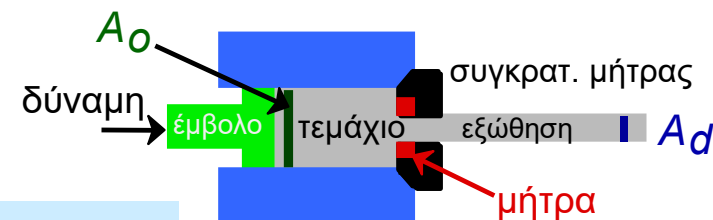
-Έλαση



-Διέλκυση



-Εξώθηση

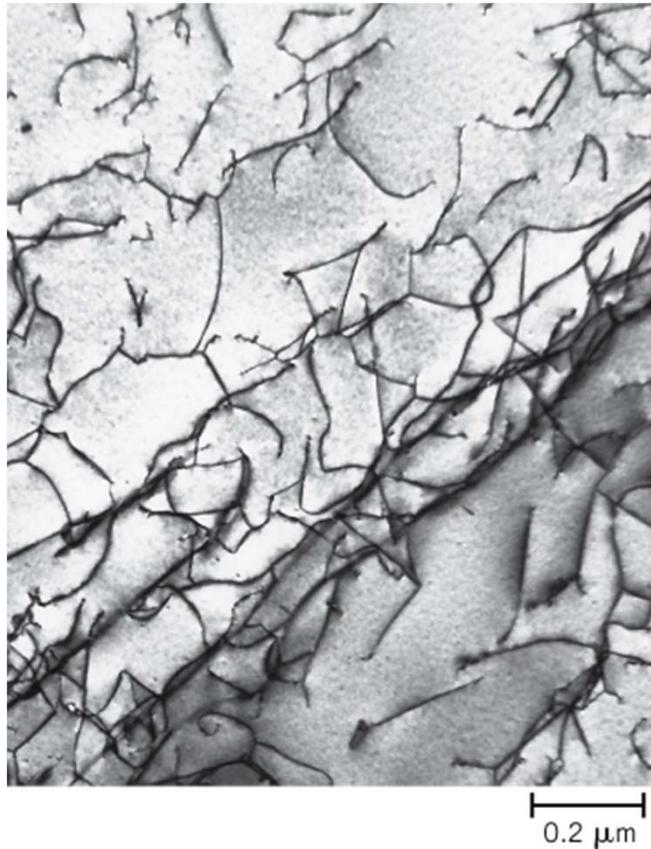


- Βαθμός ψυχρηλασίας:

$$\%CW = \frac{A_o - A_d}{A_o} \times 100$$

Ψυξηλασία και μεταβολή της δομής των διαταραχών

- Δομή διαταραχών σε εν ψυχρώ κατεργασμένο τεμάχιο Ti.



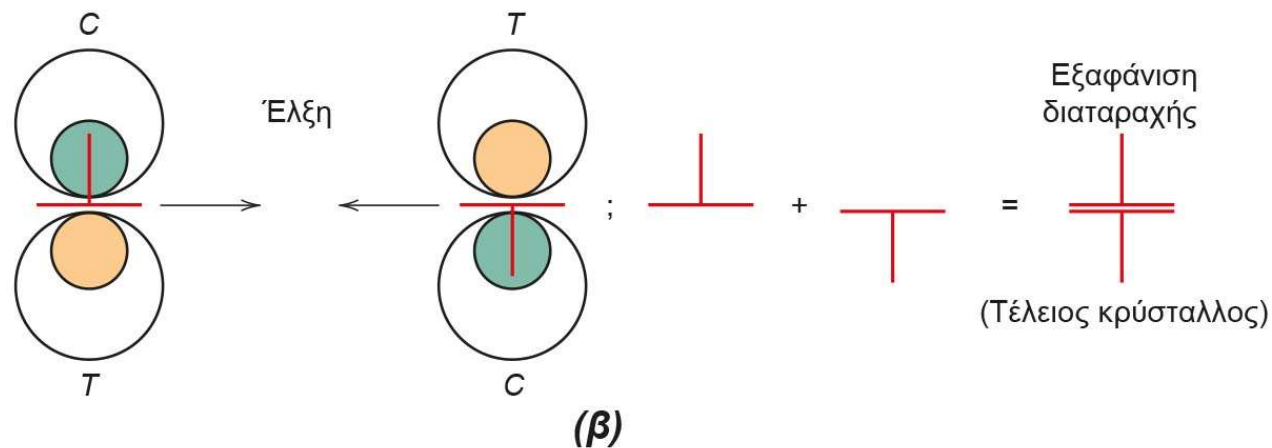
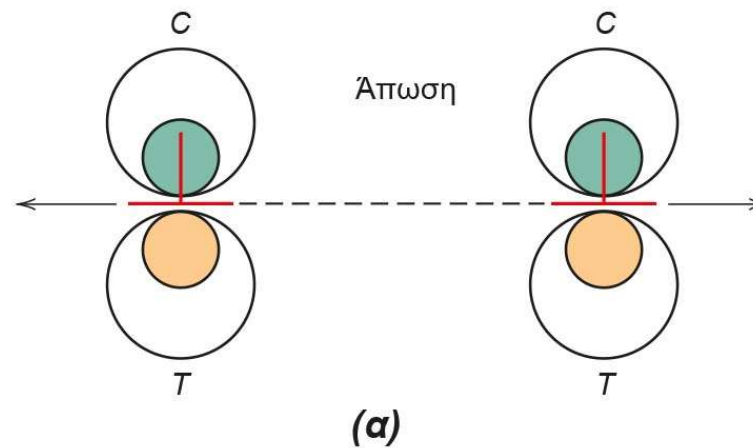
- Η ψυξηλασία οδηγεί σε “διεμπλοκή” των διαταραχών.
- Η κίνηση των διαταραχών καθίσταται πιο δύσκολη.

Ψυχρηλασία και πυκνότητα διαταραχών

$$\text{Πυκνότητα διαταραχών} = \frac{\text{ολικό μήκος διαταραχής}}{\text{μοναδιαίος όγκος}}$$

- Μονοκρύσταλλοι από ελεγχόμενη ανάπτυξη
→ περίπου 10^3 mm^{-2}
 - Εφαρμογή παραμόρφωσης => αύξηση πυκνότητας διαταραχών
→ $10^9\text{-}10^{10} \text{ mm}^{-2}$
 - Θερμική κατεργασία => μείωση πυκνότητας διαταραχών
→ $10^5\text{-}10^6 \text{ mm}^{-2}$
- Η τάση διαρροής αυξάνεται αυξανόμενης της ρ_d :

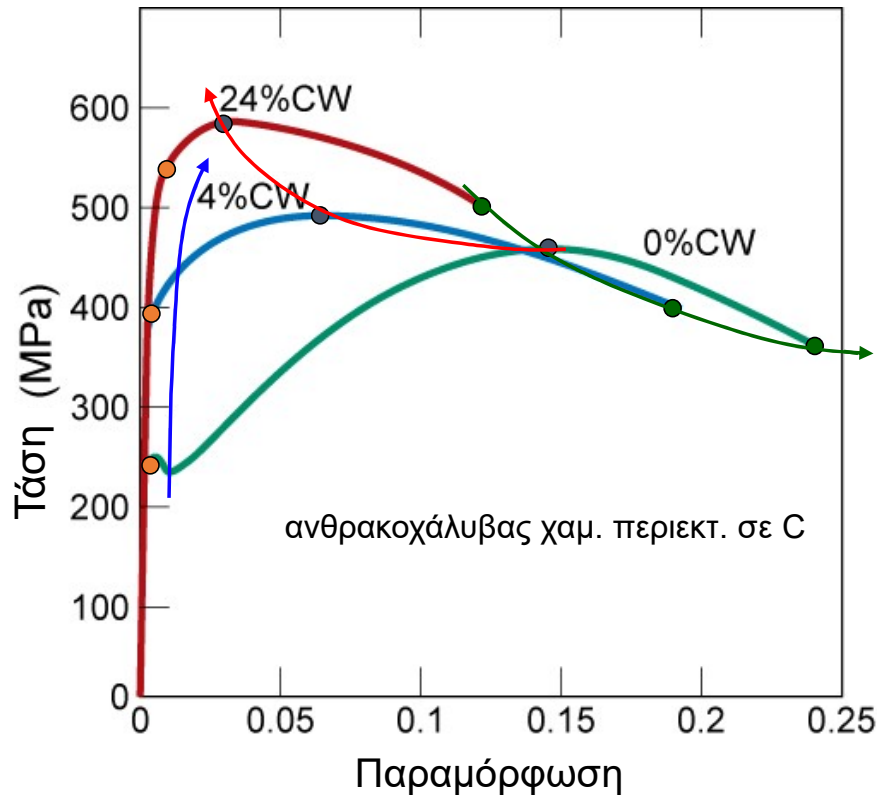
Αλληλεπιδράσεις μεταξύ πλεγματικών διαταραχών



Επιδράσεις της ψυξηλασίας

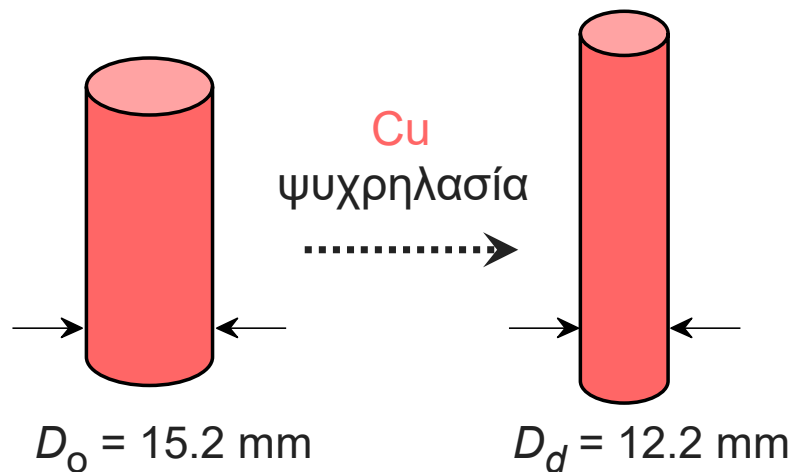
Αυξανόμενου του βαθμού ψυξηλασίας...

- αυξάνεται η αντοχή διαρροής (σ_y)
- αυξάνεται η αντοχή σε εφελκυσμό (TS)
- μειώνεται η ολκιμότητα ($\%EL$ ή $\%RA$)



Ψυξηλασία και μεταβολή μηχανικών ιδιοτήτων

- Πώς διαμορφώνονται, μετά από ψυξηλασία, οι τιμές αντοχής σε διαρροή και σε εφελκυσμό, καθώς και η ολκιμότητα, του καθαρού χαλκού;



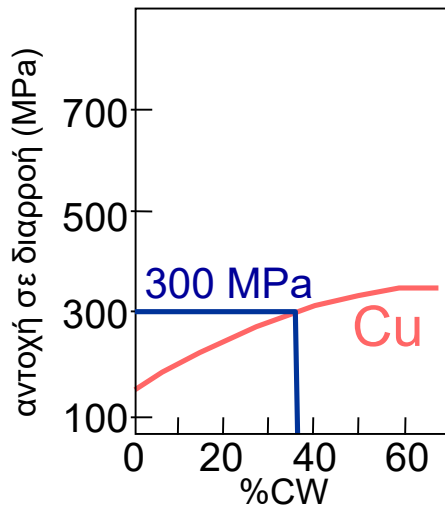
$$\%CW = \frac{\frac{\pi D_o^2}{4} - \frac{\pi D_d^2}{4}}{\frac{\pi D_o^2}{4}} \times 100$$

$$= \frac{D_o^2 - D_d^2}{D_o^2} \times 100$$

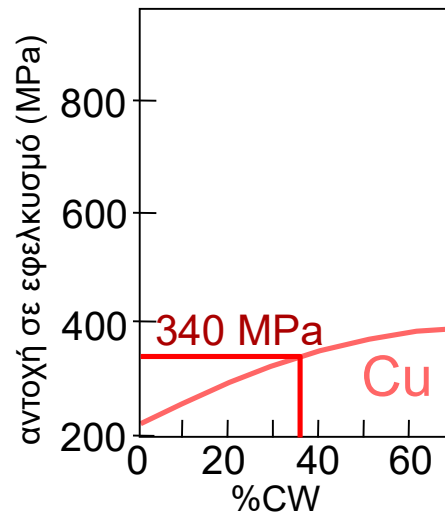
$$\%CW = \frac{(15.2 \text{ mm})^2 - (12.2 \text{ mm})^2}{(15.2 \text{ mm})^2} \times 100 = 35.6\%$$

Ψυξηλασία και μεταβολή μηχανικών ιδιοτήτων

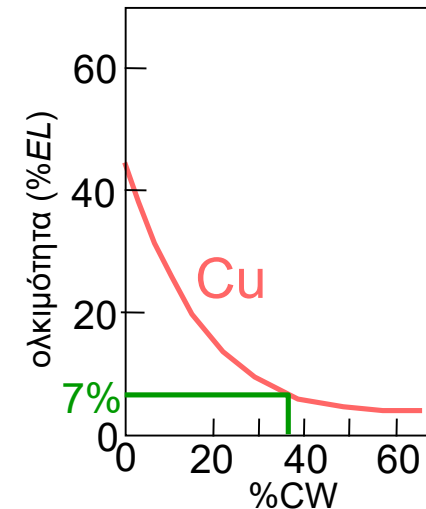
- Πώς διαμορφώνονται, μετά από ψυξηλασία, οι τιμές αντοχής σε διαρροή και σε εφελκυσμό, καθώς και η ολκιμότητα, του χαλκού με %CW = 35.6%;



$$\sigma_y = 300 \text{ MPa}$$



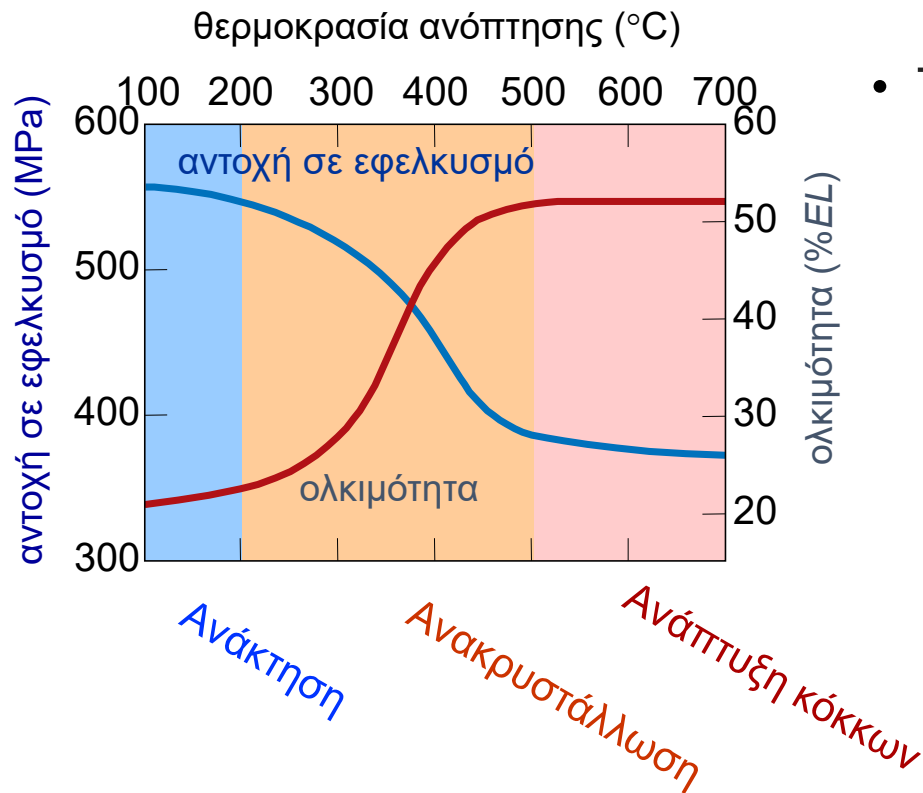
$$TS = 340 \text{ MPa}$$



$$\%EL = 7\%$$

Ανόπτηση και επιδράσεις της

- **Ανόπτηση:** Θερμική επεξεργασία μετά την ψυξηλασία ενός κράματος.
- 1 ώρα επεξεργασίας σε $T_{\text{ανόπτησης}}$...
μειώνει την TS και αυξάνει το % EL .
- Μείωση ή εξάλειψη των επιδράσεων της ψυξηλασίας!



- Τα 3 Στάδια της Ανόπτησης:

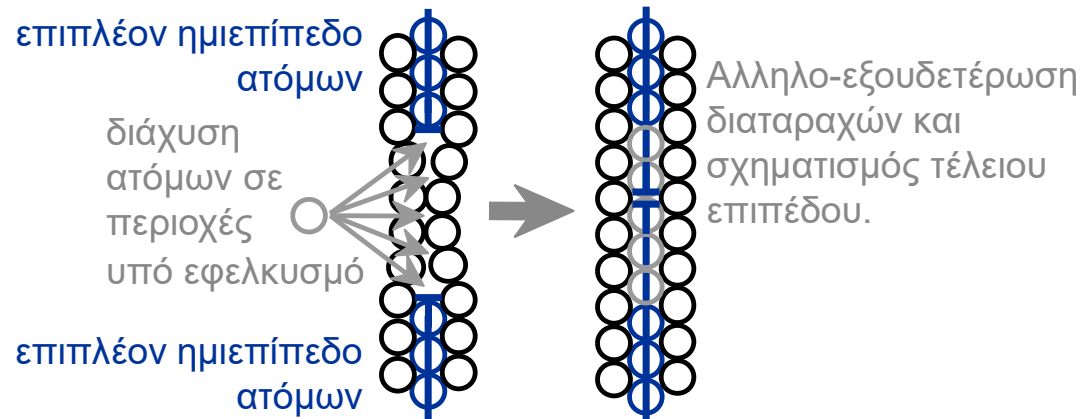
1. Ανάκτηση
2. Ανακρυστάλλωση
3. Ανάπτυξη κόκκων

Τα 3 Στάδια της Ανόπτησης:

1. Ανάκτηση

Μείωση της πυκνότητας διαταραχών μέσω εξουδετέρωσής τους.

- Σενάριο 1
Προκύπτει
από διάχυση

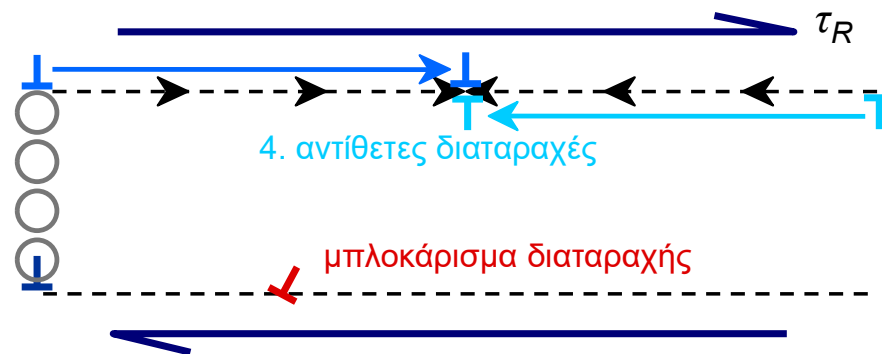


- Σενάριο 2

3. Οι “ανερχόμενες” διαταραχές μπορούν να μεταφερθούν σε νέο επίπεδο ολίσθησης.

2. Διάχυση πλεγματικών κενών => τα (γκρίζα) άτομα εκτοπίζονται, οι διαταραχές μπορούν να “ανέλθουν”.

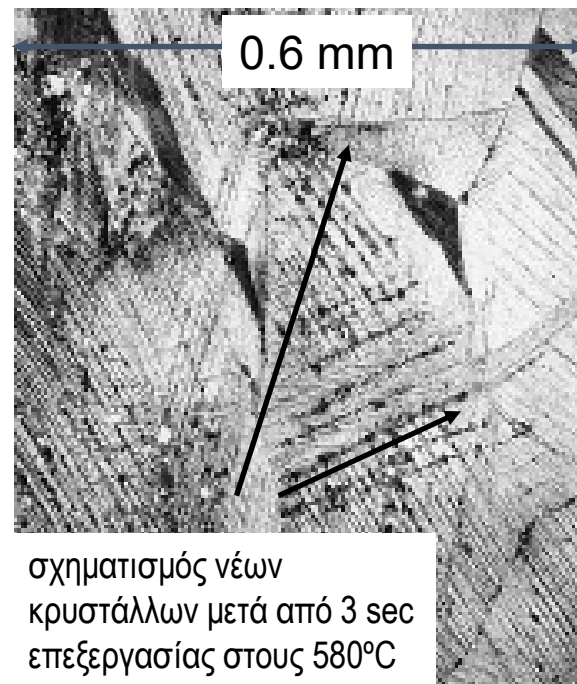
1. Μπλοκάρισμα διαταραχής – δεν μπορεί να μετακινηθεί προς τα δεξιά.



Τα 3 Στάδια της Ανόπτησης:

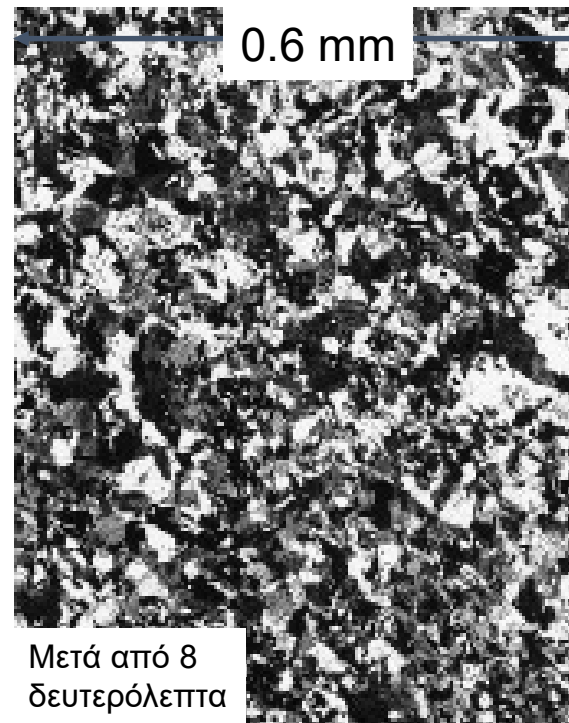
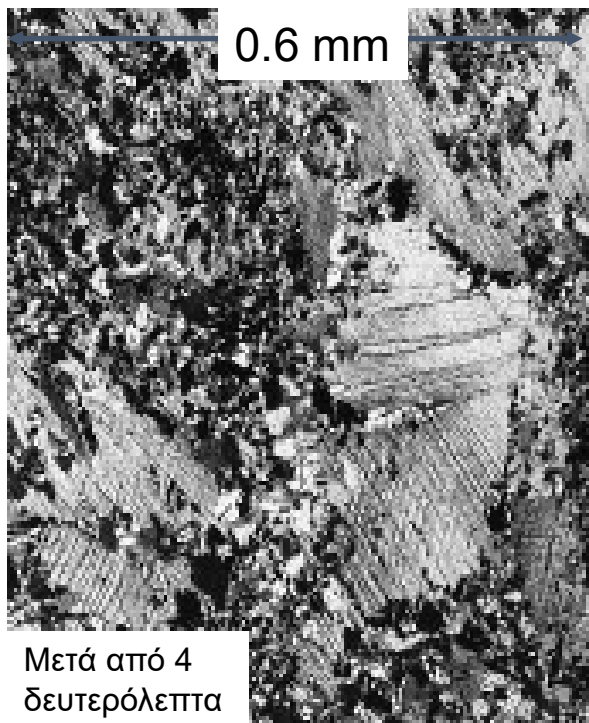
2. Ανακρυστάλλωση

- Σχηματίζονται νέοι κόκκοι οι οποίοι:
 - έχουν χαμηλές πυκνότητες διαταραχών
 - έχουν μικρό μέγεθος
 - καταναλώνουν & αντικαθιστούν γονικούς (ψυχρηλατημένους) κόκκους.



Καθώς συνεχίζεται η ανακρυστάλλωση...

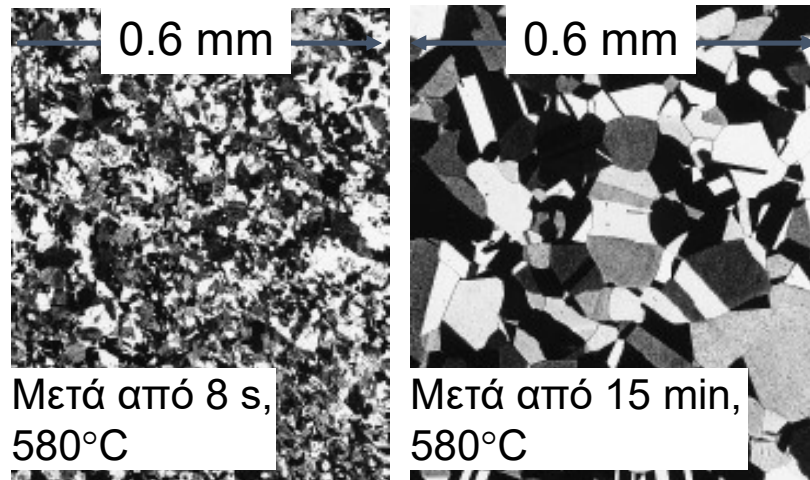
- Σταδιακά, όλοι οι “ψυχρηλατημένοι” κόκκοι καταναλώνονται ή αντικαθίστανται.



Τα 3 Στάδια της Ανόπτησης:

3. Ανάπτυξη κόκκων

- Σε μεγαλύτερους χρόνους επεξεργασίας, το μεσοσταθμικό μέγεθος κόκκων αυξάνεται.
 - μικροί κόκκοι: συρρικνώνονται (& τελικά εξαφανίζονται)
 - μεγάλοι κόκκοι: συνεχίζουν να αναπτύσσονται



- Εμπειρική σχέση:

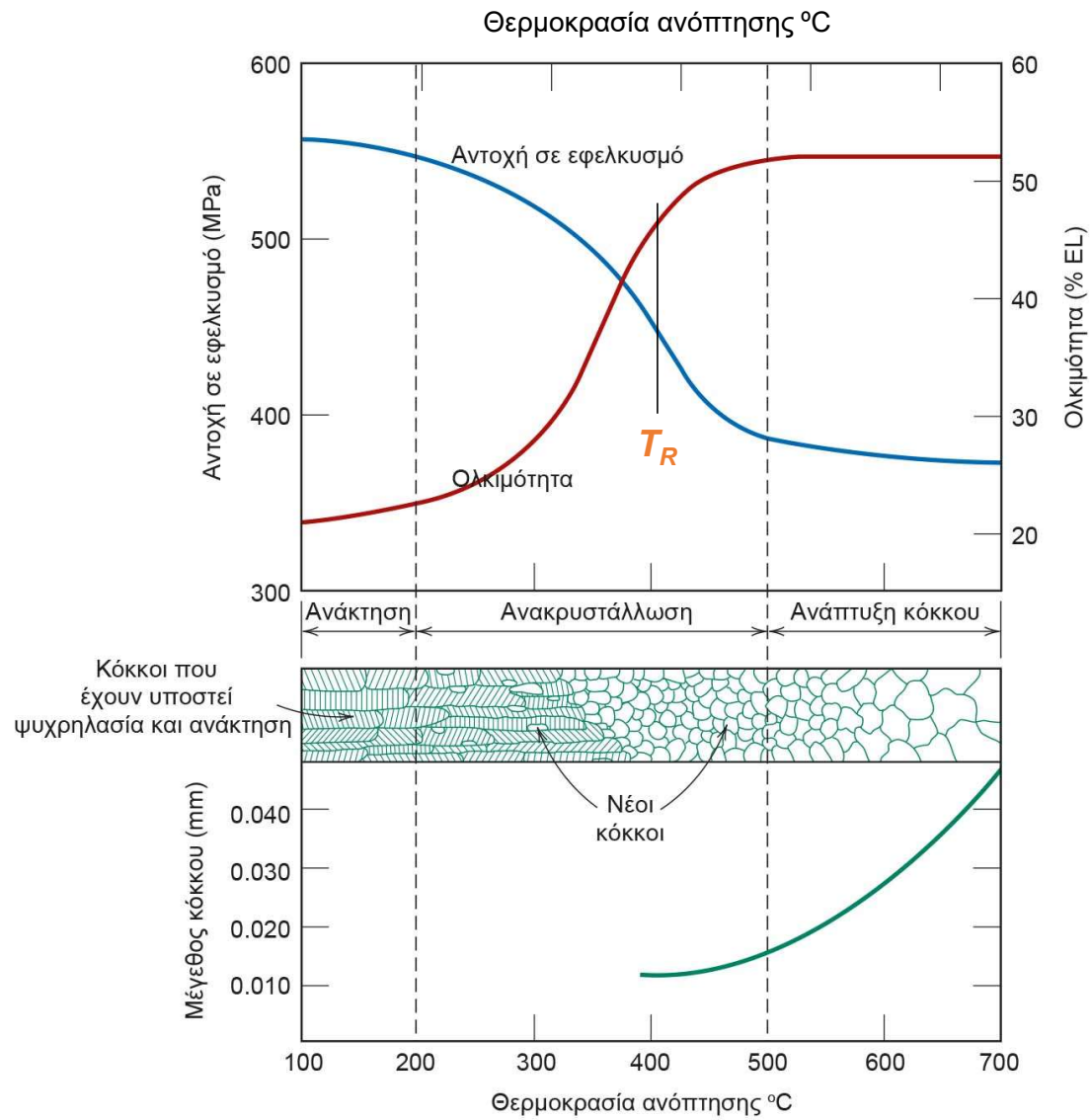
τυπ. τιμή εκθέτη ~ 2

διάμ. κόκκων
σε χρόνο t .

$$d^n - d_o^n = Kt$$

συντελεστής εξαρτ.
από υλικό και T .

χρόνος επεξεργασίας



T_R = θερμοκρασία
ανακρυστάλλωσης

Θερμοκρασία ανακρυστάλλωσης

T_R = θερμοκρασία ανακρυστάλλωσης =
θερμοκρασία στην οποία η ανακρυστάλλωση
ολοκληρώνεται σε χρόνο 1 ώρας.

$$0.3T_m < T_R < 0.6T_m$$

Για ένα συγκεκριμένο μέταλλο/κράμα, η T_R εξαρτάται
από:

- %CW -- μείωση της T_R με την αύξηση της %CW
- Καθαρότητα μετάλλου -- μείωση της T_R με την αύξηση του βαθμού καθαρότητας

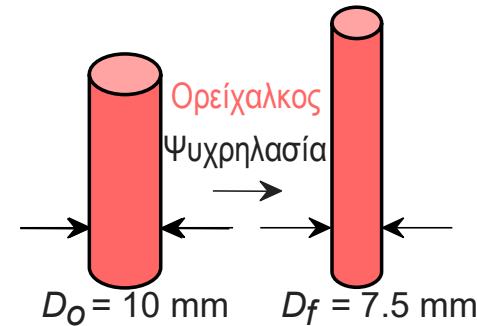
Μείωση διαμέτρου ράβδου: Πρόβλημα

Μία ράβδος από ορείχαλκο, κυκλικής διατομής με αρχική διάμετρο 10 mm, πρόκειται να διαμορφωθεί με διέλκυση. Η ψυξηλασία πρέπει να διατηρήσει το κυκλικό σχήμα της διατομής και να δώσει αντοχή σε εφελκυσμό μεγαλύτερη από 380 MPa και ολκιμότητα τουλάχιστον 15%*EL*. Επιπλέον, η τελική διάμετρος της ράβδου πρέπει να είναι 7.5 mm. Να διερευνηθεί πώς μπορεί να επιτευχθεί αυτό.

Μείωση διαμέτρου ράβδου: Διερεύνηση

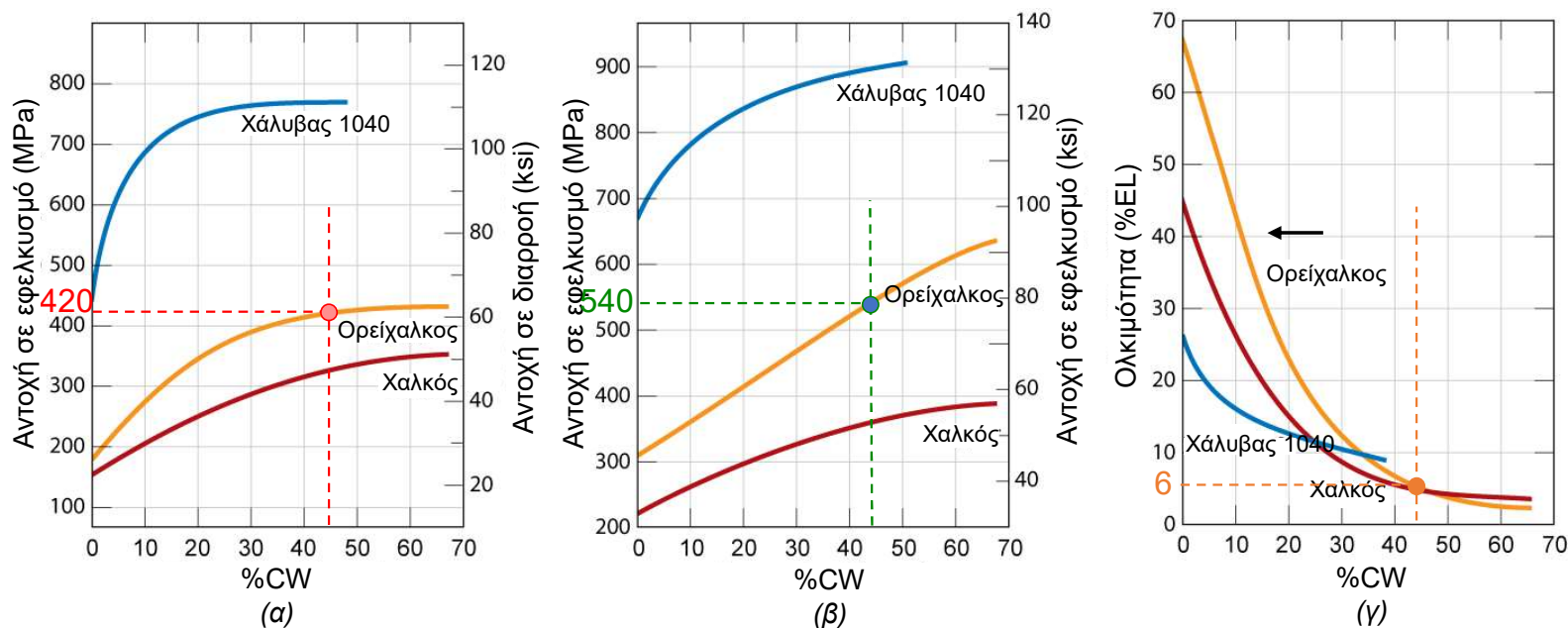
Ποιες συνέπειες θα έχει η διέλκυση της ράβδου απευθείας στην τελική διάμετρο;

Υπολογισμός βαθμού ψυξηλασίας:



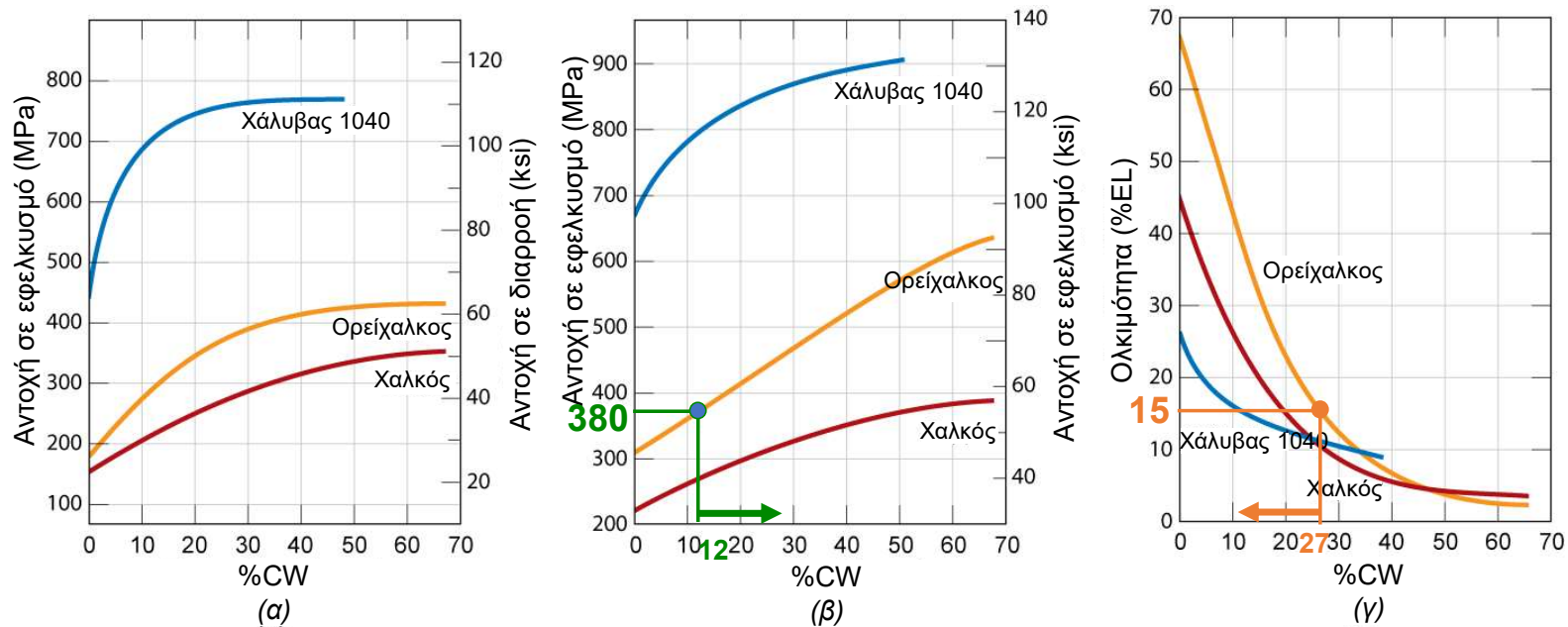
$$\begin{aligned}\%CW &= \left(\frac{A_o - A_f}{A_o} \right) \times 100 = \left(1 - \frac{A_f}{A_o} \right) \times 100 \\ &= \left(1 - \frac{\pi D_f^2 / 4}{\pi D_o^2 / 4} \right) \times 100 = \left(1 - \left(\frac{7.5}{10} \right)^2 \right) \times 100 = 43.8\%\end{aligned}$$

Μείωση διαμέτρου ράβδου: Λύση, 1



- Για %CW = 43.8%
 - $\sigma_y = 420 \text{ MPa}$
 - $TS = 540 \text{ MPa} > 380 \text{ MPa}$
 - $\%EL = 6 < 15$
- Τα αποτελέσματα δεν ικανοποιούν τις απαιτήσεις... υπάρχουν εναλλακτικές επιλογές;

Μείωση διαμέτρου ράβδου: Λύση, 2



Για $TS > 380 \text{ MPa}$ $\longrightarrow > 12 \%CW$

Για $\%EL > 15$ $\longrightarrow < 27 \%CW$

$\therefore$ Ο βαθμός ψυχρηλασίας γι' αυτή την εφαρμογή περιορίζεται σε $12 < \%CW < 27$

Μείωση διαμέτρου ράβδου: Λύση, 3

Διαδικασία: ψυξηλασία, ανόπτηση και κατόπιν ψυξηλασία ξανά

- Για επίτευξη του στόχου, απαιτείται $12 < \%CW < 27$
 - Θα χρησιμοποιήσουμε 20 %CW
- Η διάμετρος μετά από το πρώτο στάδιο ψυξηλασίας (αλλά πριν από το 2ο) υπολογίζεται ως εξής:

$$\%CW = \left(1 - \frac{D_{f2}^2}{D_{02}^2}\right) \times 100 \Rightarrow 1 - \frac{D_{f2}^2}{D_{02}^2} = \frac{\%CW}{100}$$

$$\frac{D_{f2}}{D_{02}} = \left(1 - \frac{\%CW}{100}\right)^{0.5} \Rightarrow D_{02} = \frac{D_{f2}}{\left(1 - \frac{\%CW}{100}\right)^{0.5}}$$

$$\text{Ενδιάμεση διάμετρος} = D_{f1} = D_{02} = 7.5 \text{ mm} / \left(1 - \frac{20}{100}\right)^{0.5} = 8.39 \text{ mm}$$

Μείωση διαμέτρου ράβδου: Σύνοψη

Στάδιο 1: Ψυξηλασία – μείωση διαμέτρου από 10 mm σε 8.39 mm

$$\%CW_1 = \left(1 - \left(\frac{8.39 \text{ mm}}{10 \text{ mm}} \right)^2 \right) \times 100 = 29.6$$

Στάδιο 2: Ανόπτηση (θερμική κατεργασία με ανακρυστάλλωση)

Στάδιο 3: Ψυξηλασία – μείωση διαμέτρου από 8.39 mm σε 7.5 mm

$$\%CW_2 = \left(1 - \left(\frac{7.5}{8.49} \right)^2 \right) \times 100 = 20 \quad \text{Σχ. 7.19} \Rightarrow$$

$$\sigma_y = 340 \text{ MPa}$$

$$TS = 400 \text{ MPa}$$

$$\%EL = 24$$

Η διαδικασία ικανοποιεί όλες τις απαιτήσεις
και επιτυγχάνει το ζητούμενο.

Ψυξηλασία έναντι θερμηλασίας

- Θερμηλασία $\rightarrow$ παραμόρφωση πάνω από την T_R
- Ψυξηλασία $\rightarrow$ παραμόρφωση κάτω από την T_R

Το μέγεθος κόκκων επηρεάζει τις ιδιότητες

- **Μέταλλα με δομή μικρών κόκκων** – σχετικά μεγάλη αντοχή και δυσθραυστότητα σε χαμηλές θερμοκρασίες
- **Μέταλλα με δομή μεγάλων κόκκων** – καλή αντίσταση σε ερπυσμό σε σχετικά υψηλές θερμοκρασίες



ΣΥΝΟΨΗ



- Διαταραχές στο πλέγμα: παρατηρούνται κυρίως σε μέταλλα και κράματα.
- Η αντοχή αυξάνεται καθιστώντας δύσκολη την κίνηση των διαταραχών.
- Η αντοχή των μετάλλων μπορεί να αυξηθεί με:
 - μείωση μεγέθους κόκκων
 - ισχυροποίηση στερεού διαλύματος
 - σκλήρυνση με κατακρήμνιση
 - ψυξηλασία
- Εάν μετά την ψυξηλασία εφαρμοστεί θερμική κατεργασία (ανόπτηση) σε ένα μέταλλο, θα μεταβληθούν οι ιδιότητες και η μικροδομή του (λόγω ανάκτησης, ανακρυστάλλωσης και ανάπτυξης των κόκκων).

Αστοχία



Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

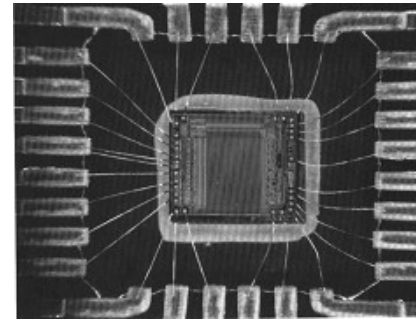
Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- Πώς σχηματίζονται οι ρωγμές που οδηγούν σε αστοχία;
- Πώς ποσοτικοποιείται η αντίσταση σε θραύση; Πώς διαφοροποιείται ανάλογα με την κατηγοριών υλικών;
- Πώς υπολογίζεται η τάση θραύσης;
- Ρυθμός φόρτισης, ιστορικό φόρτισης και θερμοκρασία: Πώς επηρεάζουν τη συμπεριφορά αστοχίας των υλικών;



Neal Boenzi/New York Times Pictures/Redux Pictures

Πλοίο: κυκλική φόρτιση από κύματα.



Chip υπολογιστή: κυκλική θερμική φόρτιση.



Εμφύτευμα ισχίου: κυκλική φόρτιση από βάδιση.



Γιατί μελετάμε την αστοχία των υλικών;

Κατά τον σχεδιασμό μιας κατασκευής ή ενός εξαρτήματος ο μηχανικός καλείται να ελαχιστοποιήσει την πιθανότητα αστοχίας. Για το λόγο αυτό είναι σημαντικό να κατανοήσουμε τους μηχανισμούς των διαφόρων τύπων αστοχίας, δηλαδή, τη **θραύση**, την **κόπωση** και τον **ερπυσμό**, και ακόμα περισσότερο να εξοικειωθούμε με τις κατάλληλες αρχές σχεδιασμού που μπορούν να χρησιμοποιηθούν ώστε να αποτραπεί αστοχία κατά την διάρκεια «λειτουργίας» των υλικών.

Που οφείλεται;

Συνήθη αίτια είναι η ακατάλληλη επιλογή υλικών, ακατάλληλη κατεργασία υλικών, ανεπαρκής σχεδιασμός των εξαρτημάτων και κακή χρήση.

ΘΡΑΥΣΗ

Μηχανισμοί θραύσης

- Όλκιμη θραύση
 - Συνοδεύεται από σημαντικό βαθμό πλαστικής παραμόρφωσης
- Ψαθυρή θραύση
 - Ελάχιστη ή καθόλου πλαστική παραμόρφωση
 - Καταστροφική

Όλκιμη έναντι ψαθυρής θραύσης

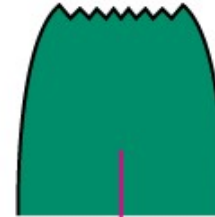
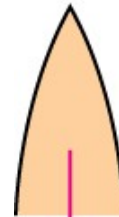
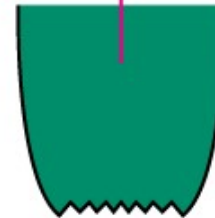
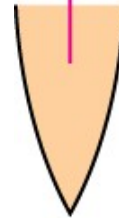
- Κατηγοριοποίηση:

Συμπεριφορά
θραύσης

Πολύ
όλκιμη

Μετρίως
όλκιμη

Ψαθυρή



%AR ή %EL

μεγάλο

μέτριο

μικρό

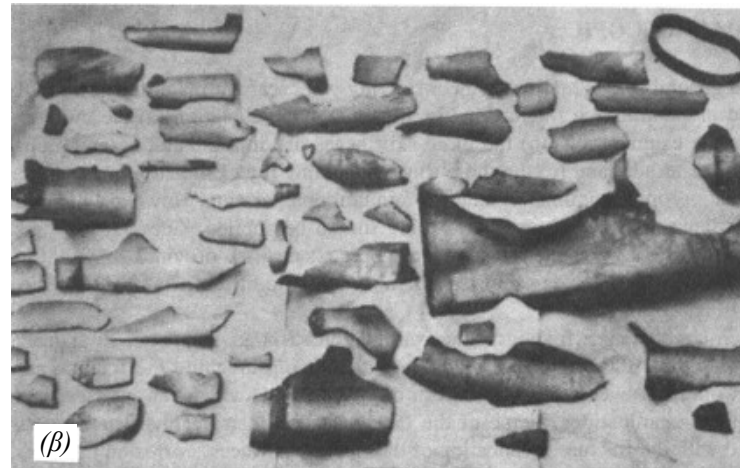
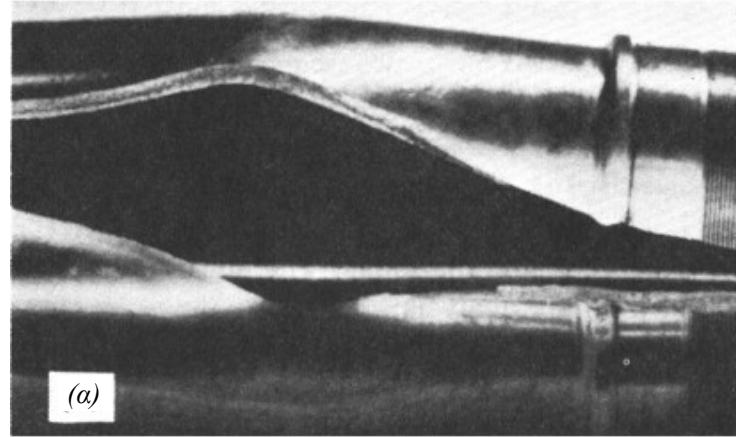
- Η όλκιμη θραύση είναι συνήθως πιο επιθυμητή από την ψαθυρή!

Όλκιμη:
“προειδοποίηση”
πριν από τη θραύση

Ψαθυρή:
θραύση χωρίς
προειδοποίηση

Παράδειγμα: Αστοχίες σωλήνων

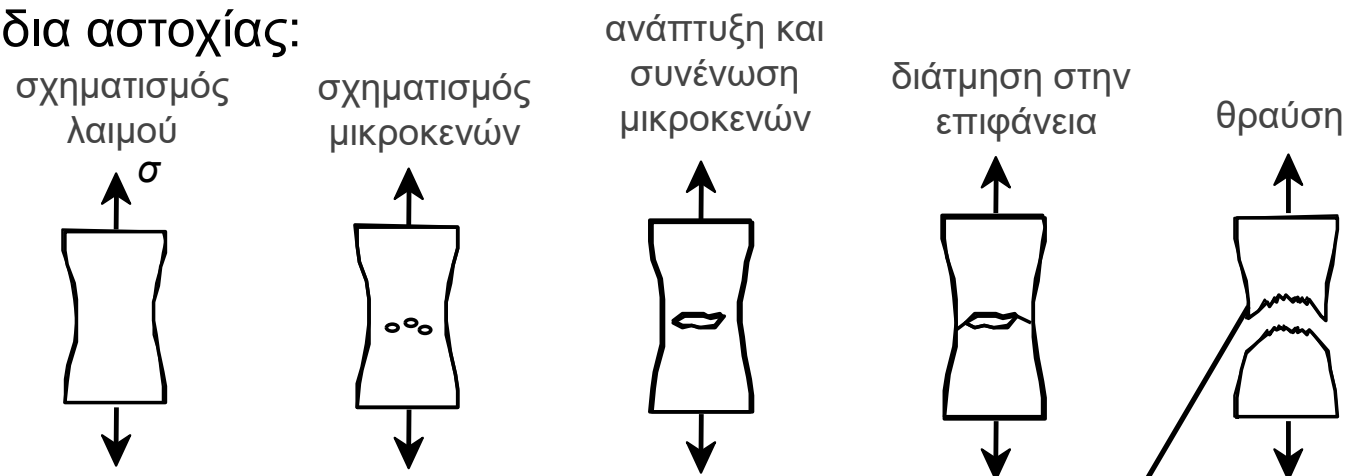
- Αστοχία με **όλκιμο** τρόπο:
 - ένα κομμάτι
 - μεγάλη παραμόρφωση
- Αστοχία με **ψαθυρό** τρόπο:
 - πολλά κομμάτια
 - μικρές παραμορφώσεις



Σχήματα από V.J. Colangelo and F.A. Heiser, *Analysis of Metallurgical Failures* (2nd ed.), Σχ. 4.1(α) και (β), p. 66 John Wiley and Sons, Inc., 1987. Χρησιμοποιείται με άδεια.

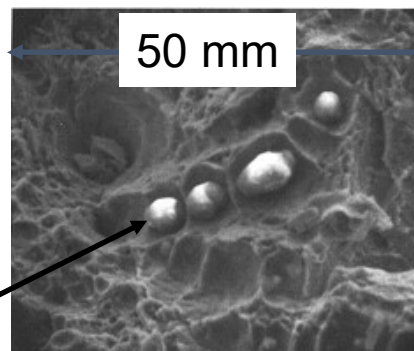
Αστοχία: Μετρίως όλκιμη θραύση

- Στάδια αστοχίας:

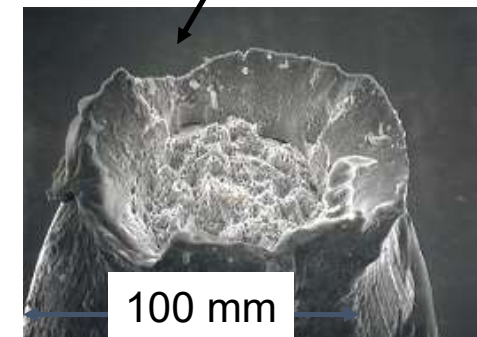


- Προκύπτουσες επιφάνειες θραύσης (χάλυβας)

σωματίδια:
πυρήνες
σχηματισμού
μικροκενών



Από V.J. Colangelo and F.A. Heiser, *Analysis of Metallurgical Failures* (2nd ed.), Σχ. 11.28, p. 294, John Wiley and Sons, Inc., 1987. (Αρχική πηγή: P. Thornton, *J. Mater. Sci.*, Vol. 6, 1971, pp. 347-56.)



Επιφάνεια θράυσης μετά από φόρτιση σε εφελκυσμό.
Πηγή: F. Roehrig, CC Technologies, Dublin, OH.
Χρησιμοποιείται με άδεια.

Μετρίως όλκιμη έναντι ψαθυρήs θραύσης



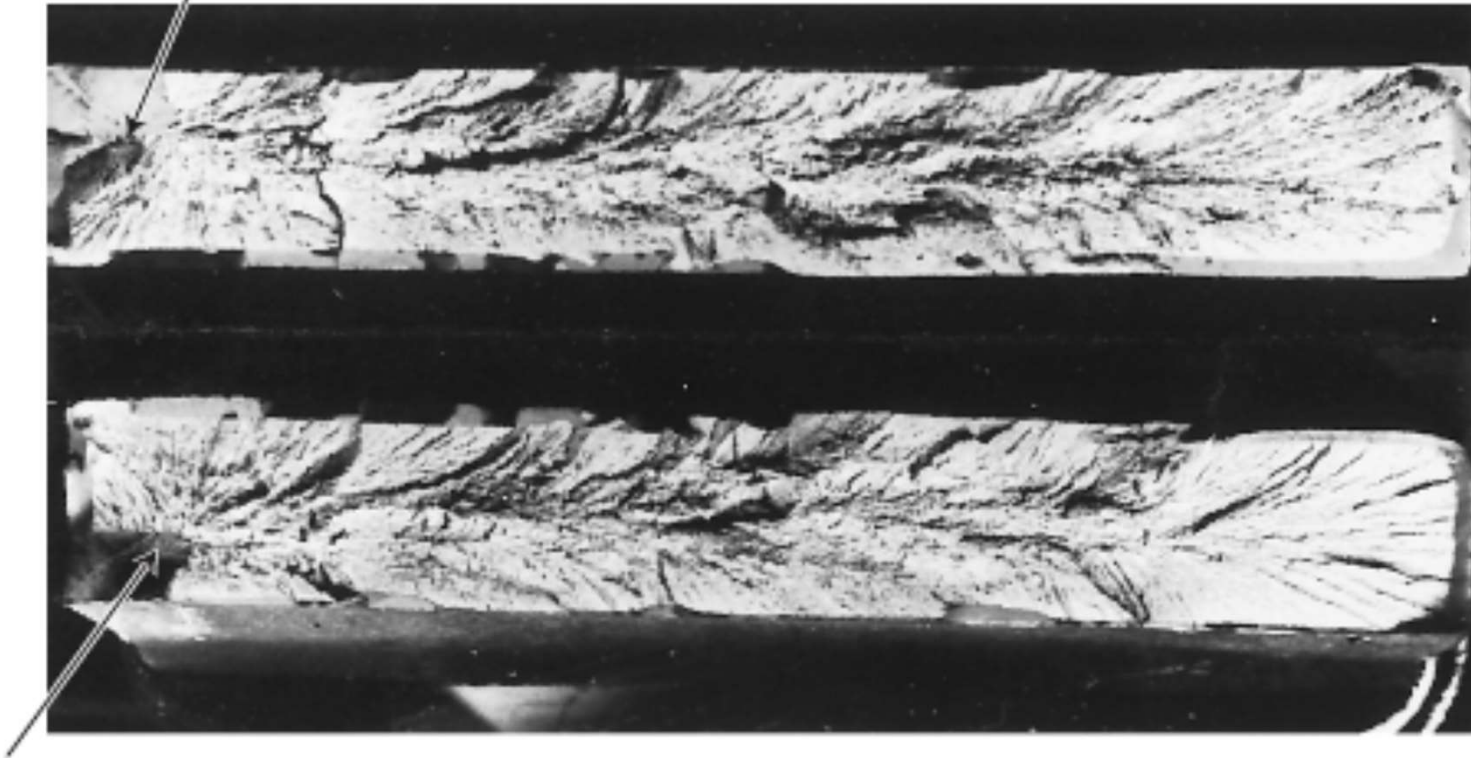
θραύση τύπου κυπέλλου-κώνου



ψαθυρή θραύση

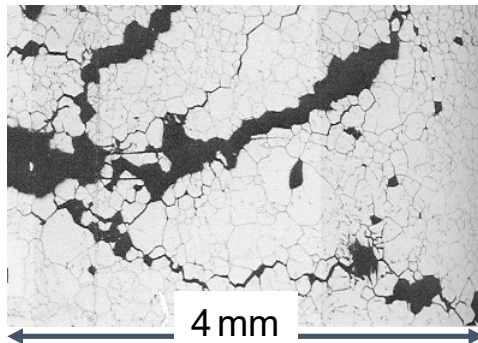
Αστοχία με ψαθυρή θραύση

Τα βέλη υποδεικνύουν το σημείο έναρξης της αστοχίας



Επιφάνειες ψαθυρής θραύσης

- Περικρυσταλλική
(μεταξύ κόκκων)



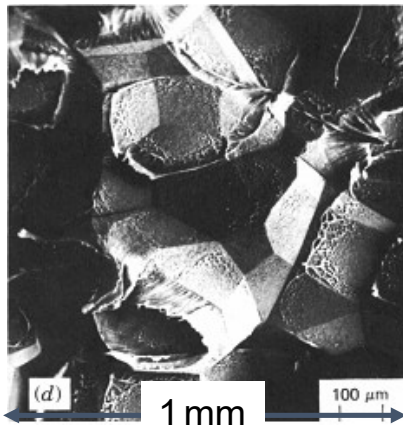
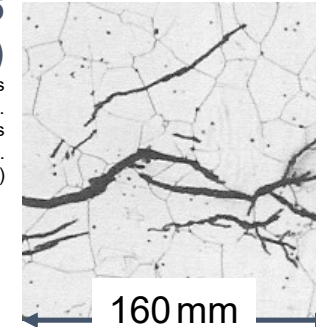
Αν. χάλυβας 304
(μέταλλο)

Αναπαράγεται με άδεια
από "Metals Handbook",
9th ed, Σχ. 633, p. 650.
© 1985, ASM International, Materials
Park, OH. (Μικροφωτογραφία:
J.R. Keiser and A.R. Olsen,
Oak Ridge National Lab.)

- Ενδοκρυσταλλική
(διαμέσου των κόκκων)

Αν. χάλυβας 316
(μέταλλο)

Αναπαράγεται με άδεια από "Metals
Handbook", 9th ed, Σχ. 650, p. 357.
© 1985, ASM International, Materials
Park, OH. (Μικροφωτογραφία: D.R.
Diercks, Argonne National Lab.)



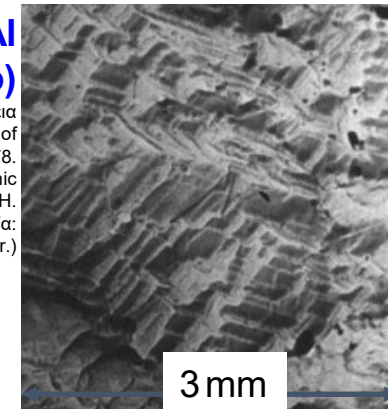
πολυπροπυλένιο
(πολυμερές)

Αναπαράγεται με άδεια
από R.W. Hertzberg,
"Deformation and Fracture Mechanics
of Engineering Materials", (4th ed.)
Σχ. 7.35(δ), p. 303,
John Wiley and Sons,
Inc., 1996.

(Αρχική πηγή: K. Friedrich, *Fracture* 1977, Vol. 3, ICF4,
Waterloo, CA, 1977, p. 1119.)

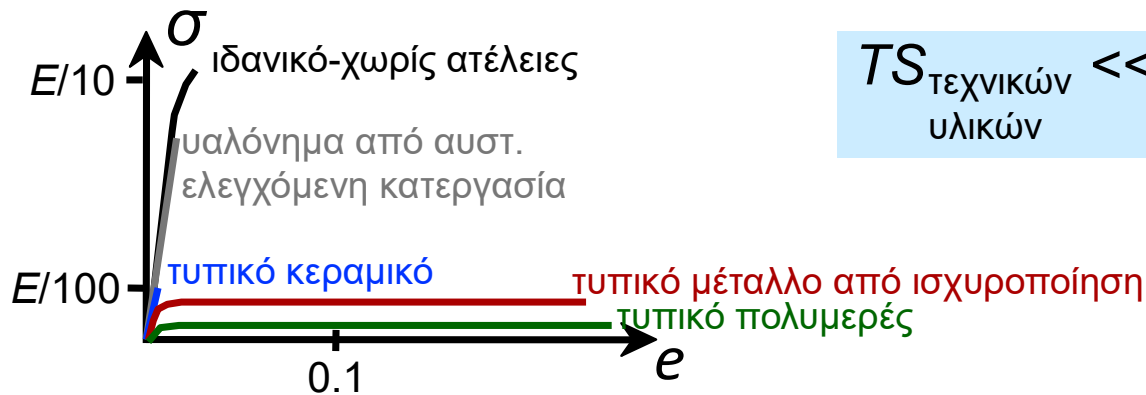
Οξείδιο Al
(κεραμικό)

Αναπαράγεται με άδεια
από "Failure Analysis of
Brittle Materials", p. 78.
© 1990, American CerTheamic
Society, Westerville, OH.
(Μικροφωτογραφία:
R.M. Gruver and H. Kirchner.)



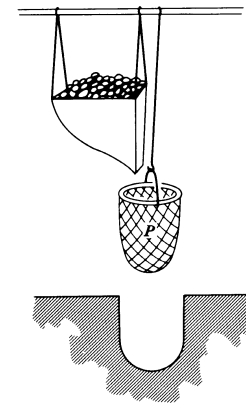
Ιδανικά έναντι πραγματικών υλικών

- Συμπεριφορά τάσης-παραμόρφωσης ($T_{\delta\omega\mu\alpha\tau\acute{\iota}\omicron\upsilon}$):



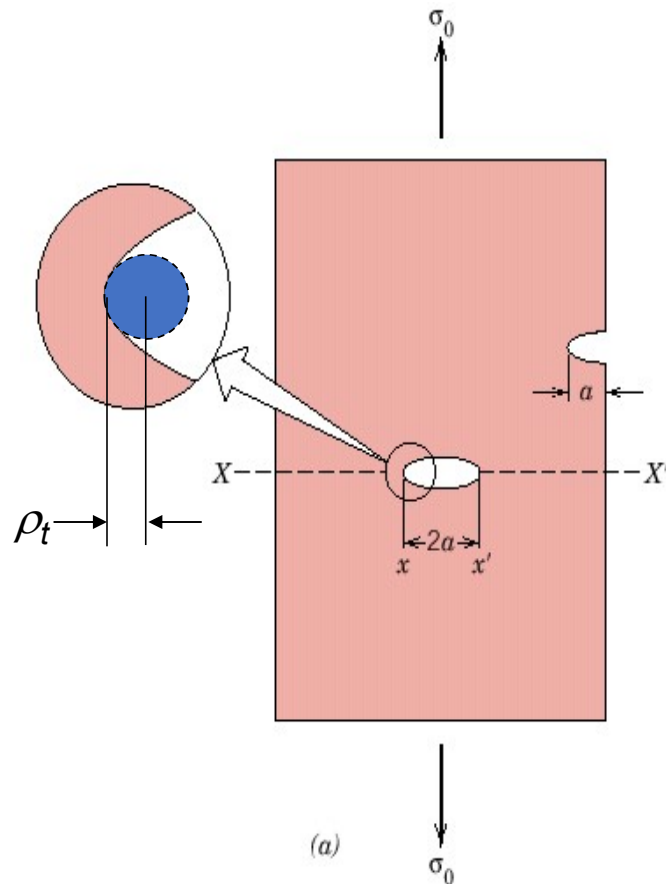
$$TS_{\text{τεχνικών υλικών}} \ll TS_{\text{ιδανικών υλικών}}$$

- (500 χρόνια πριν!) ο DaVinci παρατήρησε ότι...
 - όσο αυξάνεται το μήκος ενός σύρματος, τόσο μειώνεται το φορτίο αστοχίας.
- Αίτια:
 - οι ατέλειες προκαλούν πρόωγη αστοχία.
 - μεγαλύτερα τεμάχια περιέχουν μεγαλύτερες ατέλειες!



Αναπαράγεται με άδεια από
R.W. Hertzberg, "Deformation
and Fracture Mechanics of
Engineering Materials", (4th ed.)
Σχ. 7.4. John Wiley and Sons,
Inc., 1996.

Οι ατέλειες είναι θέσεις συγκέντρωσης τάσεων!



- Ρωγμή τύπου Griffith

$$\sigma_m = 2\sigma_o \left(\frac{a}{\rho_t} \right)^{1/2} = K_t \sigma_o$$

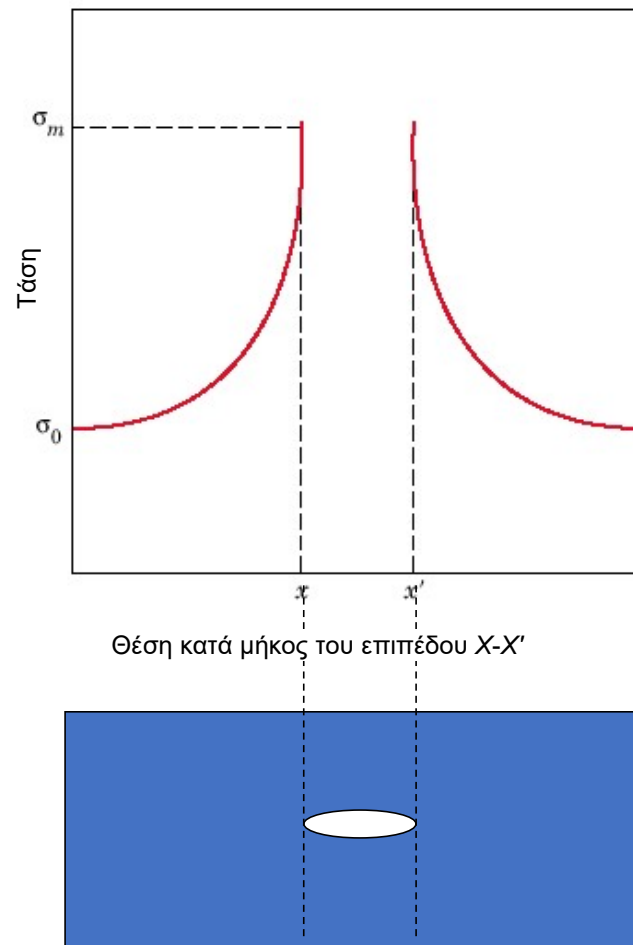
όπου

ρ_t = ακτίνα καμπυλότητας

σ_o = εφαρμοζόμενη τάση

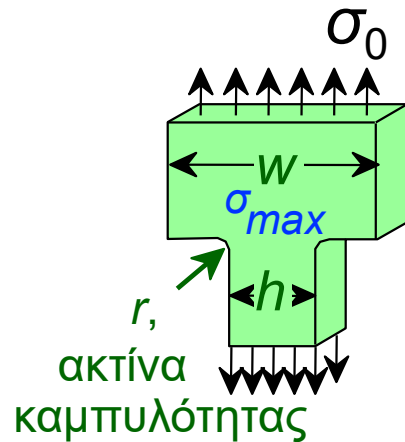
σ_m = τάση στην αιχμή
της ρωγμής

Συγκέντρωση τάσεων σε αιχμή ρωγμής

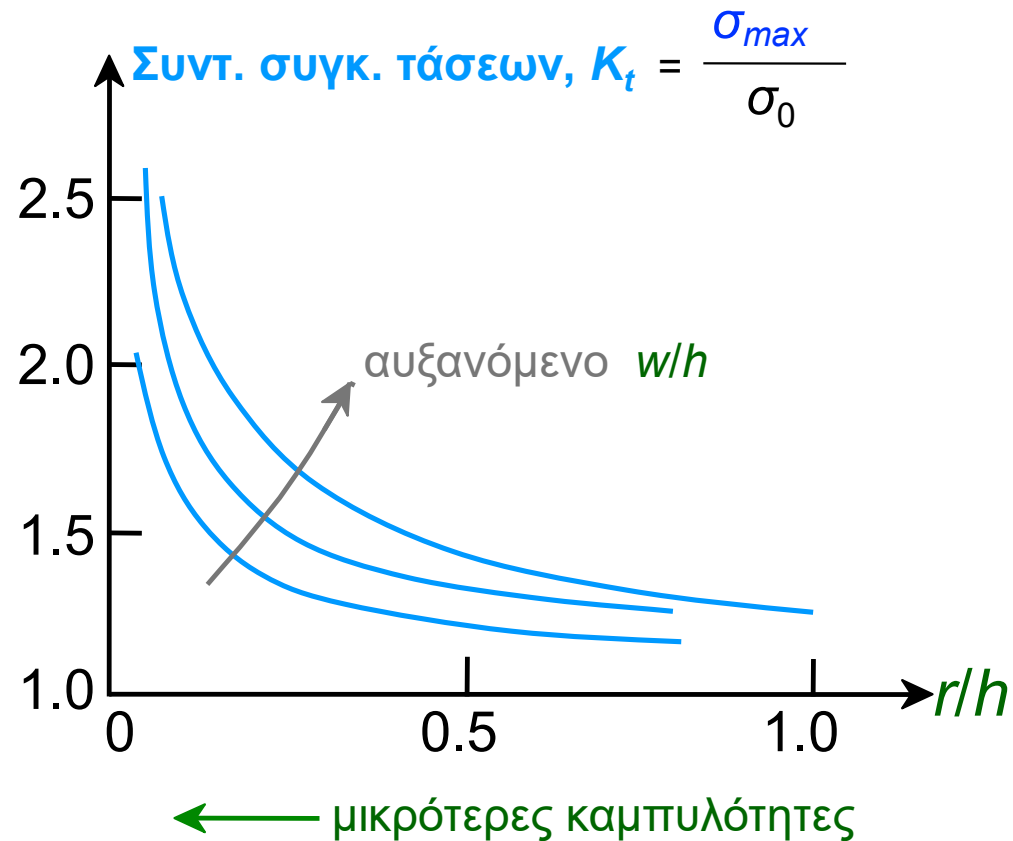


Σχεδιασμός για αποφυγή αστοχίας

- Να αποφεύγονται οι αιχμηρές γωνίες!



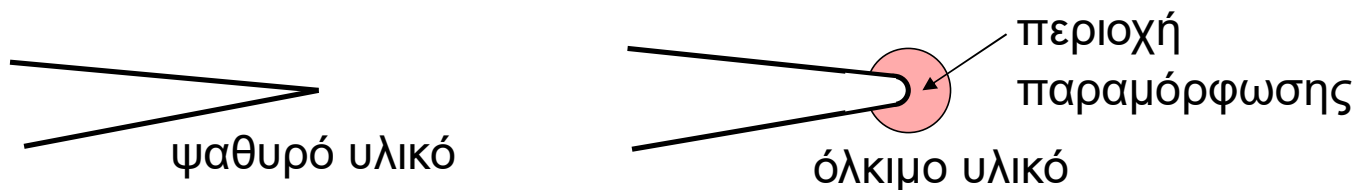
Διασκευή από Σχ. 8.2W(γ),
Callister 6e.
(Πηγή: G.H. Neugebauer, *Prod. Eng.* (NY), Vol. 14, pp. 82-87
1943.)



Διάδοση ρωγμών

Οι ρωγμές με αιχμηρές απολήξεις διαδίδονται ευκολότερα απ' ό,τι οι ρωγμές με αμβλείες απολήξεις.

- Η παραμόρφωση που υφίσταται ένα πλαστικό υλικό στην απόληξη ρωγμής, πρακτικά “αμβλύνει” τη ρωγμή.



Ενεργειακό "ισοζύγιο" στη ρωγμή

- Ενέργεια ελαστικής παραμόρφωσης
 - ενέργεια που αποθηκεύεται σε ένα υλικό καθώς αυτό παραμορφώνεται ελαστικά
 - αυτή η ενέργεια ελευθερώνεται όταν διαδίδεται μία ρωγμή
 - απαιτείται ενέργεια για τη δημιουργία νέων επιφανειών

Κριτήριο για διάδοση ρωγμής

Μία ρωγμή διαδίδεται εάν η τάση στην αιχμή της (σ_m) υπερβεί μία **κρίσιμη τάση** (σ_c)

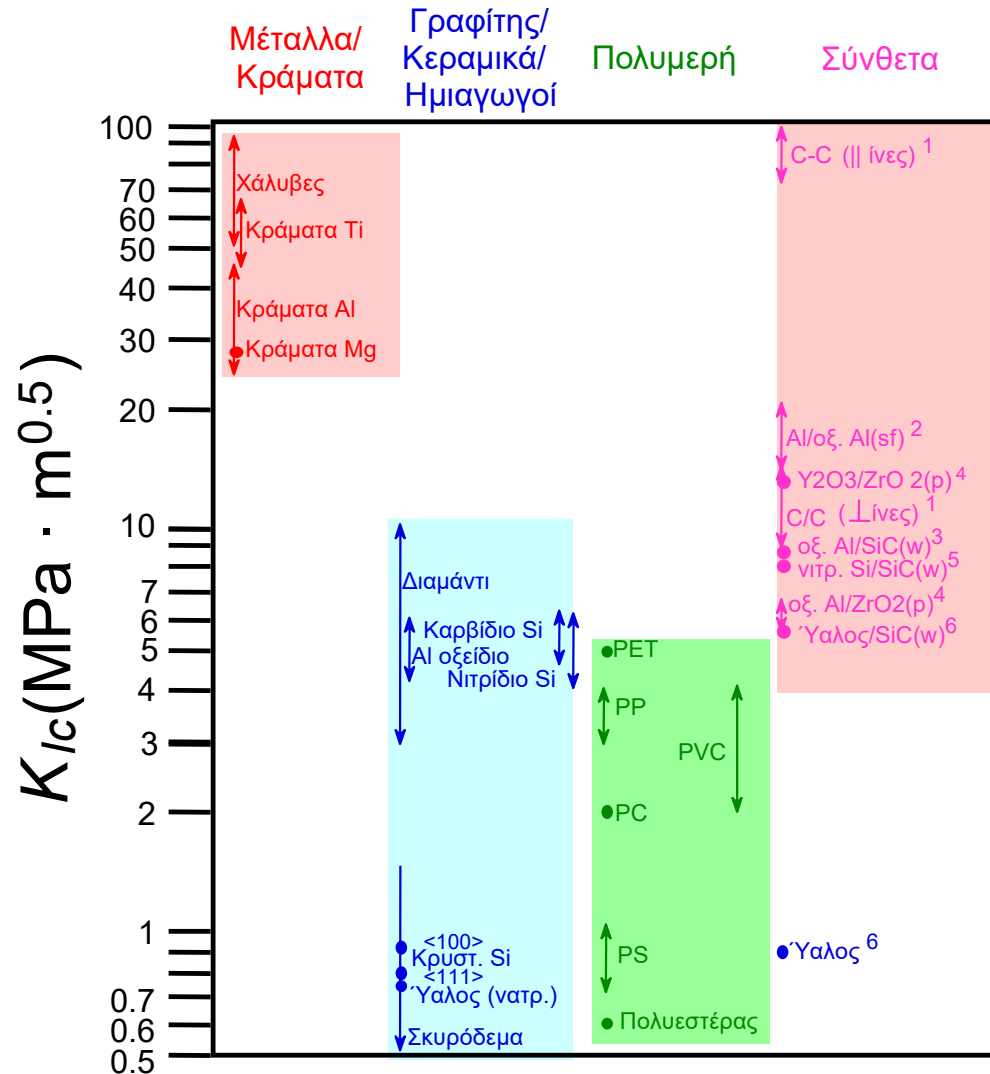
$$\text{δηλ.}, \sigma_m > \sigma_c \quad \sigma_c = \left(\frac{2E\gamma_s}{\pi a} \right)^{1/2}$$

όπου

- E = μέτρο ελαστικότητας
- γ_s = ειδική ενέργεια επιφάνειας
- a = 1/2(μήκους εσωτερικής ρωγμής)

Για όλκιμα υλικά => αντικατάσταση του γ_s με $\gamma_s + \gamma_p$
όπου γ_p η ενέργεια πλαστικής παραμόρφωσης

Δυσθραυστότητα ανά κατηγορία υλικών



Γεωμετρία ενίσχυσης σύνθετων:

f = ίνες, sf = κοντές ίνες, w = τριχίτες,
p = σωματίδια.

Επιπλέον δεδομένα όπως δίνονται
(κλάσμα όγκου ενίσχυσης):

1. (55vol%) ASM Handbook, Vol. 21, ASM Int., Materials Park, OH (2001) p. 606.
2. (55 vol%) Πηγή: J. Cornie, MMC, Inc., Waltham, MA.
3. (30 vol%) P.F. Becher et al., *Fracture Mechanics of Ceramics*, Vol. 7, Plenum Press (1986). pp. 61-73.
4. Πηγή: CoorsTek, Golden, CO.
5. (30 vol%) S.T. Buljan et al., "Development of Ceramic Matrix Composites for Application in Technology for Advanced Engines Program", ORNL/Sub/85-22011/2, ORNL, 1992.
6. (20vol%) F.D. Gace et al., *Ceram. Eng. Sci. Proc.*, Vol. 7 (1986) pp. 978-82.

Σχεδιασμός για αποτροπή ανάπτυξης ρωγμών

K_c : δυσθραυστότητα (fracture toughness) – μέτρο της αντίστασης που προβάλλει ένα υλικό σε ψαθυρή θραύση όταν υφίσταται μια ρωγμή (Υ: εξαρτάται γεωμετρία ρωγμής και δοκιμίου)

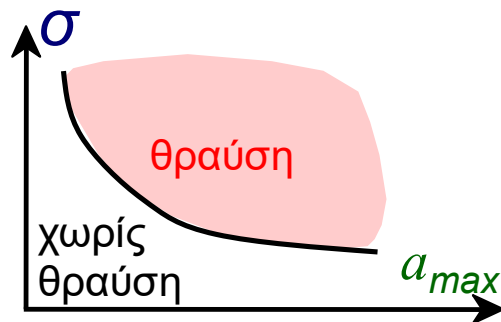
- Συνθήκη για ανάπτυξη ρωγμής:

$$K \geq K_c = Y\sigma\sqrt{\pi a}$$

- Οι μεγαλύτερου μήκους και οι δυσμενέστερα καταπονούμενες ρωγμές αναπτύσσονται πρώτες!

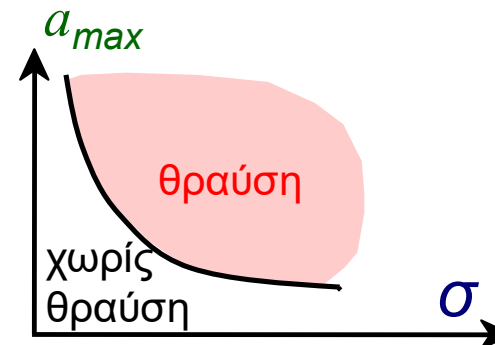
--Σενάριο 1: Το μέγιστο μέγεθος ατέλειας υπαγορεύει την τάση σχεδιασμού.

$$\sigma_{design} < \frac{K_c}{Y\sqrt{\pi a_{max}}}$$



--Σενάριο 2: Η τάση σχεδιασμού υπαγορεύει το μέγιστο μέγεθος ατέλειας.

$$a_{max} < \frac{1}{\pi} \left(\frac{K_c}{Y\sigma_{design}} \right)^2$$



Παράδειγμα σχεδιασμού: Πτέρυγα αεροσκάφους

- Υλικό με $K_{Ic} = 26 \text{ MPa-m}^{0.5}$
- Δύο σχεδιάσεις υπό εξέταση...

Σχεδίαση A

- μέγ. μέγεθος ατέλειας 9 mm
- τάση αστοχίας = 112 MPa

Σχεδίαση B

- χρήση ίδιου υλικού
- μέγ. μέγεθος ατέλειας 4 mm
- τάση αστοχίας = ?

- Υπολογισμός βάσει...

$$\sigma_c = \frac{K_{Ic}}{Y \sqrt{\pi a_{\max}}}$$

- Σημαντικό: τα Y και K_{Ic} είναι ίδια σε αμφότερες τις σχεδιάσεις.

$$\frac{K_{Ic}}{Y \sqrt{\pi}} = \sigma \sqrt{a} = \text{σταθερή}$$

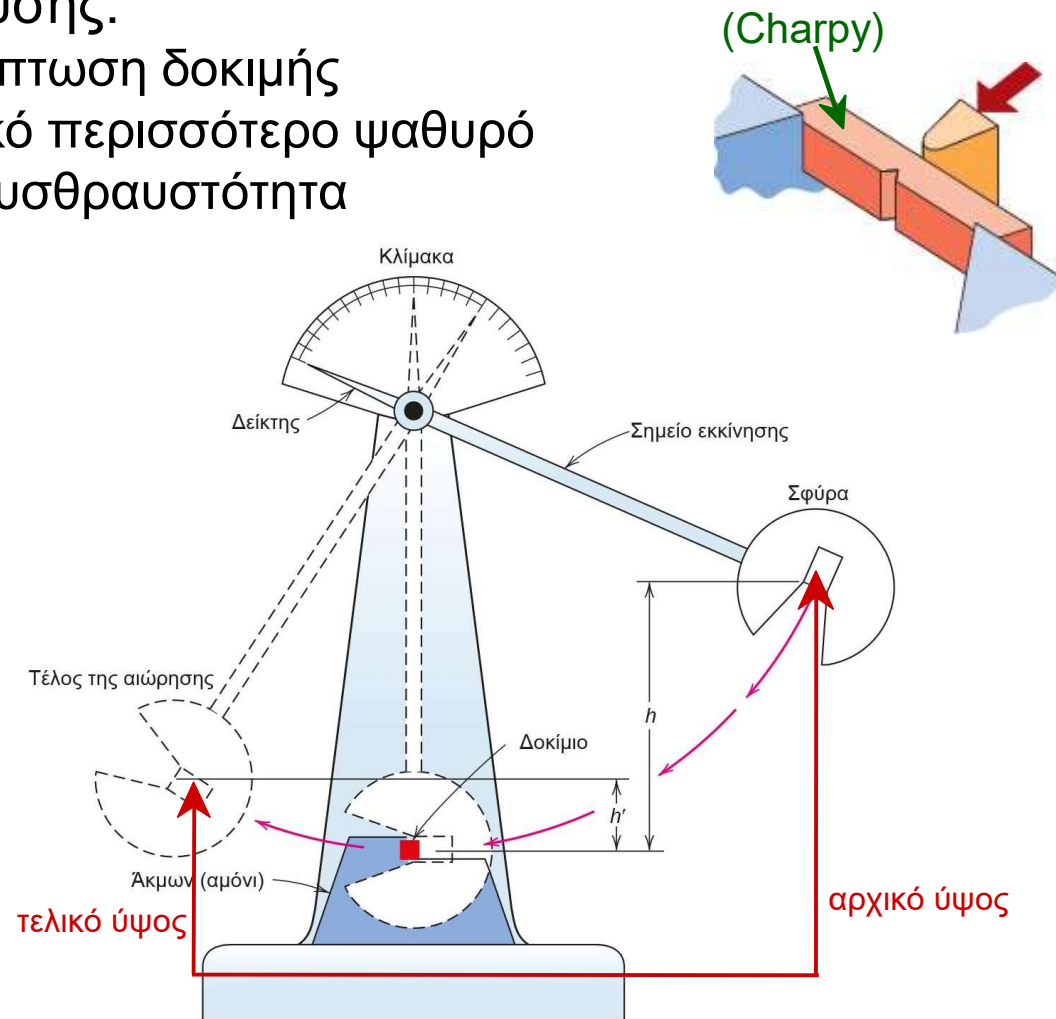
--Αποτέλεσμα:

$$\left(\overset{112 \text{ MPa}}{\sigma_c} \sqrt{\overset{9 \text{ mm}}{a_{\max}}} \right)_A = \left(\sigma_c \sqrt{\overset{4 \text{ mm}}{a_{\max}}} \right)_B$$

$$\text{Απάντηση: } (\sigma_c)_B = 168 \text{ MPa}$$

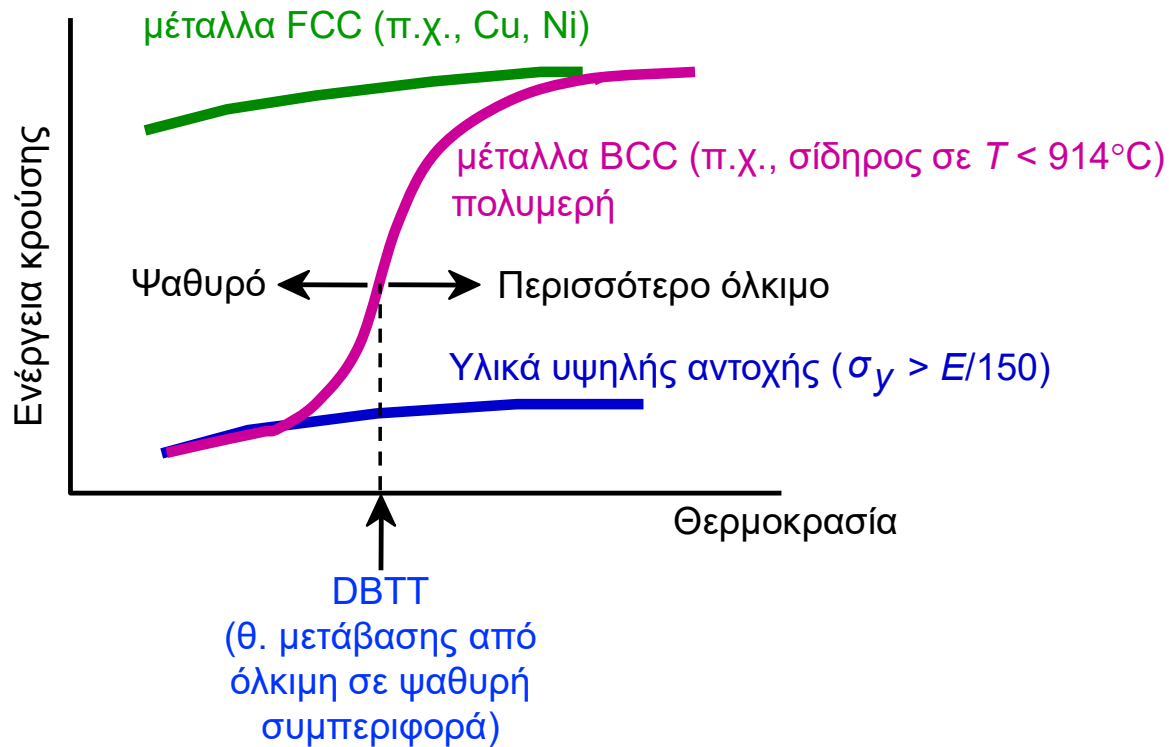
Δοκιμή κρούσης

- Φόρτιση κρούσης:
 - ακραία περίπτωση δοκιμής
 - κάνει το υλικό περισσότερο ψαθυρό
 - μειώνει τη δυσθραυστότητα



Επίδραση της θερμοκρασίας στην ενέργεια κρούσης

- Θερμοκρασία μετάβασης από όλκιμη σε ψαθυρή συμπεριφορά (ΘΜΟΨ ή DBTT)...



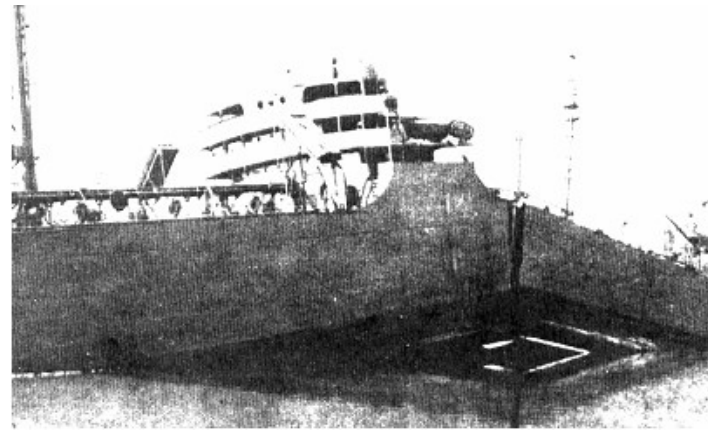
Στρατηγική σχεδιασμού: Μένουμε πάνω από τη DBTT!

- Προ WWII: Τιτανικός



Αναπαράγεται με άδεια από R.W. Hertzberg, "Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials", (4th ed.) Σχ. 7.1(α), p. 262, John Wiley and Sons, Inc., 1996. (Αρχ. Πηγή: Dr. Robert D. Ballard, *The Discovery of the Titanic*.)

- WWII: Φορτηγά πλοία Liberty



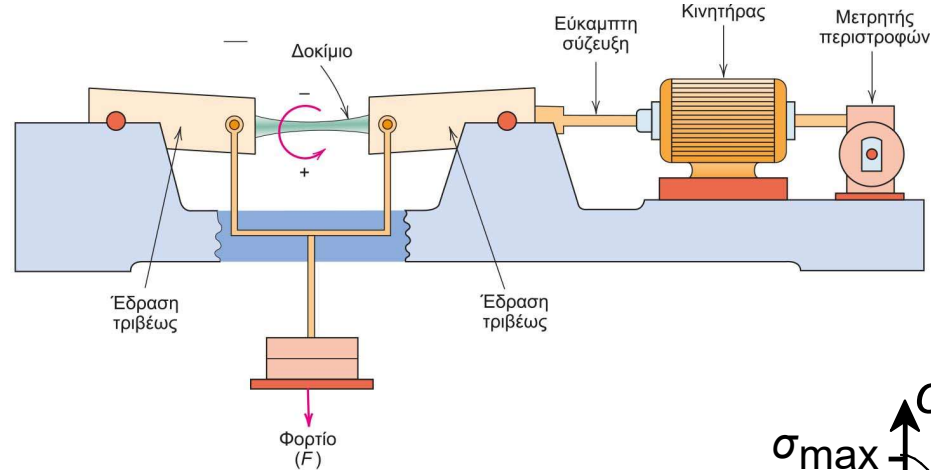
Αναπαράγεται με άδεια από R.W. Hertzberg, "Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials", (4th ed.) Σχ. 7.1(β), p. 262, John Wiley and Sons, Inc., 1996. (Αρχ. Πηγή: Earl R. Parker, "Behavior of Engineering Structures", Nat. Acad. Sci., Nat. Res. Council, John Wiley and Sons, Inc., NY, 1957.)

- **Πρόβλημα:** Χρησιμοποιούνταν χάλυβες με DBTT οριακά κάτω από την $T_{\text{δωματίου}}$

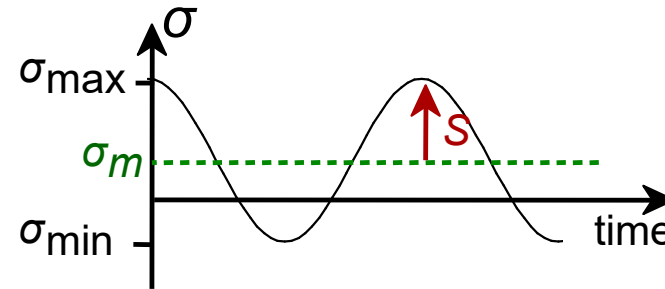
ΚΟΠΩΣΗ

Κόπωση

- **Κόπωση** = αστοχία υπό εφαρμοζόμενη κυκλική τάση.

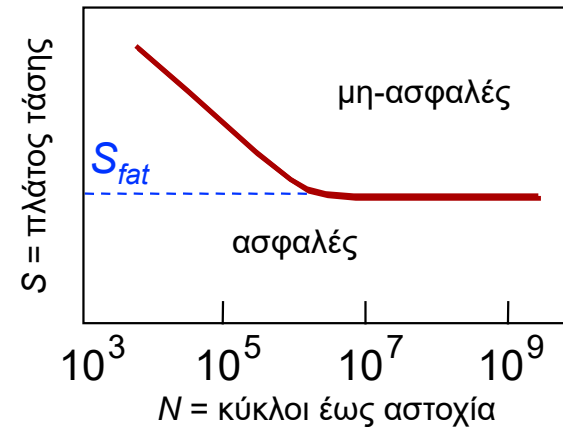


- Η τάση ως χρονικά κυμαινόμενο μέγεθος.
 - Βασικές παράμετροι: S , σ_m , και συχνότητα κύκλων φόρτισης
- Σημαντικό! Η κόπωση...
 - μπορεί να προκαλέσει αστοχία ενός μέλους ακόμα κι αν $\sigma_{\max} < \sigma_y$.
 - υπεύθυνη για ~90% των αστοχιών σε μηχανικές δομές.



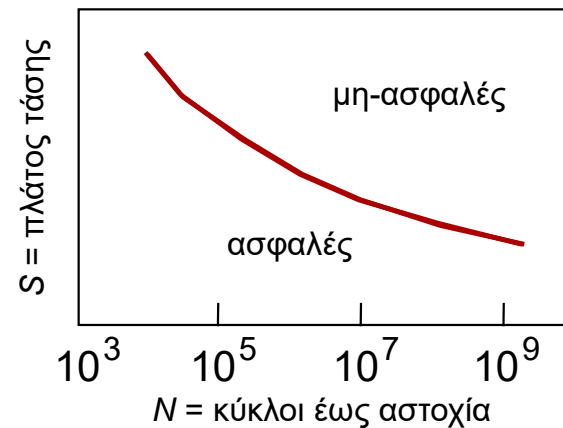
Συμπεριφορές κόπωσης

- Όριο κόπωσης, S_{fat} :
--δεν υφίσταται κόπωση
εάν $S < S_{fat}$



Περίπτωση για
χάλυβα (τυπ.)

- Για ορισμένα υλικά,
δεν υπάρχει όριο
κόπωσης!



περίπτωση
για Al (τυπ.)

Ρυθμός ανάπτυξης ρωγμής κόπωσης

- Μία ρωγμή κόπωσης αναπτύσσεται *αυξητικά* (βαθμιαία)

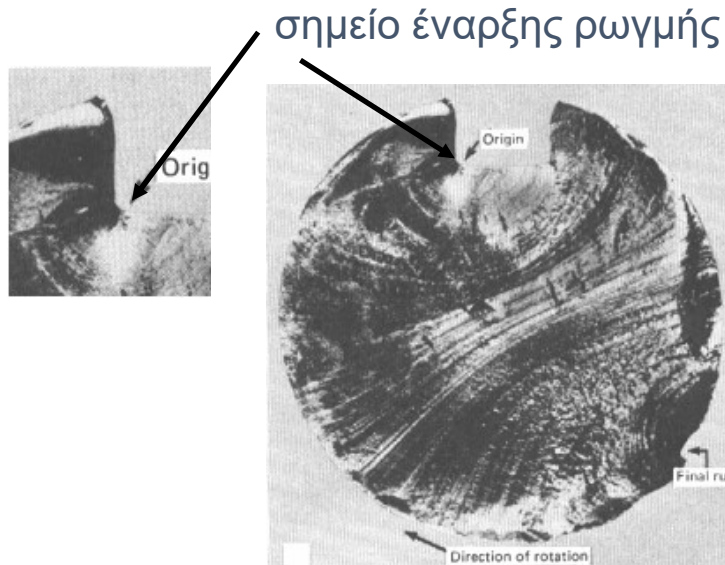
$$\frac{da}{dN} = (\Delta K)^m$$

τυπικά, 1 έως 6

$$\sim (\Delta \sigma) \sqrt{a}$$

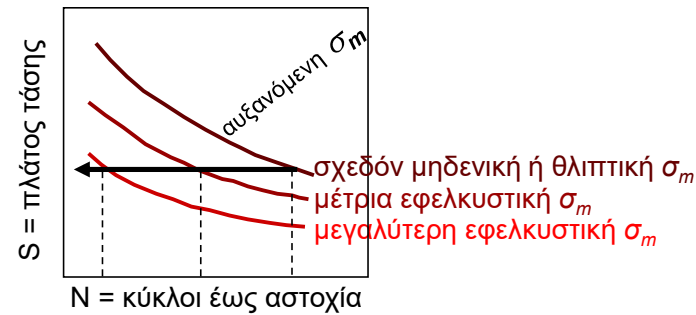
αύξηση μήκους ρωγμής ανά κύκλο φόρτισης

- Αστοχία περιστρ. άξονα
 - ανάπτυξη ρωγμής παρά το γεγονός ότι
$$K_{max} < K_c$$
 - ταχύτερη ανάπτυξη ρωγμής καθώς
 - αυξάνεται το $\Delta \sigma$
 - αυξάνεται το μήκος ρωγμής
 - αυξάνεται η συχνότητα φόρτισης.

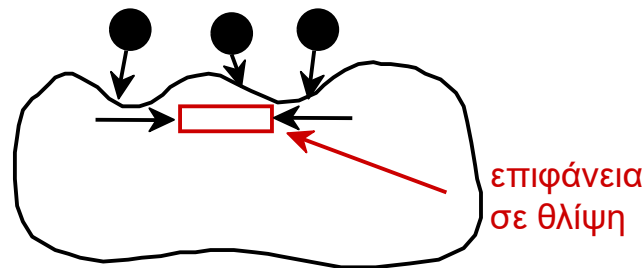


Βελτίωση της διάρκειας ζωής σε κόπωση

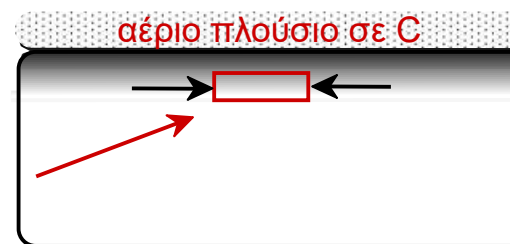
1. Επιβολή θλιπτικών τάσεων σε επιφάνειες (για αποτροπή ανάπτυξης των επιφανειακών ρωγμών)



--Μέθοδος 1: Σφαιροβολή



--Μέθοδος 2: Ενανθράκωση



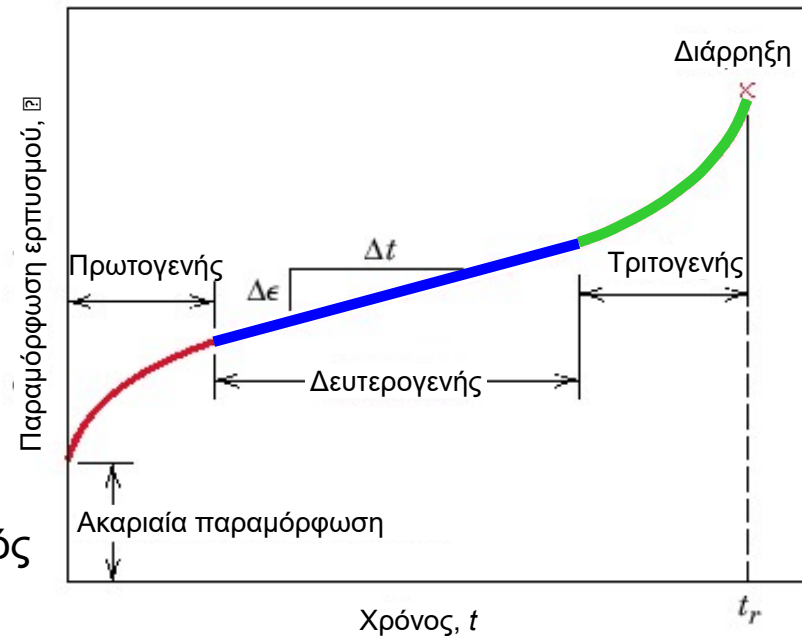
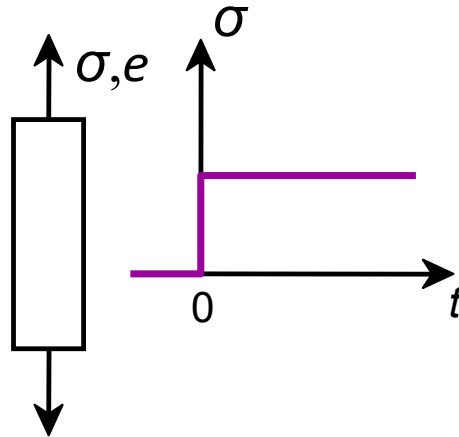
2. Σχεδιασμός: Εξάλειψη θέσεων συγκέντρωσης τάσεων.



ΕΡΠΥΣΜΟΣ

Ερπυσμός

Χρονικά εξαρτώμενη παραμόρφωση ενός υλικού όταν υπόκεινται σε σταθερή τάση (σ)



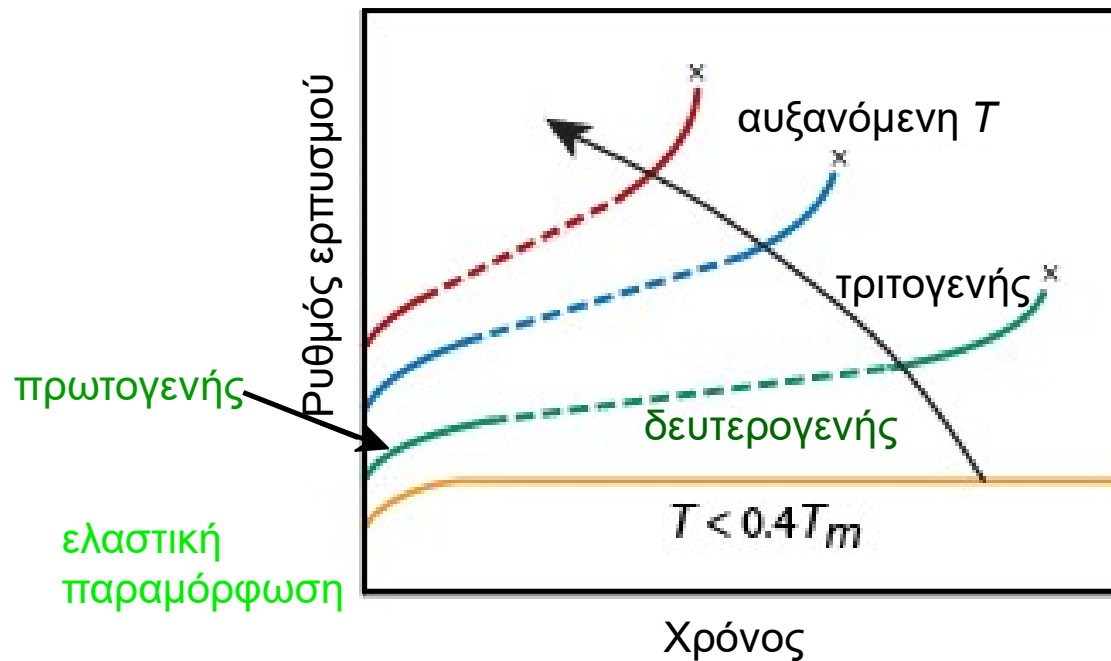
Πρωτογενής ερπυσμός: η κλίση (ρυθμός ερπυσμού) μειώνεται με τον χρόνο.

Δευτερογενής ερπυσμός: σταθερή κατάσταση - δηλ., σταθερή κλίση ($\Delta\epsilon / \Delta t$).

Τριτογενής ερπυσμός: η κλίση αυξάνεται με τον χρόνο (επιτάχυνση (ρυθμού ερπυσμού)).

Ερπυσμός: Εξάρτηση από τη θερμοκρασία

- Εκδηλώνεται σε αυξημένη θερμοκρασία, $T > 0.4 T_m$ (K)



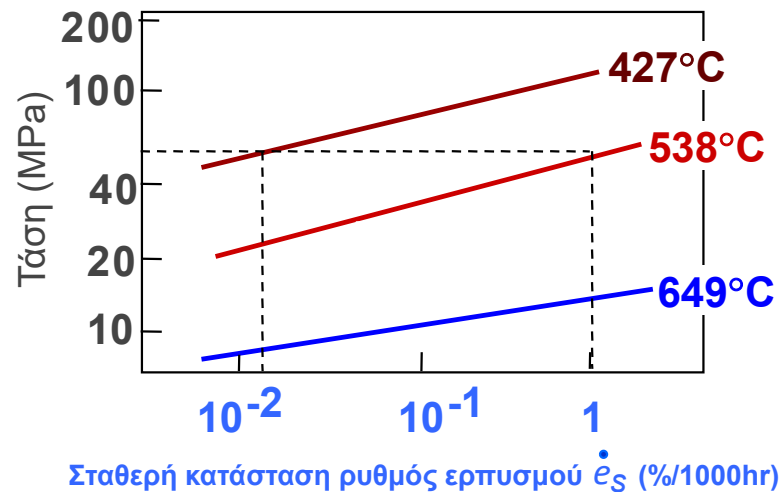
Δευτερογενής ερπυσμός

- Σταθερός ρυθμός παραμόρφωσης σε συγκεκριμένες τιμές των T , σ
-- εξισορρόπηση κράτυνσης από ανάκτηση (εκτόνωση εσωτ. ενέργειας παραμόρφωσης)

Ρυθμός παραμόρφωσης $\dot{\epsilon}_s$ = $K_2 \sigma^n \exp\left(-\frac{Q_c}{RT}\right)$

σταθ. υλικού K_2 εκθέτης τάσης (παράμετρος υλικού) n ενέργεια ενεργοποίησης για ερπυσμό (παράμετρος υλικού) Q_c εφαρμοζόμενη τάση σ

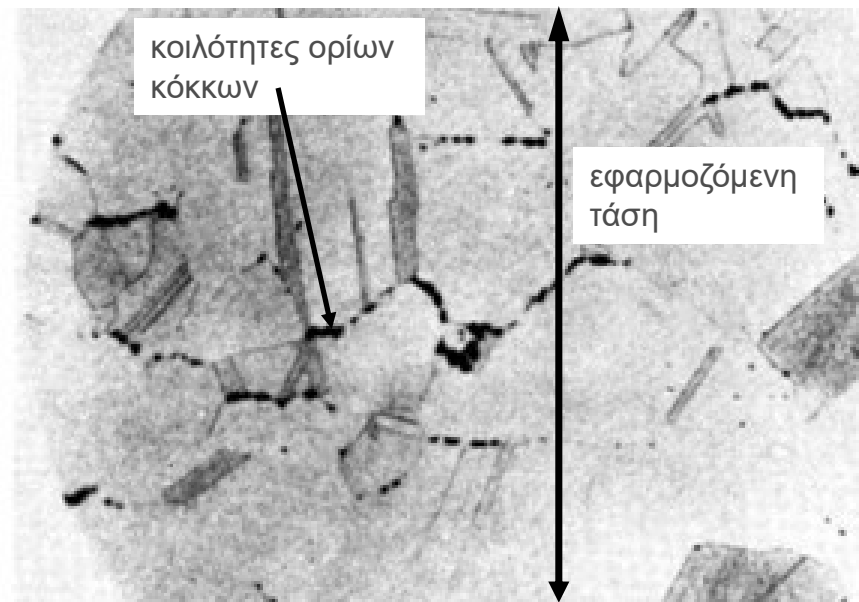
- Ο ρυθμός παραμόρφωσης αυξάνεται αυξανόμενων των T , σ



Διασκευή από Σχ. 9.38, Callister & Rethwisch 4e.
[Αναπαράγεται με άδεια από *Metals Handbook: Properties and Selection: Stainless Steels, Tool Materials, and Special Purpose Metals*, Vol. 3, 9th ed., D. Benjamin (Senior Ed.), ASM International, 1980, p. 131.]

Αστοχία λόγω ερπυσμού

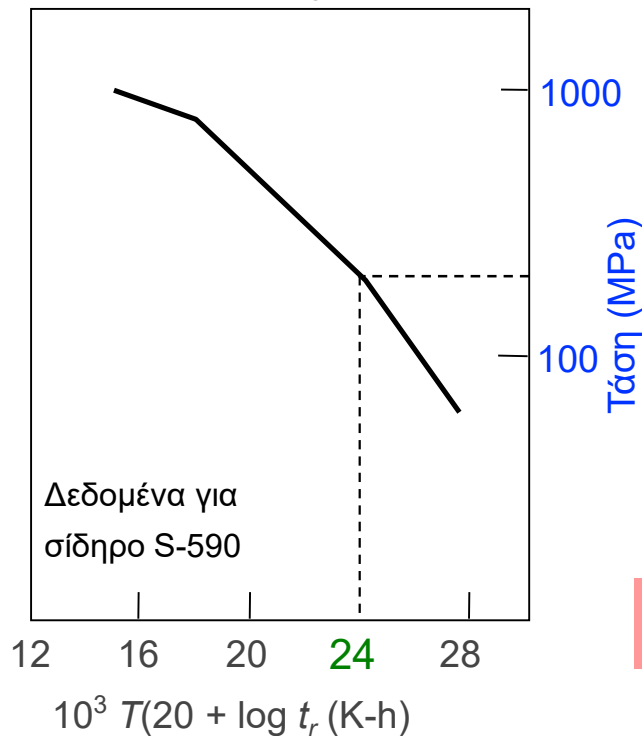
- Εκδηλώνεται κατά μήκος ορίων κόκκων.



Από V.J. Colangelo and F.A. Heiser, *Analysis of Metallurgical Failures* (2nd ed.), Σχ. 4.32, p. 87, John Wiley and Sons, Inc., 1987. (Αρχική πηγή: Pergamon Press, Inc.)

Πρόβλεψη διάρκειας ζωής έως αστοχία λόγω ερπυσμού

- Υπολογισμός χρόνου έως διάρρηξη
S-590 σίδηρος, $T = 800^{\circ}\text{C}$, $\sigma = 140 \text{ MPa}$



Χρόνος έως διάρρηξη, t_r

$$T(20 + \log t_r) = L$$

θερμοκρασία

χρόνος έως αστοχία
(διάρρηξη)

συνάρτηση
εφαρμοζόμενης
τάσης

$$(1073 \text{ K})(20 + \log t_r) = 24 \times 10^3$$

Απάντηση: $t_r = 233 \text{ hr}$

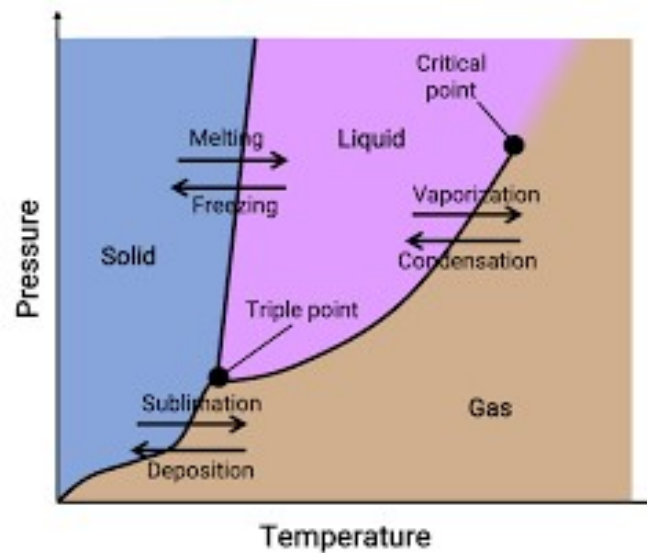


ΣΥΝΟΨΗ



- Τα τεχνικά υλικά δεν είναι τόσο ανθεκτικά όσο προβλέπεται από τη θεωρία
- Οι **ατέλειες** λειτουργούν ως **θέσεις συγκέντρωσης τάσεων** και μπορούν να προκαλέσουν αστοχία σε τάσεις χαμηλότερες από τις θεωρητικά προβλεπόμενες τιμές
- Η ύπαρξη αιχμηρών γωνιών οδηγεί σε μεγάλες συγκεντρώσεις τάσεων και πρόωμη αστοχία.
- Ο τύπος της αστοχίας εξαρτάται από τις T και σ :
 - Για **απλή θραύση** (μη-κυκλικά εφαρμοζόμενη σ και $T < 0.4 T_m$) η τάση αστοχίας μειώνεται με:
 - αύξηση του μέγιστου μεγέθους ατέλειας,
 - μείωση της T ,
 - αύξηση του ρυθμού φόρτισης.
 - Για **κόπωση** (κυκλικά εφαρμοζόμενη σ):
 - οι κύκλοι έως αστοχία μειώνονται αυξανόμενης της $\Delta\sigma$.
 - Για **ερπυσμό** ($T > 0.4 T_m$):
 - ο χρόνος έως διάρρηξη μειώνεται αυξανόμενης της σ ή της T .

Διαγράμματα φάσης



Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- Όταν συνδυάζουμε δύο στοιχεία...
ποια είναι η προκύπτουσα
κατάσταση ισορροπίας;
- Ειδικότερα, εάν καθορίσουμε...
 - τη σύσταση (π.χ. wt% Cu-wt% Ni),
και
 - τη θερμοκρασία (T)

τότε...

Πόσες φάσεις δημιουργούνται;
Ποια είναι η σύσταση κάθε φάσης;
Ποια είναι η ποσότητα κάθε φάσης;



ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ΦΑΣΕΩΝ

Ισορροπίες φάσεων και όριο διαλυτότητας

- **Διάλυμα** – στερεό, υγρό, ή αέριο, μία μεμονωμένη φάση
- **Μείγμα** – περισσότερες από μία φάση

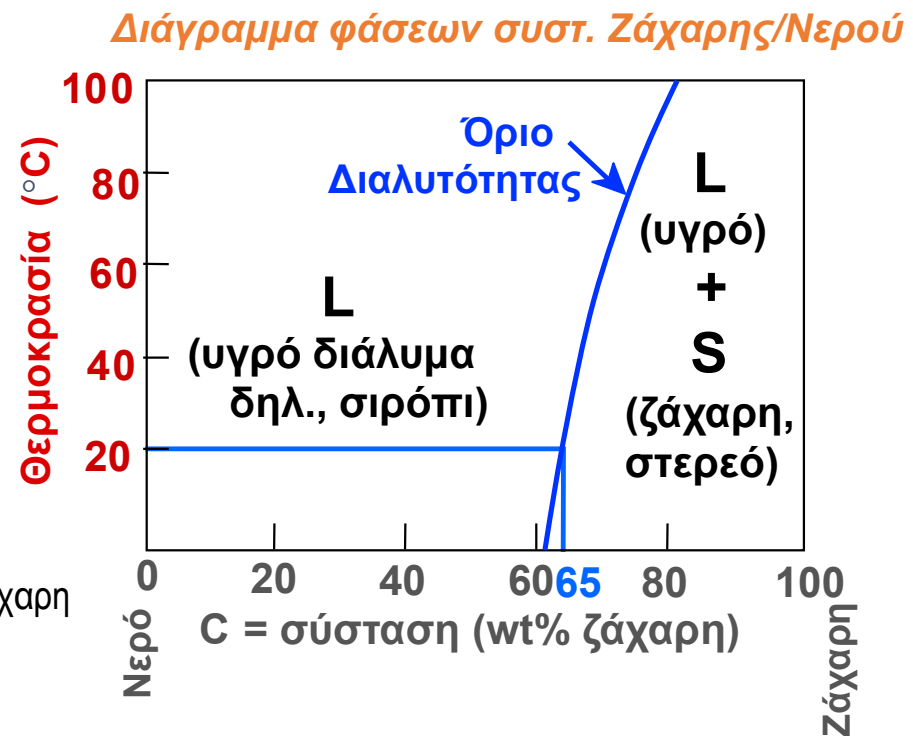
- **Όριο διαλυτότητας:**
Η μέγιστη συγκέντρωση
για την οποία υπάρχει
διάλυμα με μόνο μία φάση.

Ερώτημα: Ποιο είναι το όριο
διαλυτότητας για τη ζάχαρη
στο νερό, στους 20°C;

Απάντηση: 65 wt% ζάχαρη.

20°C: Εάν $C < 65 \text{ wt\% ζάχαρη}$ => σιρόπι

20°C: Εάν $C > 65 \text{ wt\% ζάχαρη}$ => σιρόπι + ζάχαρη



Συστατικά και φάσεις

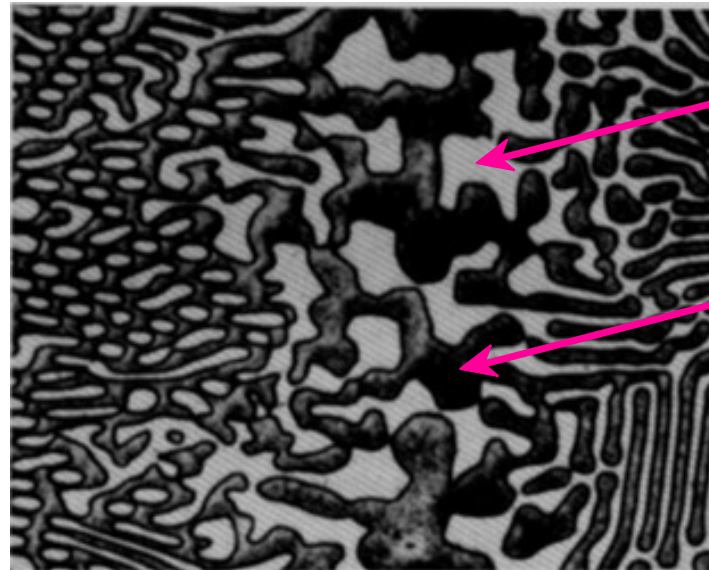
- **Συστατικά:**

Τα στοιχεία, ή οι ενώσεις στοιχείων που εμπεριέχονται σε ένα κράμα (π.χ., Al και Cu)

- **Φάσεις:**

Οι φυσικά και χημικά διακριτές περιοχές υλικού που σχηματίζονται (π.χ., α και β).

κράμα
αλουμινίου-
χαλκού

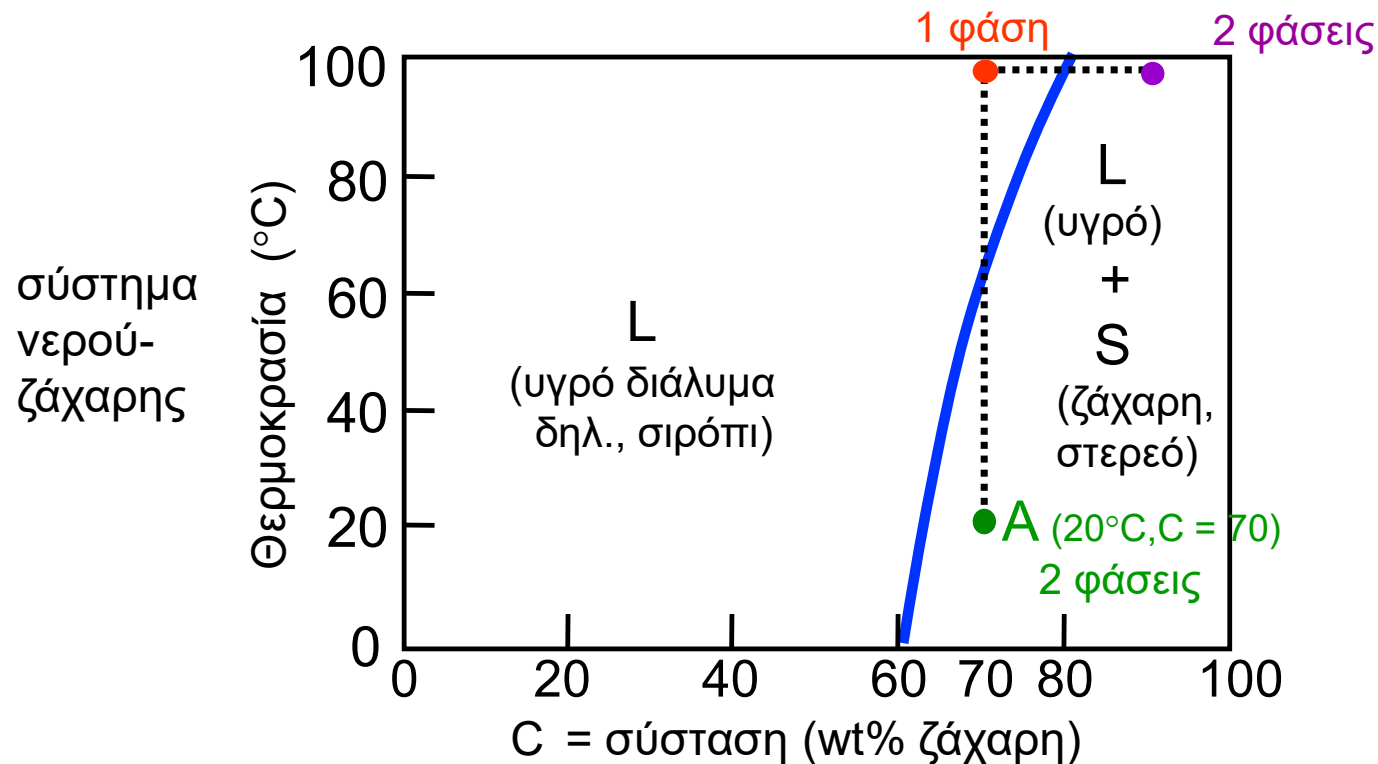


β (φωτεινόχρωμη
φάση)

α (σκουρόχρωμη
φάση)

Επίδραση της θερμοκρασίας & σύστασης

- Η μεταβολή της T μπορεί να μεταβάλλει τον αριθμό των φάσεων: διαδρομή **A** έως **B**.
- Η μεταβολή της C μπορεί να μεταβάλλει τον αριθμό των φάσεων: διαδρομή **B** έως **D**.



Κριτήρια για στερεά διαλυτότητα

Απλό σύστημα (π.χ., διάλυμα Ni-Cu)

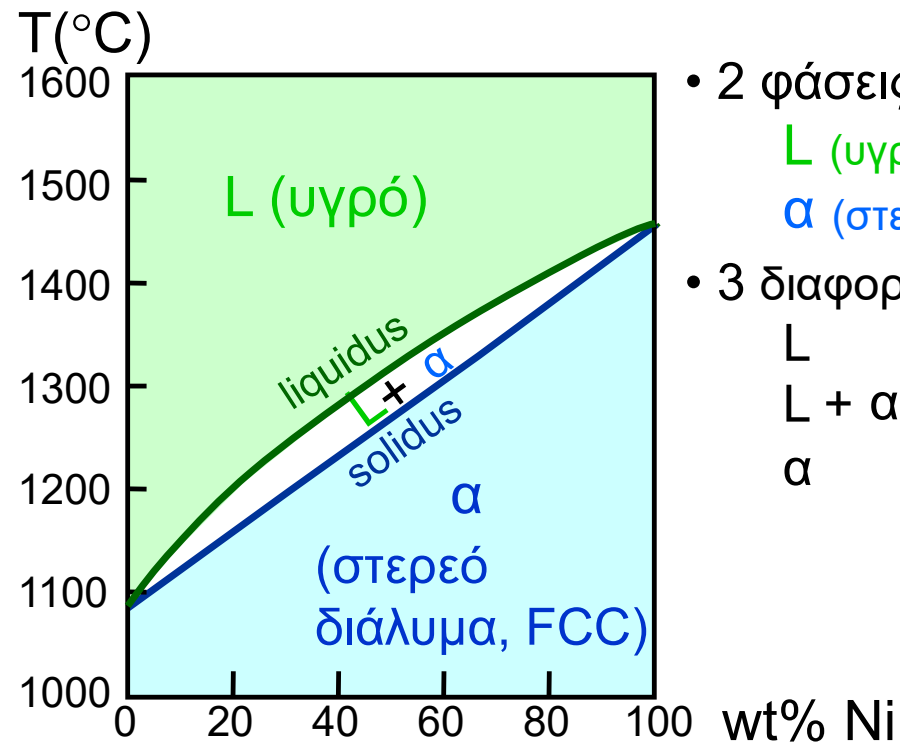
	Κρυσταλλική δομή	Ηλεκτρ- αρνητικότητα	r (nm)
Ni	FCC	1.9	0.1246
Cu	FCC	1.8	0.1278

- Αμφότερα τα συστατικά έχουν την ίδια κρυσταλλική δομή (FCC), παρόμοιες ηλεκτραρνητικότητες και ατομικές ακτίνες (κανόνες [W. Hume-Rothery](#)), αυτό υποδεικνύει υψηλή αμοιβαία διαλυτότητα.
- Τα Ni και Cu είναι πλήρως διαλυτά το ένα στο άλλο, σε όλες τις αναλογίες.

Διαγράμματα φάσεων

- Υποδεικνύουν τις φάσεις των υλικών ως συνάρτηση των T , C , και P .
- Για τους σκοπούς του παρόντος μαθήματος:
 - δυαδικά συστήματα: μόνο 2 συστατικά.
 - ανεξάρτητες μεταβλητές: T και C (σχεδόν πάντα χρησιμοποιείται $P = 1 \text{ atm}$).

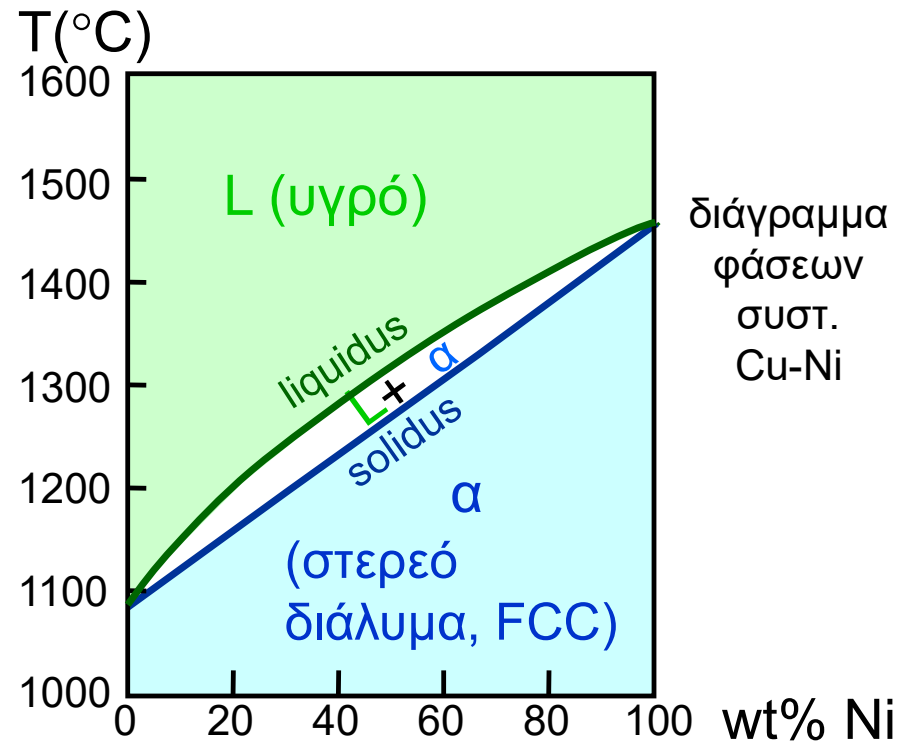
διάγραμμα
φάσεων
για το
σύστημα
Cu-Ni



- 2 φάσεις:
 - L (υγρό)
 - α (στερεό διάλυμα, FCC)
- 3 διαφορετικά πεδία φάσης:
 - L
 - $L + \alpha$
 - α

Ισόμορφα διάγραμμα φάσεων, δυαδικά συστήματα

- Διάγραμμα φάσεων συστήματος Cu-Ni
- Το σύστημα είναι:
 - **δυαδικό**
δηλ., 2 συστατικά:
Cu και Ni.
 - **ισόμορφο**
δηλ., πλήρης διαλυτότητα
του ενός συστατικού
στο άλλο· το πεδίο
φάσης α εκτείνεται
από 0 έως 100 wt% Ni



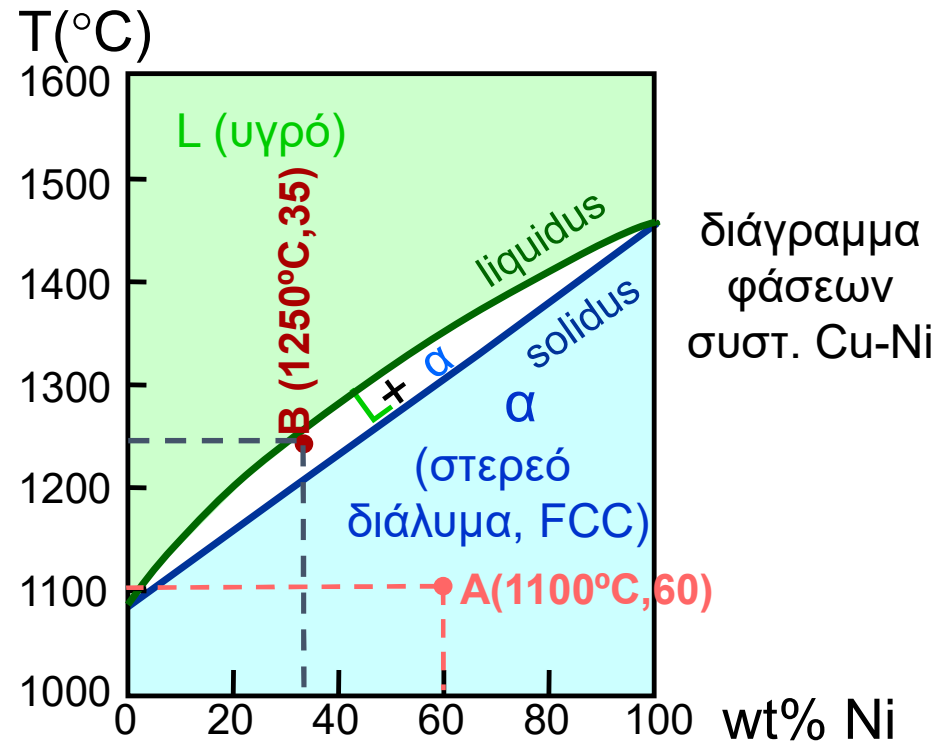
Διαγράμματα φάσεων: Προσδιορισμός υπαρχουσών φάσεων

- **Κανόνας 1:** Εάν γνωρίζουμε τις T και C_0 , τότε γνωρίζουμε επίσης -- ποιες φάσεις υπάρχουν στο κράμα.

- Παραδείγματα:

A(1100°C, 60 wt% Ni):
1 φάση: α

B(1250°C, 35 wt% Ni):
2 φάσεις: L + α



Διαγράμματα φάσεων: Προσδιορισμός των συστάσεων των φάσεων

- **Κανόνας 2:** Εάν γνωρίζουμε τις T και C_0 , μπορούμε να προσδιορίσουμε -- τη σύσταση κάθε φάσης.

- Παραδείγματα:

Δίνεται $C_0 = 35 \text{ wt\% Ni}$

Σε $T_A = 1320^\circ\text{C}$:

παρούσα μόνο η υγρή (L) φάση

$C_L = C_0$ ($= 35 \text{ wt\% Ni}$)

Σε $T_D = 1190^\circ\text{C}$:

παρούσα μόνο η στερεά (α) φάση

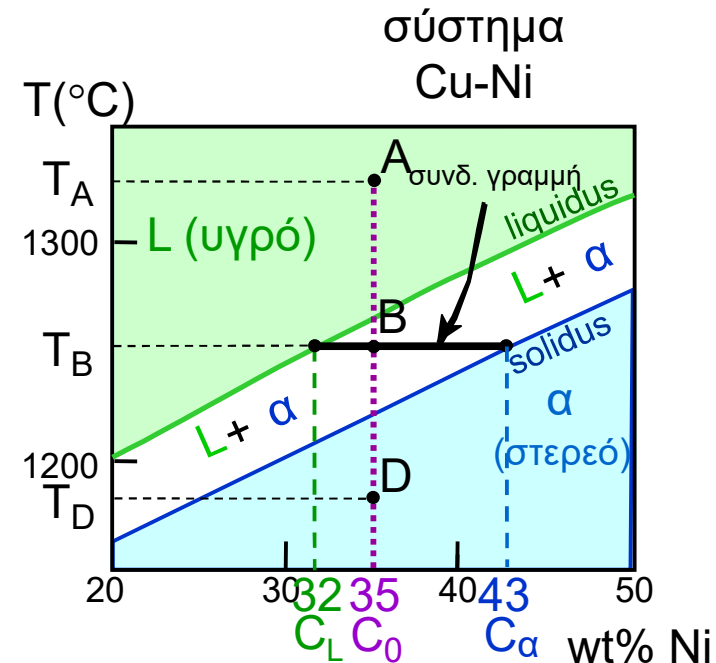
$C_\alpha = C_0$ ($= 35 \text{ wt\% Ni}$)

Σε $T_B = 1250^\circ\text{C}$:

Παρούσες αμφότερες οι φάσεις α και L

$C_L = C_{\text{liquidus}}$ ($= 32 \text{ wt\% Ni}$)

$C_\alpha = C_{\text{solidus}}$ ($= 43 \text{ wt\% Ni}$)



Διαγράμματα φάσεων: Προσδιορισμός των κλασμάτων βάρους των φάσεων

- **Κανόνας 3:** Εάν γνωρίζουμε τις T και C_0 , μπορούμε να προσδιορίσουμε -- το κλάσμα βάρους κάθε φάσης.
- *Παραδείγματα:*

Δίνεται $C_0 = 35 \text{ wt\% Ni}$

Σε T_A : παρούσα μόνο η υγρή (L) φάση

$$W_L = 1.00, W_\alpha = 0$$

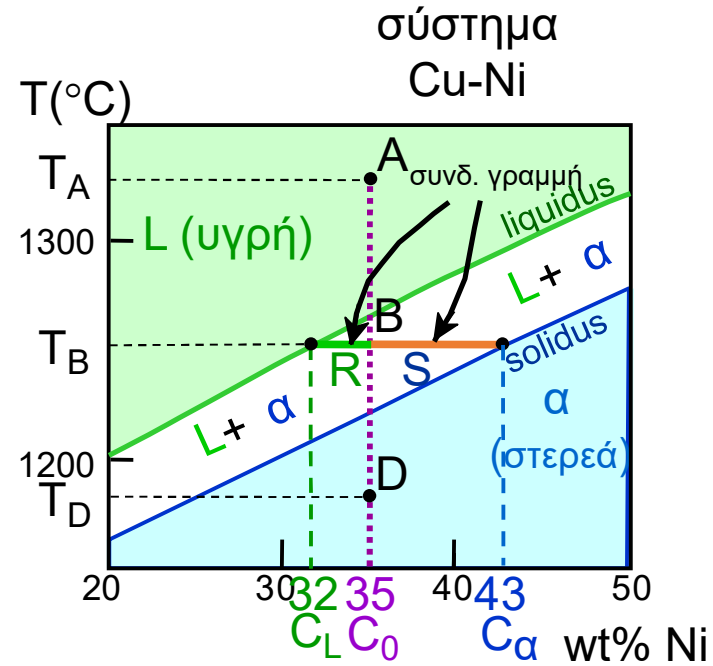
Σε T_D : παρούσα μόνο η στερεά (α) φάση

$$W_L = 0, W_\alpha = 1.00$$

Σε T_B : παρούσες αμφότερες οι φάσεις
α και L

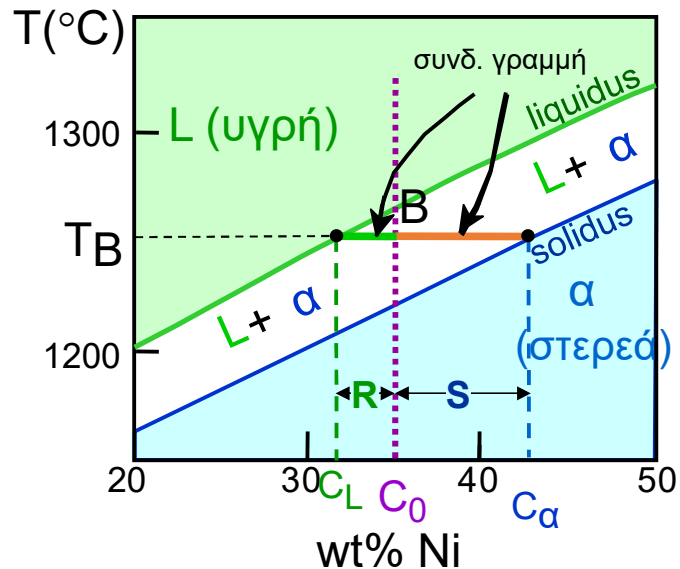
$$W_L = \frac{S}{R+S} = \frac{43-35}{43-32} = 0.73$$

$$W_{\alpha} = \frac{R}{R+S} = 0.27$$

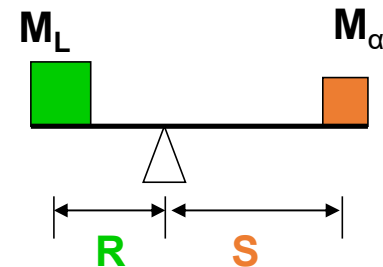


Ο κανόνας του μοχλού

- Συνδετική γραμμή – ενώνει τις φάσεις που είναι παρούσες στην κατάσταση ισορροπίας



Είναι το κλάσμα βάρους κάθε φάσης;
Σκεφτείτε τη συνδετική γραμμή ως
μοχλό



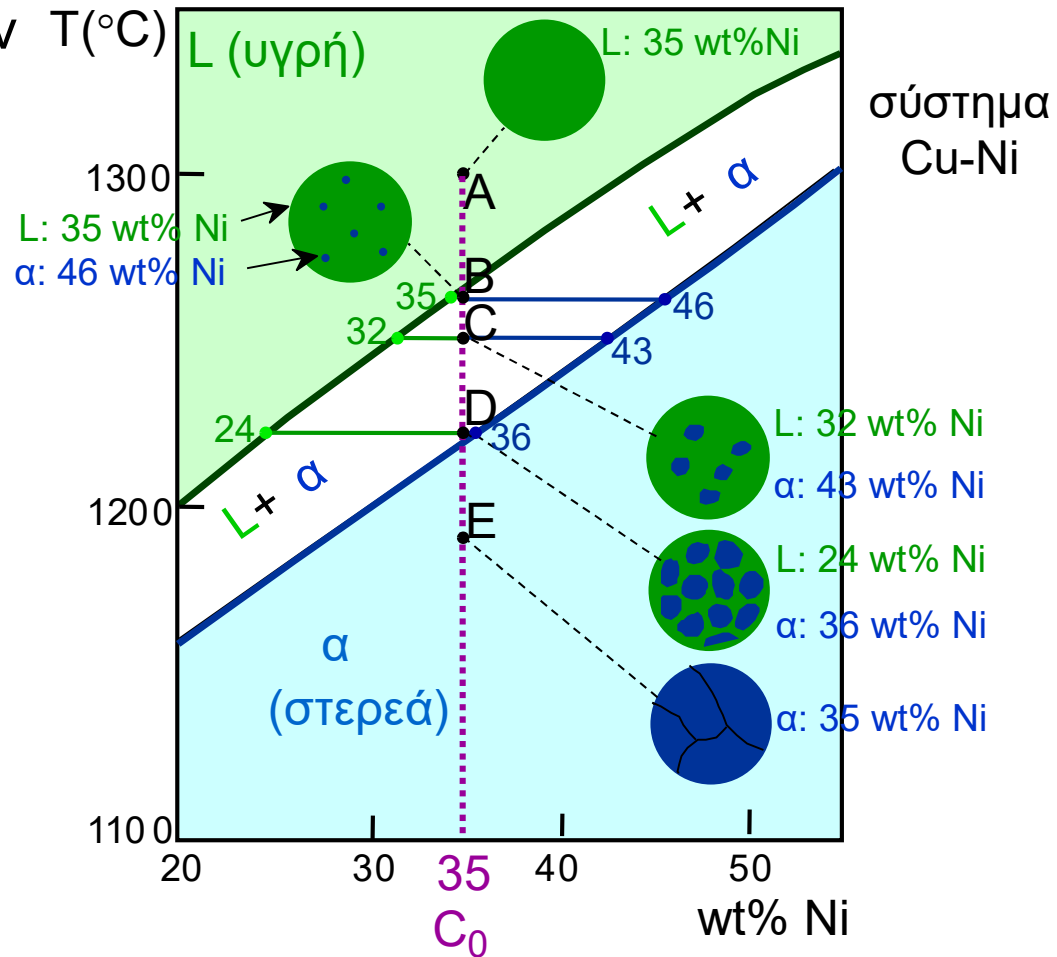
$$M_{\alpha} \times S = M_L \times R$$

$$W_L = \frac{M_L}{M_L + M_{\alpha}} = \frac{S}{R + S} = \frac{C_{\alpha} - C_0}{C_{\alpha} - C_L}$$

$$W_{\alpha} = \frac{R}{R + S} = \frac{C_0 - C_L}{C_{\alpha} - C_L}$$

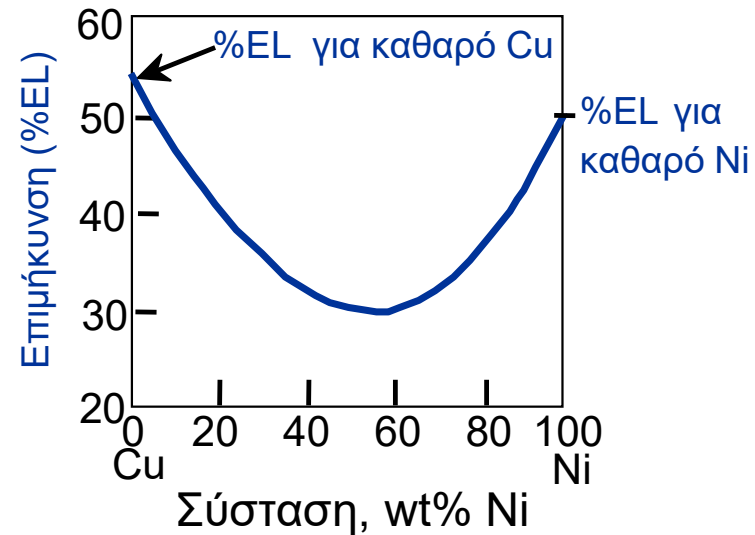
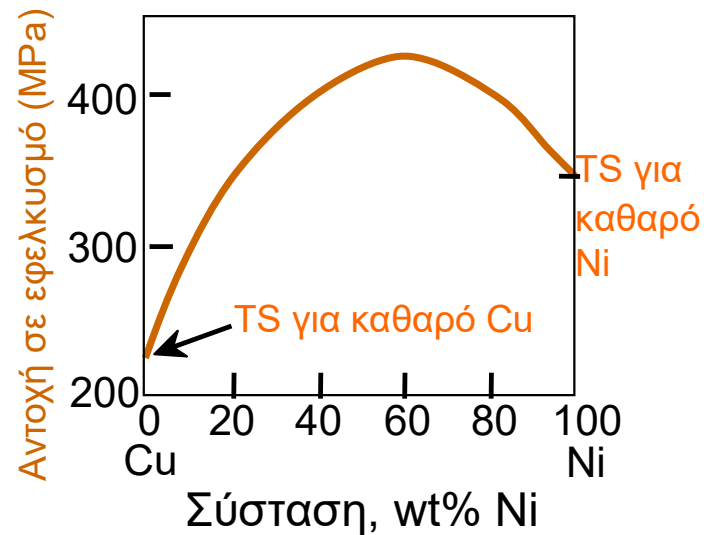
Παράδειγμα: Ψύξη κράματος Cu-Ni

- Διάγραμμα φάσεων συστήματος Cu-Ni.
- Διερεύνηση των μικροδομικών μεταβολών που λαμβάνουν χώρα κατά την ψύξη του κράματος με $C_0 = 35 \text{ wt\% Ni}$



Μηχανικές ιδιότητες: Σύστημα Cu-Ni

- Ισχυροποίηση του στερεού διαλύματος με επίδραση σε:
 - αντοχή σε εφελκυσμό (TS) -- ολκιμότητα (%EL)



Δυαδικά-ευτηκτικά συστήματα

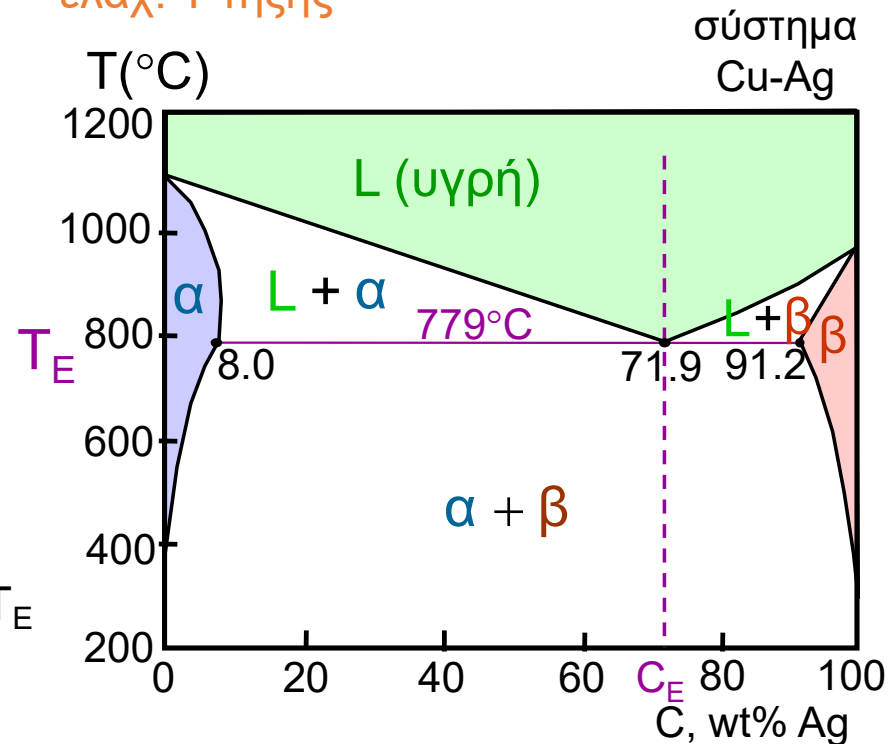
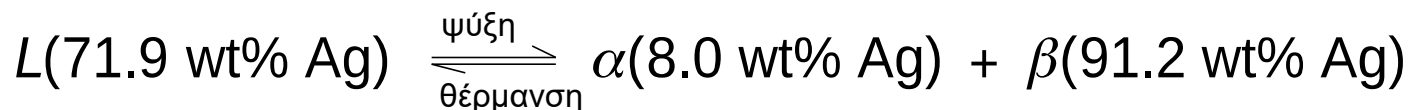
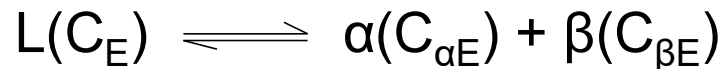
2 συστατικά

ειδική σύσταση με
ελάχ. T τήξης

Π.χ.: Σύστημα Cu-Ag

- 3 διακριτές περιοχές φάσεων (L, α , β)
- Περιορισμένη διαλυτότητα:
 - α : κυρίως Cu
 - β : κυρίως Ag
- T_E : δεν υφίσταται υγρή φάση κάτω από την T_E
- C_E : Σύσταση σε θερμοκρασία T_E

• Ευτηκτική αντίδραση



Παράδειγμα 1: Ευτηκτικό σύστημα Pb-Sn

- Για το κράμα 40 wt% Sn – 60 wt% Pb στους 150 °C, να προσδιοριστούν:
 - οι παρούσες φάσεις

Απάντηση: $\alpha + \beta$

-- Οι συστάσεις των φάσεων

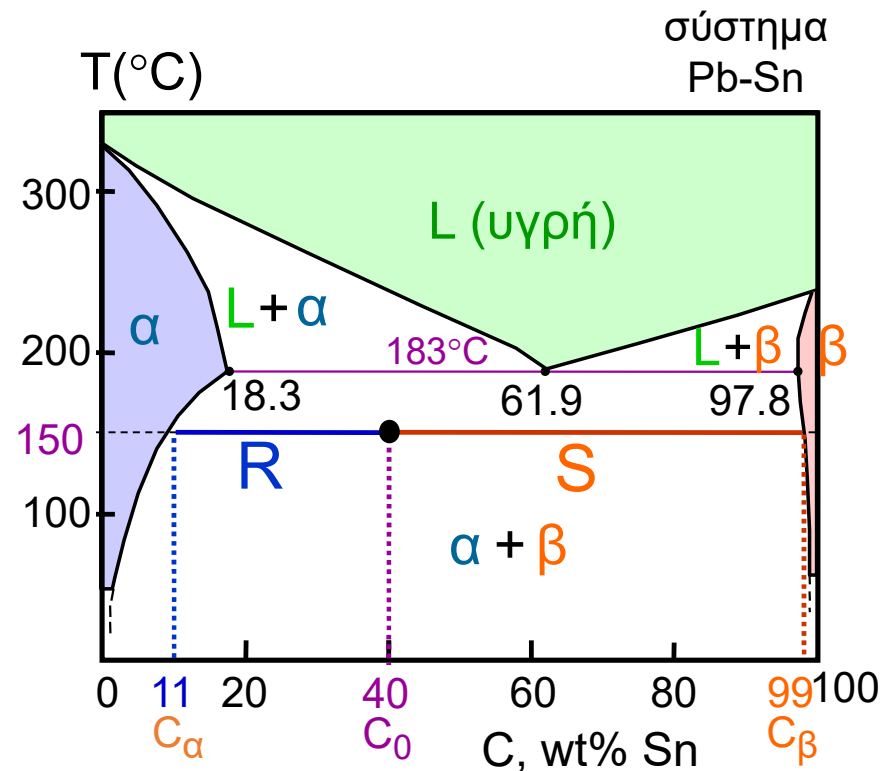
Απάντηση: $C_\alpha = 11 \text{ wt\% Sn}$
 $C_\beta = 99 \text{ wt\% Sn}$

-- Η σχετική ποσότητα
κάθε φάσης

Απάντηση:

$$W_\alpha = \frac{S}{R+S} = \frac{C_\beta - C_0}{C_\beta - C_\alpha}$$
$$= \frac{99 - 40}{99 - 11} = \frac{59}{88} = 0.67$$

$$W_\beta = \frac{R}{R+S} = \frac{C_0 - C_\alpha}{C_\beta - C_\alpha}$$
$$= \frac{40 - 11}{99 - 11} = \frac{29}{88} = 0.33$$



Παράδειγμα 2: Ευτηκτικό σύστημα Pb-Sn

- Για το κράμα 40 wt% Sn – 60 wt% Pb στους 220 °C, να προσδιοριστούν:

-- Οι παρούσες φάσεις

Απάντηση: $\alpha + L$

-- Οι συστάσεις των φάσεων

Απάντηση: $C_\alpha = 17 \text{ wt\% Sn}$

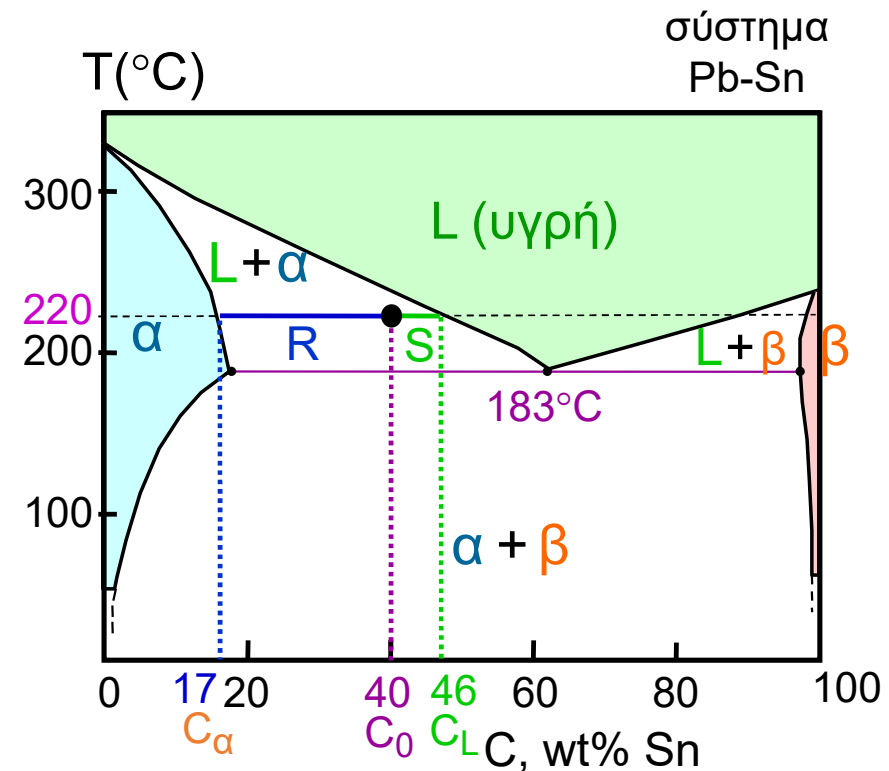
$C_L = 46 \text{ wt\% Sn}$

-- Η σχετική ποσότητα
κάθε φάσης

Απάντηση:

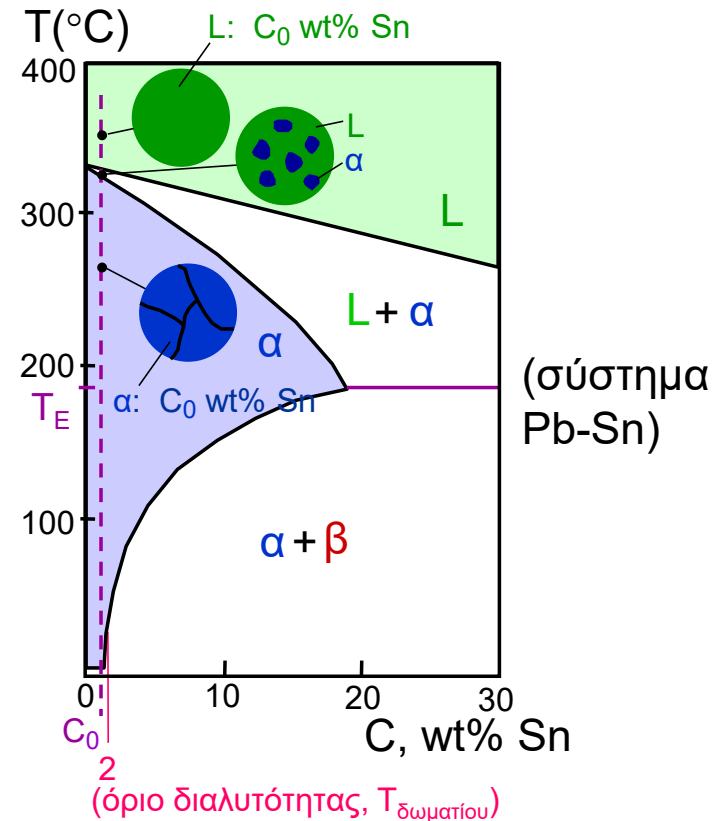
$$W_\alpha = \frac{C_L - C_0}{C_L - C_\alpha} = \frac{46 - 40}{46 - 17}$$
$$= \frac{6}{29} = 0.21$$

$$W_L = \frac{C_0 - C_\alpha}{C_L - C_\alpha} = \frac{23}{29} = 0.79$$



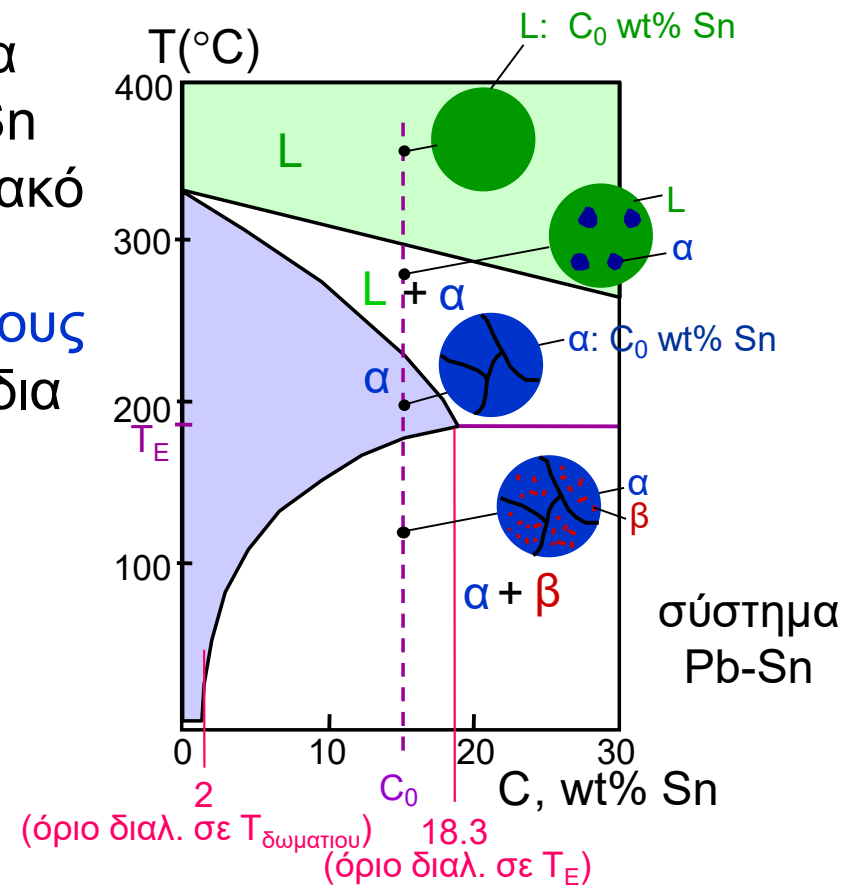
Ανάπτυξη μικροδομών σε ευτηκτικά συστήματα (1)

- Για κράματα Pb-Sn στα οποία $C_0 < 2 \text{ wt\% Sn}$
- Αποτέλεσμα σε θερμοκρασία δωματίου
 - πολυκρυσταλλικό, με τους κόκκους της φάσης α να έχουν σύσταση C_0



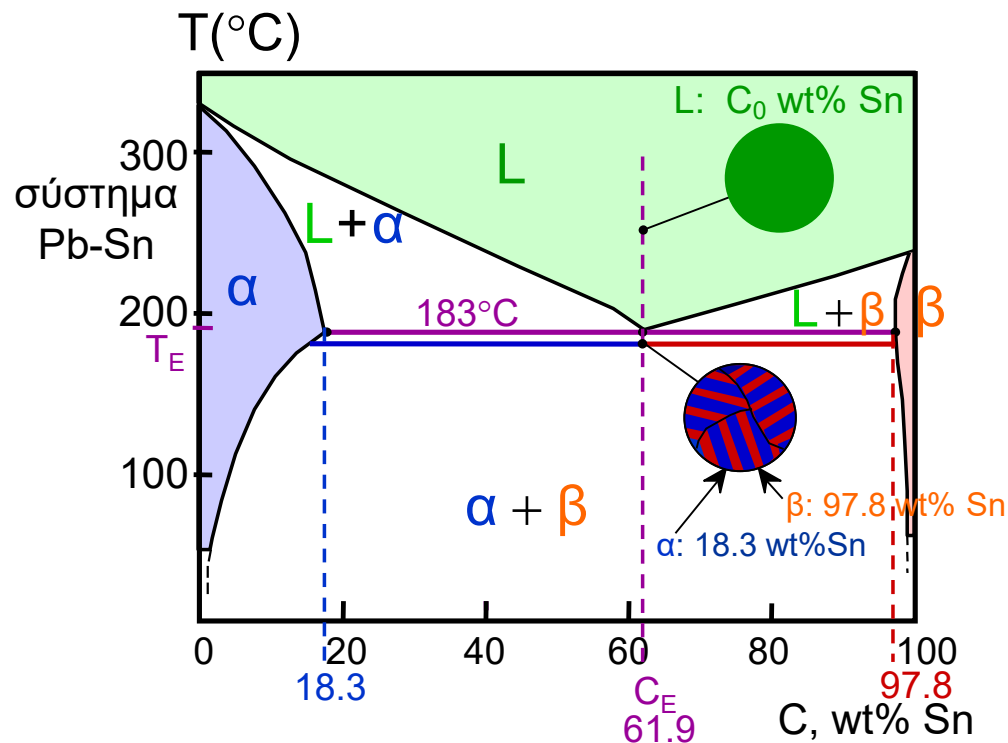
Ανάπτυξη μικροδομών σε ευτηκτικά συστήματα (2)

- Για κράματα Pb-Sn στα οποία $2 \text{ wt\% Sn} < C_0 < 18.3 \text{ wt\% Sn}$
- Αποτέλεσμα στο θερμοκρασιακό εύρος $\alpha + \beta$
 - πολυκρυσταλλικό, με **κόκκους** α -φάσης και μικρά σωματίδια β -φάσης



Ανάπτυξη μικροδομών σε ευτηκτικά συστήματα (3)

- Για κράματα Pb-Sn με σύσταση $C_0 = C_E$
- Αποτέλεσμα: ανάπτυξη ευτηκτικής μικροδομής (λαμελοειδής δομή)
-- εναλλάξ στρώματα (lamellae) των φάσεων α και β .

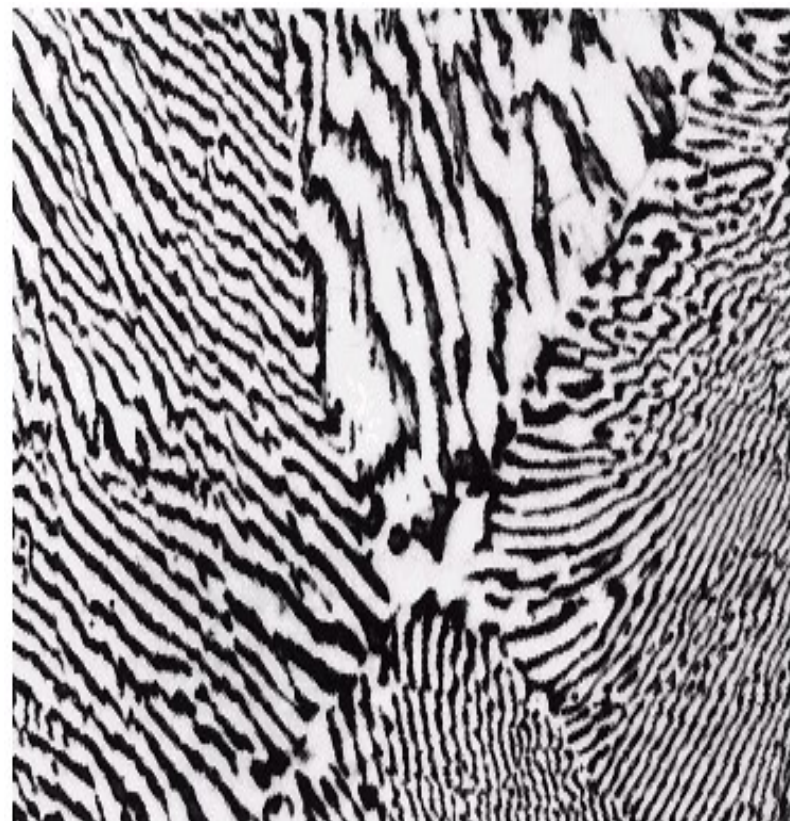
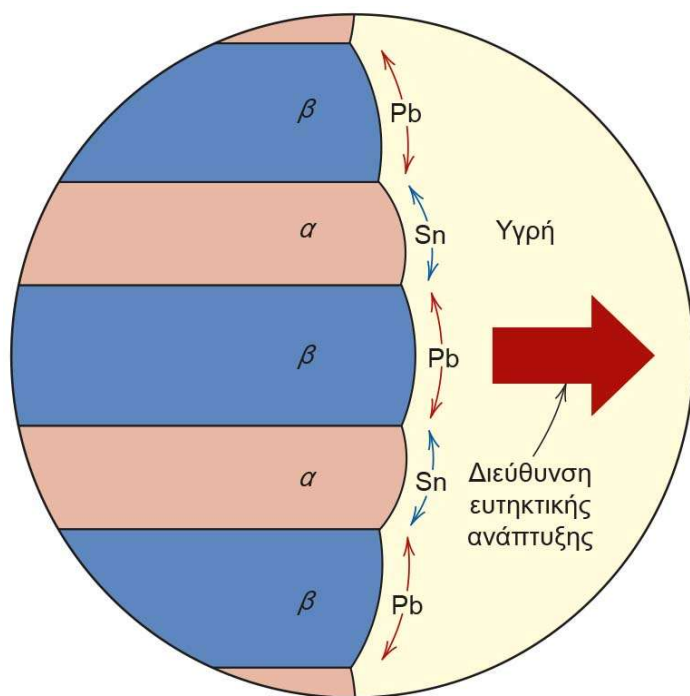


Μικροφωτογραφία
ευτηκτικής μικροδομής
σε κράμα Pb-Sn



160 μm

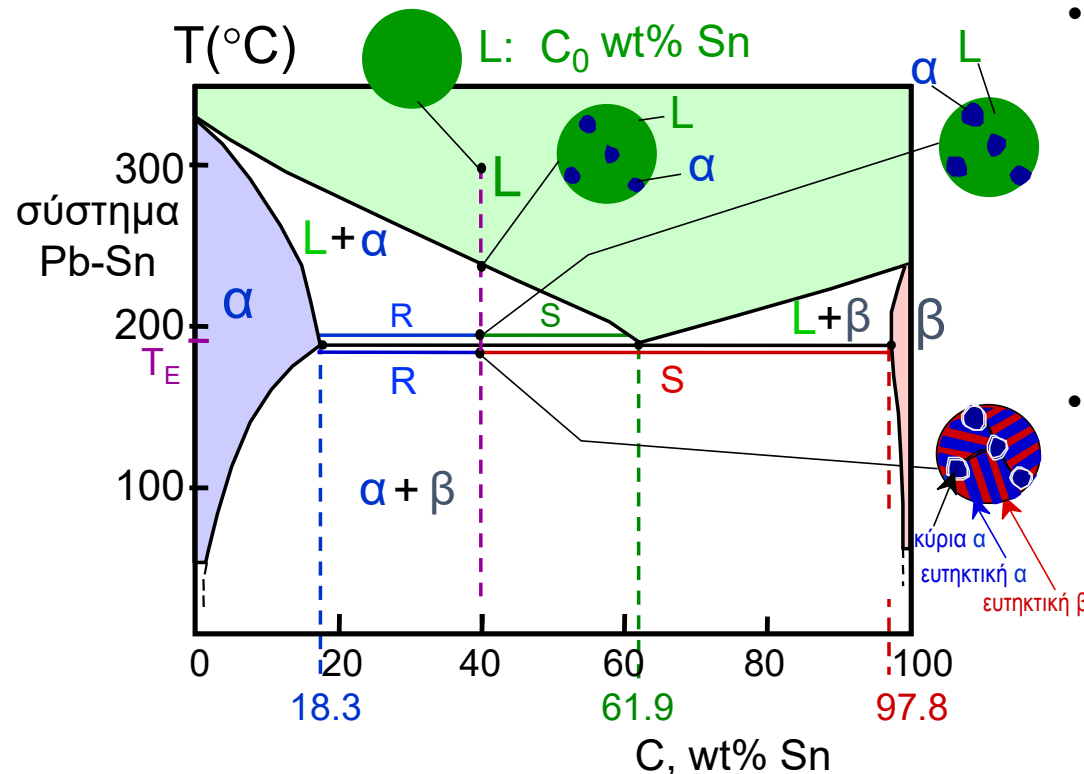
Φυλλοειδής* ευτηκτική δομή



* Λαμελοειδής

Ανάπτυξη μικροδομών σε ευτηκτικά συστήματα (4)

- Για κράματα Pb-Sn στα οποία $18.3 \text{ wt\% Sn} < C_0 < 61.9 \text{ wt\% Sn}$
- Αποτέλεσμα: σωματίδια φάσης α και ένα ευτηκτικό μικροσυστατικό



- Οριακά πάνω από την T_E :

$$C_\alpha = 18.3 \text{ wt\% Sn}$$

$$C_L = 61.9 \text{ wt\% Sn}$$

$$W_\alpha = \frac{S}{R + S} = 0.50$$

$$W_L = (1 - W_\alpha) = 0.50$$

- Οριακά κάτω από την T_E :

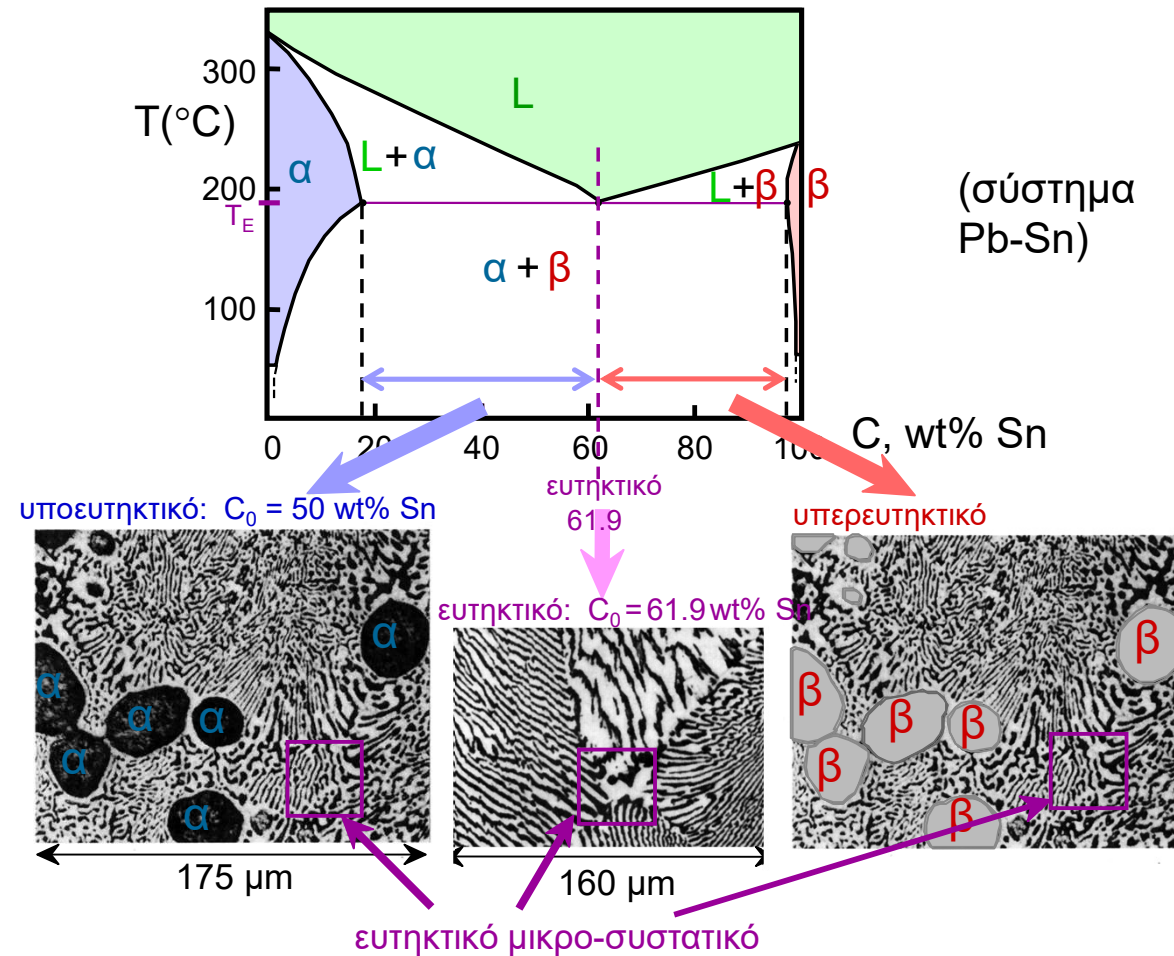
$$C_\alpha = 18.3 \text{ wt\% Sn}$$

$$C_\beta = 97.8 \text{ wt\% Sn}$$

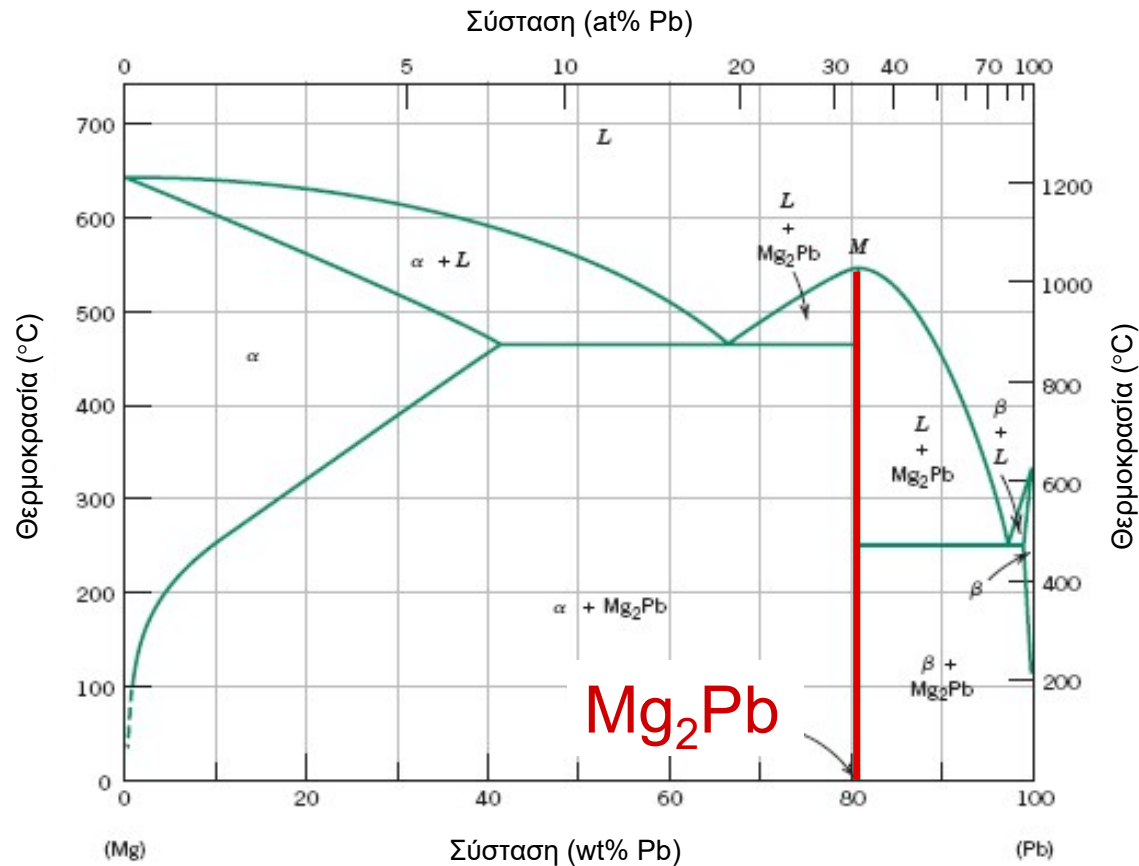
$$W_\alpha = \frac{S}{R + S} = 0.73$$

$$W_\beta = 0.27$$

Υποευτηκτικά & υπερευτηκτικά συστήματα



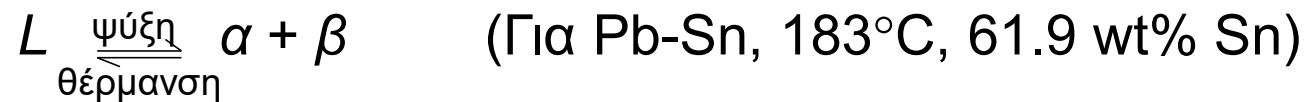
Διαμεταλλικές ενώσεις



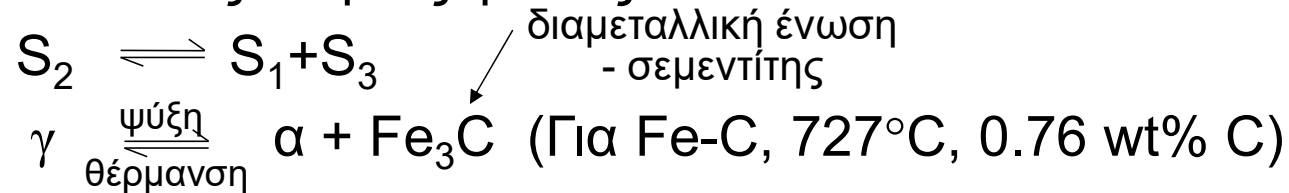
Σημείωση: Η διαμεταλλική ένωση υφίσταται ως γραμμή (και όχι επιφάνεια) στο διάγραμμα, λόγω στοιχειομετρίας (δηλ. η σύσταση της ένωσης είναι σταθερή).

Ευτηκτικά, ευτηκτοειδή & περιτηκτικά συστήματα

- **Ευτηκτικό** – μετασχηματισμός υγρού σε δύο στερεές φάσεις



- **Ευτηκτοειδές** – μετασχηματισμός μιας στερεάς φάσης σε δύο άλλες στερεές φάσεις



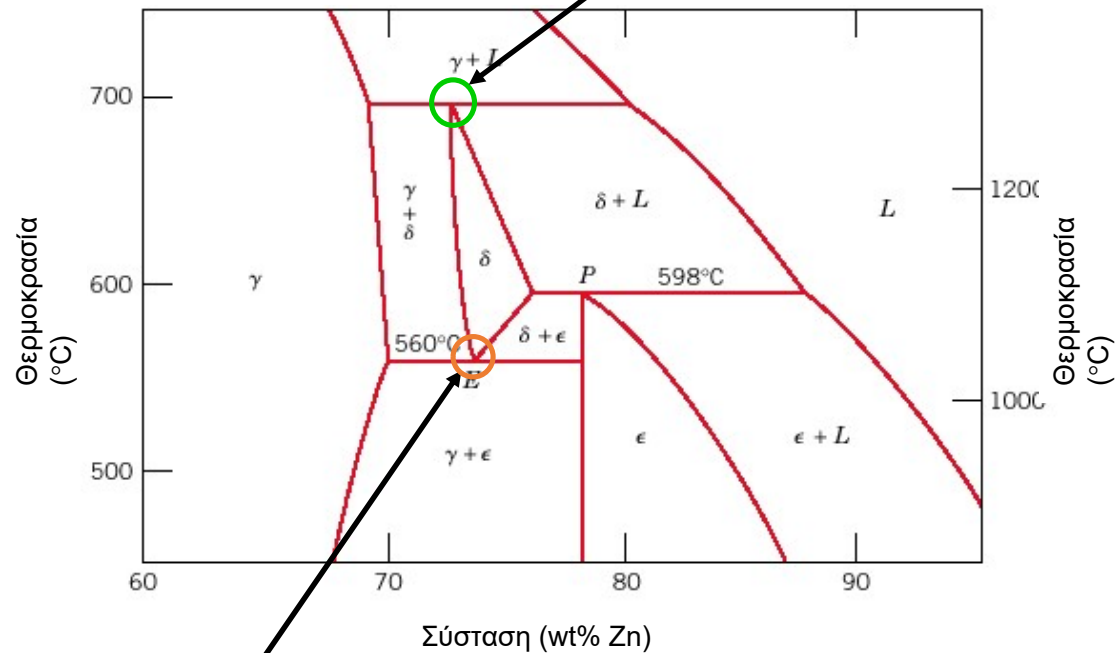
- **Περιτηκτικό** - μετασχηματισμός υγρού και μιας στερεάς φάσης σε μία δεύτερη στερεά φάση



Ευτηκτοειδής & περιτηκτικός μετασχηματισμός

Διάγραμμα φάσεων
συστήματος Cu-Zn

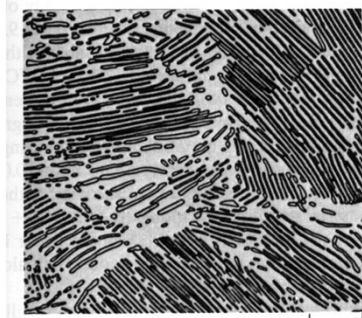
Περιτηκτικός μετασχηματισμός $\gamma + L \rightleftharpoons \delta$



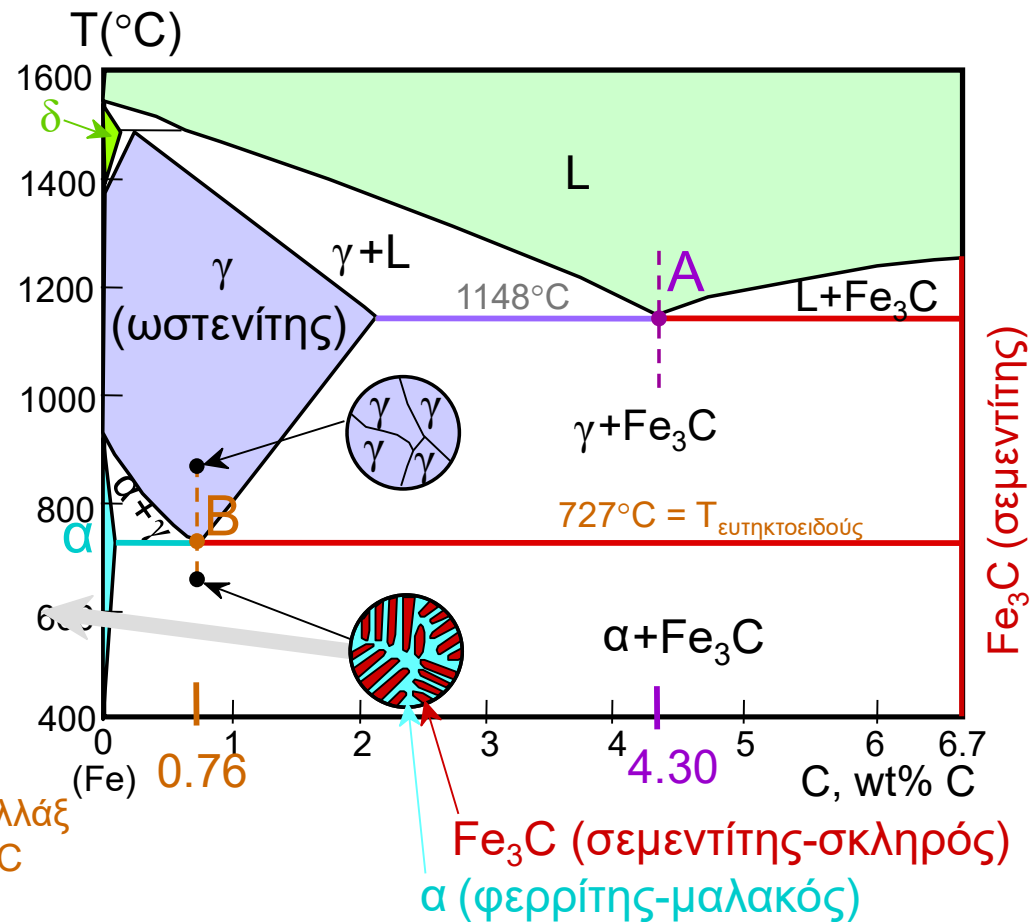
Ευτηκτοειδής μετασχηματισμός $\delta \rightleftharpoons \gamma + \epsilon$

Διάγραμμα φάσεων σιδήρου-άνθρακα (Fe-C)

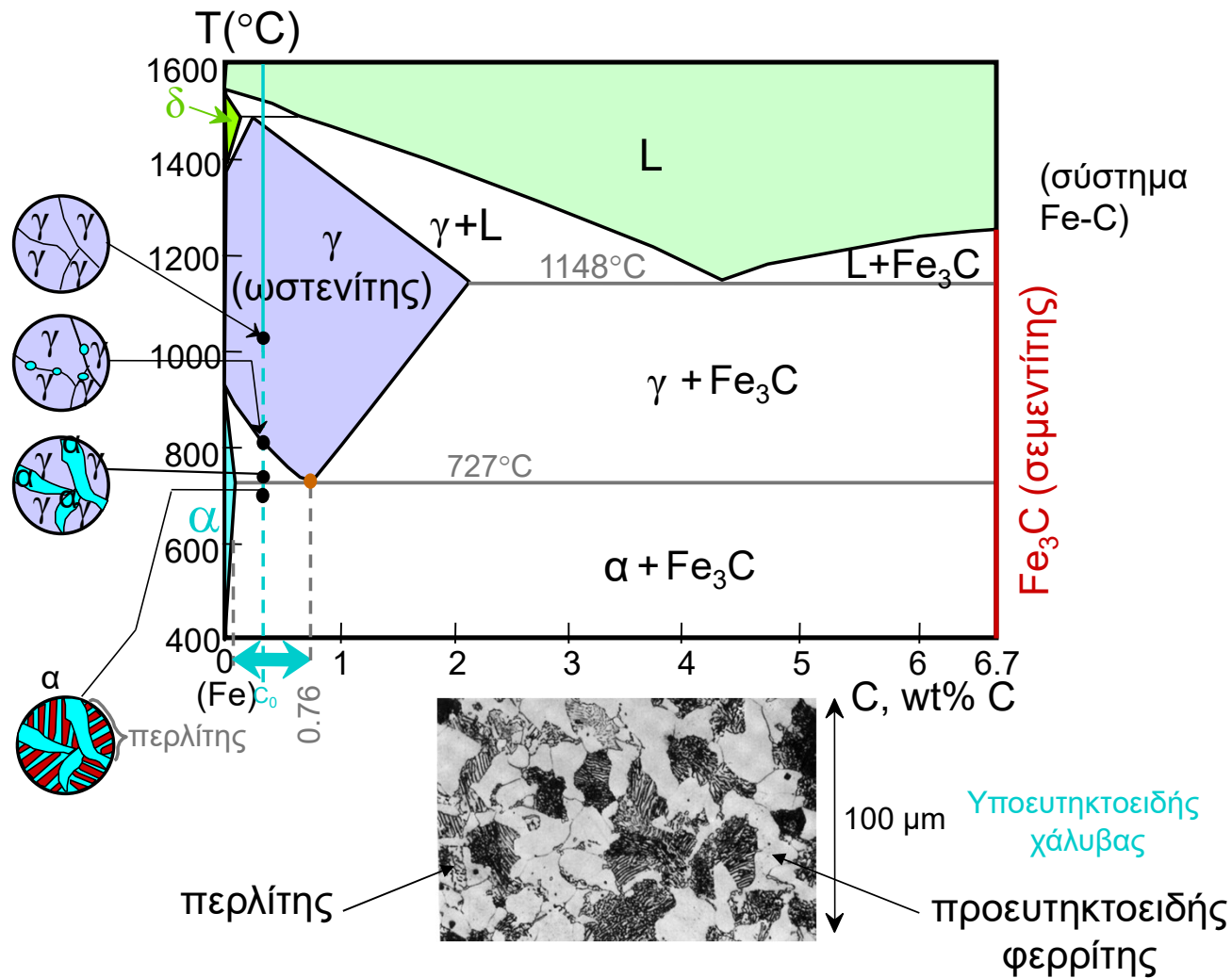
- 2 σημαντικά σημεία
 - **ευτηκτικό (A):**
 $L \Rightarrow \gamma + \text{Fe}_3\text{C}$
 - **ευτηκτοειδές (B):**
 $\gamma \Rightarrow \alpha + \text{Fe}_3\text{C}$



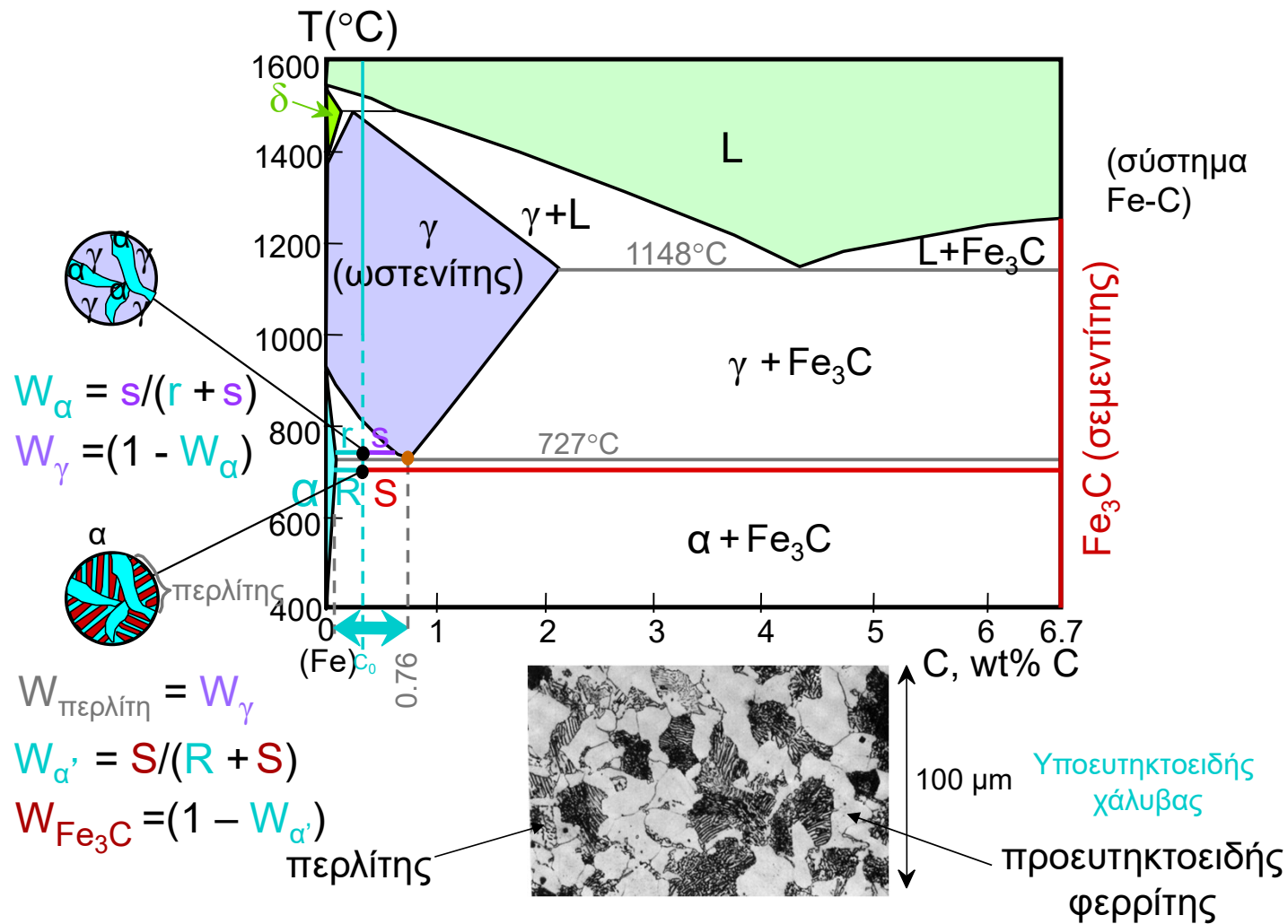
Αποτέλεσμα: Περλίτης = εναλλάξ στρώματα φάσεων α και Fe_3C



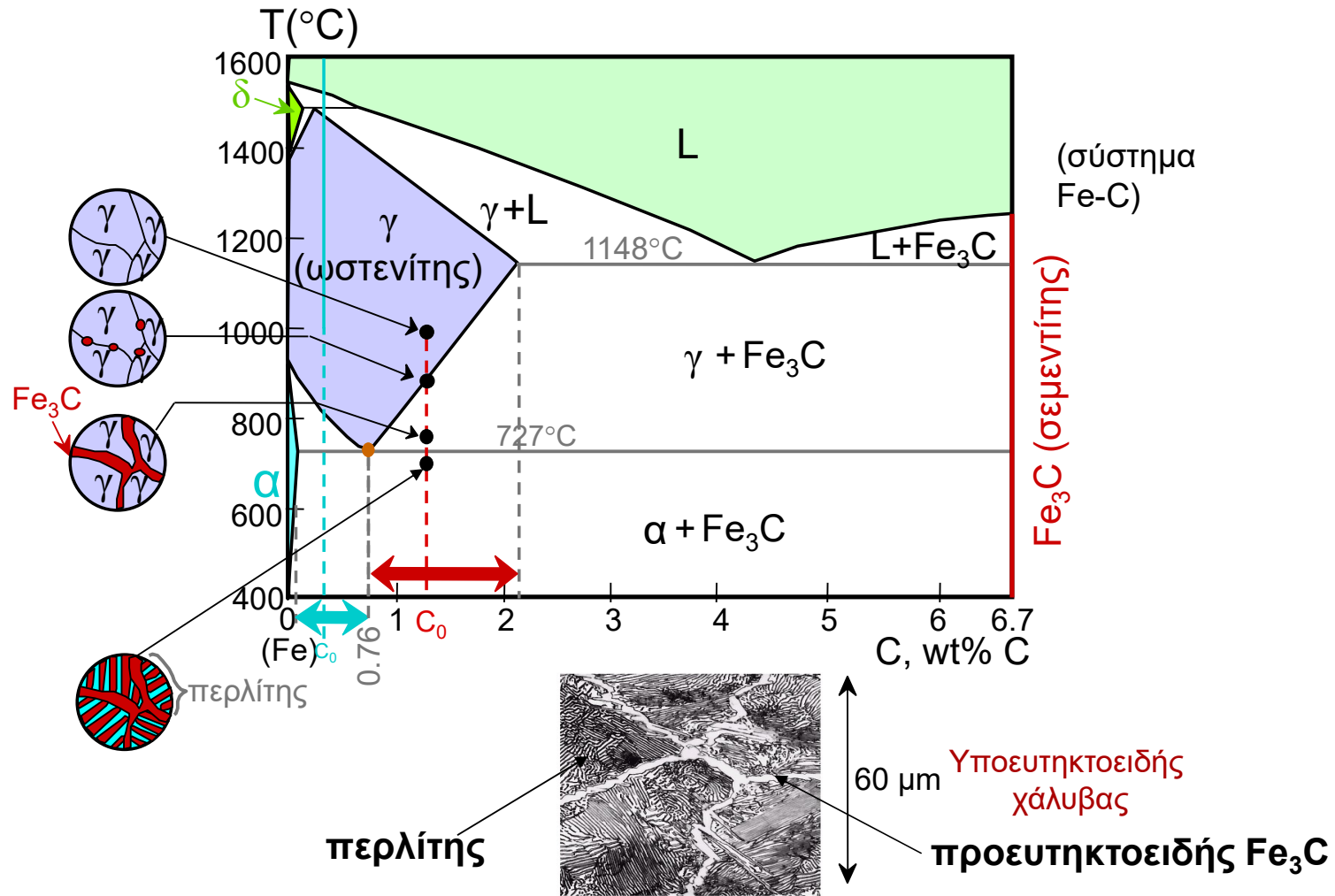
Υποευτηκτοειδής χάλυβας



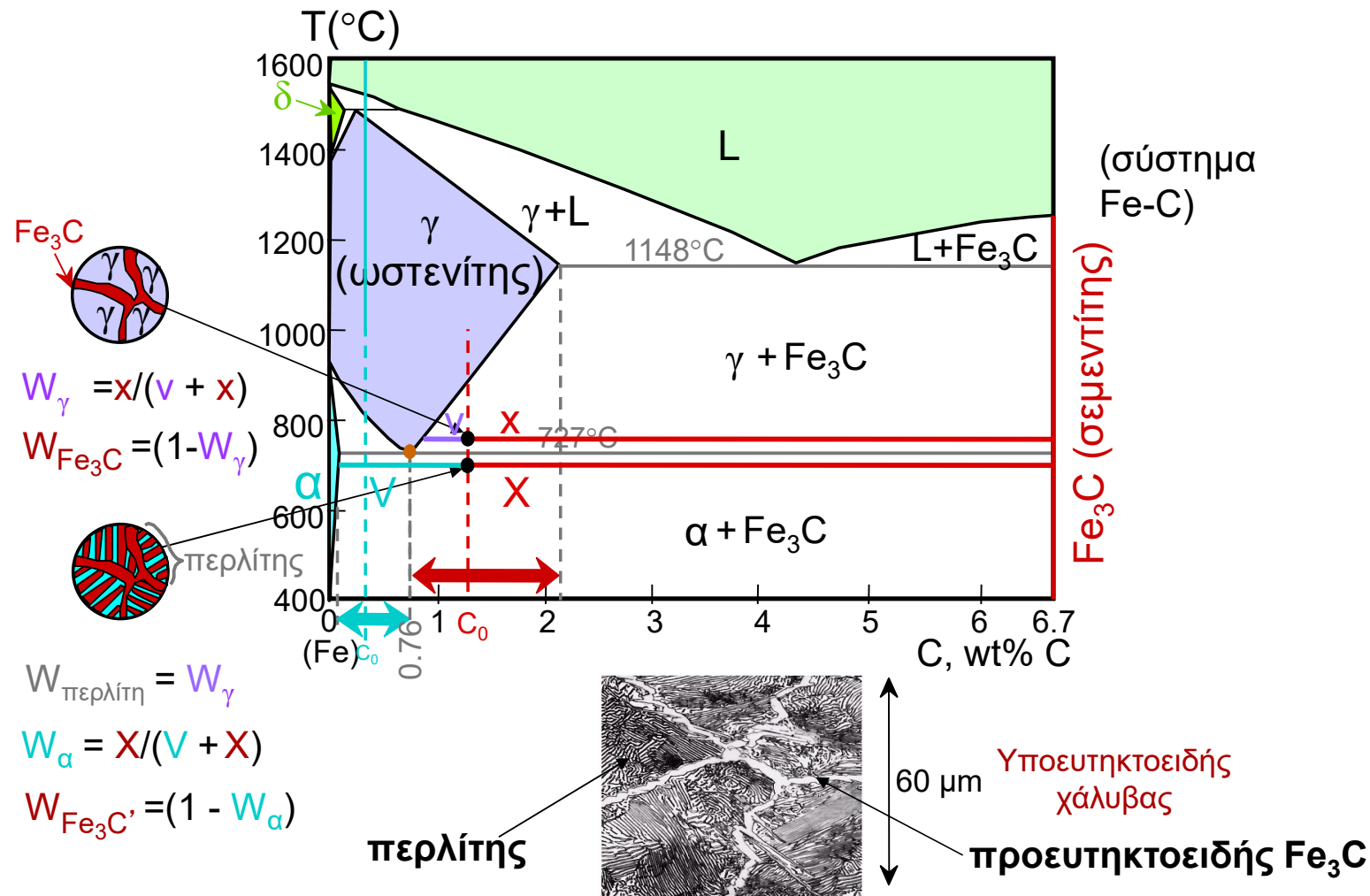
Υποευτηκτοειδής χάλυβας



Υπερευτηκτοειδής χάλυβας



Υπερευτηκτοειδής χάλυβας



Παράδειγμα

Για έναν χάλυβα με σύσταση 99.6 wt% Fe – 0.40 wt% C, σε θερμοκρασία οριακά κάτω από την ευτηκτοειδή, να προσδιοριστούν τα ακόλουθα:

- α) Οι συστάσεις του Fe_3C και του α -φερρίτη.
- β) Η ποσότητα (σε γραμμάρια) του σεμεντίτη που σχηματίζεται σε 100 g χάλυβα.
- γ) Οι ποσότητες περλίτη και προευτηκτοειδή φερρίτης (α) στα 100 g χάλυβα.

Λύση

α) Βάσει της συνδετικής γραμμής RS ακριβώς κάτω από το ευτηκτοειδές σημείο

$$C_{\alpha} = 0.022 \text{ wt\% C}$$

$$C_{\text{Fe}_3\text{C}} = 6.70 \text{ wt\% C}$$

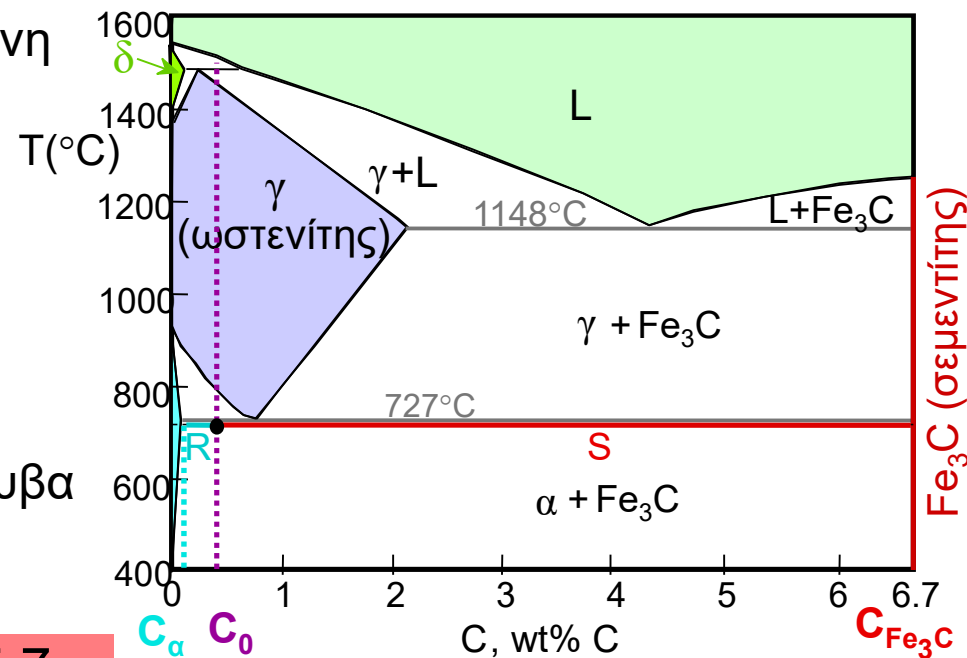
β) Εφαρμόζοντας τον κανόνα του μοχλού με την απεικονιζόμενη συνδ. γραμμή

$$\begin{aligned} W_{\text{Fe}_3\text{C}} &= \frac{R}{R+S} = \frac{C_0 - C_{\alpha}}{C_{\text{Fe}_3\text{C}} - C_{\alpha}} \\ &= \frac{0.40 - 0.022}{6.70 - 0.022} = 0.057 \end{aligned}$$

Ποσότητα Fe_3C στα 100 g χάλυβα

$$= (100 \text{ g}) W_{\text{Fe}_3\text{C}}$$

$$= (100 \text{ g})(0.057) = 5.7 \text{ g}$$



Λύση (συνέχεια)

γ) Βάσει της συνδετικής γραμμής VX ακριβώς πάνω από το ευτηκτοειδές σημείο και με δεδομένο ότι

$$C_0 = 0.40 \text{ wt\% C}$$

$$C_\alpha = 0.022 \text{ wt\% C}$$

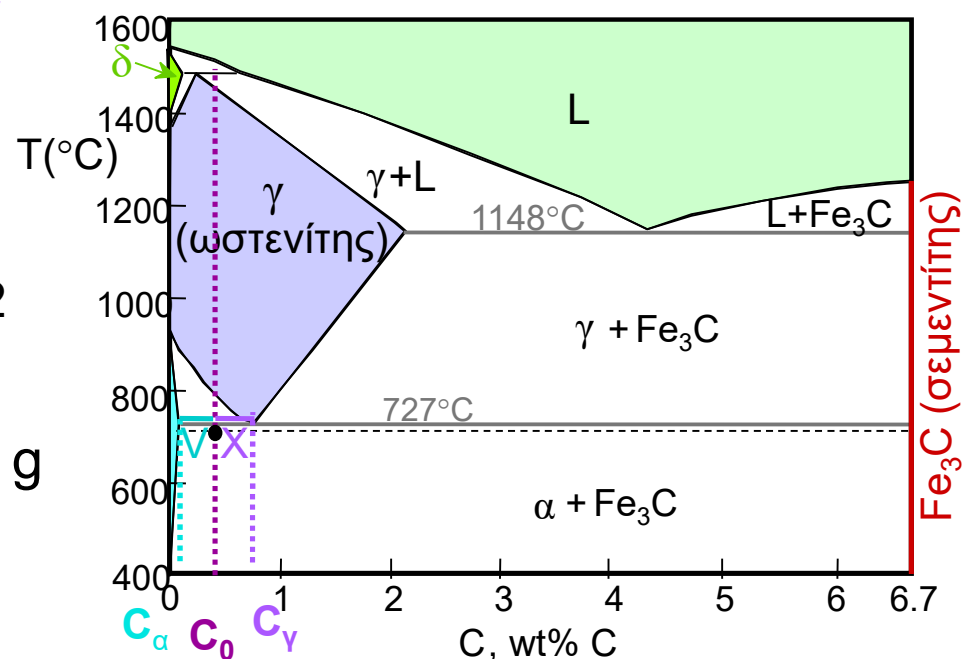
$$C_{\text{περλίτη}} = C_\gamma = 0.76 \text{ wt\% C}$$

$$W_{\text{περλίτη}} = \frac{V}{V + X} = \frac{C_0 - C_\alpha}{C_\gamma - C_\alpha}$$
$$= \frac{0.40 - 0.022}{0.76 - 0.022} = 0.512$$

Ποσότητα περλίτη στα 100 g χάλυβα

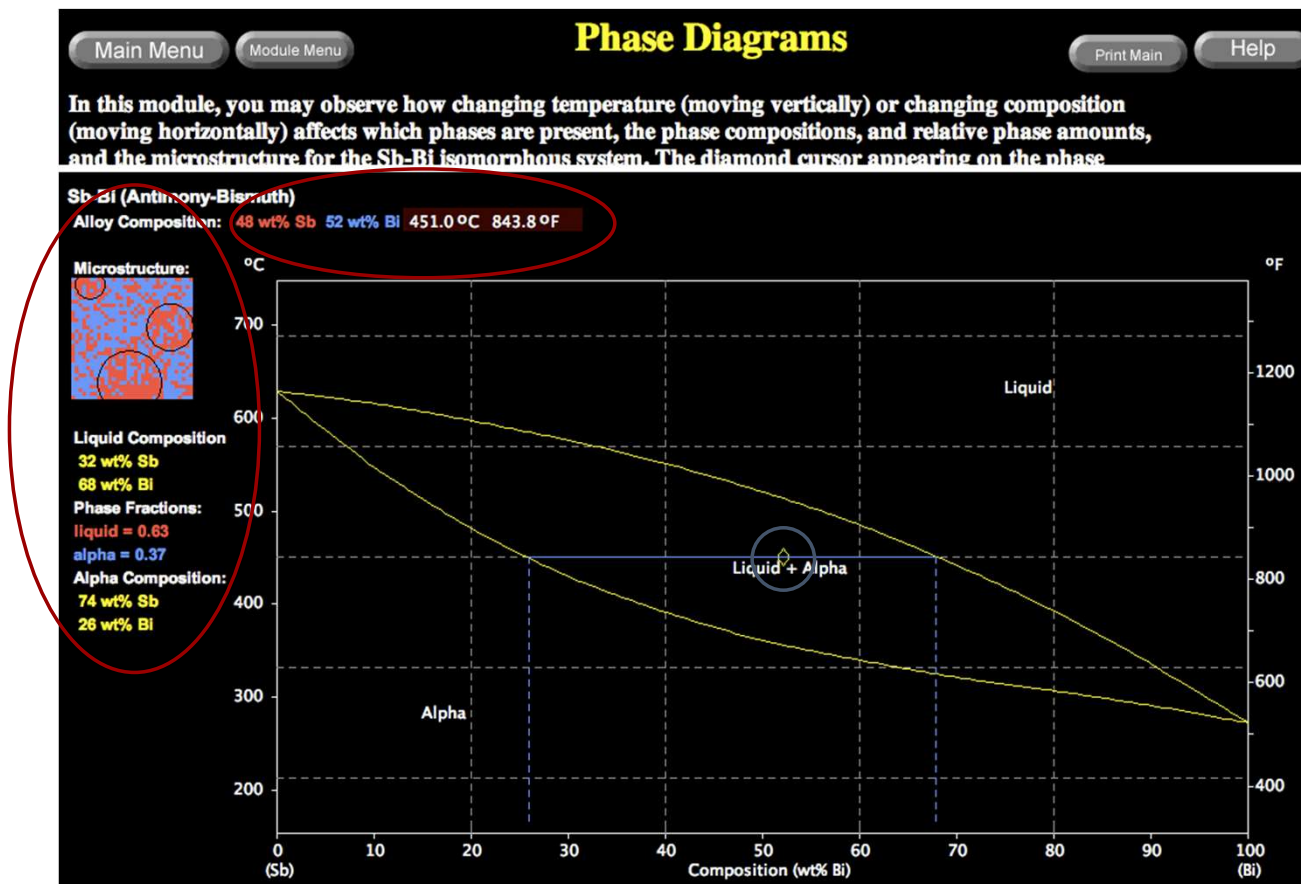
$$= (100 \text{ g})W_{\text{περλίτη}}$$

$$= (100 \text{ g})(0.512) = 51.2 \text{ g}$$



Προσομοίωση διαγραμμάτων φάσεων

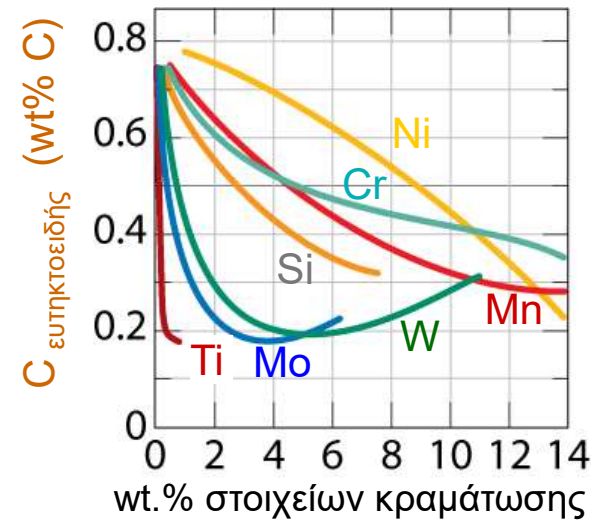
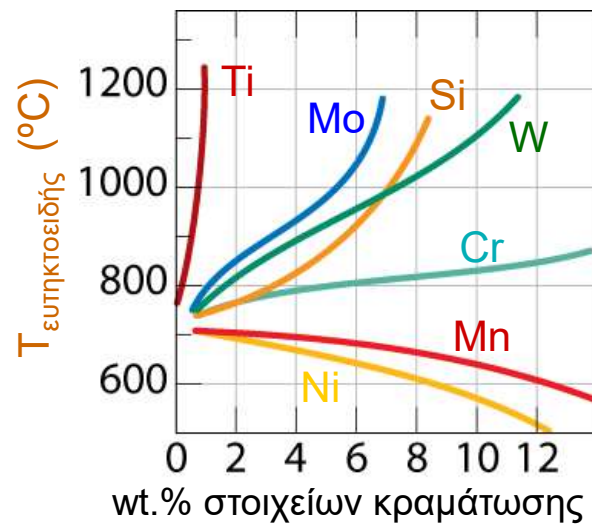
Το διαδραστικό περιβάλλον του λογισμικού VMSE επιτρέπει στους χρήστες να αλλάζουν τη μικροδομή, τις συστάσεις και τα κλάσματα μάζας/βάρους των φάσεων και εμφανίζει άμεσα τα αποτελέσματα.



Αλλαγή της σύστασης του κράματος

Κραμάτωση με άλλα στοιχεία

- Μεταβολή της $T_{\text{ευτηκτοειδούς}}$:
- Μεταβολή της $C_{\text{ευτηκτοειδούς}}$:





ΣΥΝΟΨΗ



- Τα **διαγράμματα φάσεων** είναι εργαλεία τα οποία χρησιμεύουν για τον προσδιορισμό
 - του πλήθους και του τύπου των υπαρχουσών φάσεων,
 - της **σύστασης** κάθε φάσης, και
 - του κλάσματος βάρους κάθε φάσηςεφόσον είναι γνωστή η θερμοκρασία και η σύσταση.
- Η μικροδομή ενός κράματος εξαρτάται από
 - τη σύστασή του, και
 - το εάν ο ρυθμός ψύξης επιτρέπει τη διατήρηση της κατάστασης ισορροπίας ή όχι.
- Οι σημαντικοί μετασχηματισμοί φάσεων βασίζονται **ευτηκτικές, ευτηκτοειδείς** και **περιτηκτικές** αντιδράσεις.

Μεταλλικά υλικά: Επεξεργασία και Εφαρμογές



Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

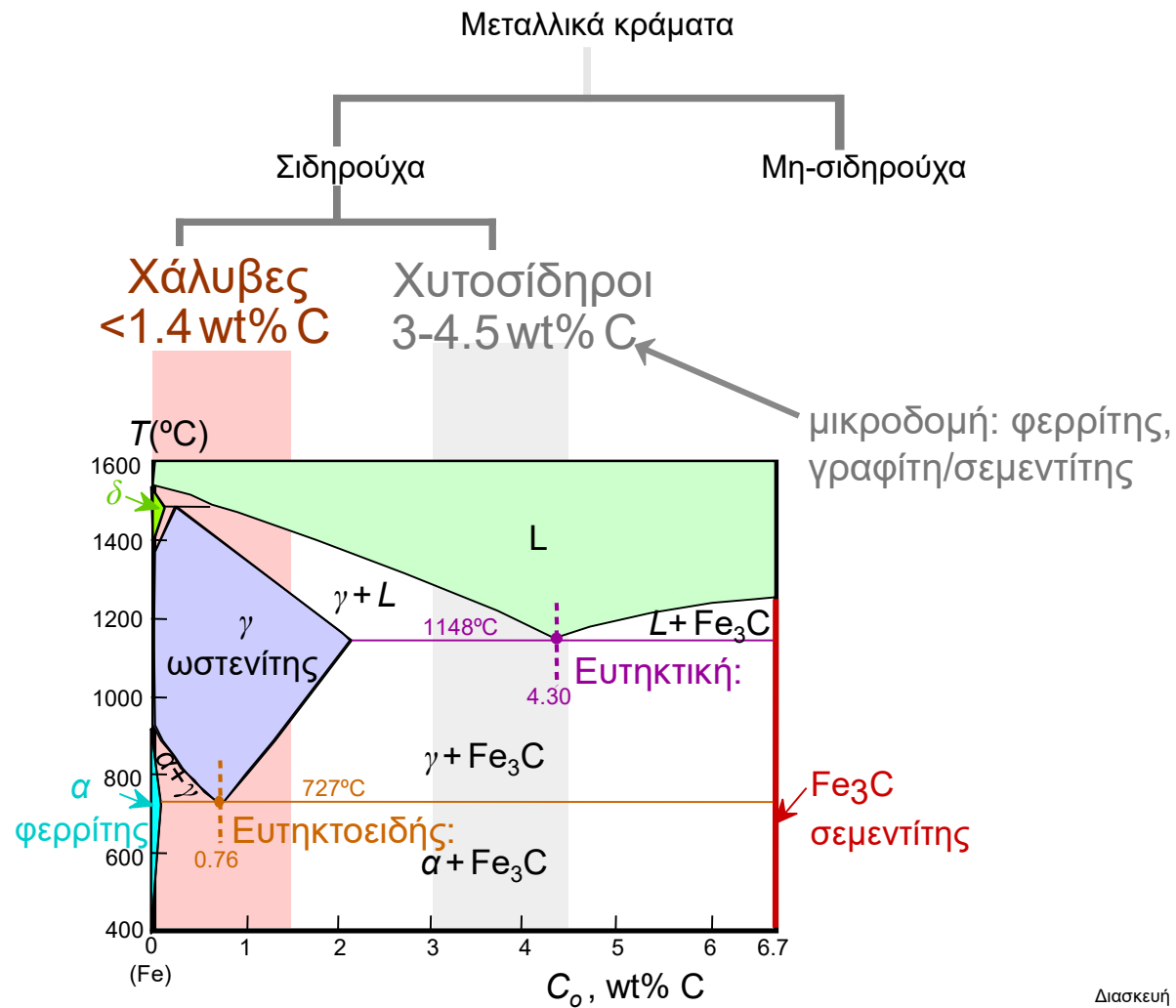
Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- Κατηγοριοποίηση μεταλλικών κραμάτων και τυπικές εφαρμογές τους.
- Μικροδομή και γενικά χαρακτηριστικά των χυτοσιδηρών.
- Οι ιδιαίτερες φυσικές και μηχανικές ιδιότητες των μη-σιδηρούχων κραμάτων.



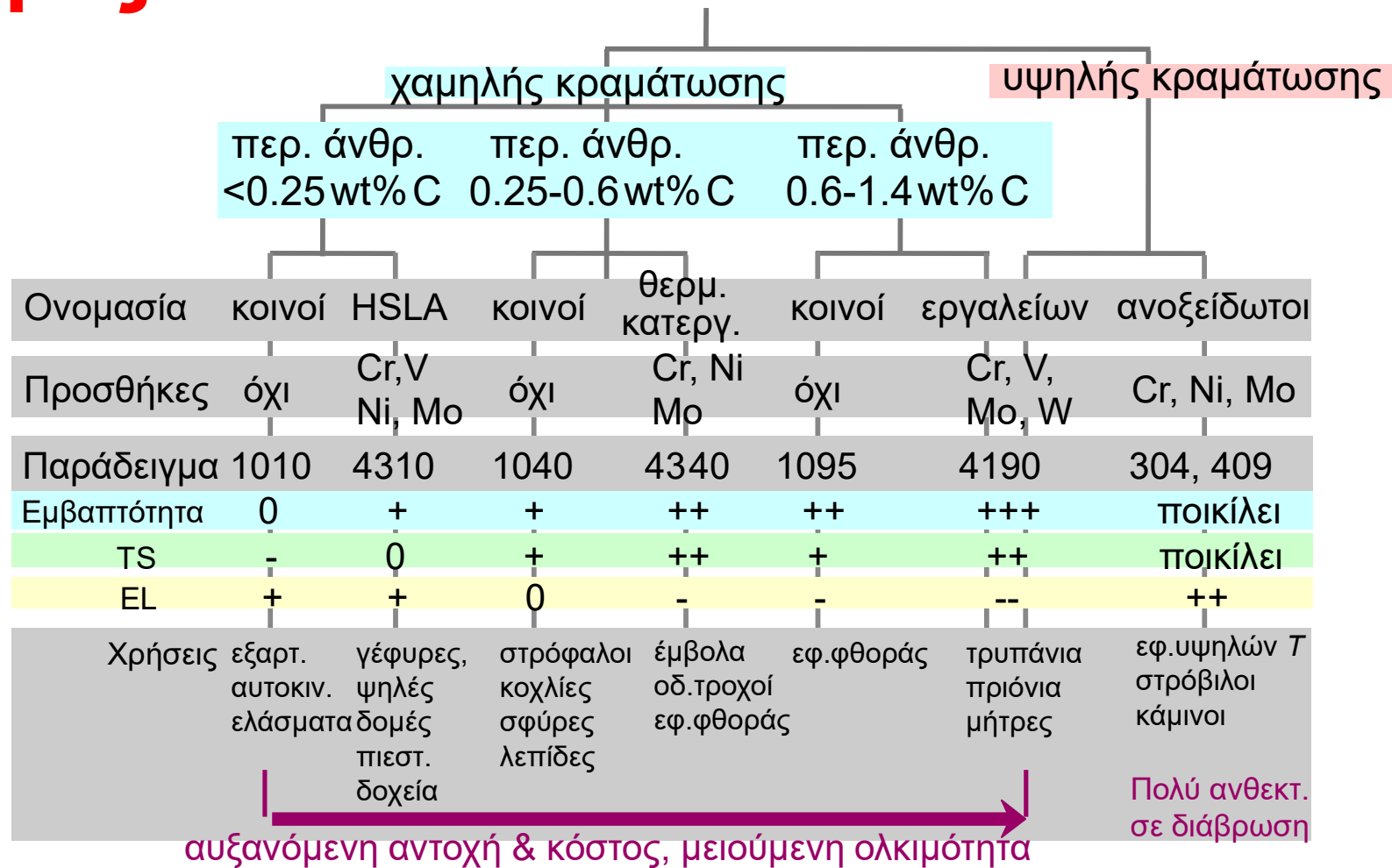
ΜΕΤΑΛΛΙΚΑ ΥΛΙΚΑ

Κατηγοριοποίηση μεταλλικών κραμάτων

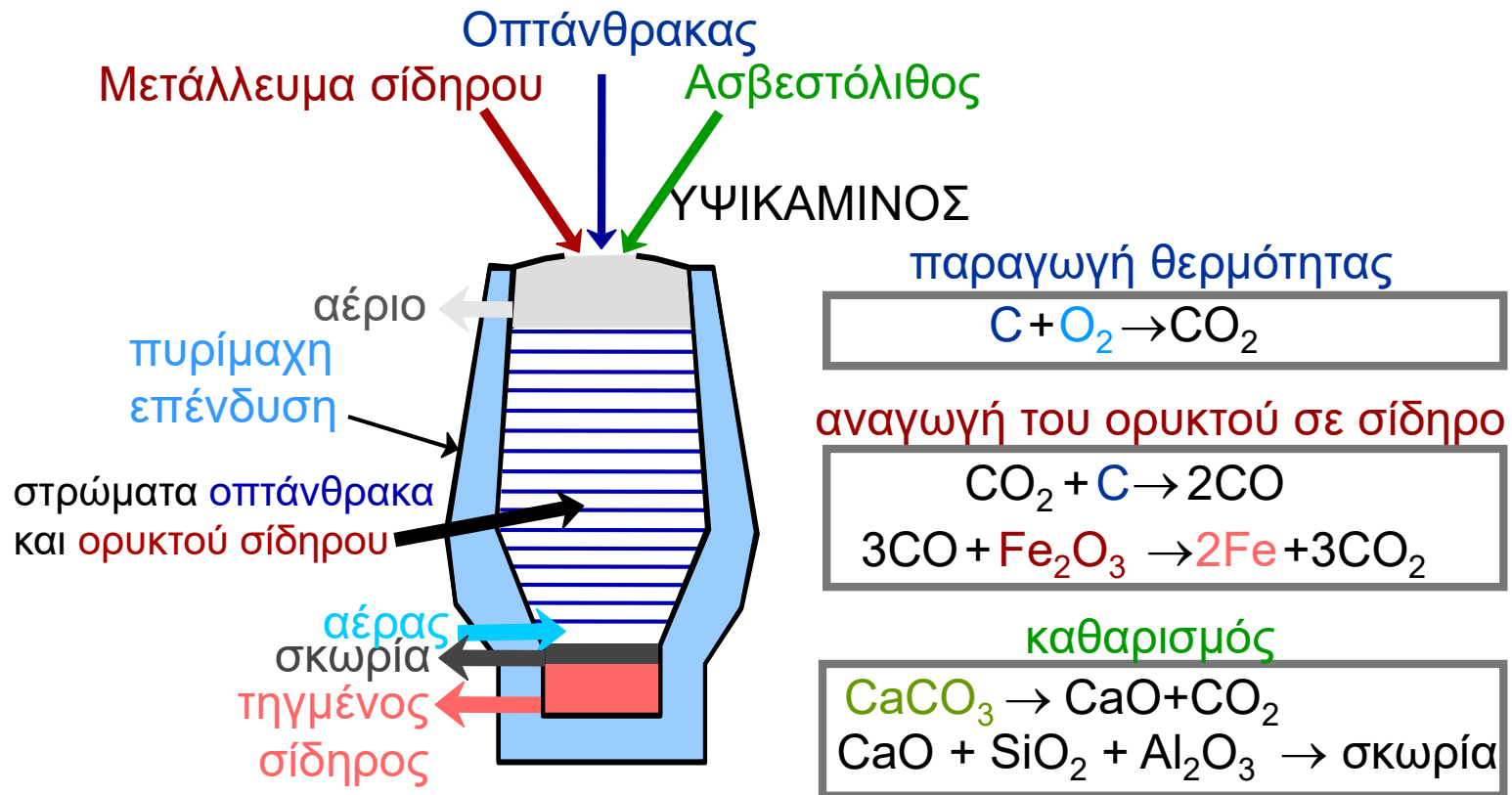


Διασκευή από Σχ. 11.1,
Callister & Rethwisch 10η έκδ.

Χάλυβες



Εξαγωγή χάλυβα από ορυκτό (εξευγενισμός)



Σιδηρούχα κράματα

Κράματα με βάση τον σίδηρο

- Χάλυβες
- Χυτοσίδηροι

Τυποποίηση χαλύβων (AISI/SAE)

10xx Κοινοί ανθρακούχοι χάλυβες

11xx Κοινοί ανθρακούχοι χάλυβες (με προσθήκη θείου για βελτίωση κατεργασιμότητας)

15xx Mn (1.00 - 1.65%)

40xx Mo (0.20 ~ 0.30%)

43xx Ni (1.65 - 2.00%), Cr (0.40 - 0.90%), Mo (0.20 - 0.30%)

44xx Mo (0.5%)

όπου το xx υποδεικνύει wt% C x 100

Παράδειγμα: χάλυβας 1060 – κοινός ανθρακοχάλυβας με 0.60 wt% C

Ανοξείδωτος χάλυβας >11% Cr

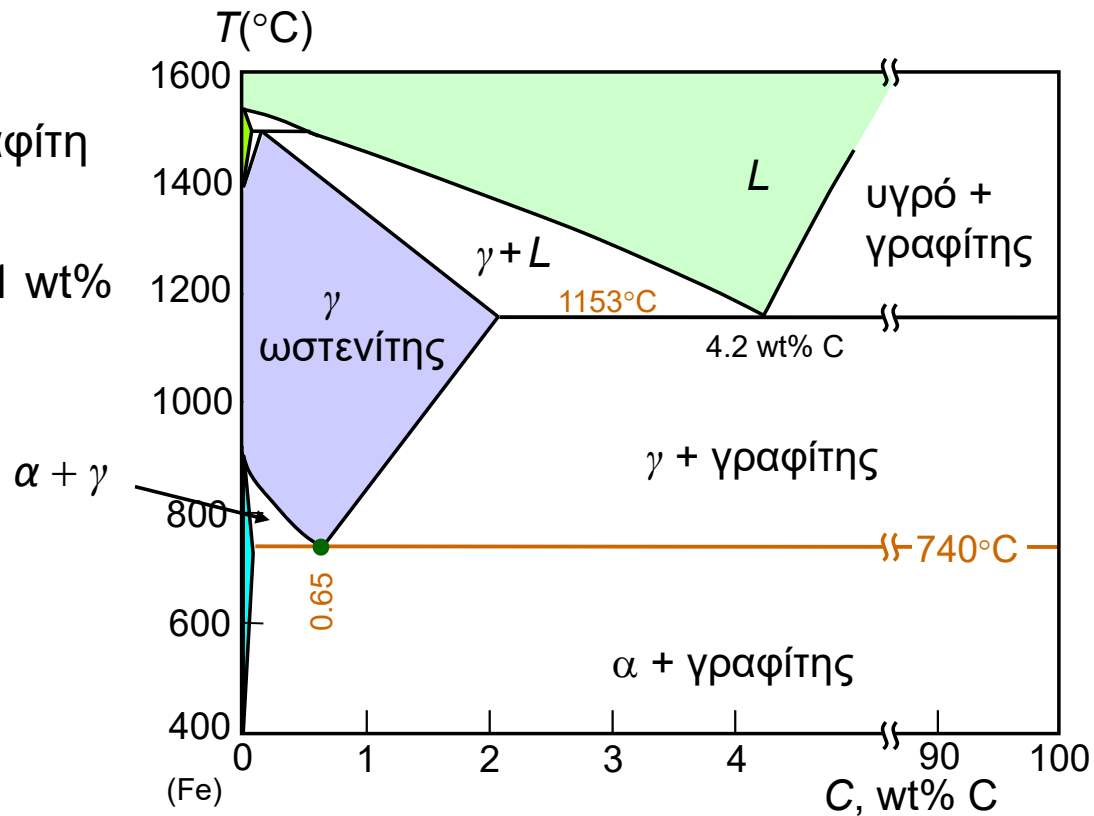
Χυτοσίδηροι

- Σιδηρούχα κράματα με περιεκτικότητα σε C > 2.1 wt% C
 - συνηθέστερα 3 - 4.5 wt% C
- Χαμηλή θερμ. τήξης – σχετικά εύκολα στη χύτευση
- Γενικά ψαθυρά
- Ο σεμεντίτης μετασχηματίζεται σε φερρίτη + γραφίτη
$$\text{Fe}_3\text{C} \rightarrow 3 \text{Fe} (\alpha) + \text{C} (\text{γγραφίτης})$$
 - γενικά, αργή διαδικασία

Διάγραμμα ισορροπίας συστήματος Fe-C

Ο σχηματισμός γραφίτη προάγεται από

- την ύπαρξη Si > 1 wt%
- την αργή ψύξη



Τύποι χυτοσιδήρων

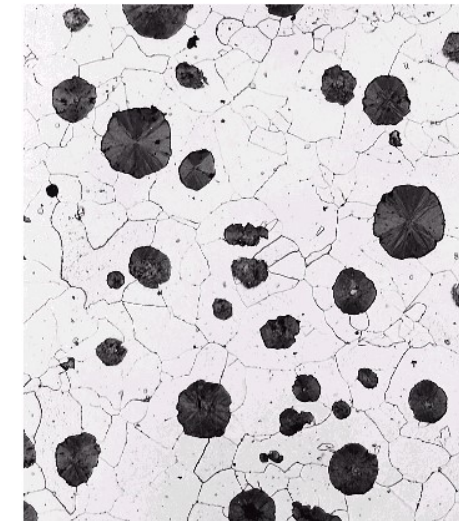
Φαίος χυτοσίδηρος

- νιφάδες γραφίτη
- μειωμένη αντοχή σε εφελκυσμό, ψαθυρός
- ανθεκτικότερος σε θλίψη
- άριστη απόσβεση κραδασμών
- ανθεκτικός σε φθορά



Όλκιμος σίδηρος

- με προσθήκη Mg και/ή Ce
- γραφίτης σε μορφή κονδυλωμάτων, όχι νιφάδων
- συχνά, το υλικό μήτρας είναι περλίτης – μεγαλύτερη αντοχή αλλά μικρότερη ολκιμότητα



Τύποι χυτοσιδήρων (συνέχεια)

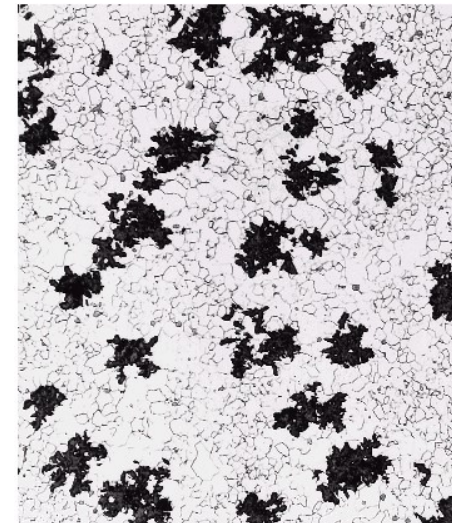
Λευκοσίδηρος

- $< 1 \text{ wt\% Si}$
- περλίτης + σεμεντίτης
- πολύ σκληρό και ψαθυρό υλικό



Μαλακτός σίδηρος

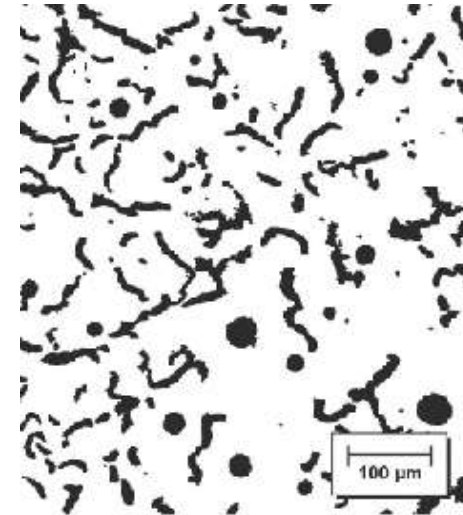
- από θερμική κατεργασία λευκοσιδήρου στους $800-900^{\circ}\text{C}$
- ροζέτες γραφίτη
- ικανοποιητική αντοχή και ολκιμότητα



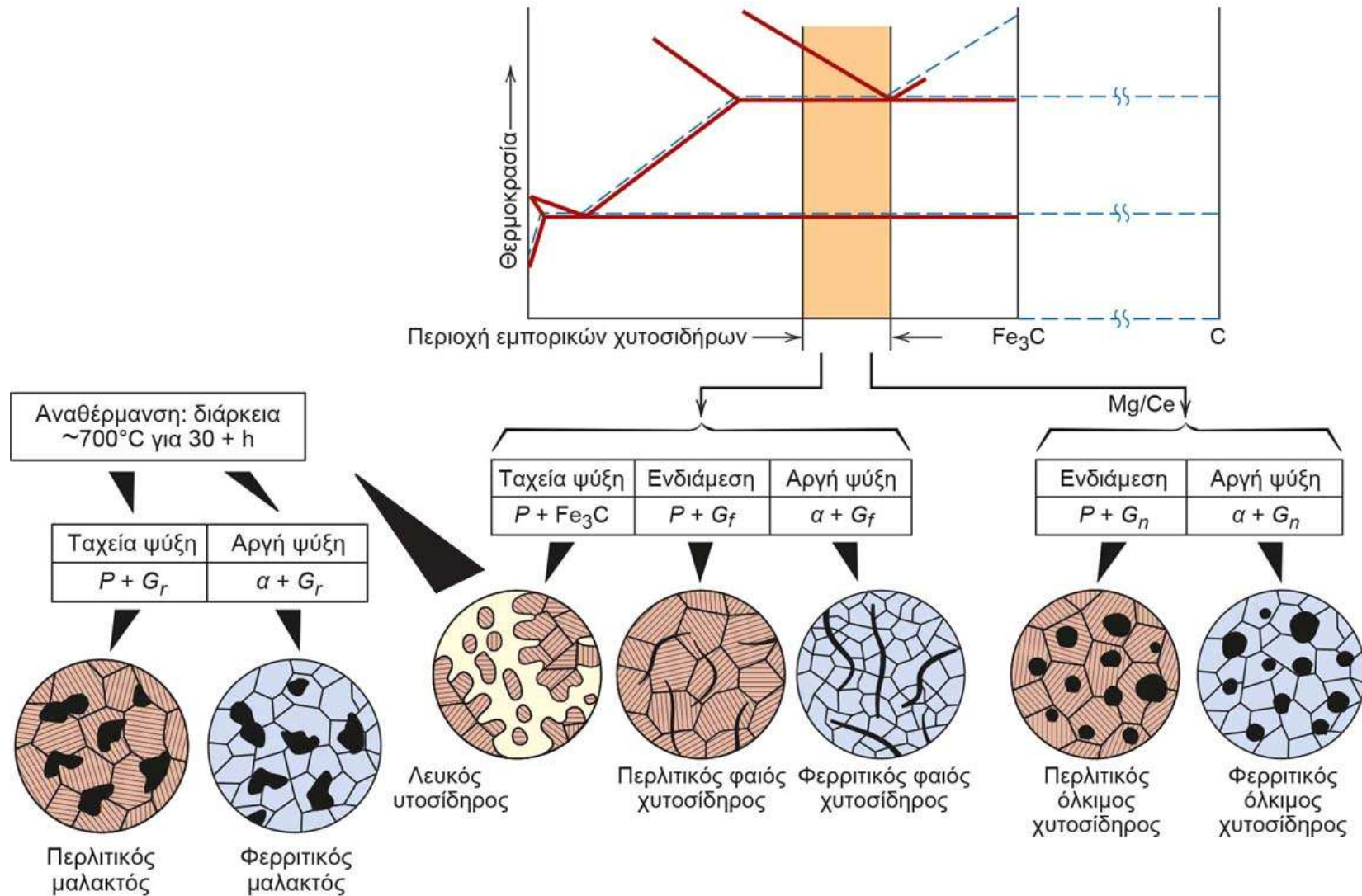
Τύποι χυτοσιδήρων (συνέχεια)

Συμπαγής γραφιτικός χυτοσίδηρος

- σχετικά υψηλή θερμική αγωγιμότητα
- καλή αντίσταση σε θερμικό αιφνιδιασμό
- μειωμένη οξείδωση σε υψηλές θερμοκρασίες



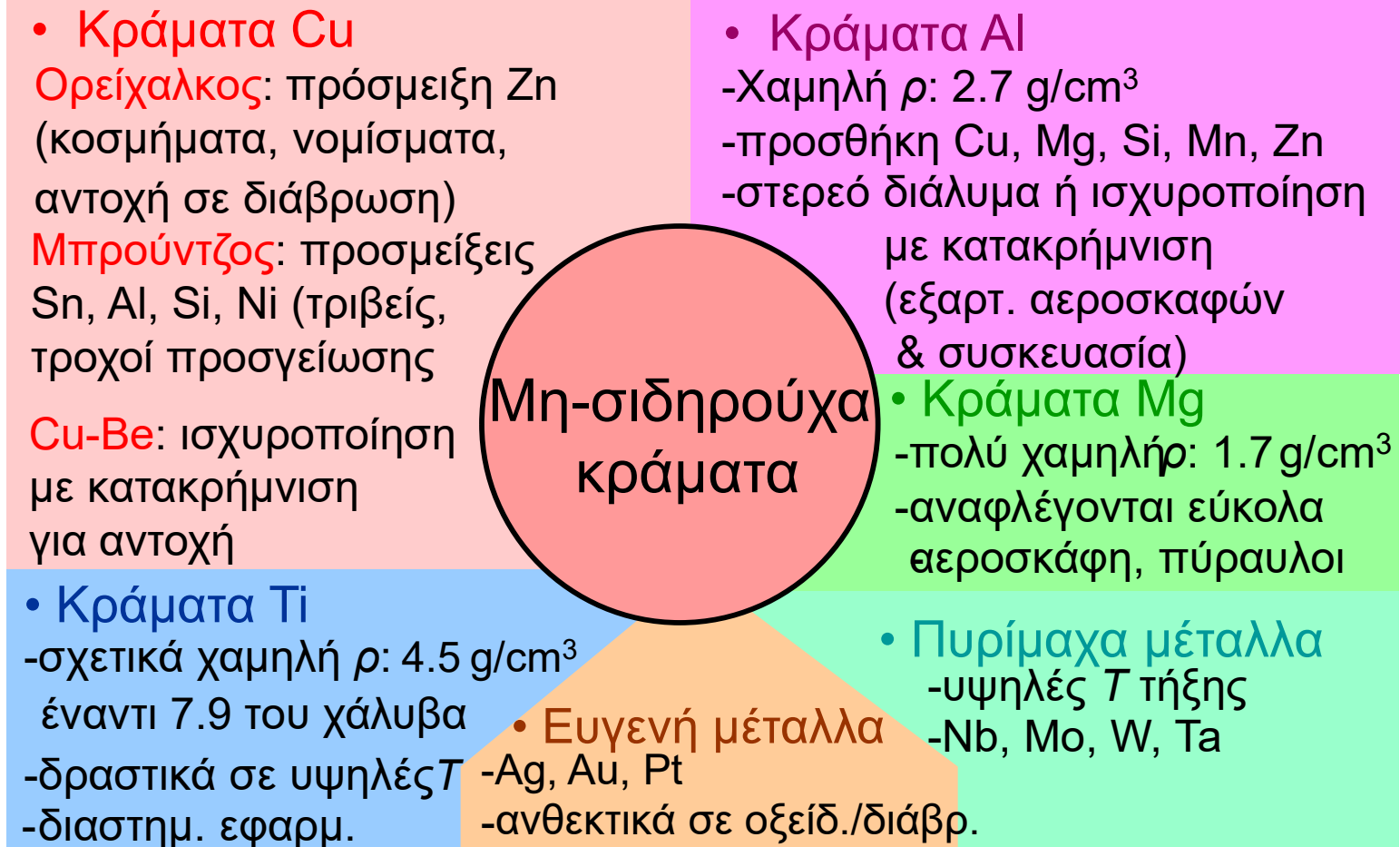
Παραγωγή χυτοσιδήρων



Περιορισμοί των σιδηρούχων κραμάτων

- 1) Σχετικά υψηλές πυκνότητες
- 2) Σχετικά χαμηλές ηλεκτρικές αγωγιμότητες
- 3) Γενικά, μη-ικανοποιητική αντίσταση σε διάβρωση

Μη-σιδηρούχα κράματα





ΣΥΝΟΨΗ



- Σιδηρούχα κράματα:
 - χάλυβες
 - χυτοσίδηροι
- Μη-σιδηρούχα κράματα:
 - Κράματα των Cu, Al, Ti, και Mg· πυρίμαχα κράματα· ευγενή μέταλλα



Κεραμικά υλικά: Ιδιότητες, Επεξεργασία και Εφαρμογές



Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

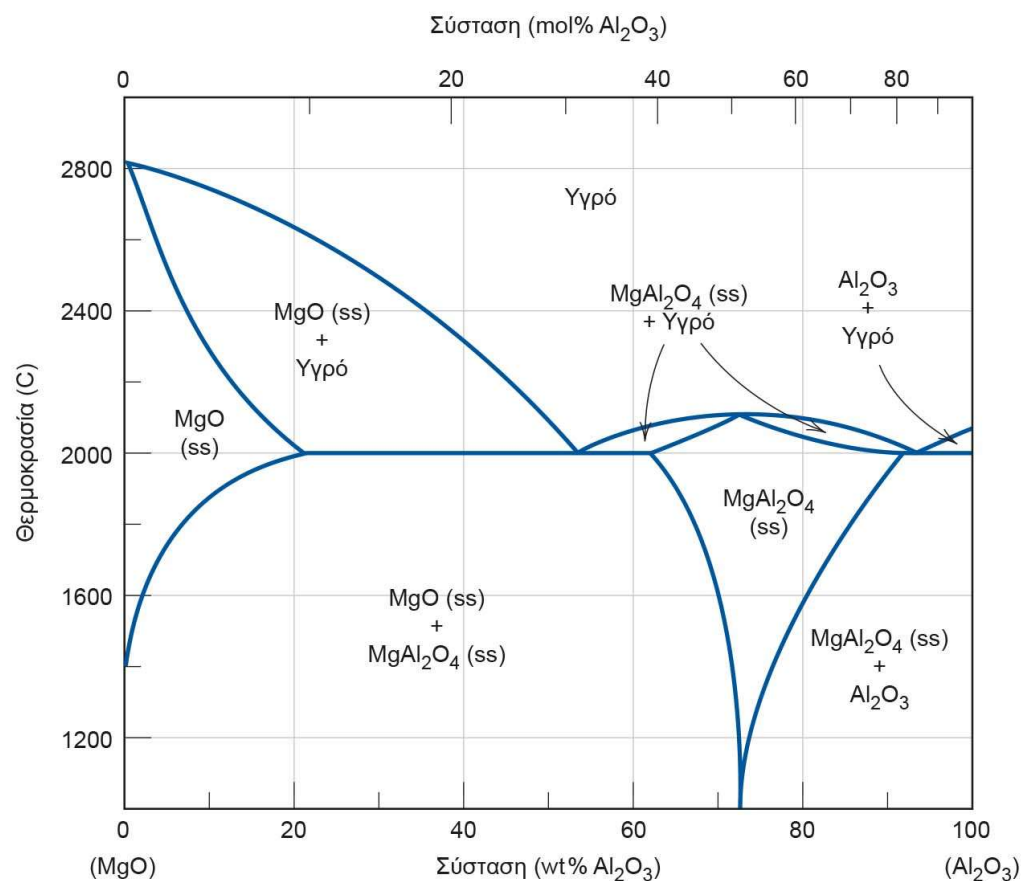
- Πώς διαφέρουν τα διαγράμματα φάσεων των κεραμικών από τα διαγράμματα φάσεων των μετάλλων;
- Πώς μετριοούνται οι μηχανικές ιδιότητες των κεραμικών, και πώς διαφέρουν από τις αντίστοιχες των μετάλλων;
- Κατηγοριοποίηση των κεραμικών υλικών.
- Ορισμένες χαρακτηριστικές εφαρμογές των κεραμικών.



ΚΕΡΑΜΙΚΑ ΥΛΙΚΑ

Κεραμικά – διαγράμματα φάσεων

Διάγραμμα φάσεων για το $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$:



Μηχανικές ιδιότητες των κεραμικών

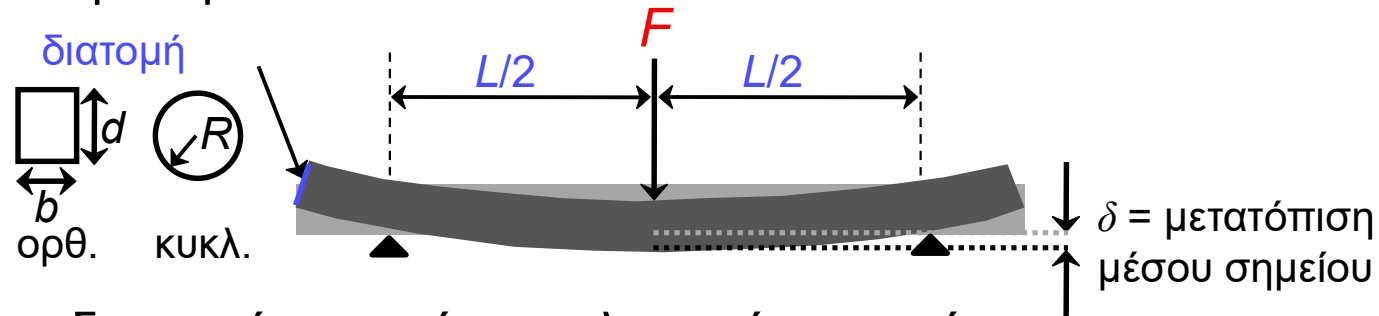
Τα κεραμικά υλικά είναι πιο ψαθυρά από τα μέταλλα.

Γιατί συμβαίνει αυτό;

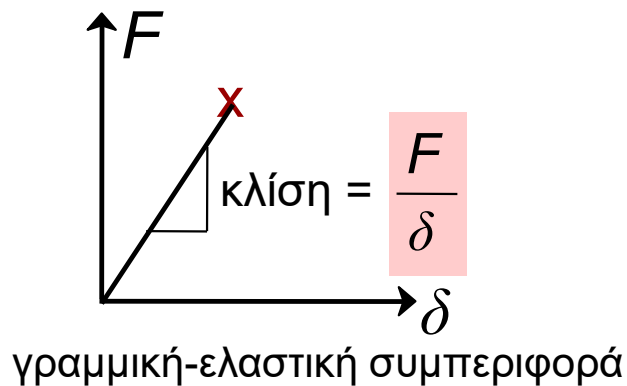
- Εξέταση του μηχανισμού παραμόρφωσης
 - Σε κρυσταλλικά στερεά, μέσω κίνησης των διαταραχών του πλέγματος
 - Σε ισχυρά ιοντικά στερεά, η κίνηση των διαταραχών είναι δύσκολη λόγω...
 - ύπαρξης λίγων συστημάτων ολίσθησης
 - αντίστασης στην κίνηση ιόντων όμοιου φορτίου (π.χ., ανιόντων) καθώς διέρχονται το ένα από το άλλο

Προσδιορισμός του μέτρου ελαστικότητας

- Συμπεριφορά σε θερμοκρασία δωματίου (ΘΔ): συνήθως ελαστική, με ψαθυρή αστοχία.
- Συχνά χρησιμοποιείται η **δοκιμή κάμψης 3-σημείων**.
 - Οι δοκιμές εφελκυσμού είναι δύσκολο να διεξαχθούν σε ψαθυρά υλικά.



- Προσδιορισμός του μέτρου ελαστικότητας σύμφωνα με:

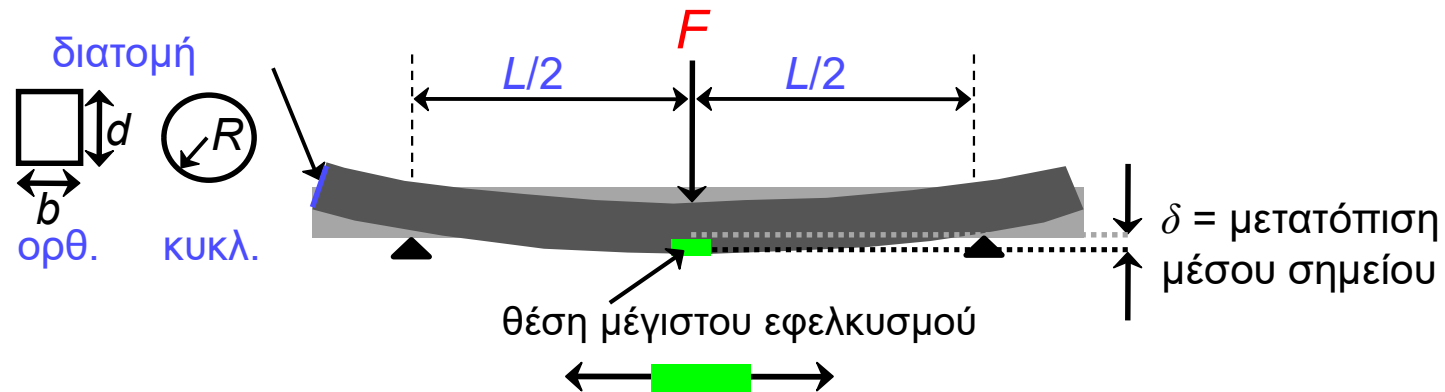


$$E = \frac{F}{\delta} \frac{L^3}{4bd^3} \quad (\text{ορθ. διατομή})$$

$$E = \frac{F}{\delta} \frac{L^3}{12\pi R^4} \quad (\text{κυκλ. διατομή})$$

Δοκιμές κάμψης: Μέτρηση αντοχής

- Χρησιμοποιείται η δοκιμή κάμψης 3-σημείων.



- Αντοχή σε κάμψη:

$$\sigma_{fs} = \frac{3F_f L}{2bd^2} \quad (\text{ορθ. διατομή})$$

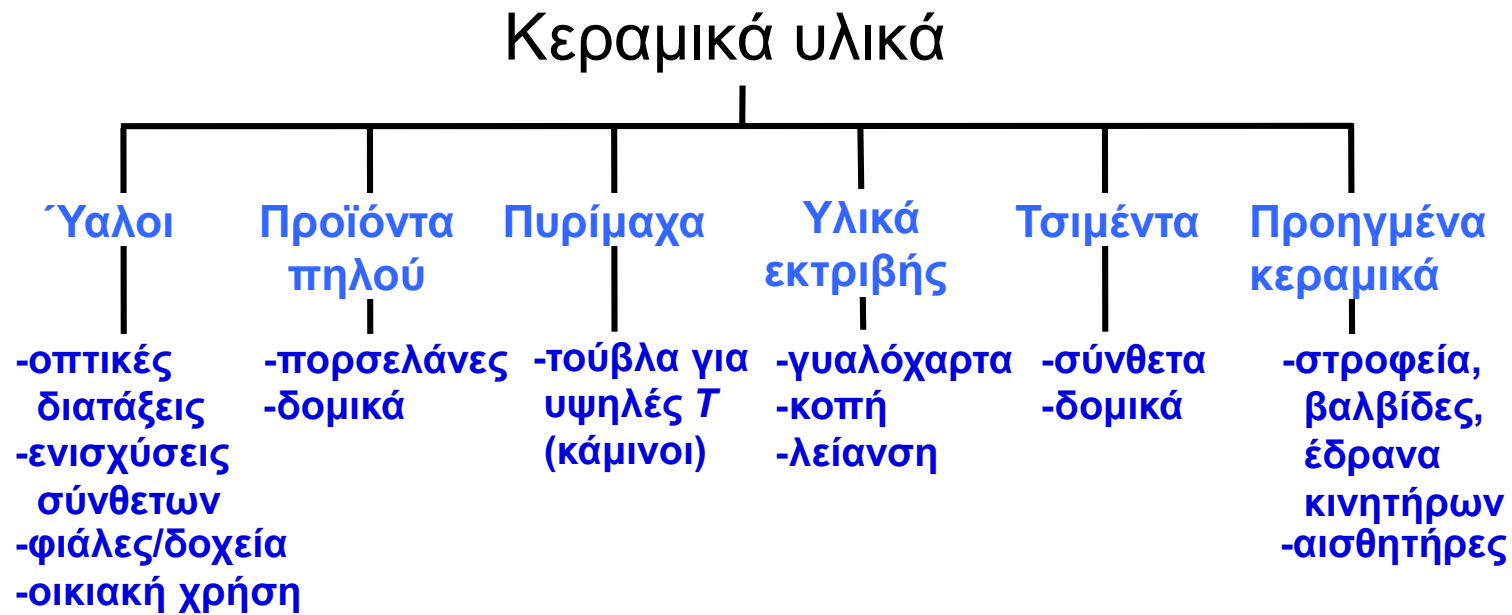
$$\sigma_{fs} = \frac{F_f L}{\pi R^3} \quad (\text{κυκλ. διατομή})$$

- Τυπικές τιμές:

Υλικό	σ_{fs} (MPa)	E (GPa)
Νιτρίδιο Si	250-1000	304
Καρβίδιο Si	100-820	345
Οξείδιο Al	275-700	393
Ύαλος (νατρασβέστου)	69	69

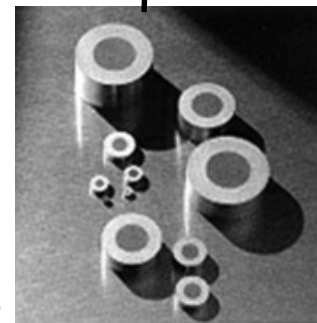
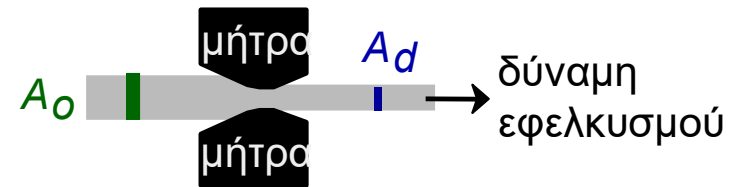
Δεδομένα από Πίνακα 14.1,
Callister & Rethwisch 10η έκδ.

Κατηγοριοποίηση των κεραμικών



Εφαρμογές κεραμικών: Μήτρες και καλούπια

- Σώμα (κύριος όγκος) μήτρας:
 - χρειάζεται αυξημένη ανθεκτικότητα σε φθορά!
- Επιφάνεια μήτρας:
 - κόκκοι πολυκρυσταλλικού διαμαντιού διαμ. 4 μm που ενσωματώνονται με πυροσυσσωμάτωση σε υπόστρωμα από καρβίδιο βολφραμίου.
 - το πολυκρυσταλλικό διαμάντι δίνει ομοιόμορφη σκληρότητα προς όλες τις διευθύνσεις, για μείωση της φθοράς.



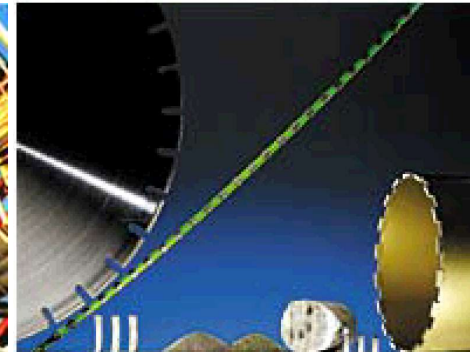
Πηγή: Martin Deakins, GE Superabrasives, Worthington, OH. Χρησιμοποιείται με άδεια.

Εφαρμογές κεραμικών: Εργαλεία κοπής

- Εργαλεία:
 - για λείανση/από υάλων, βολφραμίου, καρβιδίων, κεραμικών
 - για κοπή δισκίων Si
 - για γεωτρήματα
- Υλικά:
 - συνθετικά διαμάντια (μονοκρυσταλλικής ή πολυκρυσταλλικής μορφής) σε μήτρα μετάλλου ή ρητίνης.
 - πολυκρυσταλλικά διαμάντια: διατηρούν την αιχμηρότητά τους μέσω μικροθραύσεων κατά μήκος των επιπέδων απόσχισης.



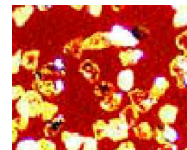
γεωτρήπανο



λεπίδες



μονοκρυσταλλικά
διαμάντια

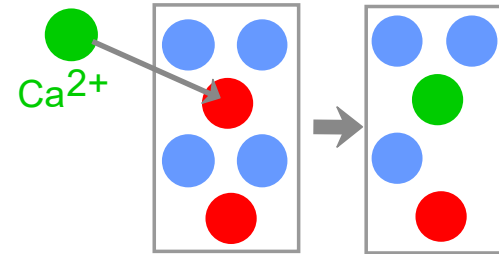


πολυκρυσταλλικά
διαμάντια σε μήτρα
ρητίνης

ΦΩΤΟ: Πηγή: Martin Deakins,
GE Superabrasives, Worthington,
OH. Χρησιμοποιείται με άδεια.

Εφαρμογές των κεραμικών: Αισθητήρες

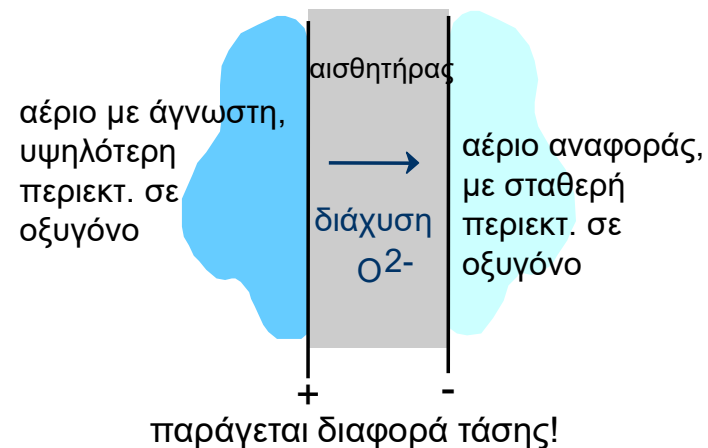
- Παράδειγμα: ZrO_2 ως αισθητήρας οξυγόνου
- Αρχή: Αύξηση του ρυθμού διάχυσης οξυγόνου για παραγωγή ταχείας απόκρισης (σήμα αισθητήρα) στη μεταβολή της συγκέντρωσης οξυγόνου.



Ένα ιόν Ca^{2+} εκτοπίζει από το πλέγμα ένα ιόν Zr^{4+} και ένα ιόν O^{2-} .

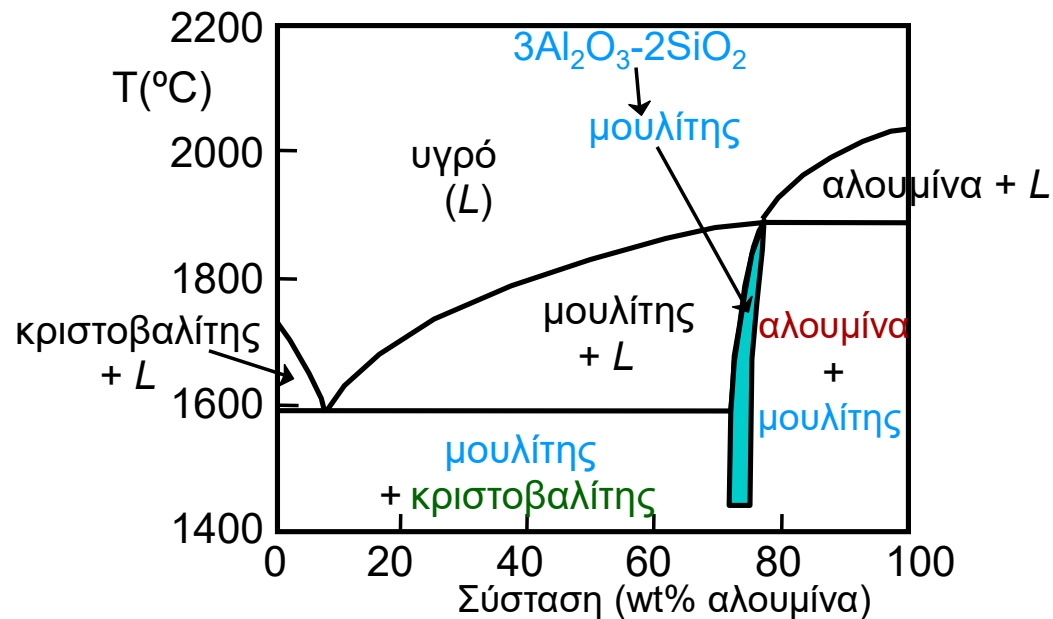
- Προσέγγιση:
Προσθήκη Ca ως πρόσμειξη σε ZrO_2 :
 - αυξάνει τα πλεγματικά κενά σε θέσεις O^{2-}
 - αυξάνει τον ρυθμό διάχυσης O^{2-}

- Λειτουργία:
 - αναπτύσσεται διαφορά τάσης όταν ιόντα O^{2-} διαχέονται από την εξωτερική επιφάνεια διαμέσου του αισθητήρα, στην περιοχή αερίου αναφοράς.
 - το μέτρο της διαφοράς τάσης είναι συνάρτηση της μερικής πίεσης του οξυγόνου στην εξωτερική επιφάνεια.



Πυρίμαχα κεραμικά

- Υλικά που πρόκειται να χρησιμοποιούνται σε υψηλές θερμοκρασίες (π.χ., σε καμίνους).
- Ενδεικτικό παράδειγμα το σύστημα Πυριτίας (SiO_2) – Αλουμίνας (Al_2O_3).
- Πυρίμαχα με βάση την πυριτία: πλούσια σε πυριτία, η προσθήκη μικρών ποσοτήτων αλουμίνας κατεβάζει τη θερμοκρασία τήξης (διάγραμμα φάσεων):



Προηγμένα κεραμικά: Υλικά για κινητήρες αυτοκινήτων

- Πλεονεκτήματα:
 - Λειτουργία σε υψηλές θερμοκρασίες με υψηλή απόδοση
 - Μειωμένες απώλειες λόγω τριβής απώλειες λόγω τριβής
 - Λειτουργία χωρίς σύστημα ψύξης
 - Μικρότερο βάρος έναντι συμβατικών κινητήρων
- Μειονεκτήματα:
 - Η ψαθυρότητα των κεραμικών υλικών
 - Η δυσκολία εξάλειψης των εσωτερικών κενών (που υποβαθμίζουν την αντοχή των κατασκευών)
 - Η σχετική δυσκολία κατεργασίας (διαμόρφωσης & κοπής) κεραμικών εξαρτημάτων
- Πιθανά υποψήφια υλικά: Si_3N_4 , SiC , & ZrO_2
- Δυνατότητα εφαρμογής σε: μπλοκ κινητήρων & επιστρώσεις εμβόλων

Προηγμένα κεραμικά: Υλικά για προστατευτικές θωρακίσεις

Συστατικά:

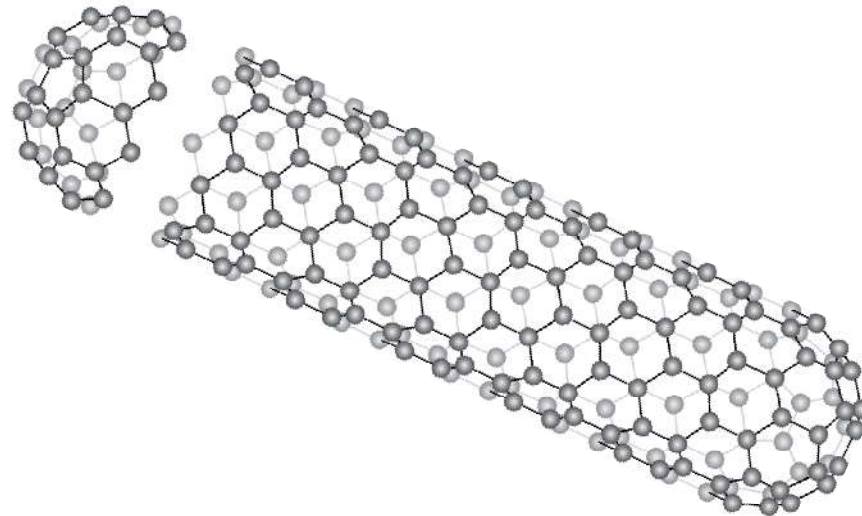
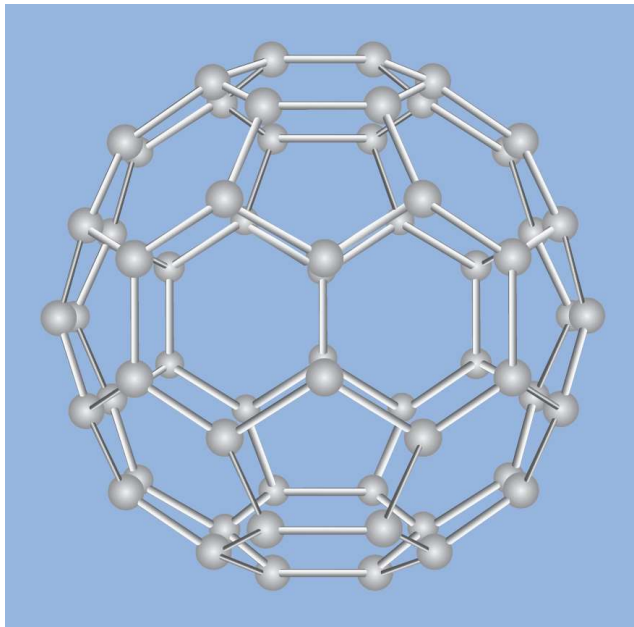
- Εξωτερικές επιφάνειες (ελάσματα, πλάκες...)
- Φύλλα ενίσχυσης/στήριξης

Ιδιότητες/Υλικά:

- Εξωτερικές επιφάνειες -- σκληρά και ψαθυρά υλικά
 - ικανά να προκαλέσουν θραύση βλημάτων υψηλής ταχύτητας
 - Al_2O_3 , B_4C , SiC , TiB_2
- Φύλλα ενίσχυσης/στήριξης -- μαλακά και όλκιμα υλικά
 - παραμορφώνονται, απορροφώντας την εναπομένουσα ενέργεια
 - αλουμίνιο, πολύστρωτα συνθετικών ινών

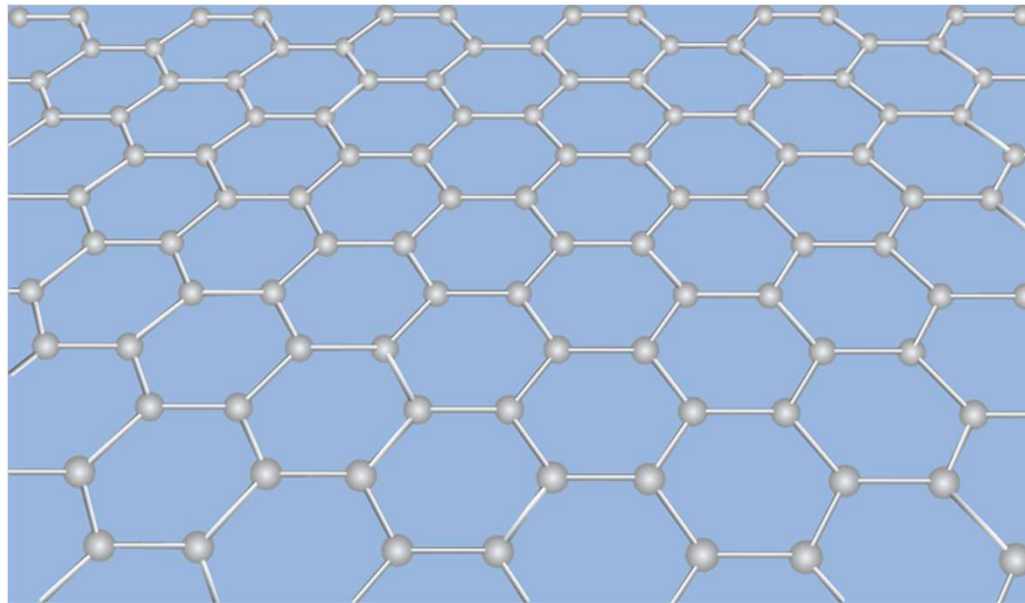
Νανοάνθρακες

- Φουλερένια – σφαιρικά συγκροτήματα αποτελούμενα από 60 άτομα άνθρακα (C_{60})
 - Μορφολογία παρόμοια με μπάλα ποδοσφαίρου
- Νανοσωλήνες άνθρακα – δημιουργούνται με “τύλιγμα” φύλλων γραφίτη σε μορφή σωλήνα
 - Τα άκρα τους καλύπτονται με “ημισφαίρια” φουλερενίων



Νανοάνθρακες

- Γραφένιο – μονοστρώμα/μεμβράνη γραφίτη με πάχος ενός ατόμου
 - αποτελείται από άτομα άνθρακα ενωμένα με δεσμούς sp^2 , εξαγωνικής διάταξης





ΣΥΝΟΨΗ



- Μηχανική συμπεριφορά σε θερμοκρασία δωματίου – προσδιορίζεται με δοκιμές κάμψης
 - γραμμική-ελαστική: μέτρηση του μέτρου ελαστικότητας
 - ψαθυρή θραύση: μέτρηση του μέτρου κάμψης
- Κατηγορίες κεραμικών υλικών:
 - ύαλοι
 - πυρίμαχα
 - προηγμένα κεραμικά
 - προϊόντα πηλού
 - τσιμέντα

Πολυμερικά υλικά: Δομές, Χαρακτηριστικά, Επεξεργασία και Εφαρμογές

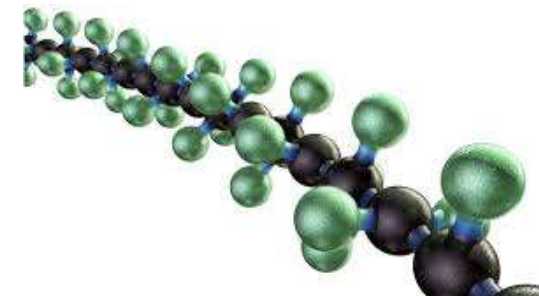
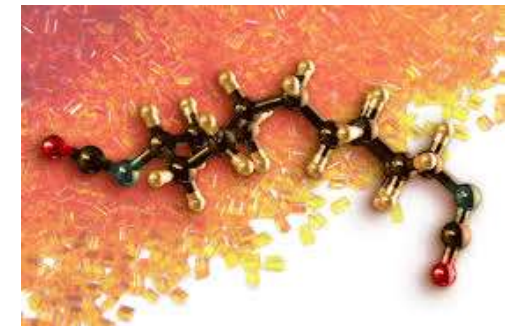


Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- Τα γενικά δομικά και χημικά χαρακτηριστικά των μορίων πολυμερών.
- Κοινά πολυμερικά υλικά και οι χημικές διαφορές τους.
- Σε τι διαφέρει η κρυσταλλική κατάσταση των πολυμερών από αυτή των μετάλλων και των κεραμικών;
- Ποιες είναι οι μηχανικές ιδιότητες των πολυμερών και πώς επηρεάζονται από τα μικροδομικά χαρακτηριστικά τους;
- Σκλήρυνση, ανισοτροπία, και ανόπτηση σε πολυμερή.
- Πώς συγκρίνεται η μηχανική απόκριση των πολυμερών σε αυξημένες θερμοκρασίες, έναντι των κεραμικών και μετάλλων;

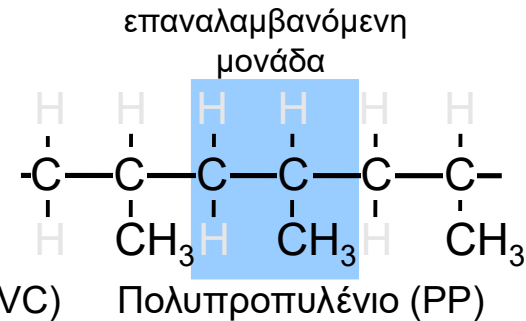
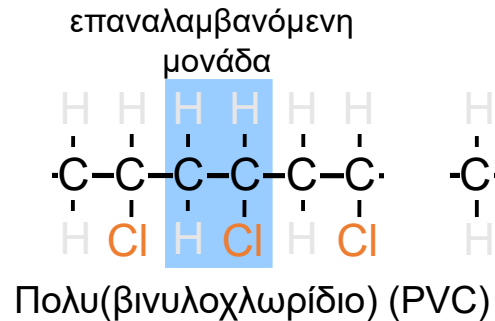
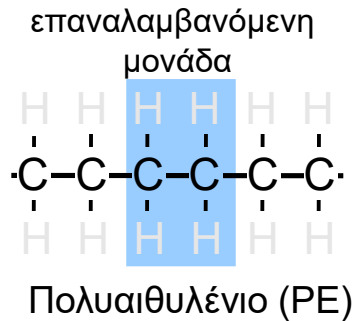


ΔΟΜΕΣ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ

Η ανατομία ενός πολυμερούς

Πολύ μερές

πολλές επαναλαμβανόμενες μονάδες



Πολυμερή από την αρχαιότητα

- **Φυσικά πολυμερή**

- Ξύλο – Καουτσούκ
- Βαμβάκι – Μαλλί
- Δέρμα – Μετάξι

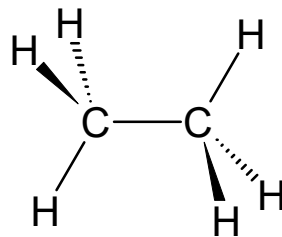
- **Παλαιότερες καταγεγραμμένες χρήσεις**

- Οι Ίνκας χρησιμοποιούσαν μπάλες από καουτσούκ
- Ο Νώε χρησιμοποίησε πίσσα (φυσικό πολυμερές) για την κατασκευή της κιβωτού

Σύσταση πολυμερών

Τα περισσότερα πολυμερή είναι υδρογονάνθρακες
– δηλ., αποτελούνται από H και C

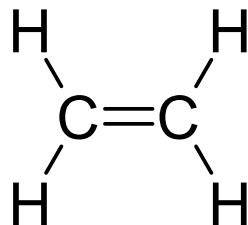
- Κορεσμένοι υδρογονάνθρακες
 - κάθε άτομο άνθρακα συνδέεται μέσω μονού δεσμού με τέσσερα άλλα άτομα
 - παράδειγμα:
 - Αιθάνιο, C_2H_6



Ονομασία	Σύσταση	Δομή	Σημείο βρασμού (°C)
Μεθάνιο	CH ₄	$ \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array} $	-164
Αιθάνιο	C ₂ H ₆	$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	-88,6
Προπάνιο	C ₃ H ₈	$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	-42,4
Βουτάνιο	C ₄ H ₁₀	.	-0,5
Πεντάνιο	C ₅ H ₁₂	.	36,1
Εξάνιο	C ₆ H ₁₄	.	69,0

Ακόρεστοι υδρογονάνθρακες

- Διπλοί & τριπλοί δεσμοί σχετικά ασταθείς – μπορούν να σχηματιστούν νέοι δεσμοί
 - διπλός δεσμός: στο αιθυλένιο (αιθένιο, C_2H_4)



- τριπλός δεσμός: στο ακετυλένιο (αιθίνιο, C_2H_2)



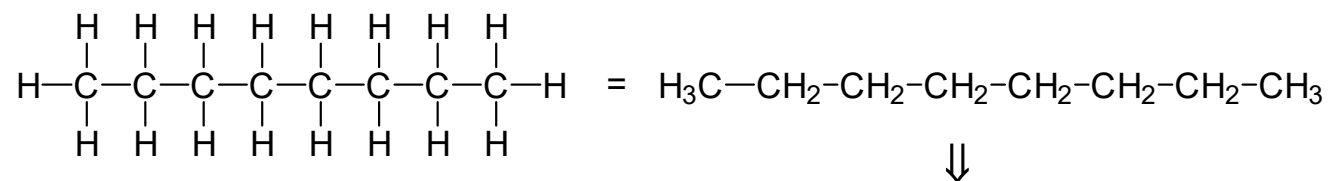
Ισομέρεια

- Ισομέρεια

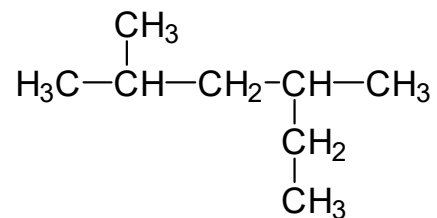
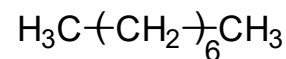
- δύο ενώσεις με τον ίδιο χημικό τύπο μπορεί να έχουν εντελώς διαφορετικές δομές

παράδειγμα: C_8H_{18}

- τυπική-οκτάνιο

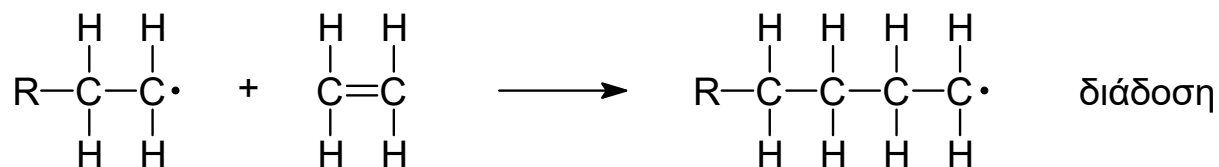
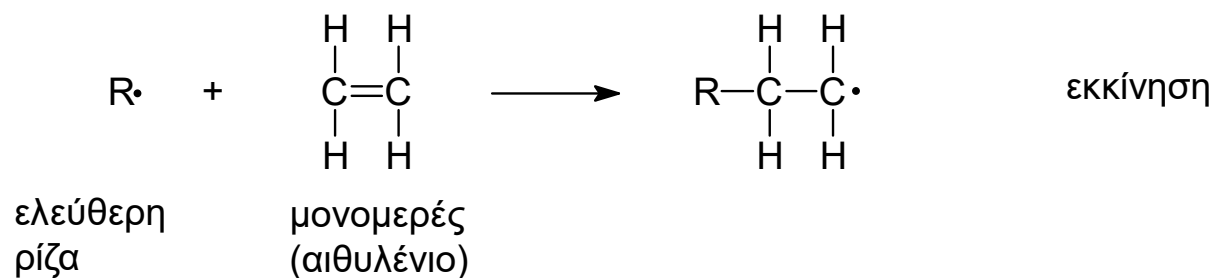


- 2,4-διμεθυλεξάνιο

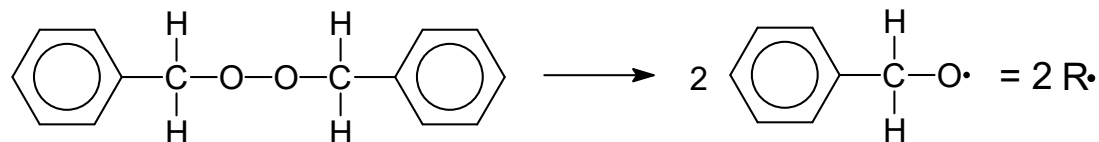


Πολυμερισμός και χημεία πολυμερών

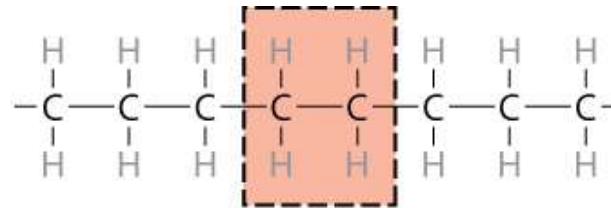
- Πολυμερισμός ελεύθερων ριζών



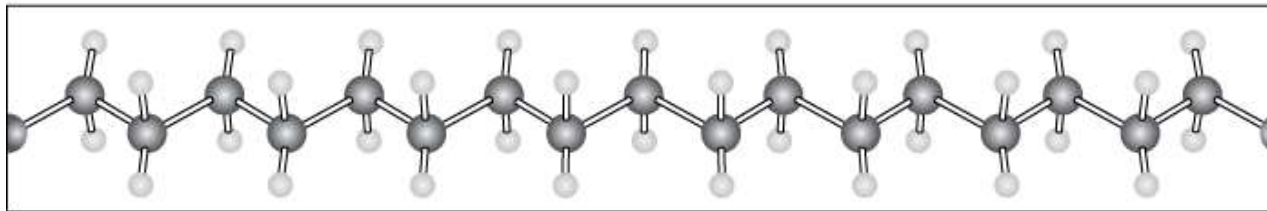
- Εκκινητής (καταλύτης): π.χ. βενζοϊκό υπεροξείδιο



Χημεία και δομή πολυαιθυλενίου



Επαναλαμβανόμενη μονάδα



Σημείωση: Το πολυαιθυλένιο είναι υδρογονάνθρακας με δομή μεγάλης αλυσίδας
- η παραφίνη που χρησιμοποιείται σε κεριά είναι πολυαιθυλένιο με μικρό μήκος αλυσίδας

Πολυμερή ευρείας χρήσης

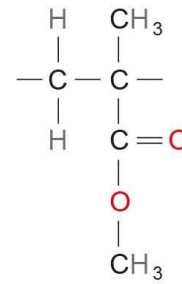
Πολυμερές	Επαναλαμβανόμενη δομή (ομάδα μονομερούς)
Πολυαιθυλένιο (PE)	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$
Πολυβινυλοχλωρίδιο (PVC)	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{Cl} \end{array}$
Πολυτετραφθοροαιθυλένιο (PTFE)	$\begin{array}{c} \text{F} \quad \text{F} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{F} \quad \text{F} \end{array}$
Πολυπροπυλένιο (PP)	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{CH}_3 \end{array}$
Πολυστυρόλιο (PS)	$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ -\text{C}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$

Πολυμερή ευρείας χρήσης (συνέχεια)

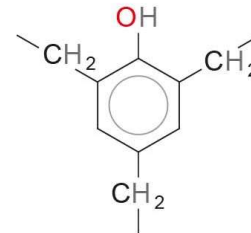
Πολυμερές

Επαναλαμβανόμενη δομή (ομάδα μονομερούς)

Πολυ(μεθακρυλικός μεθυλεστέρας)
(PMMA)



Φαινόλη-φορμαλδεΰδη (βακελίτης)

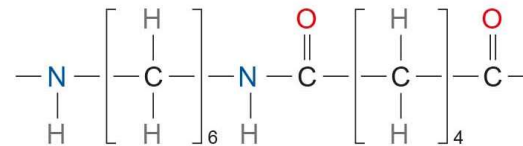


Πολυμερή ευρείας χρήσης (συνέχεια)

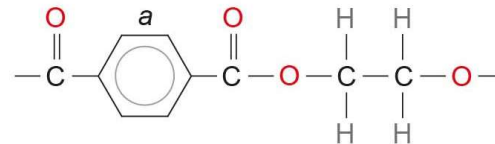
Πολυμερές

Επαναλαμβανόμενη δομή (ομάδα μονομερούς)

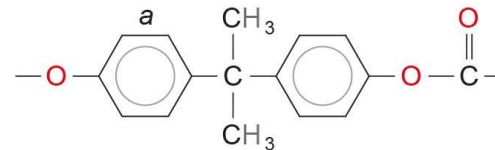
Πολυ(αδιπαμίδιο εξαμεθυλενίου)
(νάιλον 6,6)



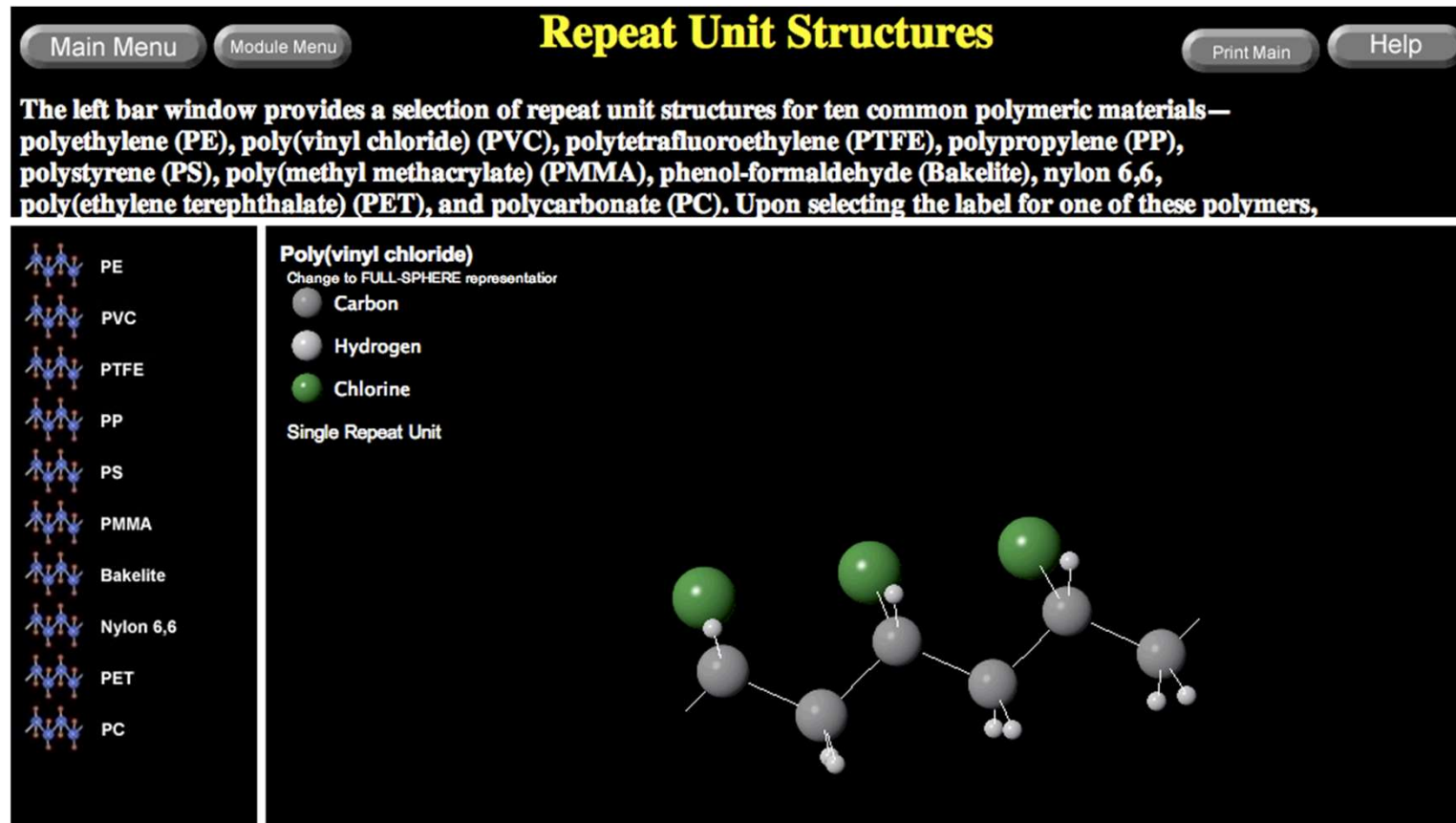
Πολυ(τερεφθαλικός αιθυλεστέρας)
(PET, ένας πολυεστέρας)



Πολυ(καρβονικός εστέρας)



Προσομοίωση δομών πολυμερικών μονάδων



Το λογισμικό VMSE παρέχει δυνατότητες προσαρμογής και περιστροφής πολυμερικών δομών στις 3 διαστάσεις.

ΜΟΡΙΑΚΟ ΒΑΡΟΣ

- **Μοριακό βάρος**, M : Μάζα ενός γραμμομορίου αλυσίδας πολυμερούς.



χαμηλή τιμή M



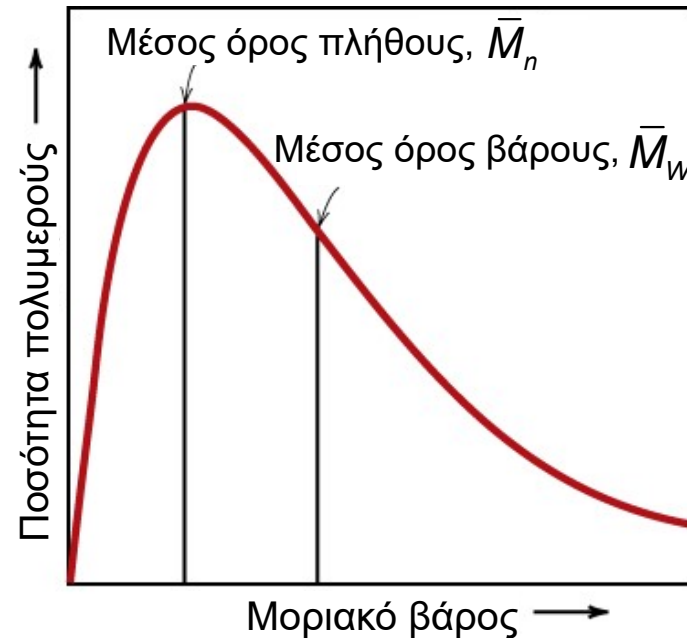
υψηλή τιμή M

Δεν έχουν ίδιο μήκος όλες οι αλυσίδες σε ένα πολυμερές...
— αυτό σημαίνει ότι υπάρχει μία κατανομή μοριακών βαρών

ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΜΟΡΙΑΚΟΥ ΒΑΡΟΥΣ

$$\bar{M}_n = \frac{\text{ολικό βάρος πολυμερούς}}{\text{ολικός αρ. μορίων}}$$

$$\bar{M}_n = \sum x_i M_i$$
$$\bar{M}_w = \sum w_i M_i$$



M_i = μέσο μοριακό βάρος για το εύρος μεγεθών i

x_i = κλάσμα αριθμού αλυσίδων στο εύρος μεγεθών i

w_i = κλάσμα βάρους αλυσίδων στο εύρος μεγεθών i

Υπολογισμός μοριακού βάρους

Παράδειγμα: μέσος όρος μάζας για μία τάξη

Σπουδαστής	Βάρος
	μάζα (lb)
1	104
2	116
3	140
4	143
5	180
6	182
7	191
8	220
9	225
10	380

Να υπολογιστεί ο μέσος όρος βάρους των σπουδαστών σε αυτή την τάξη:

α) Κατ' αριθμό: κλάσμα του αριθμού σπουδαστών σε κάθε κατηγορία (εύρος τιμών) μάζας.

β) Κατά βάρος: κλάσμα βάρους των σπουδαστών σε κάθε κατηγορία (εύρος τιμών) μάζας.

Υπολογισμός μοριακού βάρους (συνέχεια)

Λύση: Το πρώτο βήμα είναι η κατηγοριοποίηση των σπουδαστών, σε εύρη τιμών βάρους. Χρησιμοποιώντας ως “βήμα εύρους” τα 40 lb λαμβάνουμε τον ακόλουθο πίνακα:

Εύρος βάρους	Αριθμός σπουδαστών N_i	Μέσο βάρους W_i
μάζα (lb)		μάζα (lb)
81-120	2	110
121-160	2	142
161-200	3	184
201-240	2	223
241-280	0	-
281-320	0	-
321-360	0	-
361-400	1	380

Υπολογισμός κλάσματος, κατ' αριθμό και βάρους, των σπουδαστών σε κάθε εύρος βάρους, ως εξής:

$$x_i = \frac{N_i}{\sum N_i} \quad w_i = \frac{N_i W_i}{\sum N_i W_i}$$

Παράδειγμα: Για το εύρος βάρους 81-120 lb,

$$x_{81-120} = \frac{2}{10} = 0.2$$

$$w_{81-120} = \frac{2 \times 110}{1881} = 0.117$$

Σύνολο σπουδαστών	→ $\sum N_i$	$\sum N_i W_i$	← Σύνολο βάρους
	10	1881	

Υπολογισμός μοριακού βάρους (συνέχεια)

εύρος βάρους	μέσο βάρος W_i	κλάσμα κατ' αριθμό x_i	κλάσμα βάρους w_i
μάζα (lb)	μάζα (lb)		
81-120	110	0,2	0,117
121-160	142	0,2	0,150
161-200	184	0,3	0,294
201-240	223	0,2	0,237
241-280	-	0	0,000
281-320	-	0	0,000
321-360	-	0	0,000
361-400	380	0,1	0,202

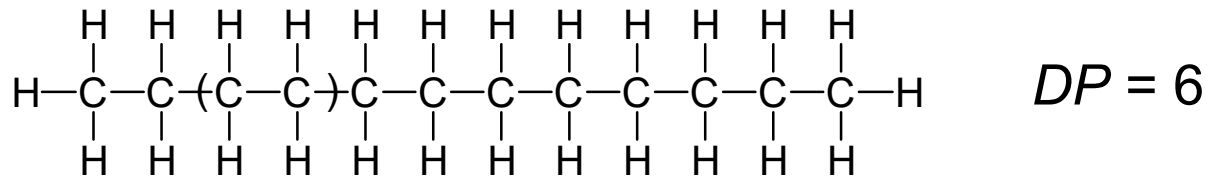
$$\bar{M}_n = \sum x_i M_i = (0.2 \times 110 + 0.2 \times 142 + 0.3 \times 184 + 0.2 \times 223 + 0.1 \times 380) = 188 \text{ lb}$$

$$\bar{M}_w = \sum w_i M_i = (0.117 \times 110 + 0.150 \times 142 + 0.294 \times 184 + 0.237 \times 223 + 0.202 \times 380) = 218 \text{ lb}$$

$$\bar{M}_w = \sum w_i M_i = 218 \text{ lb}$$

Βαθμός πολυμερισμού, DP

DP = μεσοσταθμικό πλήθος επαναλαμβανόμενων μονάδων ανά πολυμερική αλυσίδα



$$DP = \frac{\bar{M}_n}{\bar{m}}$$

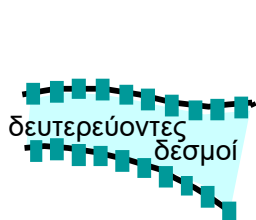
όπου $\bar{m}$ = μεσοσταθμικό μοριακό βάρος επαναλαμβανόμενης μονάδας για συμπολυμερή και υπολογίζεται ως:

$$\bar{m} = \sum f_i m_i$$

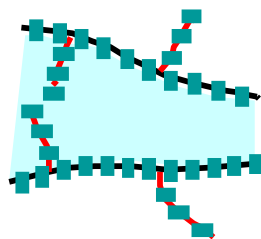
τμήμα αλυσίδας

μορ. βάρος επαναλ. μονάδας i

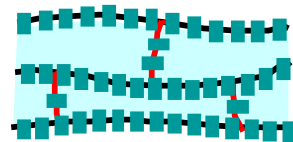
Πολυμερή – μοριακές δομές



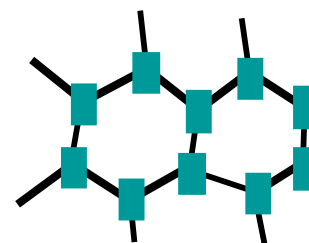
Γραμμική



Διακλαδιζόμενη



Διασταυρωμένη

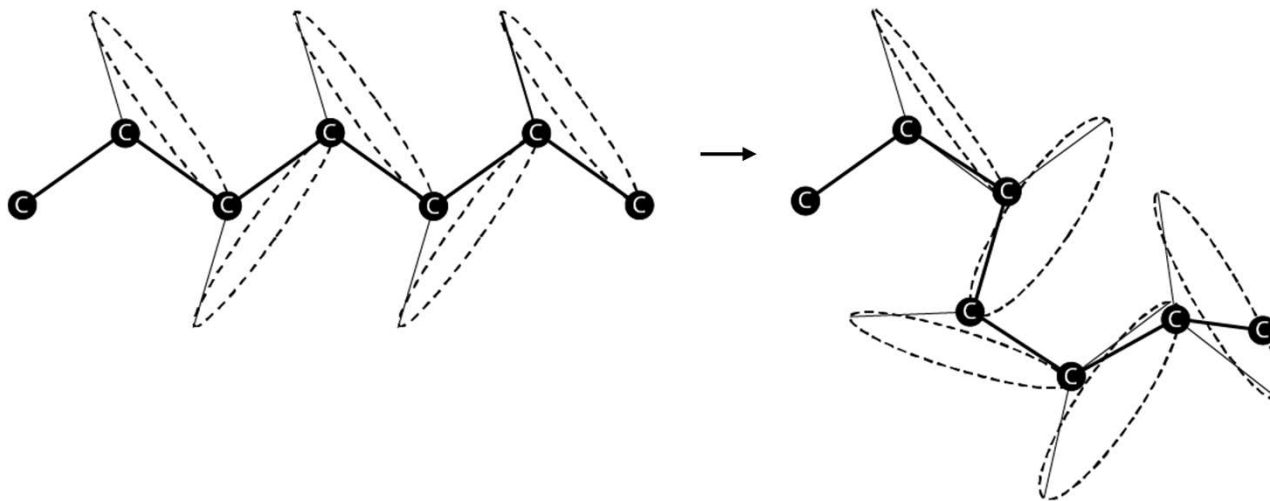


Δικτυωμένη

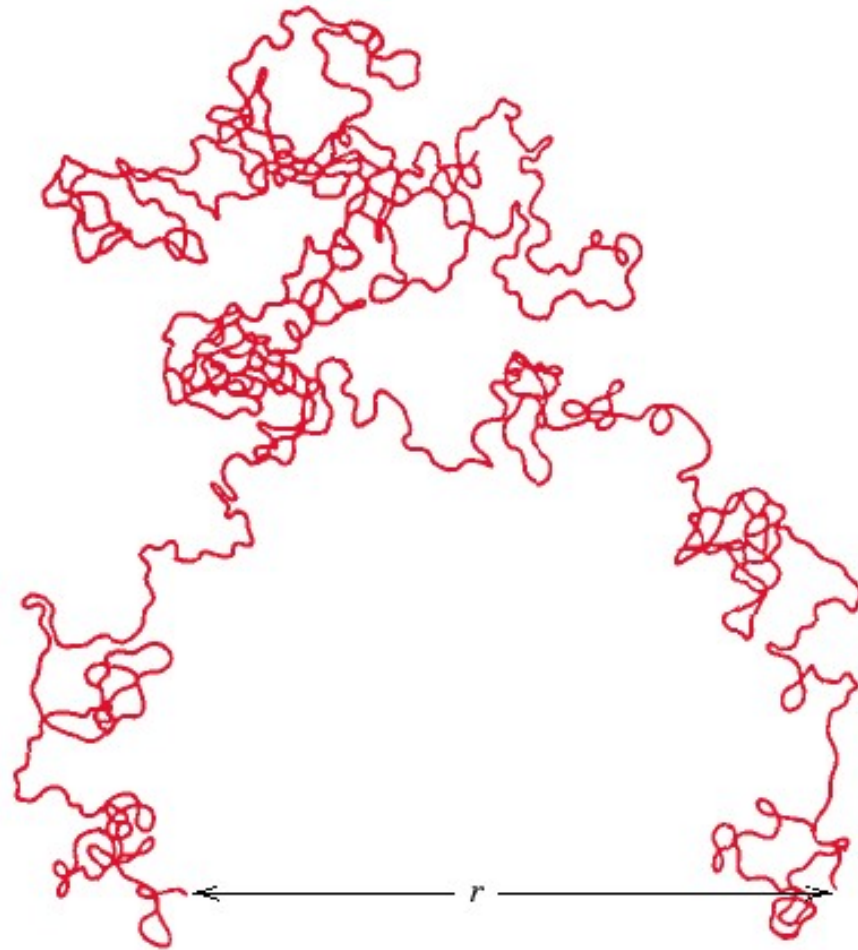
Πολυμερή – μοριακό σχήμα

Μοριακό σχήμα (“ικανότητα συμμόρφωσης”) – είναι δυνατή η κάμψη και συστροφή των αλυσίδων μέσω της περιστροφής των ατόμων άνθρακα γύρω από τους δεσμούς τους στην αλυσίδα

- Σημείωση: η μεταβολή του μοριακού σχήματος δεν προϋποθέτει “σπάσιμο” των δεσμών της πολυμερικής αλυσίδας



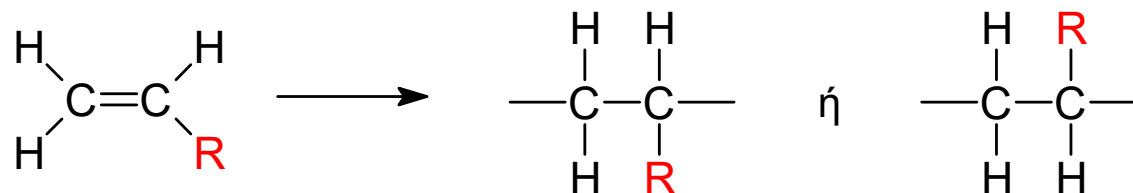
Μήκος πολυμερικής αλυσίδας, r



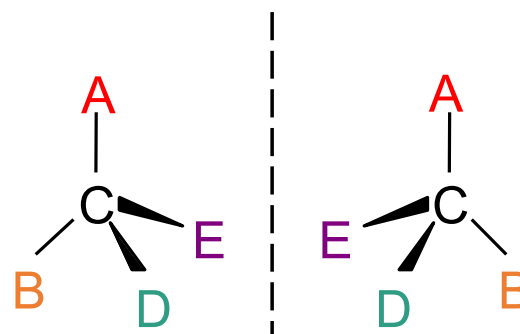
Πολυμερή – μοριακές διαμορφώσεις

Οι **μοριακές διαμορφώσεις** – μπορούν να μεταβάλλονται μόνο με “σπάσιμο” και εκ νέου σχηματισμό των δεσμών.

•Στερεοϊσομέρεια



Στερεοϊσομερή: συμμετρικές (κατοπτρικές) δομές, δεν είναι δυνατή η υπέρθεσή τους χωρίς διάσπαση δεσμών

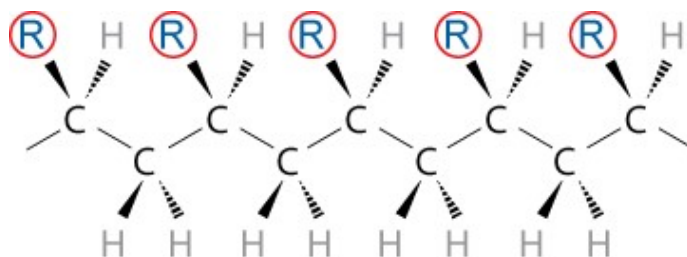
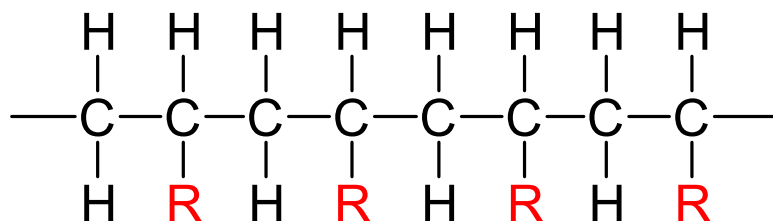


επίπεδο
συμμετρίας

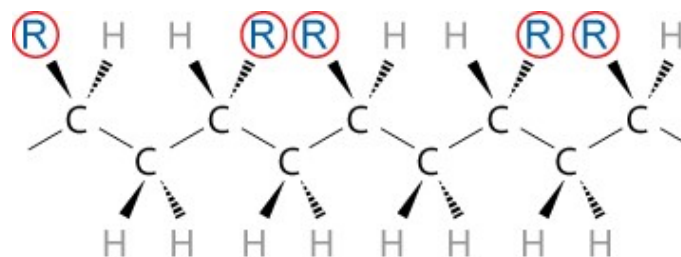
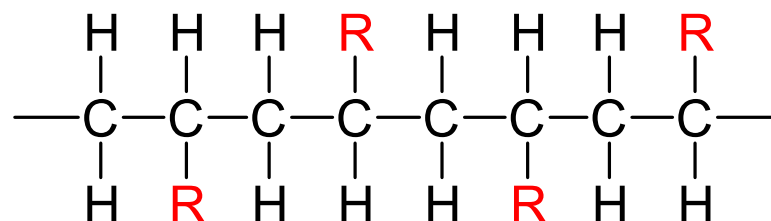
Τακτικότητα

Τακτικότητα – χωρική (3Δ) κανονικότητα των μονάδων **R** κατά μήκος της πολυμερικής αλυσίδας.

ισοτακτική διαμόρφωση –
όλες οι ομάδες **R** στην ίδια
πλευρά της αλυσίδας

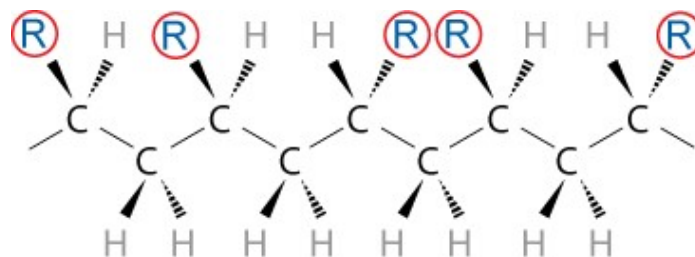
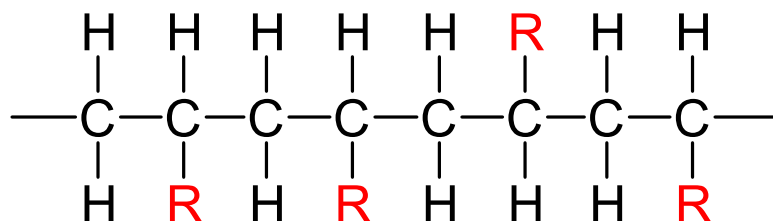


συνδιοτακτική διαμόρφωση
– ομάδες **R** εναλλάξ στις
δύο πλευρές της αλυσίδας

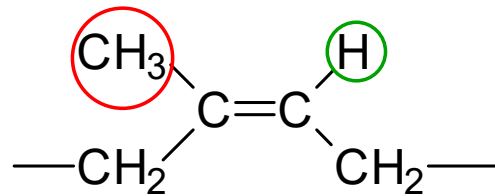


Τακτικότητα (συνέχεια)

ατακτική διαμόρφωση – τυχαία
τοποθέτηση των ομάδων R



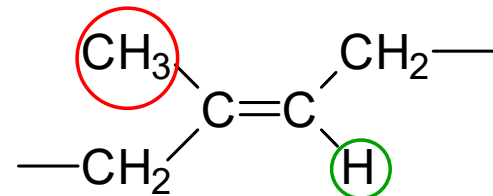
Γεωμετρική ισομέρεια (cis/trans-πολυμερή)



cis

cis-ισοπρένιο
(φυσικό καουτσούκ)

άτομο H και ομάδα CH₃
στην ίδια πλευρά
της πολυμ. αλυσίδας

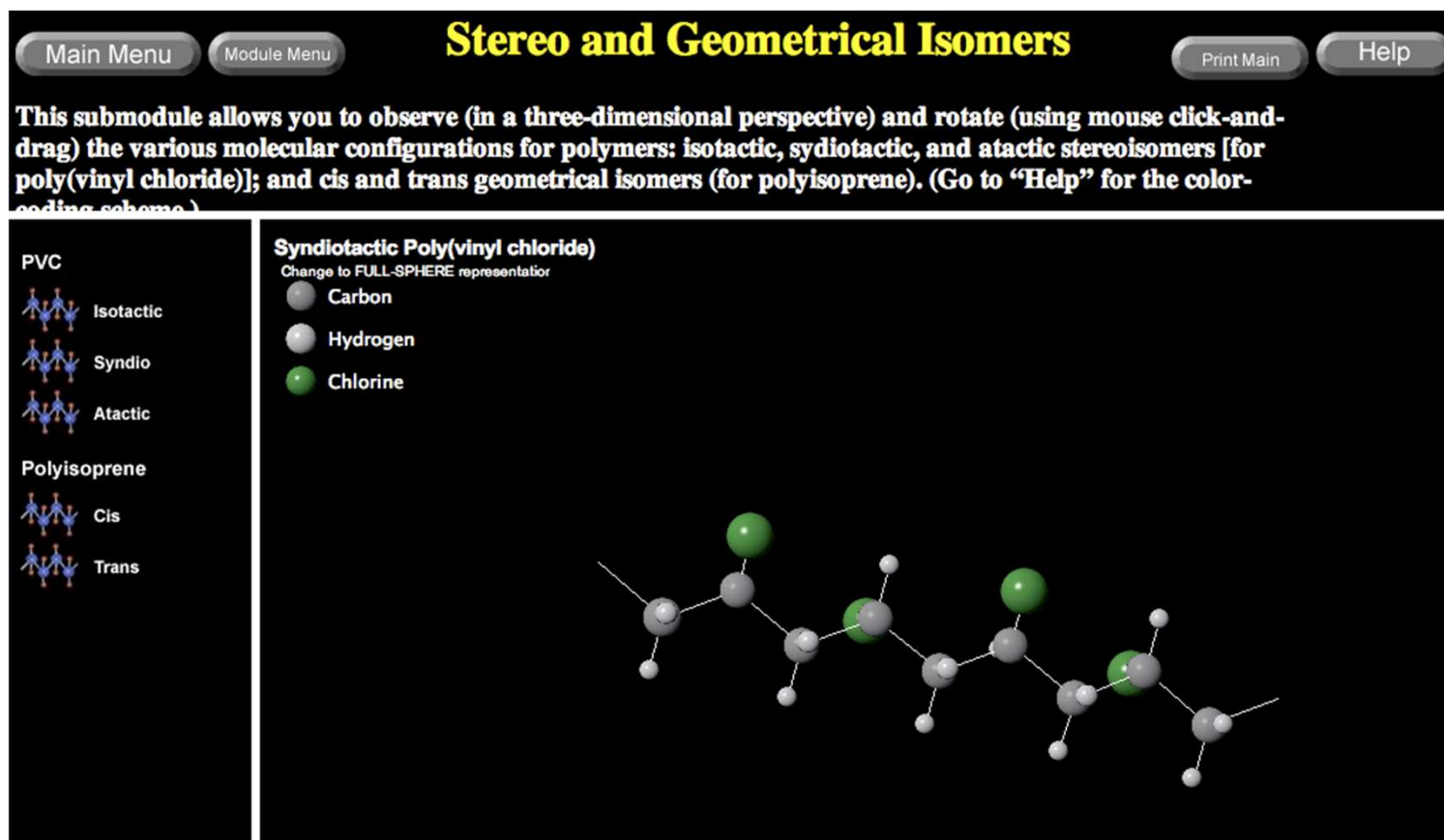


trans

trans-ισοπρένιο
(γουταπέρκα)

άτομο H και ομάδα CH₃
σε αντίθετες πλευρές
της πολυμ. αλυσίδας

Προσομοίωση στερεοϊσομέρειας & γεωμετρικής ισομέρειας



Το λογισμικό VMSE παρέχει δυνατότητες χειρισμού πολυμερικών δομών στις 3 διαστάσεις.

Συμπολυμερή

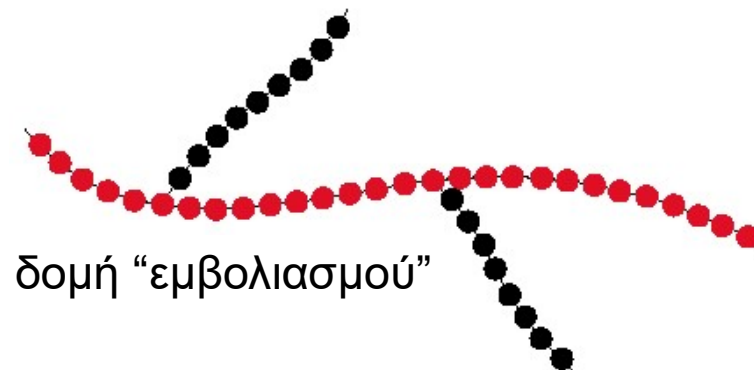
Δύο ή περισσότερα μονομερή που πολυμερίζονται μαζί.

- **τυχαίας δομής** – τυχαία τοποθέτηση των μονομερών Α και Β κατά μήκος της αλυσίδας
- **εναλλασσόμενης δομής** – εναλλάξ τοποθέτηση των μονομερών Α και Β στην πολυμερική αλυσίδα
- **δομής μπλοκ** – μεγάλες συστάδες μονομερούς Α εναλλάσσονται με μεγάλες συστάδες μονομερούς Β
- **συμπολυμερές εμβολιασμού** – αλυσίδες του Β “εμβολιάζονται” σε μία κύρια αλυσίδα (κορμό) μονομερούς Α

A –

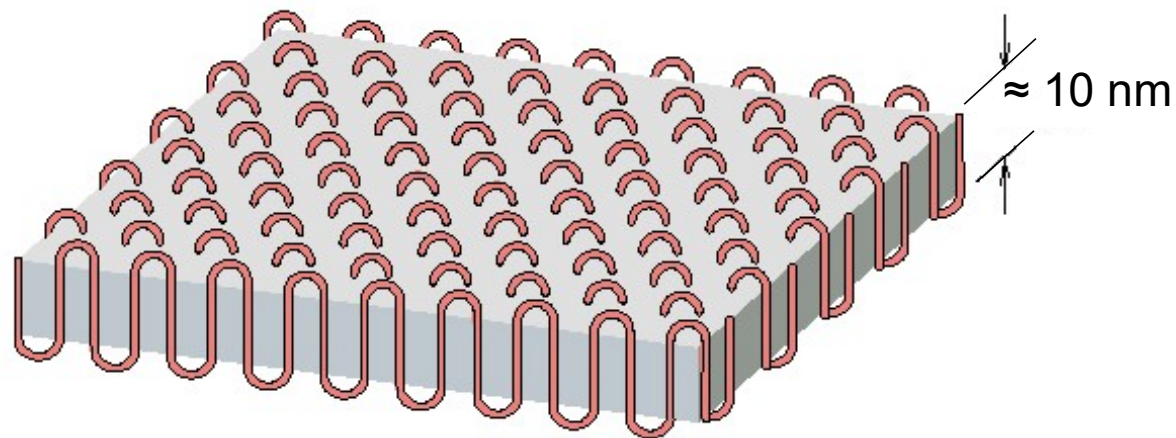


B –



Κρύσταλλοι πολυμερών

- Κρυσταλλικές περιοχές
 - λεπτά “πλακίδια” με αναδιπλώσεις αλυσίδων στις έδρες τους
 - δομή **αναδιπλωμένης αλυσίδας**



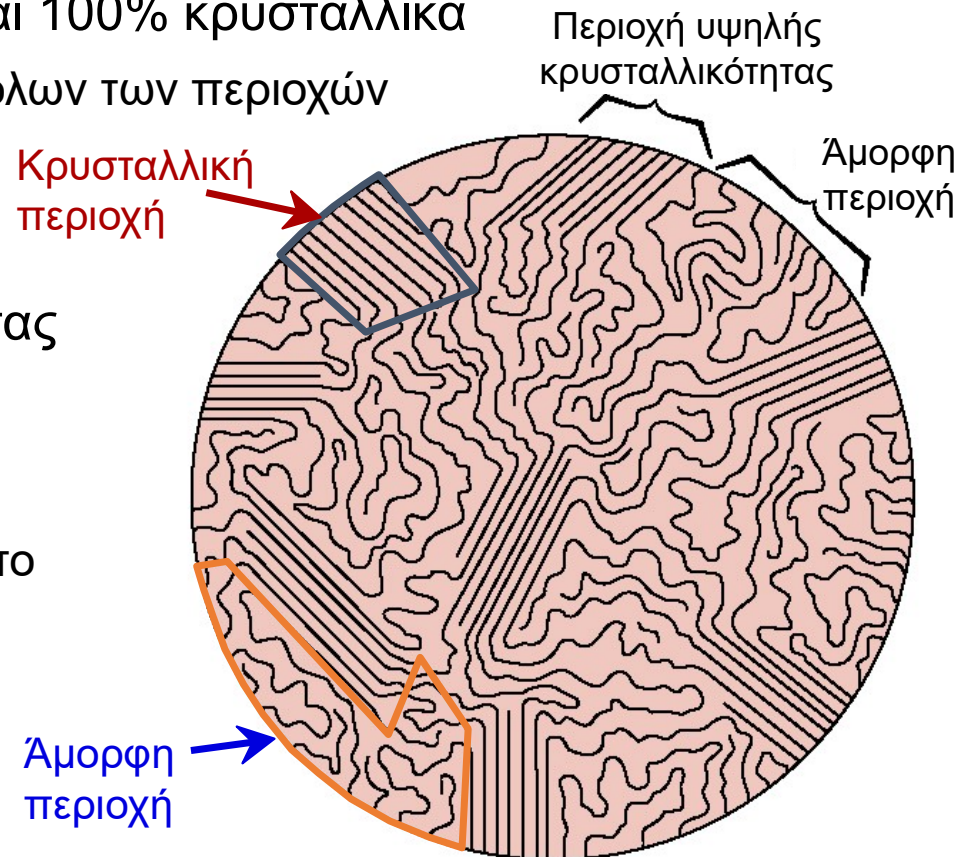
Κρύσταλλοι πολυμερών (συνέχεια)

Τα πολυμερή σπανίως είναι 100% κρυσταλλικά

- Δυσκολία ευθυγράμμισης όλων των περιοχών σε όλες τις αλυσίδες

- Βαθμός κρυσταλλικότητας εκφράζεται ως **%κρυσταλλικότητας**.

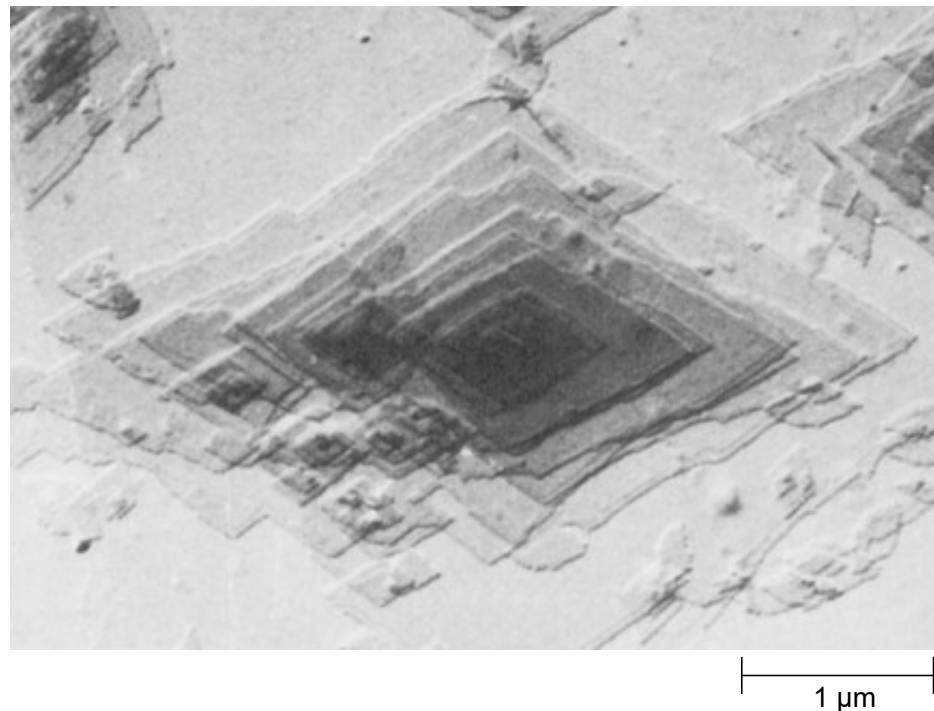
- συγκεκριμένες φυσικές ιδιότητες εξαρτώνται από το %κρυσταλλικότητας.
- η θερμική κατεργασία προκαλεί ανάπτυξη των κρυσταλλικών περιοχών και του %κρυσταλλικότητας.



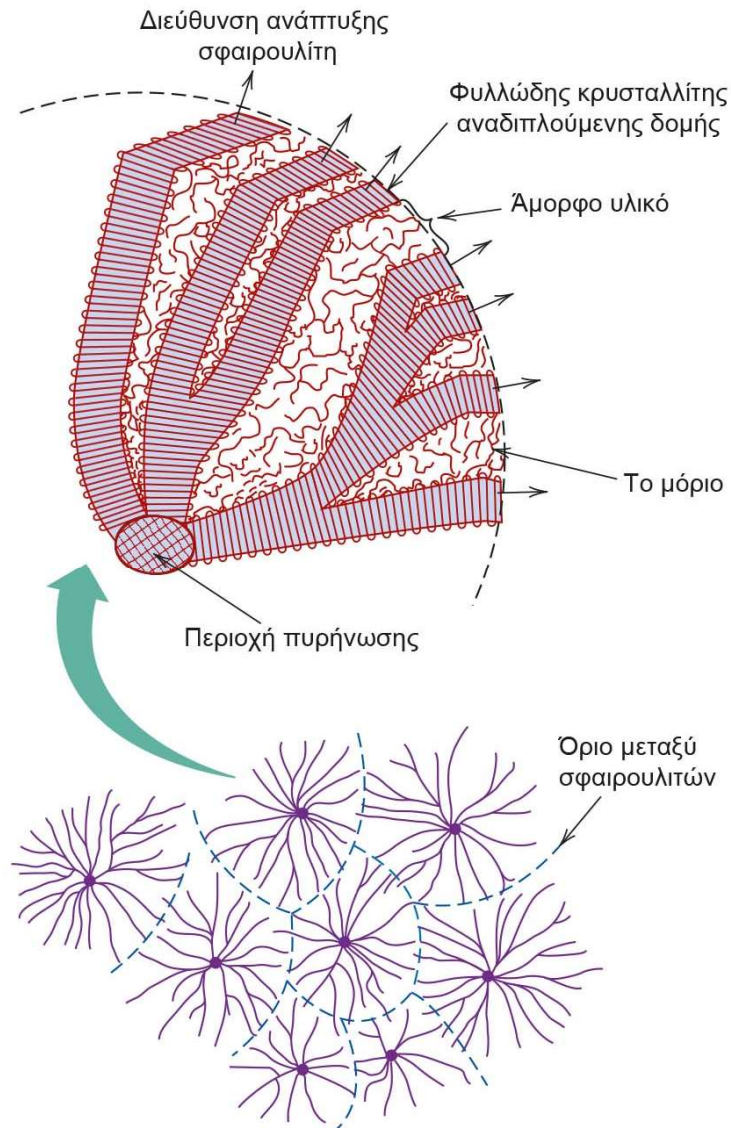
Σχ. 14.11, *Callister 6e*. (Από H.W. Hayden, W.G. Moffatt, and J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. III, *Mechanical Behavior*, John Wiley and Sons, Inc., 1965.)

Μονοκρύσταλλοι πολυμερών

- Φωτογραφία από μικροσκόπιο TEM: πολλαπλά στρώματα μονοκρυστάλλων (αναδιπλούμενης-αλυσίδας) πολυαιθυλενίου
- Μονοκρύσταλλοι – μόνο με αργούς και προσεκτικά ελεγχόμενους ρυθμούς ανάπτυξης



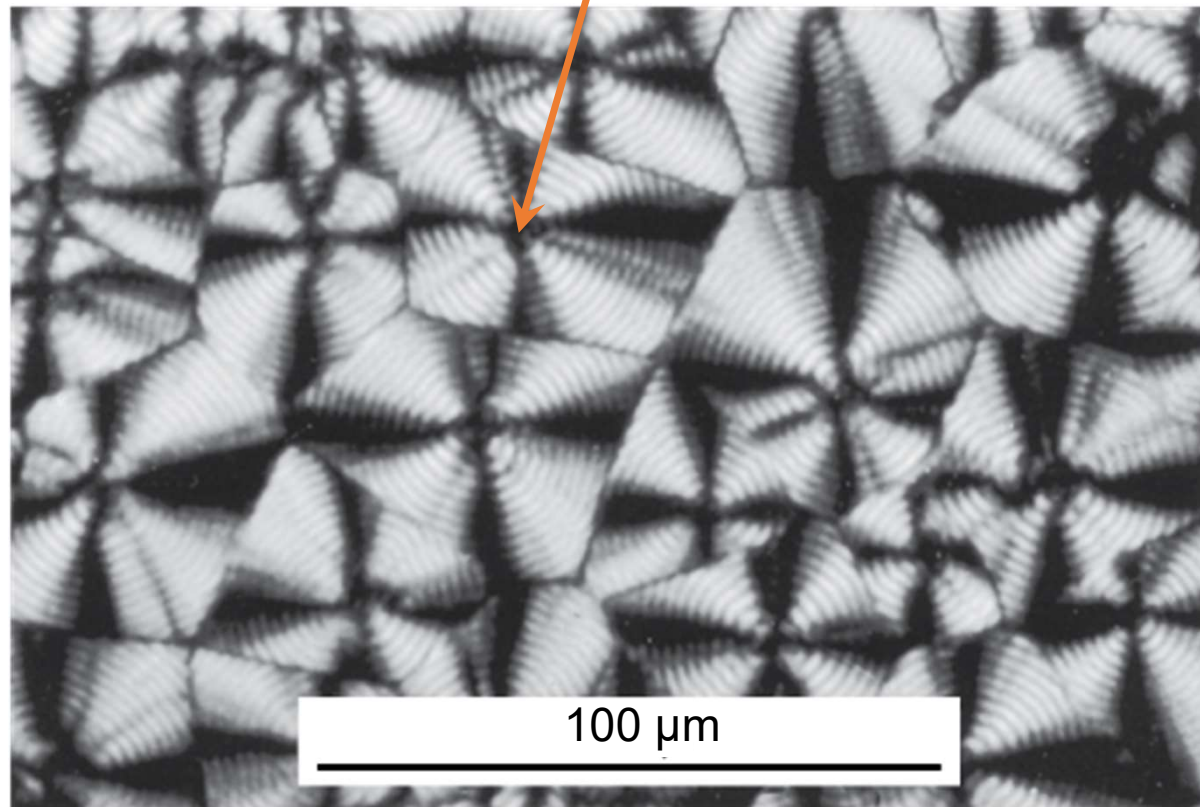
Ημικρυσταλλικά πολυμερή



- Ορισμένα ημι-κρυσταλλικά πολυμερή σχηματίζουν **σφαιρουλιτικές** δομές
- Εναλλάξ μοτίβο από κρυσταλλίτες αναδιπλούμενης-αλυσίδας και άμορφες περιοχές
- Σφαιρουλιτική δομή προκύπτει από σχετικά ταχείς ρυθμούς ανάπτυξης

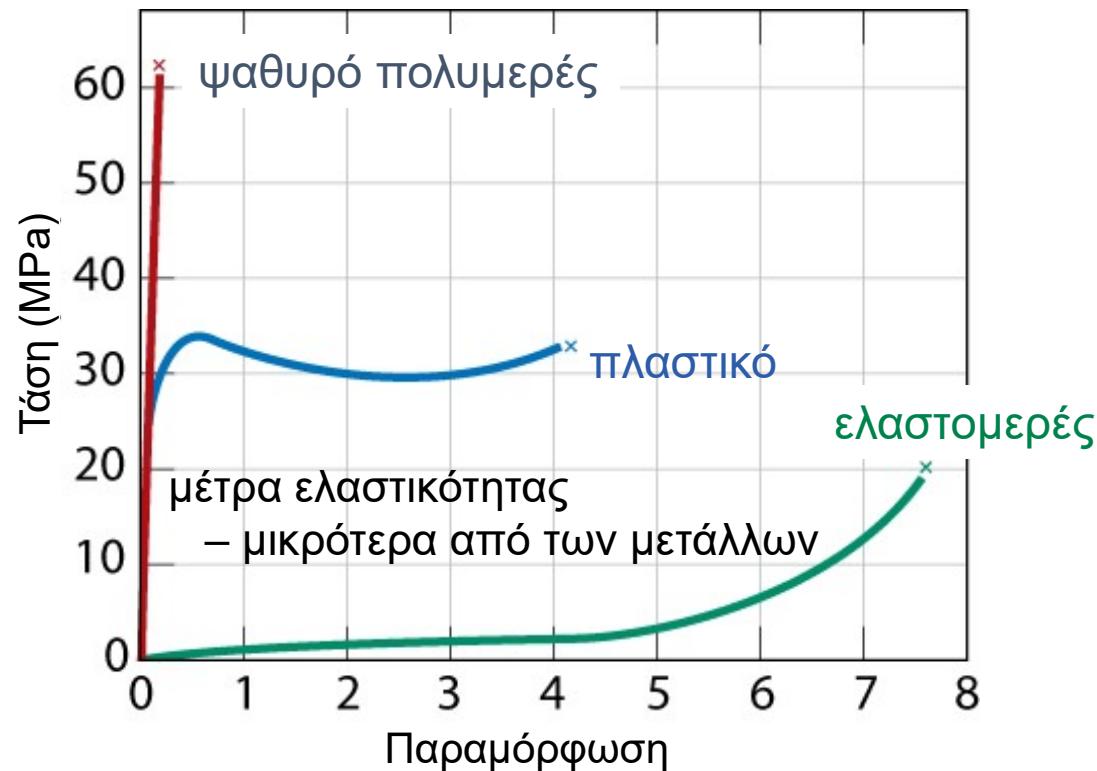
Σφαιρουλίτες σε πολυαιθυλένιο (φωτογραφία από μικροσκόπιο TEM)

Χρησιμοποιείται κάθετα πολωμένο φως
-- στο εσωτερικό κάθε σφαιρουλίτη, μορφολογία
που θυμίζει τον “σταυρό της Μάλτας”



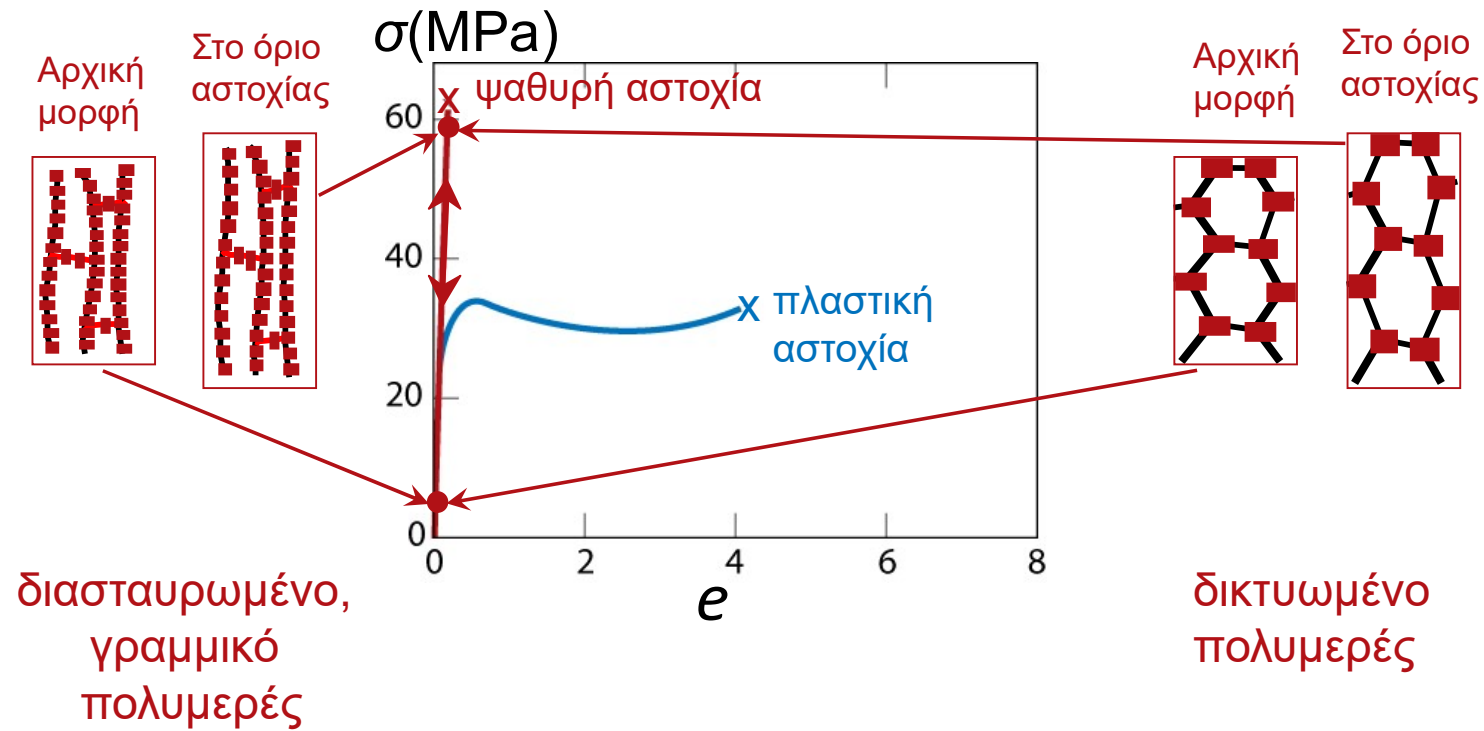
ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ, ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ, ΚΑΙ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ

Μηχανικές ιδιότητες πολυμερών – Συμπεριφορά τάσης-παραμόρφωσης

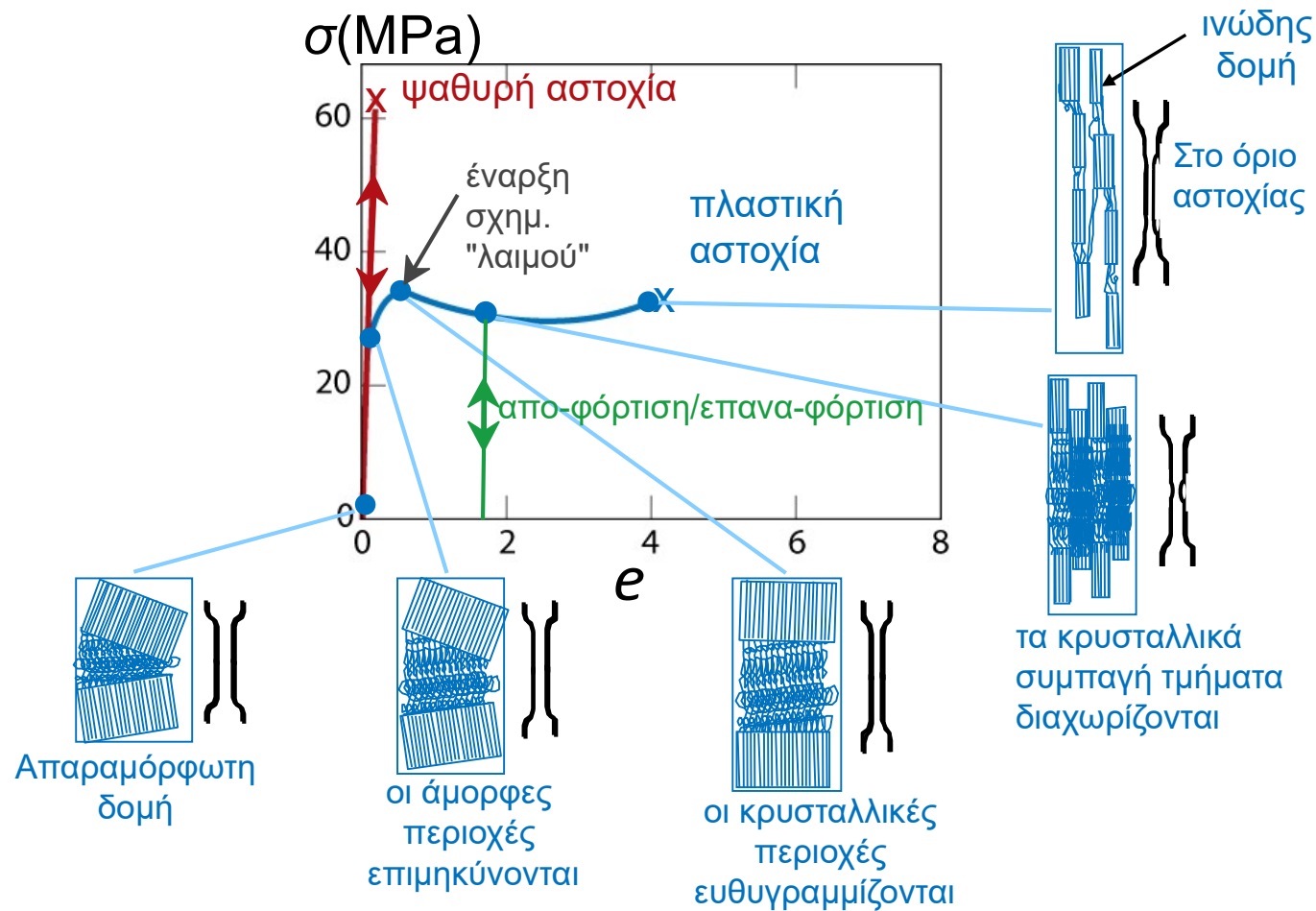


- Αντοχή πολυμερών σε θραύση: ~10% αυτής των μετάλλων
- Μηχανικές παραμορφώσεις πολυμερών > 1000%
 - στα περισσότερα μέταλλα, μηχ. παραμόρφωση < 10%

Μηχανισμοί παραμόρφωσης: Ψαθυρά, διασταυρωμένα και δικτυωμένα πολυμερή

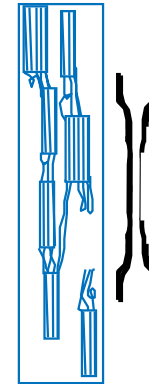


Μηχανισμοί παραμόρφωσης: Ημι-κρυσταλλικά (πλαστικά) πολυμερή

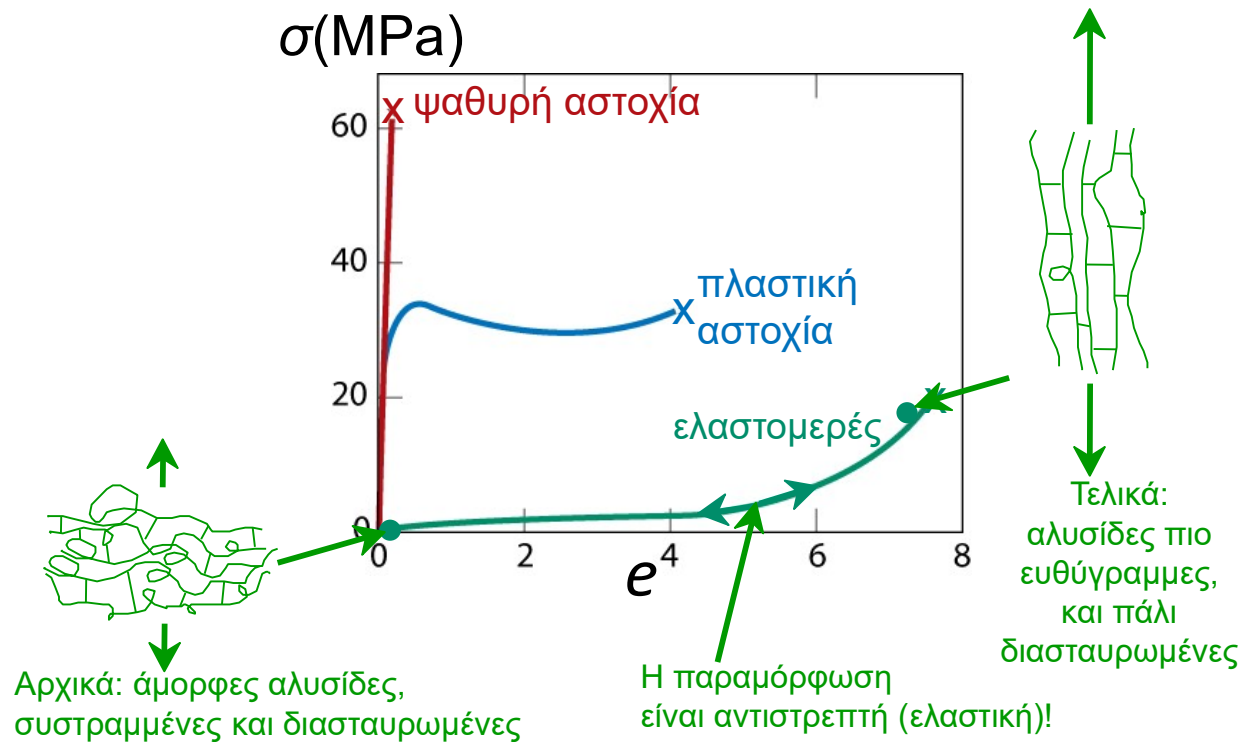


Προ-παραμόρφωση με διέλκυση

- Η **διέλκυση**...
 - εφελκύει το πολυμερές πριν από τη χρήση
 - ευθυγραμμίζει τις πολυμερ. αλυσίδες ως προς τη διεύθυνση διέλκυσης
- Αποτελέσματα της διέλκυσης:
 - αύξηση του μέτρου ελαστικότητας (E) στη διεύθυνση διέλκυσης
 - αύξηση της αντοχής σε εφελκυσμό (TS) στη διεύθυνση διέλκυσης
 - μείωση της ολκιμότητας ($\%EL$)
- Η **ανόπτηση** μετά τη διέλκυση...
 - μειώνει την ευθυγράμμιση των αλυσίδων
 - αντιστρέφει τις επιδράσεις της διέλκυσης (μείωση των E και TS , βελτίωση του $\%EL$)
- Αποτελέσματα ανόπτησης: Αντίστροφα από αυτά που τυπικά παρατηρούνται σε μεταλλικά υλικά!



Μηχανισμοί παραμόρφωσης: Ελαστομερή

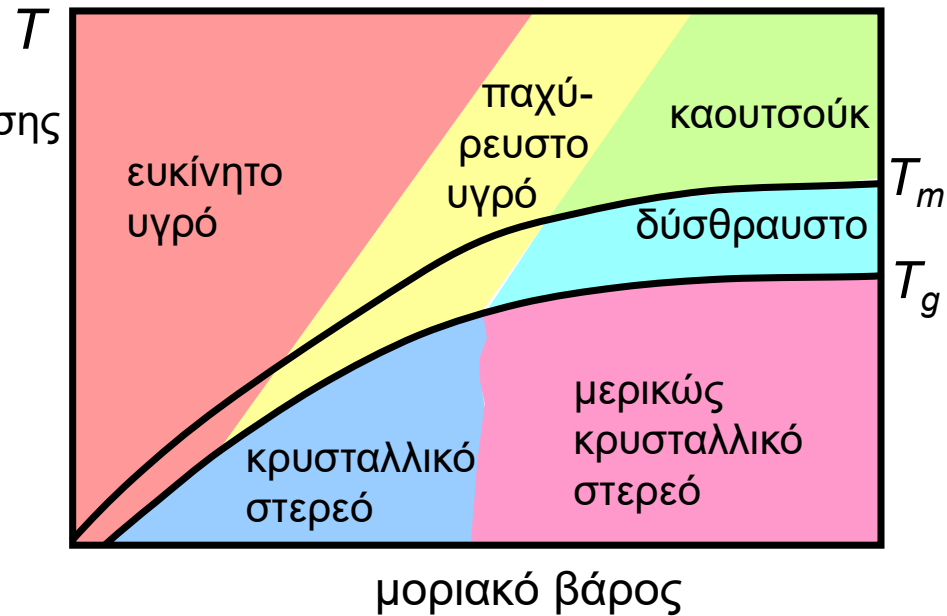


- Σύγκριση της ελαστικής συμπεριφοράς των ελαστομερών με:
 - την ψαθυρή συμπεριφορά των ευθυγραμμισμένων, διασταυρωμένων & δικτυωμένων πολυμερών, και
 - την πλαστική συμπεριφορά των ημι-κρυσταλλικών πολυμερών (όπως αναφέρονται σε προηγούμενες διαφάνειες)

Θερμοπλαστικά έναντι θερμοσκληρυνόμενων

- **Θερμοπλαστικά:**

- μικρός βαθμός διασταύρωσης
- όλκιμα
- μαλακώνουν με θέρμανση
- πολυαιθυλένιο
- πολυπροπυλένιο
- πολυκαρβονικά
- πολυστυρένιο

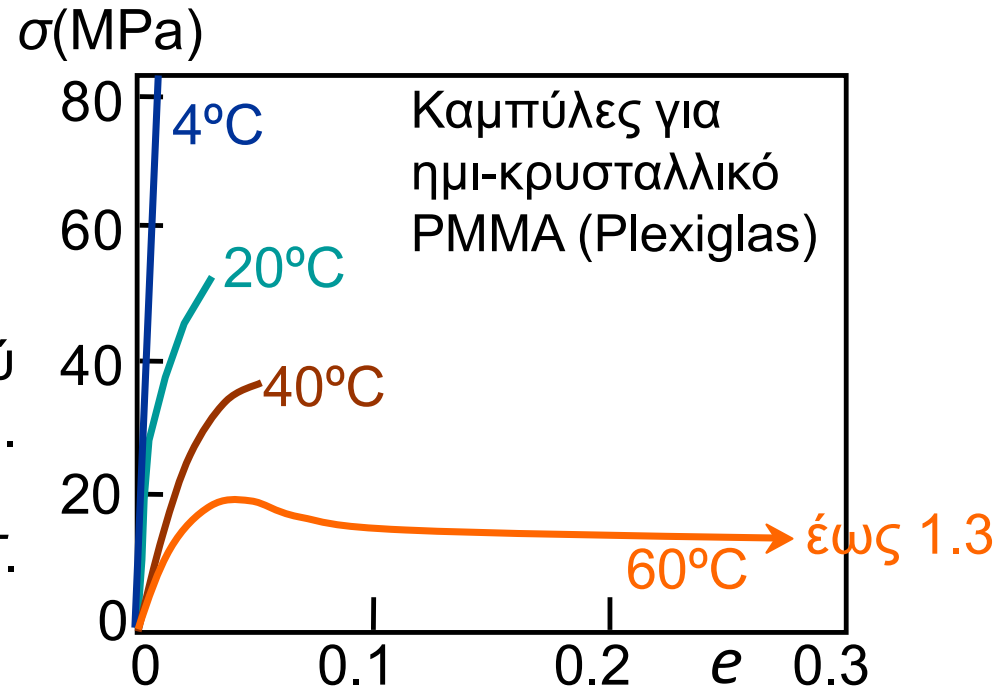


- **Θερμοσκληρυνόμενα:**

- σημαντικός βαθμός διασταύρωσης (10 έως 50% επαναλαμβανόμενων μονάδων)
- σκληρά και ψαθυρά
- ΔΕΝ μαλακώνουν με θέρμανση
- βουλκανισμένο καουτσούκ, εποξειδικά, πολυεστερική ρητίνη, φαινολική ρητίνη

Επίδραση θερμοκρασίας (T) & ρυθμού παραμόρφωσης στα θερμοπλαστικά

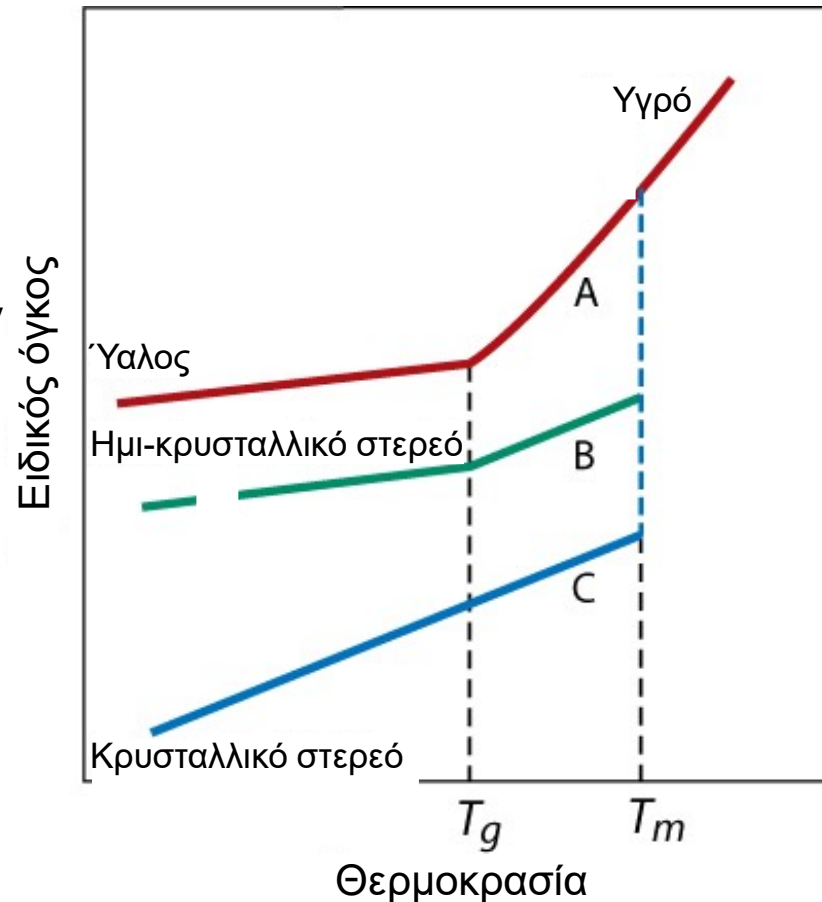
- Μείωση της T ...
 - αυξάνει το E
 - αυξάνει την TS
 - μειώνει το $\%EL$
- Αύξηση του ρυθμού παραμόρφωσης...
 - ίδιες επιδράσεις με τη μείωση της T .



Θερμοκρασίες τήξης & υαλώδους μετάπτωσης (T_m , T_g)

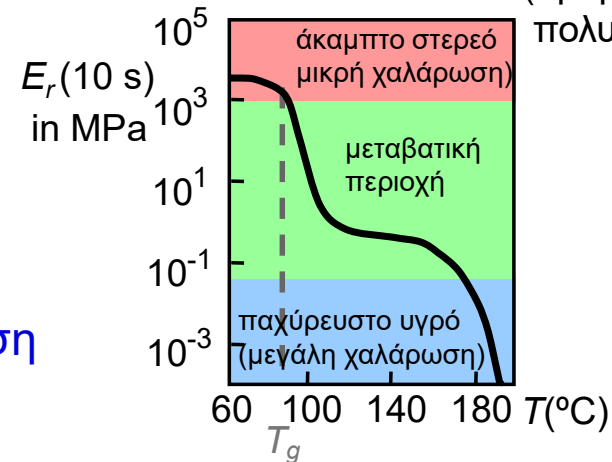
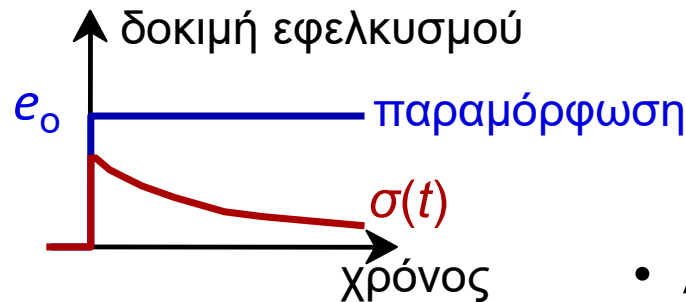
Ποιοι παράγοντες επηρεάζουν τις T_m και T_g ;

- Αμφότερες οι T_m και T_g αυξάνονται με την αύξηση της ακαμψίας των πολυμερ. αλυσίδων
- Η ακαμψία των πολυμερ. αλυσίδων αυξάνεται όταν υπάρχουν
 1. Ογκώδεις πλευρικές ομάδες
 2. Πολικές ομάδες ή πλευρικές ομάδες
 3. Διπλοί δεσμοί και αρωματικές ομάδες στις αλυσίδες
- Κανονικότητα διάταξης επαναλαμβανόμενων μονάδων – επηρεάζει μόνο την T_m



Χρονικά εξαρτώμενη παραμόρφωση

- **Δοκιμή χαλάρωσης τάσεων:**
 - παραμόρφωση, υπό εφελκυσμό, έως ϵ_0 .
 - παρατηρείται μείωση της τάσης με τον χρόνο.
- Για $T > T_g$ παρατηρείται μεγάλη μείωση στην E_r (άμορφο πολυστυρένιο)



- **Μέτρο χαλάρωσης:**

$$E_r(t) = \frac{\sigma(t)}{\epsilon_0}$$

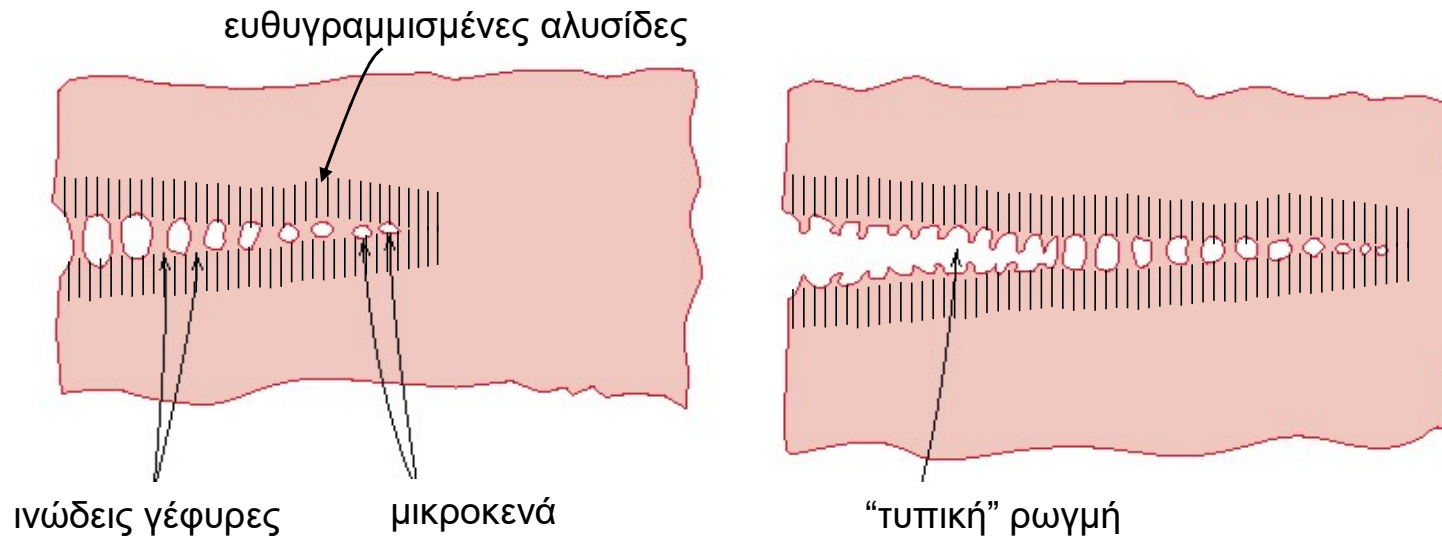
- Αντιπροσωπευτικές τιμές T_g (°C):

PE (χαμηλής πυκνότητας)	- 110
PE (υψηλής πυκνότητας)	- 90
PVC	+ 87
PS	+100
PC	+150

Ανάπτυξη πορωδών ρωγμών κατά τη θραύση θερμοπλαστικών

Οι **πορώδεις ρωγμές** συμπεριφέρονται διαφορετικά από τις συνήθεις ρωγμές και σχηματίζονται πριν από αυτές

- σχετίζονται με περιοχές πολύ εντοπισμένης διαρροής, οι οποίες οδηγούν στον σχηματισμό μικρών αλληλένδετων μικροκενών
- μεταξύ των μικροκενών σχηματίζονται ινώδεις γέφυρες εντός των οποίων προσανατολίζονται οι μοριακές αλυσίδες



Τύποι πολυμερών – ίνες

Ίνες - μήκος/διάμετρος > 100

- Κύρια χρήση σε υφάσματα.
- Χαρακτηριστικά ινών:
 - Υψηλή αντοχή σε εφελκυσμό
 - Υψηλός βαθμός κρυσταλλικότητας
 - Δομές που περιέχουν πολικές ομάδες
- Διαμορφώνονται με κατεργασίες **στροβιλισμού**
 - το τηγμένο πολυμερές διέρχεται από ειδική μήτρα με πολλές μικρές οπές
 - οι παραγόμενες ίνες υφίστανται μηχανική επιμήκυνση (διέλκυση)
 - το αποτέλεσμα είναι εξαιρετικά ευθυγραμμισμένες πολυμερικές αλυσίδες – ινώδης δομή

Τύποι πολυμερών και χρήσεις

- **Επιστρώσεις** – λεπτές στρώσεις πολυμερούς που εφαρμόζονται σε επιφάνειες (π.χ. βαφές, βερνίκια) για σκοπούς όπως
 - προστασία από διάβρωση/αλλοίωση
 - αισθητική – βελτίωση εμφάνισης
 - επίτευξη ηλεκτρικής μόνωσης
- **Υλικά συγκόλλησης** – διασύνδεση δύο στερεών υλικών
 - τύποι διασύνδεσης:
 1. χημική – μέσω δυνάμεων van der Waals
 2. μηχανική – διείδυση σε πόρους/εσοχές/σχισμές
- **Μεμβράνες** – παράγονται με εξώθηση/εμφύσηση
- **Αφροί** – παράγονται με ενσωμάτωση φυσαλίδων αέρα σε πλαστικό

Προηγμένα πολυμερή

Πολυαιθυλένιο υπερυψηλού μοριακού βάρους (UHMWPE)

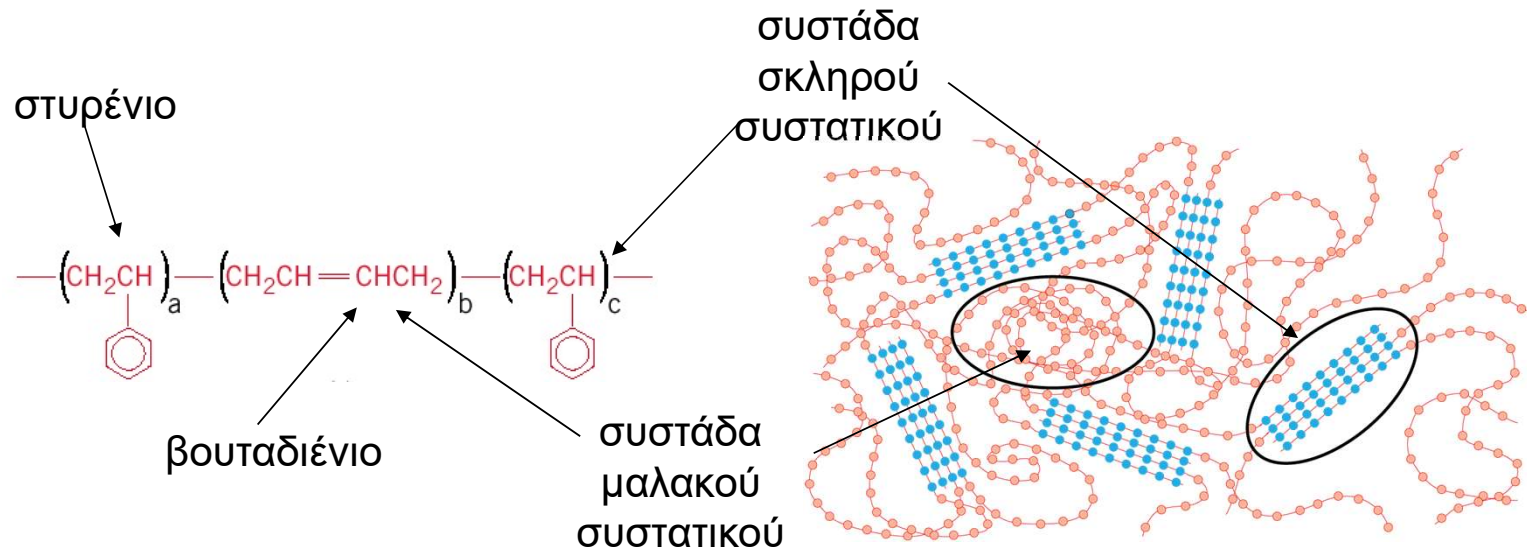
- Μοριακό βάρος περίπου 4×10^6 g/mol
- Εξαιρετικές ιδιότητες
 - υψηλή αντοχή σε κρούση
 - αντίσταση σε φθορά/εκτριβή
 - χαμηλός συντελεστής τριβής
 - αυτο-στιλβούμενη, αντικολλητική επιφάνεια
- Σημαντικές εφαρμογές
 - αλεξίσφαιρα γιλέκα
 - καλύμματα για μπάλες γκολφ
 - εμφυτεύματα αρthroπλαστικής ισχίου



Προηγμένα πολυμερή

Θερμοπλαστικά ελαστομερή

Στυρένιο-Βουταδιένιο: συμπολυμερές κατά συστάδες





ΣΥΝΟΨΗ

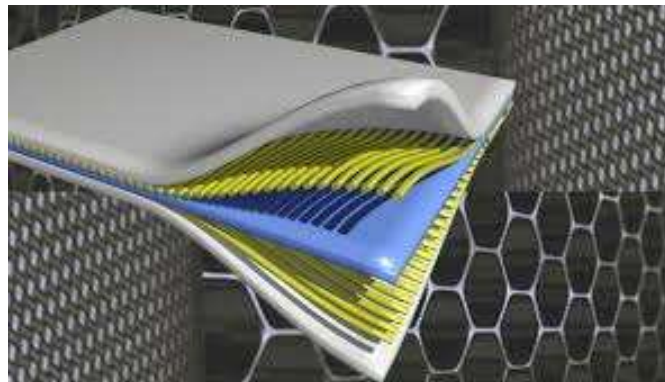


- Περιορισμοί των πολυμερών:
 - Γενικά μικρά μεγέθη E , σ_y , K_c , $T_{\text{εφαρμογής}}$.
 - Παραμόρφωση, συχνά εξαρτώμενη από χρόνο και θερμοκρασία.
- **Θερμοπλαστικά** (PE, PS, PP, PC):
 - Σχετικά μικρότερα E , σ_y , $T_{\text{εφαρμογής}}$
 - Σχετικά μεγαλύτερο K_c
 - Ευκολότερη διαμόρφωση και ανακύκλωση
- **Ελαστομερή** (καουτσούκ):
 - Μεγάλες αντιστρεπτές παραμορφώσεις!
- **Θερμοσκληρυνόμενα** (εποξειδικά, πολυεστέρες):
 - Σχετικά μεγαλύτερα E , σ_y , $T_{\text{εφαρμογής}}$
 - Σχετικά μικρότερο K_c

• Εφαρμογές των πολυμερών

- | | |
|-------------------------------|----------------------|
| -- ελαστομερή | -- ίνες |
| -- επιστρώσεις | -- υλικά συγκόλλησης |
| -- μεμβράνες | -- αφροί |
| -- προηγμένα πολυμερικά υλικά | |

Σύνθετα υλικά



Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

- Κατηγορίες και τύποι σύνθετων υλικών.
- Ποια πλεονεκτήματα παρέχει η χρήση σύνθετων υλικών;
- Πώς μπορεί να προβλεφθεί η ακαμψία και η αντοχή των διάφορων τύπων σύνθετων υλικών;



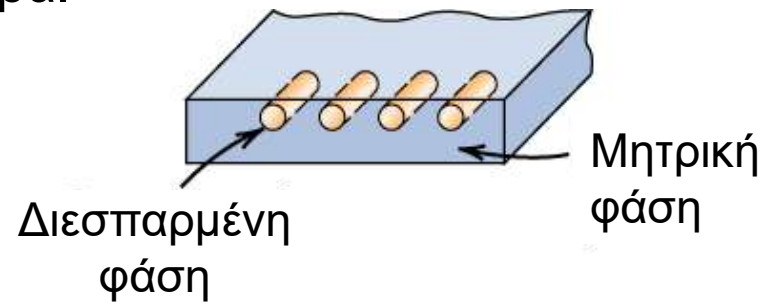
ΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ

Σύνθετα Υλικά: Εισαγωγή

- **Είναι:** Συνδυασμός δύο ή περισσότερων ξεχωριστών υλικών.
- **Στόχος που εξυπηρετούν:** Επίτευξη ενός συνδυασμού “περισσότερο επιθυμητών” ιδιοτήτων (βάσει της αρχής της συνδυασμένης δράσης)
 - π.χ., χαμηλή πυκνότητα και υψηλή αντοχή

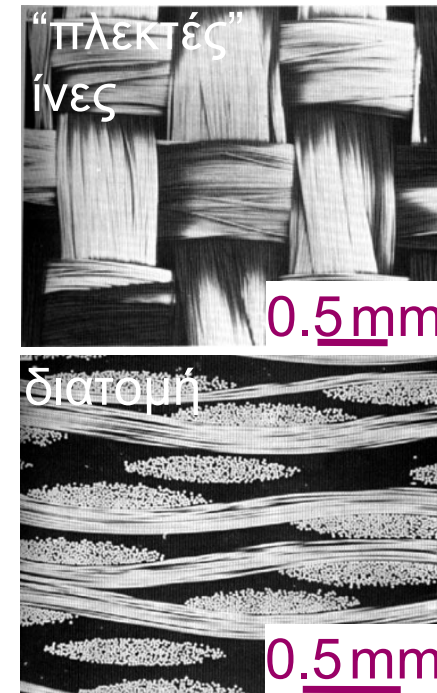
Ορισμοί & ορολογία

- **Σύνθετο:**
 - Τεχνητά κατασκευασμένο υλικό, αποτελούμενο από περισσότερες της μιας φάσεις.
- **Τύποι φάσεων:**
 - Συνεχής: το μητρικό υλικό (μήτρα).
 - Διεσπαρμένη: ασυνεχής, περιβάλλεται από τη μήτρα.



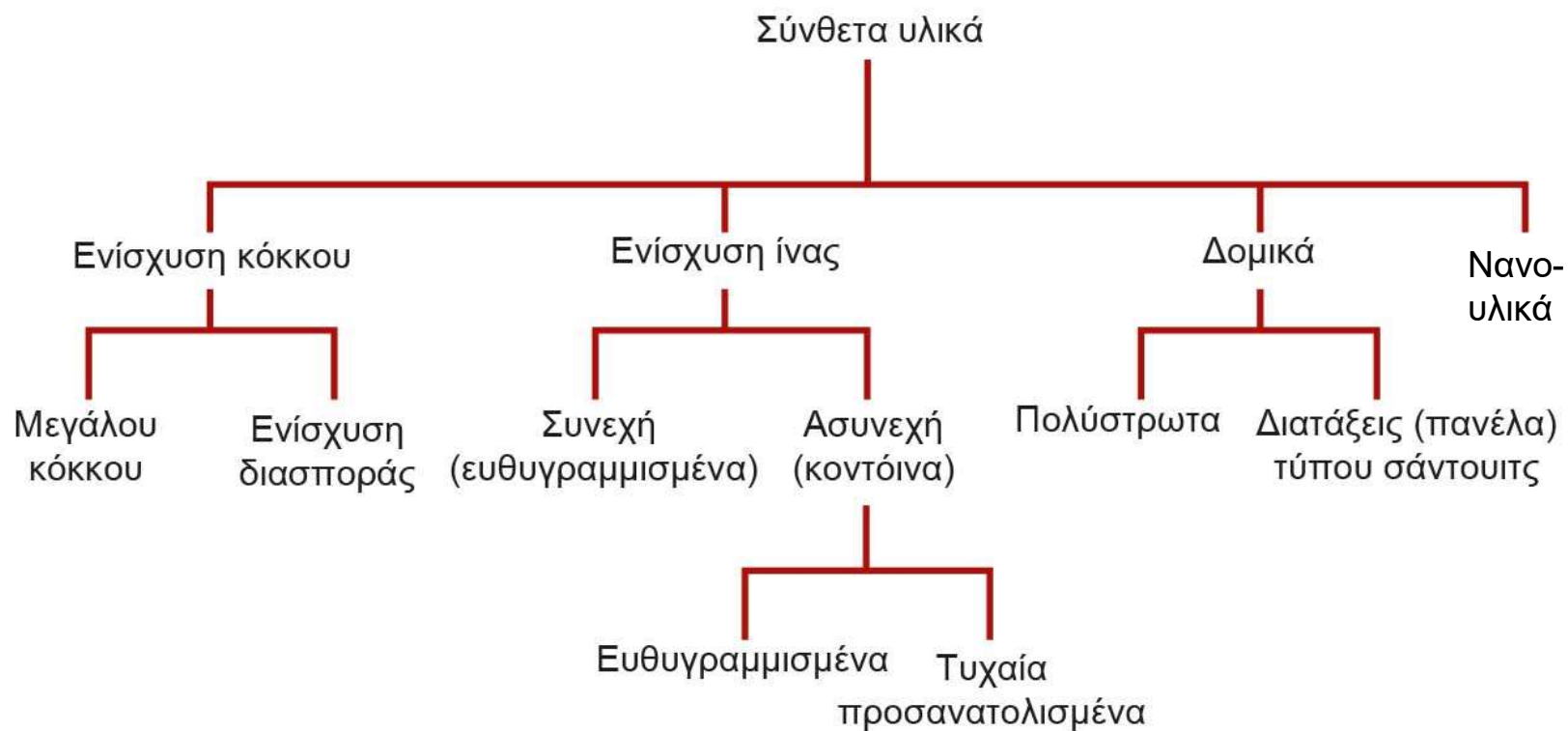
Ορισμοί & ορολογία

- **Φάση μήτρας:**
 - Σκοποί που εξυπηρετεί:
 - μεταφορά τάσης στη διεσπαρμένη φάση
 - προστασία της διεσπαρμένης φάσης από το περιβάλλον
 - Τύποι: **MMC**, **CMC**, **PMC**
 - μέταλλο κεραμικό πολυμερές
- **Διεσπαρμένη φάση:**
 - Σκοπός που εξυπηρετεί:
 - MMC**: αύξηση σ_y , TS , αντοχής σε ερπυσμό.
 - CMC**: αύξηση δυσθραυστότητας
 - PMC**: αύξηση E , σ_y , TS , αντοχής σε ερπυσμό.
 - Τύποι: **σωματίδια (κόκκοι)**, **ίνες**, **δομικά υλικά**



Αναπαράγεται από D. Hull and T.W. Clyne, *An Introduction to Composite Materials*, 2nd ed., Cambridge University Press, New York, 1996, Σχ. 3.6, p. 47.

Κατηγοριοποίηση σύνθετων υλικών

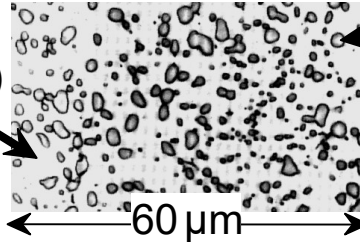


Σύνθετα με ενίσχυση κόκκου (1)

- Παραδείγματα:

- Σφαιροειδίτης χάλυβας

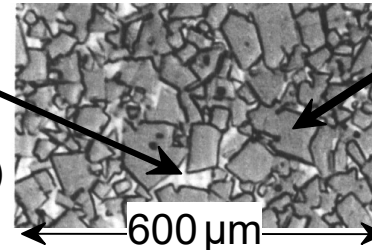
μήτρα:
φερρίτης (α)
(όλκιμο)



σωματίδια:
σεμεντίτης
(Fe_3C)
(ψαθυρό)

- WC/Co
“τσιμεντο-
ποιημένο”
καρβίδιο

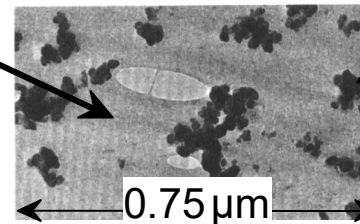
μήτρα:
κοβάλτιο
(όλκιμο,
δύσθραυστο)



σωματίδια:
WC
(ψαθυρό,
σκληρό)

- Ελαστικά
αυτοκινήτου

μήτρα:
καουτσούκ
(σύμμορφο)



σωματίδια:
άνθρακας
(άκαμπτο)

Σύνθετα με ενίσχυση κόκκου (2)

Σκυρόδεμα – χαλίκι + άμμο + τσιμέντο + νερό

- Γιατί και άμμο και χαλίκι; Η άμμος “γεμίζει” τα κενά μεταξύ των “κόκκων” χαλικιού

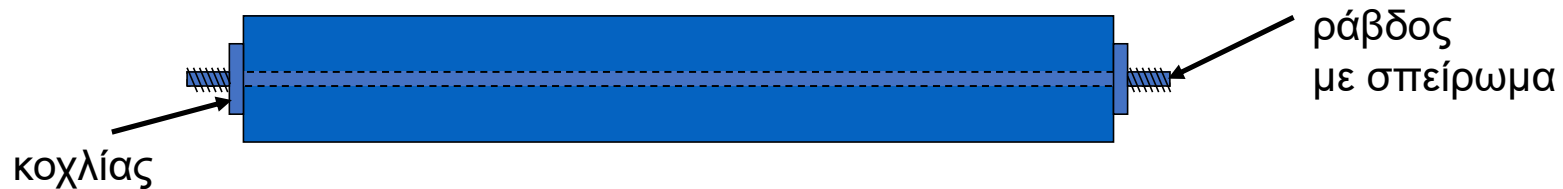
Ενισχυμένο σκυρόδεμα – Ενίσχυση με βέργες, σύρματα, δίχτυα από χάλυβα

- αυξημένη αντοχή – ακόμα κι αν υπάρξουν ρωγμές στο υλικό μήτρας (τσιμέντο)

Προ-τανυσμός (προεντεταμένο σκυρόδεμα)

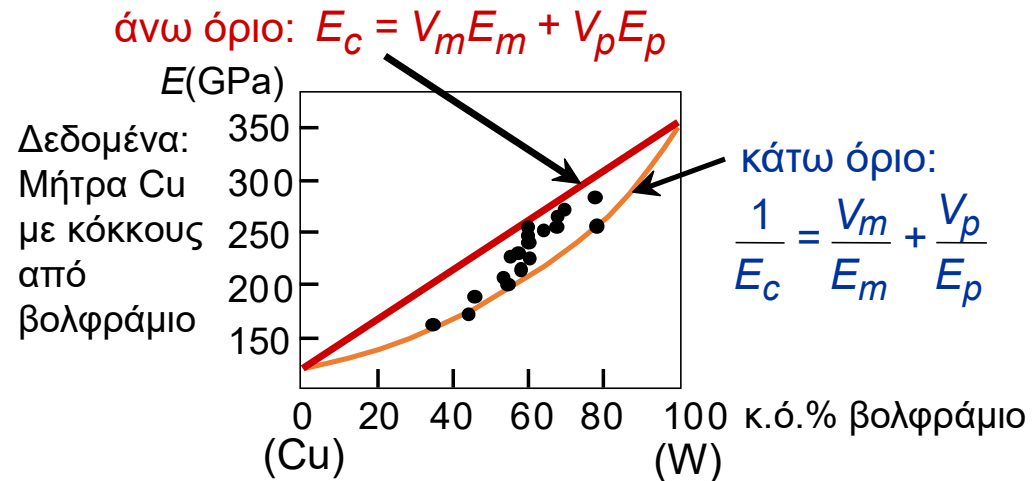
- Τα στοιχεία ενίσχυσης τίθενται υπό εφελκυσμό κατά τη διάρκεια σκλήρυνσης του σκυροδέματος
- Η άρση του εφελκυσμού μετά τη σκλήρυνση οδηγεί το σκυρόδεμα σε κατάσταση θλίψης
- Για θραύση του σκυροδέματος, θα πρέπει να εφαρμοστεί τάση μεγαλύτερη από αυτή τη θλιπτική τάση

Μετα-τανυσμός – η σύσφιγξη των ενισχ. στοιχείων θέτει το σκυρόδεμα υπό θλίψη



Σύνθετα με ενίσχυση κόκκου (3)

- Μέτρο ελαστικότητας, E_c , των σύνθετων υλικών:
-- δύο οριακές περιπτώσεις του “κανόνα μειγμάτων”:



- Εφαρμογή, κατ' αναλογία σε άλλες ιδιότητες:
-- Ηλεκτρική αγωγιμότητα, σ_e : Αντικατάσταση του E στις εξισώσεις με σ_e .
-- Θερμική αγωγιμότητα, k : Αντικατάσταση του E στις εξισώσεις με k .

Σύνθετα με ενίσχυση ίνας (1)

- Οι ίνες έχουν πολύ υψηλή αντοχή στον εφελκυσμό
 - Παρέχουν σημαντική βελτίωση της αντοχής του σύνθετου
 - Π.χ.: fiber-glass – συνεχή υαλονήματα σε πολυμερική μήτρα
 - ίνες υάλου (υαλονήματα)
 - παρέχουν αντοχή και ακαμψία
 - πολυμερική μήτρα
 - συγκρατεί τις ίνες στη θέση τους
 - προστατεύει τις επιφάνειες των ινών
 - μεταφέρει φορτίο στις ίνες

Σύνθετα με ενίσχυση ίνας (2)

- Τύποι ινών

- Βελόνες - λεπτοί μονοκρύσταλλοι – μεγάλοι λόγοι μήκους προς διάμετρο

- γραφίτης, νιτρίδιο πυριτίου, καρβίδιο πυριτίου
 - υψηλός βαθμός κρυσταλλικής τελειότητας – εξαιρετικά μεγάλες αντοχές
 - πολύ υψηλό κόστος, δυσκολία διασποράς

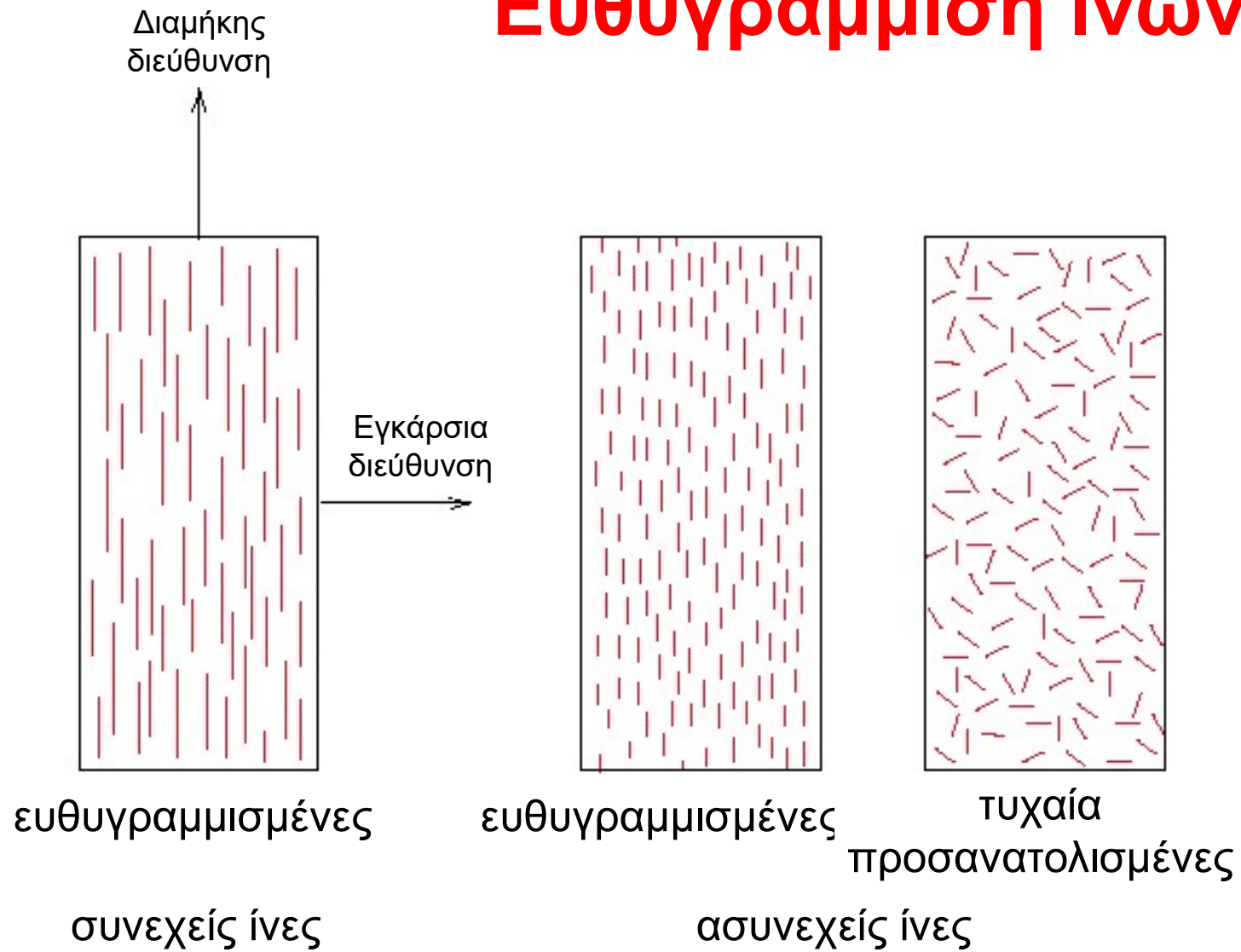
- Ίνες

- πολυκρυσταλλικά ή άμορφα υλικά
 - γενικά πολυμερή ή κεραμικά
 - π.χ.: αλουμίνη, αραμίδια, γυαλί Ε-τύπου, βόριο, πολυαιθυλένιο υπερυψηλού μοριακού βάρους (UHMWPE)

- Σύρματα

- μέταλλα – χάλυβας, μολυβδαίνιο, βολφράμιο

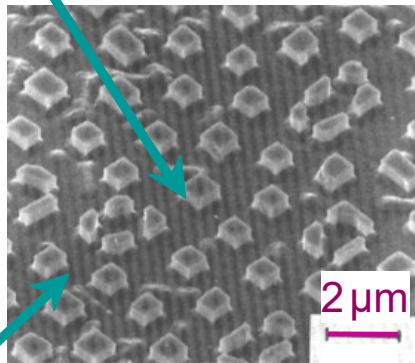
Ευθυγράμμιση ινών



Σύνθετα με ενίσχυση ίνας (3)

- Ευθυγραμμισμένες συνεχείς ίνες
- Παραδείγματα:

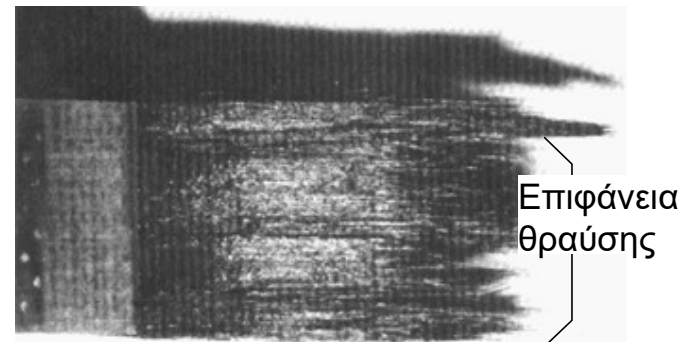
-- **Μέταλλο:** γ' (Ni₃Al)- α (Mo)
μέσω ευτηκτικής στερεοποίησης.
Μήτρα: α (Mo) (όλκιμο)



Ίνες: γ' (Ni₃Al) (ψαθυρό)

Από W. Funk and E. Blank, "Creep deformation of Ni₃Al-Mo in-situ composites", *Metall. Trans. A* Vol. 19(4), pp. 987-998, 1988. Χρησιμοποιείται με άδεια.

-- **Κεραμικό:** ύαλος με ίνες SiC
διαμόρφωση από πολτό (υαλόμαζα)
 $E_{\text{glass}} = 76 \text{ GPa}$; $E_{\text{SiC}} = 400 \text{ GPa}$.



Από F.L. Matthews and R.L. Rawlings, *Composite Materials; Engineering and Science*, Reprint ed., CRC Press, Boca Raton, FL, 2000. Με άδεια από CRC Press, Boca Raton, FL.

Σύνθετα με ενίσχυση ίνας (4)

- **Ασυνεχείς ίνες**, τυχαίος προσανατολισμός στις 2 διαστάσεις

- Παράδειγμα: άνθρακας-άνθρακας

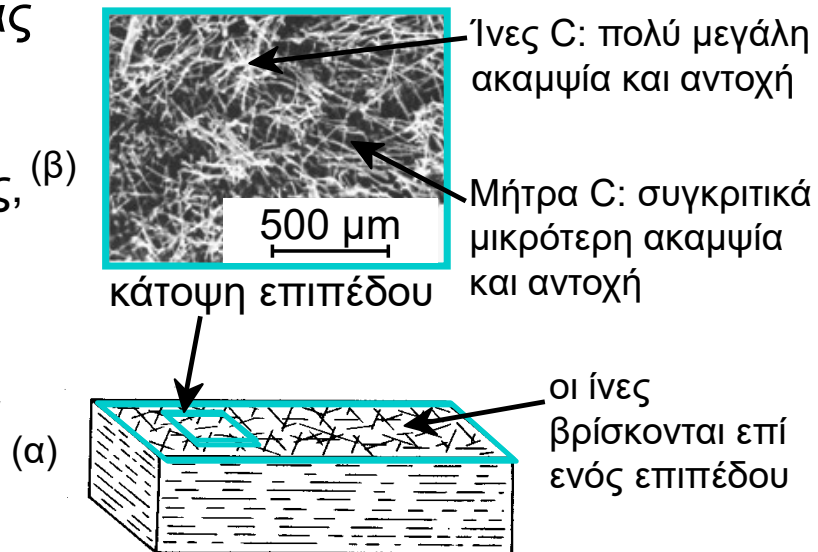
-- Διαδικασία κατασκευής:

- ίνες άνθρακα ενσωματώνονται σε μήτρα πολυμερικής ρητίνης, (β)
- πυρόλυση της πολυμερικής ρητίνης σε θερμοκρασία έως 2500° C.

-- Χρήσεις: φρένα δίσκων, πτερύγια εξαγωγής αεριοστροβίλων, κώνοι ρύγχους πυραύλων.

- Άλλες δυνατότητες:

- **Ασυνεχείς, τυχαίος προσανατολισμός 3D**
- **Ασυνεχείς, ευθυγραμμισμένες**



Διασκευή από F.L. Matthews and R.L. Rawlings, *Composite Materials; Engineering and Science*, Reprint ed., CRC Press, Boca Raton, FL, 2000. (α) Σχ. 4.24(α), p. 151; (β) Σχ. 4.24(β) p. 151. (Πηγή: I.J. Davies) Αναπαράγεται με άδεια από CRC Press, Boca Raton, FL.

Σύνθετα με ενίσχυση ίνας (5)

- Κρίσιμο μήκος ίνας για αποτελεσματική ισχυροποίηση & αύξηση ακαμψίας:
μέγιστη αντοχή ίνας σε εφελκυσμό

$$\text{μήκος ίνας} > \frac{\sigma_f d}{2\tau_c}$$

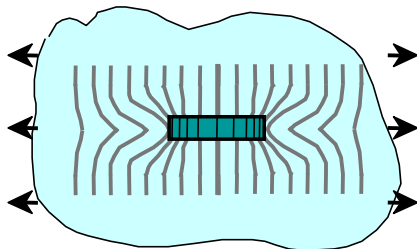
διάμετρος ίνας

διατμητική αντοχή διεπαφής ίνας-μήτρας

- Π.χ.: Για υαλονήματα, απαιτείται συνήθως μήκος ίνας $> 15 \text{ mm}$
- Με ίνες μεγαλύτερου μήκους, η μεταφορά τάσης από τη μήτρα είναι πιο αποτελεσματική

Παχιές ίνες μικρού μήκους:

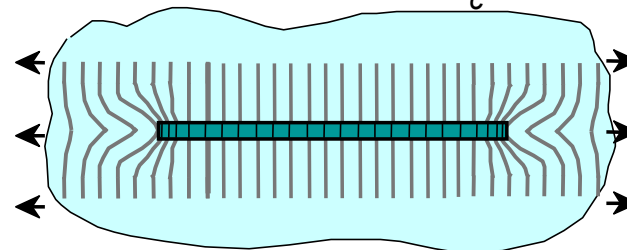
$$\text{μήκος ίνας} < \frac{\sigma_f d}{2\tau_c}$$



Χαμηλή αποτελεσματικότητα

Λεπτές ίνες μεγάλου μήκους:

$$\text{μήκος ίνας} > \frac{\sigma_f d}{2\tau_c}$$



Υψηλή αποτελεσματικότητα

Ακαμψία, διαμήκης φόρτιση

(σύνθετα με ενίσχυση ίνας)

Συνεχείς ίνες - Εκτίμηση του μέτρου ελαστικότητας
για ινοενισχυμένο σύνθετο με συνεχείς ίνες

- Διαμήκης παραμόρφωση

$$\sigma_c = \sigma_m V_m + \sigma_f V_f$$

κλάσμα όγκου

και

$$e_c = e_m = e_f$$

ισοπαραμορφωσιακή κατάσταση

∴

$$E_{cl} = E_m V_m + E_f V_f$$

E_{cl} = μέτρο ελαστ.,
διαμήκης διεύθυνση

c = σύνθετο

f = ίνα

m = μήτρα

Ακαμψία, διαμήκης φόρτιση (σύνθετα με ενίσχυση ίνας)

- Σε εγκάρσια φόρτιση, οι ίνες φέρουν μικρότερο μέρος του φορτίου

$$e_c = e_m V_m + e_f V_f$$

και

$$\sigma_c = \sigma_m = \sigma_f = \sigma$$

↖
ισοτασική κατάσταση

∴

$$\frac{1}{E_{ct}} = \frac{V_m}{E_m} + \frac{V_f}{E_f}$$

$$E_{ct} = \frac{E_m E_f}{V_m E_f + V_f E_m}$$

E_{ct} = μέτρο ελαστ.,
εγκάρσια διεύθυνση

c = σύνθετο

f = ίνα

m = μήτρα

Ακαμψία

(σύνθετα με ενίσχυση ίνας)

- Υπολογισμός του E_{cd} για ασυνεχείς ίνες:
 - έγκυρος όταν το μήκος ίνας $< 15 \frac{\sigma_f d}{\tau_c}$
 - Μέτρο ελαστικότητας στη διεύθυνση των ινών:

$$E_{cd} = E_m V_m + K E_f V_f$$

↑
δείκτης αποτελεσματικότητας:

- ευθυγραμμισμένες ίνες: $K = 1$ (ευθυγρ. παράλληλα)
- ευθυγραμμισμένες ίνες: $K = 0$ (ευθυγρ. κάθετα)
- τυχ. προσανατολισμού, 2Δ: $K = 3/8$ (ισοτροπία 2Δ)
- τυχ. προσανατολισμού, 3Δ: $K = 1/5$ (ισοτροπία 3Δ)

Αντοχή

(σύνθετα με ενίσχυση ίνας)

- Υπολογισμός του σ_{cd}^* για ασυνεχείς ίνες:

1. Όταν $l > l_c$

$$\sigma_{cd'}^* = \sigma_f^* V_f \left(1 - \frac{l_c}{2l}\right) + \sigma'_m (1 - V_f)$$

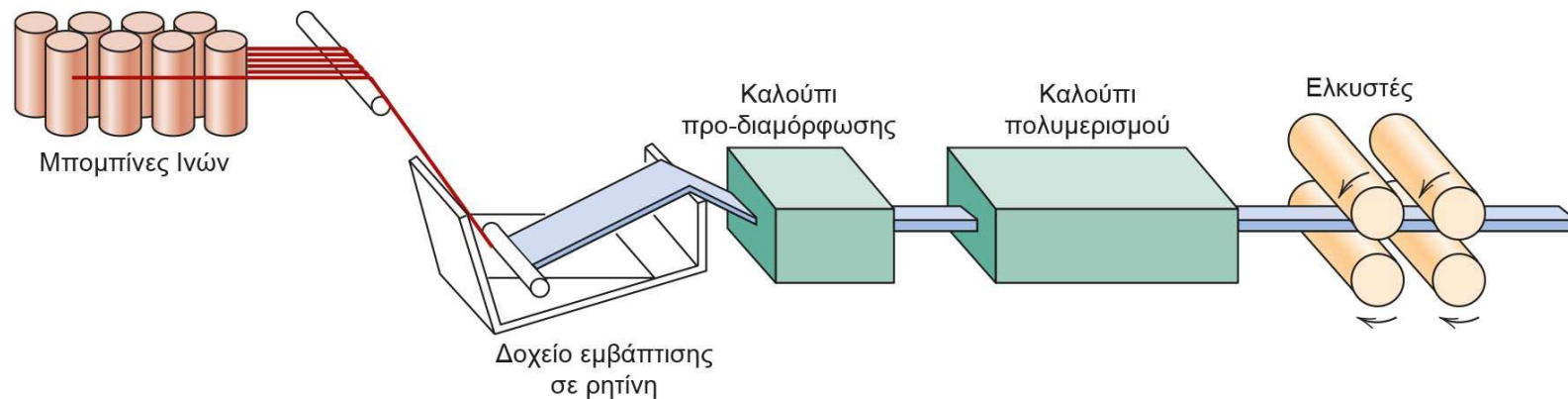
2. Όταν $l < l_c$

$$\sigma_{cd'}^* = \frac{l \tau_c}{d} V_f + \sigma'_m (1 - V_f)$$

Μέθοδοι παραγωγής σύνθετων υλικών (1)

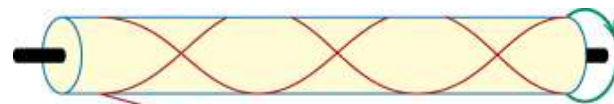
Μορφοποίηση με έλξη

- Συνεχείς ίνες (ή πλέξεις/δέσμες ινών) εμποτίζονται κατ' αρχάς με θερμοσκληρυνόμενη ρητίνη
- Οι εμποτισμένες ίνες διέρχονται από χαλύβδινο καλούπι προ-διαμόρφωσης στο επιθυμητό σχήμα.
- Το προ-διαμορφωμένο υλικό διέρχεται από καλούπι πολυμερισμού, το οποίο είναι:
 - κατασκευασμένο με κατεργασία ακριβείας ώστε να προσδώσει το τελικό σχήμα στο υλικό
 - θερμαινόμενο, ώστε να εκκινεί τη σκλήρυνση της πολυμερικής ρητίνης

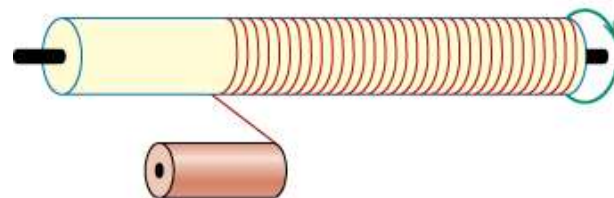


Μέθοδοι παραγωγής σύνθετων υλικών (2)

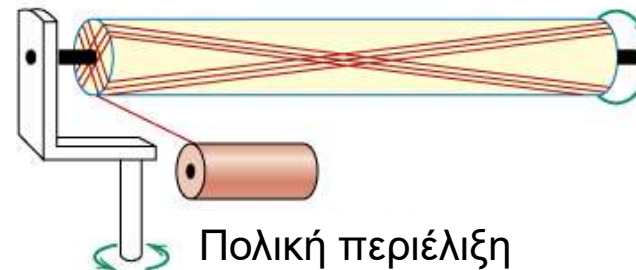
- **Μορφοποίηση με περιέλιξη ινών**
 - Συνεχείς ενισχυτικές ίνες τοποθετούνται επακριβώς σε προκαθορισμένο μοτίβο ώστε να σχηματιστεί ένα κοίλο (συνήθως κυλινδρικό) σχήμα
 - Οι ίνες (ανεξάρτητες ή δέσμες) οδηγούνται σε λουτρό ρητίνης
 - Οι εμποτισμένες ίνες περιελίσσονται συνεχώς πάνω σε κυλινδρικό άξονα (συνήθως μέσω αυτοματοποιημένων διατάξεων περιέλιξης)
 - Αφού εναποτεθεί ο κατάλληλος αριθμός στρώσεων, ο πολυμερισμός (σκλήρυνση) διεξάγεται είτε σε φούρνο είτε σε θερμοκρασία δωματίου
 - Ο κυλινδρικός άξονας απομακρύνεται και απομένει το τελικό προϊόν



Ελικοειδής περιέλιξη



Περιφερειακή περιέλιξη

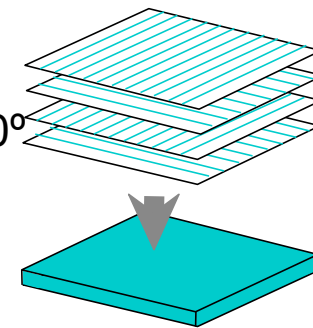


Πολική περιέλιξη

Δομικά σύνθετα υλικά

- **Πολύστρωτα** -

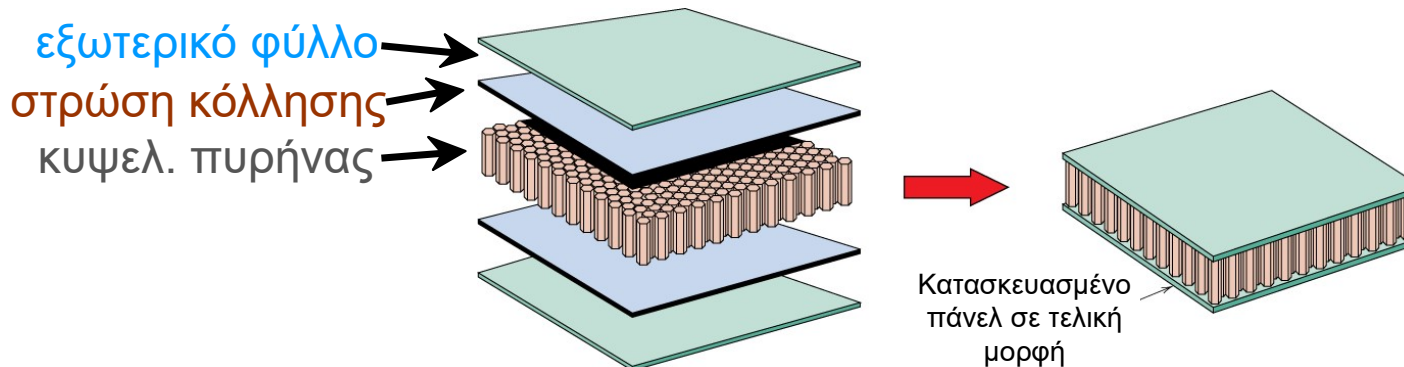
- πολλαπλές στρώσεις (στοίβαση) ινοενισχυμένων φύλλων, κολλημένων μεταξύ τους
 - αλληλουχία στοίβασης στρώσεων: π.χ., $0^\circ/90^\circ$
 - πλεονέκτημα: ισορροπημένη ακαμψία στο μέσο επίπεδο του πολύστρωτου



Διασκευή από
Σχ. 16.16,
Callister &
Rethwisch 8e.

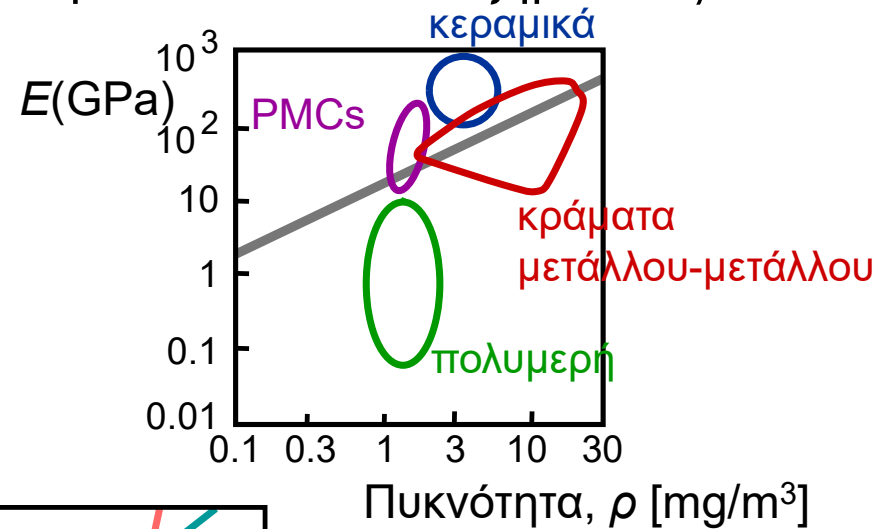
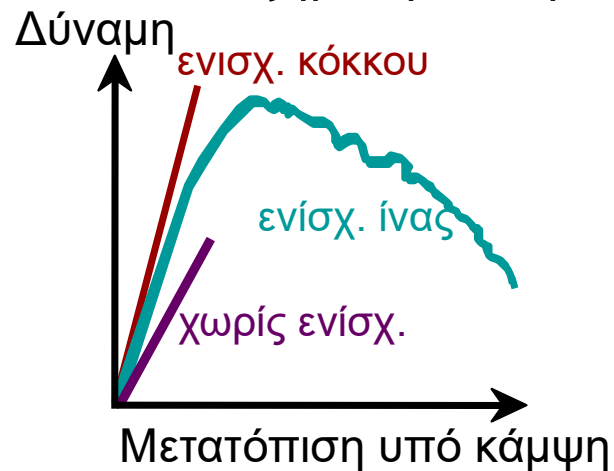
- **Διατάξεις (πάνελ) τύπου σάντουιτς**

- πυρήνας κυψελωτής δομής μεταξύ δύο εξωτερικών φύλλων
 - πλεονεκτήματα: χαμηλή πυκνότητα, μεγάλη αντίσταση σε κάμψη

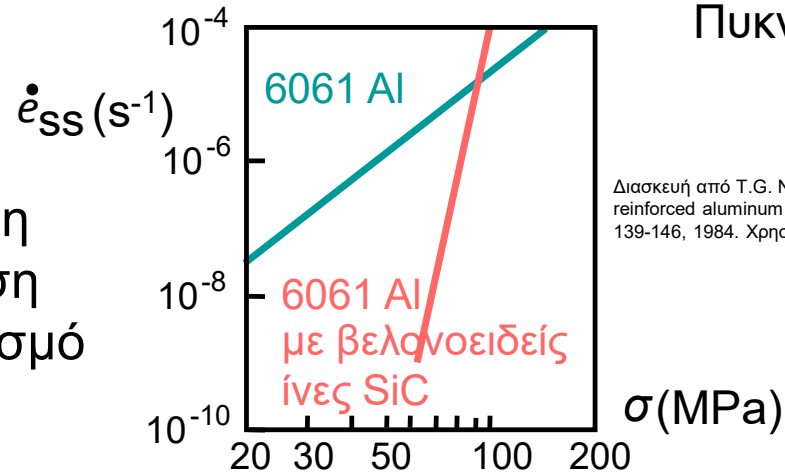


Πλεονεκτήματα των σύνθετων υλικών

- CMCs: Αυξημένη δυσθραυστότητα
- PMCs: Αυξημένο E/ρ



- MMCs: Αυξημένη αντίσταση σε ερπυσμό



Διασκευή από T.G. Nieh, "Creep rupture of a silicon-carbide reinforced aluminum composite", *Metall. Trans. A* Vol. 15(1), pp. 139-146, 1984. Χρησιμοποιείται με άδεια.

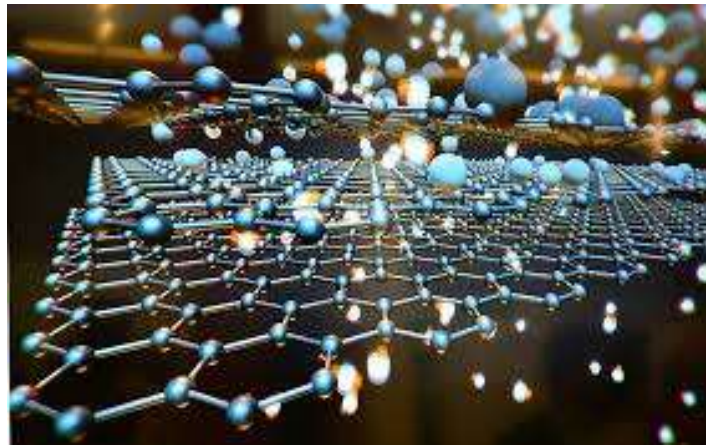


ΣΥΝΟΨΗ



- Οι τύποι των σύνθετων υλικών κατηγοριοποιούνται βάσει:
 - του υλικού μήτρας (**CMC**, **MMC**, **PMC**)
 - της ενίσχυσης (κόκκοι, ίνες, δομικά υλικά)
- Πλεονεκτήματα που προκύπτουν από τις ιδιότητες των σύνθετων:
 - **MMC**: βελτίωση των E , σ^* , απόκριση σε ερπυσμό
 - **CMC**: βελτίωση του K_{Ic}
 - **PMC**: βελτίωση των E/ρ , σ_y , TS/ρ
- **Σύνθετα με ενίσχυση κόκκου**:
 - Τύποι: μεγάλων κόκκων, ενίσχυσης με διασπορά
 - Ιδιότητες: ισότροπες
- **Σύνθετα με ενίσχυση ίνας**:
 - Τύποι: συνεχείς ίνες (ευθυγραμμισμένες)
ασυνεχείς ίνες (ευθυγραμμισμένες ή τυχαίου προσανατολισμού)
 - Ιδιότητες: είτε ισότροπες είτε ανισότροπες
- **Δομικά σύνθετα υλικά**:
 - Πολύστρωτα και διατάξεις (πάνελ) τύπου σάντουιτς

Εισαγωγή στη επιστήμη και τεχνολογία υλικών



Περιέχει περιεχόμενο και υλικό από τα συγγράμματα:

Callister W. D., Rethwisch D. G. Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 10η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2022

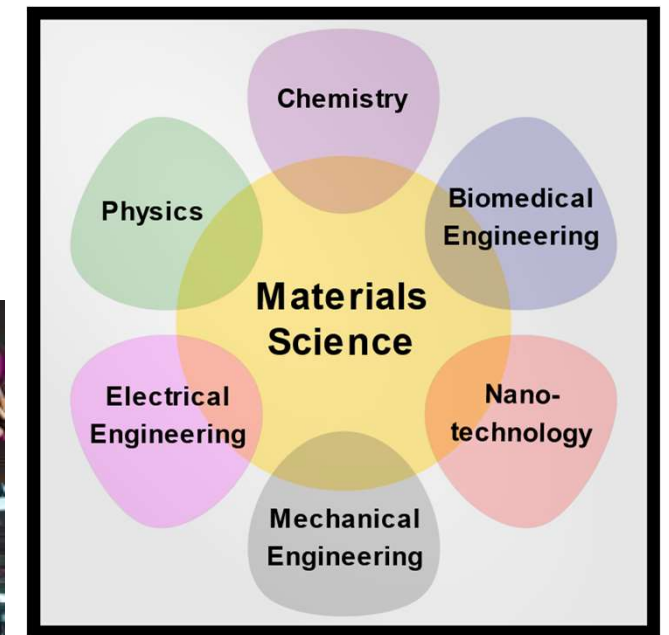
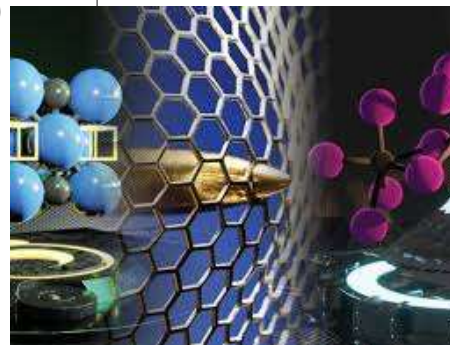
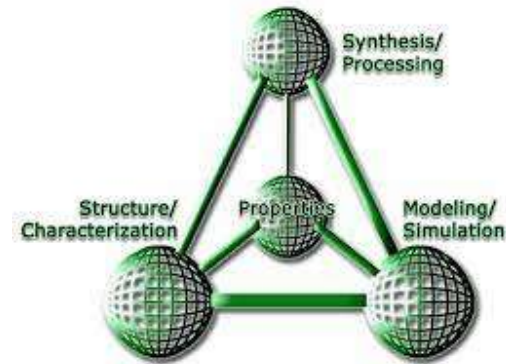
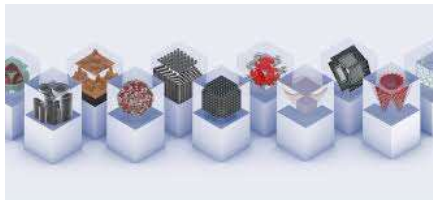
Β. Ζασπάλης, Επιστήμη και Τεχνολογία των Υλικών, 2η Έκδοση, Εκδ. Α. Τζιόλα & Υιοί, 2020

Ύλη (όχι οριστική... σίγουρα!)

1. Εισαγωγή στην έννοια «υλικό», ατομική δομή και δεσμοί.
2. Κρυσταλλική δομή.
3. Μηχανικές ιδιότητες των υλικών.
4. Ατέλειες και μηχανισμοί ισχυροποίησης, αστοχία.
5. Διαγράμματα φάσεων μετάλλων
6. Ανάπτυξη μικροδομής.
7. Μεταλλικά κράματα.
8. Δομή, ιδιότητες και διεργασίες κεραμικών.
9. Δομή, ιδιότητες και κατεργασία πολυμερών.
10. Δομή και ιδιότητες συνθέτων υλικών.
11. Περιβαλλοντικά θέματα στην επιλογή υλικών.
12. Οικονομικά θέματα στην επιλογή υλικών.
13. Βιομηχανική παρασκευή προϊόντων.

ΕΙΣΑΓΩΓΙΚΑ

- Τι είναι η **επιστήμη και η τεχνολογία των υλικών**;
- Γιατί τη μελετάμε;
- Τα υλικά οδηγούν την εξέλιξη της κοινωνίας
 - Εποχή του Λίθου
 - Εποχή του Χαλκού
 - Εποχή του Σιδήρου
 - Σήμερα;
 - Εποχή του Πυριτίου;
 - Εποχή των Πολυμερών; 20^{ος} (Natta)
 - **Εποχή Νανοϋλικών & Νανοτεχνολογίας**





Εμφύτευμα ισχίου

- Σε μεγάλες ηλικίες, ή λόγω συγκεκριμένων ασθενειών, η λειτουργικότητα των αρθρώσεων του ανθρώπινου σώματος υποβαθμίζεται – ιδιαίτερα αυτών που φέρουν μεγάλα φορτία (όπως το ισχίο).

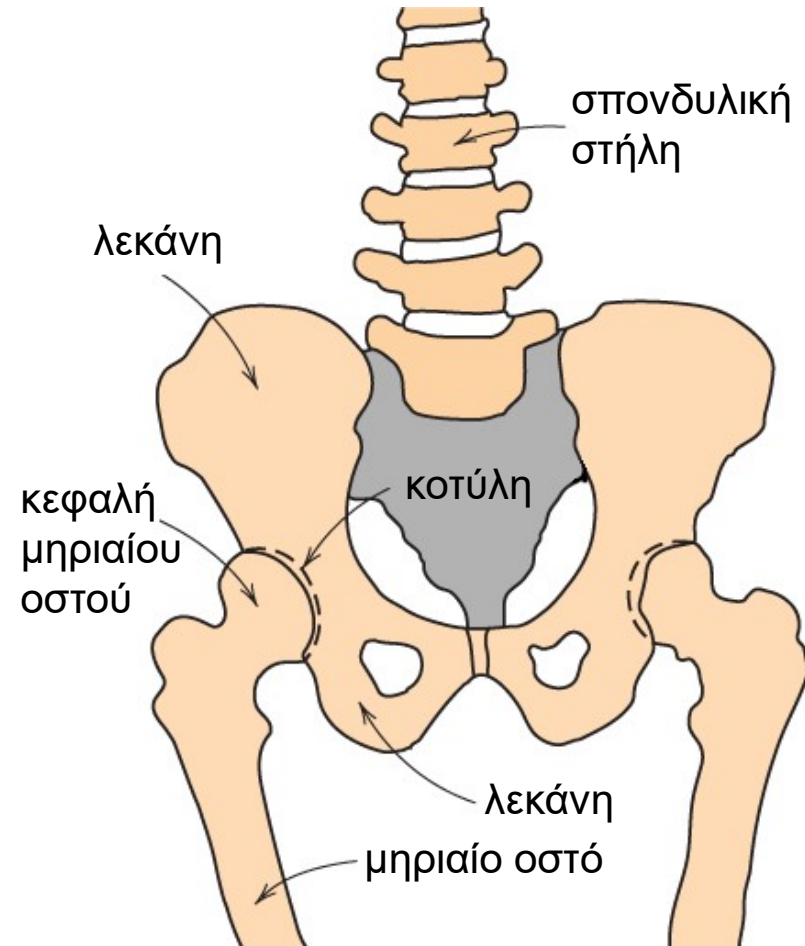


Διασκευή από Σχ. 22.25, Callister 7e.



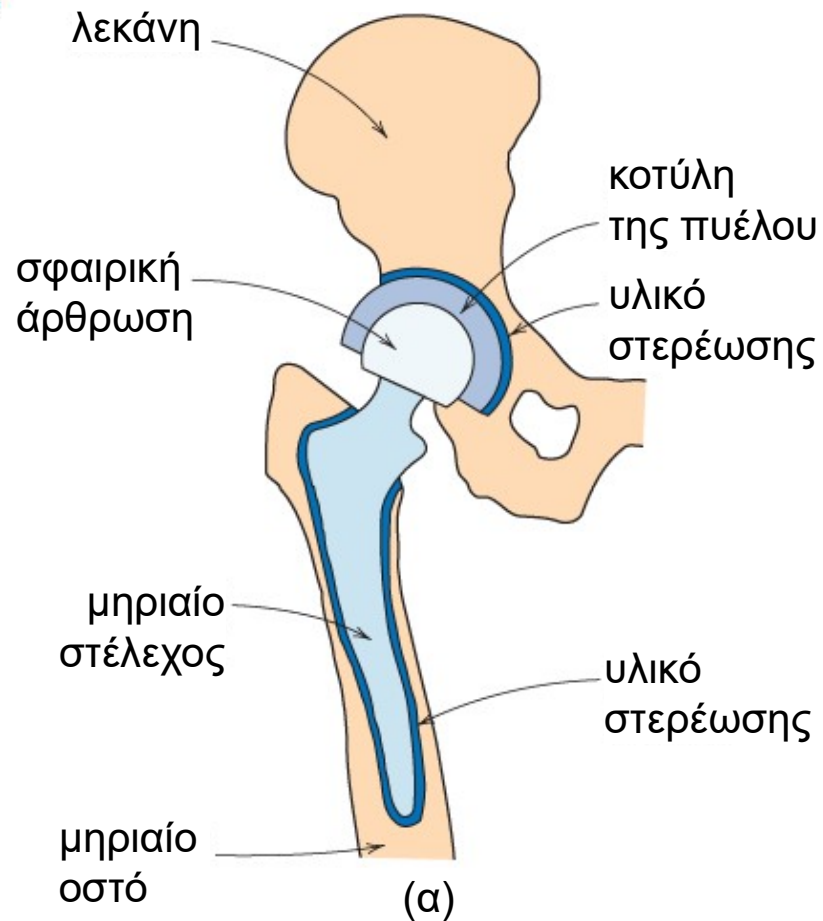
Εμφύτευμα ισχίου

- Απαιτήσεις
 - Μηχανική αντοχή (πολλοί κύκλοι φόρτισης)
 - Καλή τριβολογική συμπεριφορά (λιπαντικότητα)
 - Βιοσυμβατότητα



Διασκευή από Σχ. 22.24, Callister 7ε.

Εμφύτευμα ισχίου



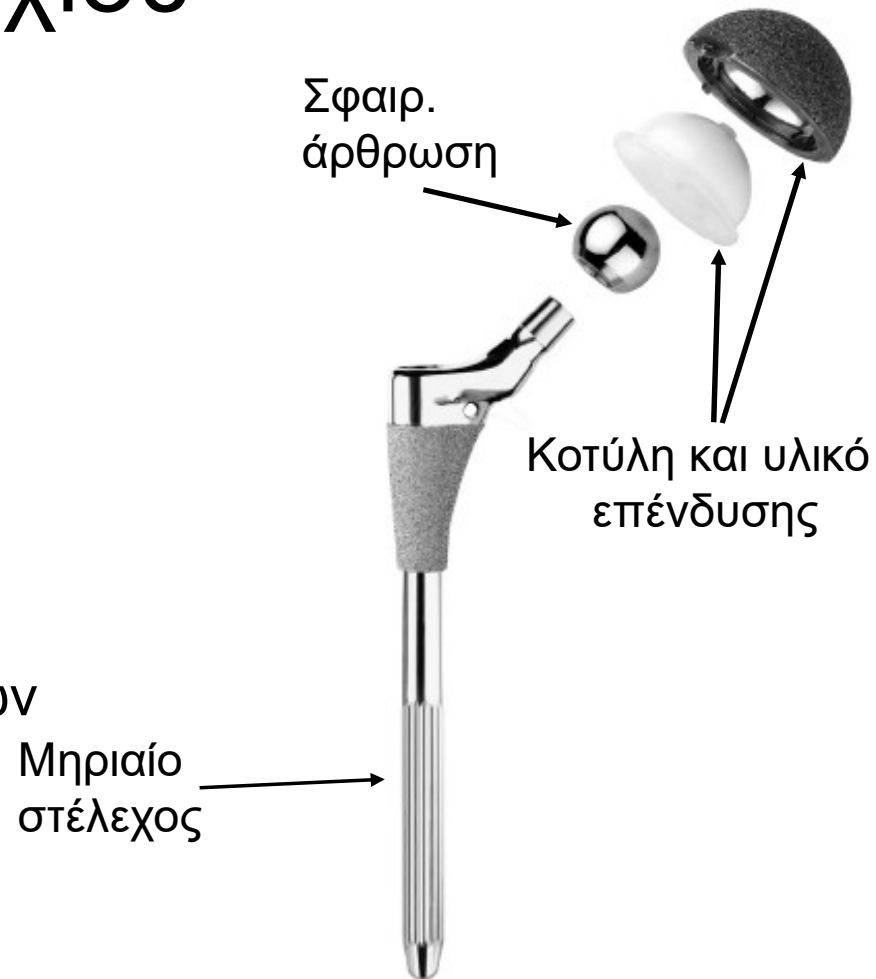
(β)

Διασκευή από Σχ. 22.26, Callister 7e.



Εμφύτευμα ισχίου

- Βασικά προβλήματα που πρέπει να λυθούν
 - υλικό στερέωσης της κοτύλης
 - υλικό λίπανσης για την κοτύλη
 - υλικό στερέωσης για το μηριαίο στέλεχος
 - επιτακτική η αποφυγή θραυσμάτων ή ξένων σωμάτων στην κοτύλη της πυέλου



Διασκευή από αρχική φωτογραφία Κεφαλαίου 22, *Callister 7e*. (Πηγή: Zimmer, Inc., Warsaw, IN, USA.)



Ανάπτυξη νέων τύπων πολυμερών

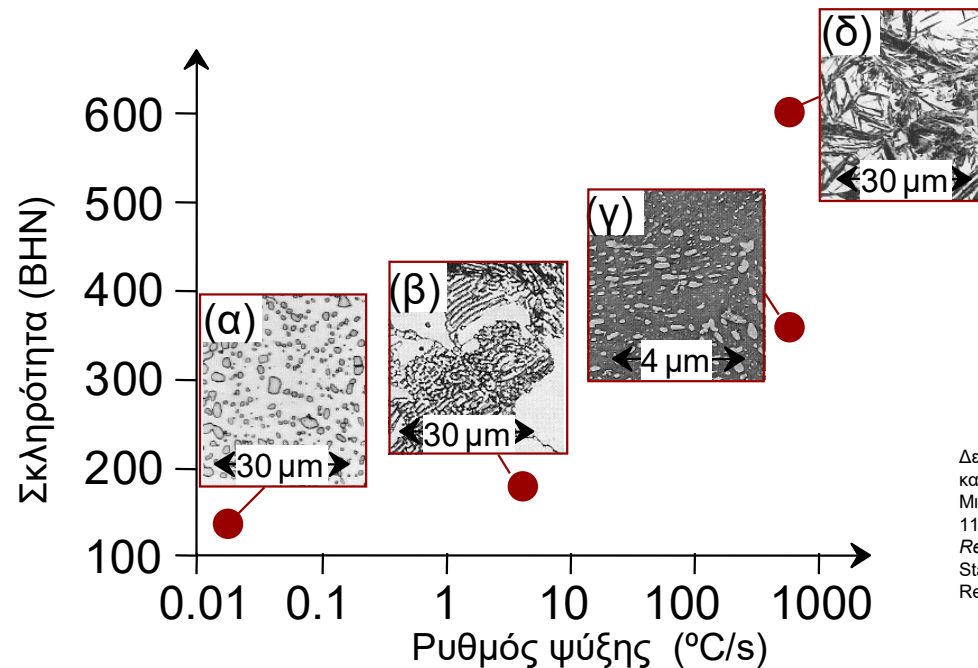
- **Πλαστικά ευρείας χρήσης** – μεγάλος όγκος, μικρό κόστος
Π.χ. Πολυαιθυλένιο
Πολυπροπυλένιο
Πολυστυρένιο
κ.λπ.
- **Ρητίνες κατασκευών & τεχνικών χρήσεων** – μικρός όγκος, σχετικά μεγαλύτερο κόστος
Π.χ. Πολυκαρβονικά υλικά
Νάιλον
Πολυσουλφόνες
κ.λπ.

Μπορεί το πολυπροπυλένιο να “αναβαθμιστεί” σε ιδιότητες (και κόστος) που να προσεγγίζουν αυτές των ρητινών τεχνικών χρήσεων;

ΔΟΜΗ, ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ, ΤΥΠΟΙ ΥΛΙΚΩΝ

Δομή, επεξεργασία και ιδιότητες υλικών

- Οι **ιδιότητες** εξαρτώνται από τη **δομή**
π.χ.: σχέση σκληρότητας-δομής του χάλυβα



Δεδομένα από: Σχ. 12.31(α) και 12.32 με περιεκτ. C 4 wt% και από Σχ. 17.8, *Callister & Rethwisch 9η έκδ.*
Μικροφωτογραφίες: Διασκευή από (α) Σχ. 12.19, (β) Σχ. 11.29, (γ) Σχ. 12.33 και (δ) Σχ. 12.21, *Callister & Rethwisch 9η έκδ.* (Σχ. 12.19, 12.21, & 12.33 © United States Steel Corporation, 1971. Σχ. 9.30: Χορηγία της Republic Steel Corporation.)

- Η **επεξεργασία** μπορεί να μεταβάλλει τη **δομή**
π.χ: σχέση της δομής με τον ρυθμό ψύξης του χάλυβα

Τύποι υλικών



- **Μέταλλα:**
 - Υψηλή αντοχή & ολκιμότητα
 - Υψηλή θερμική & ηλεκτρική αγωγιμότητα
 - Αδιαφανή, ανακλαστικά.



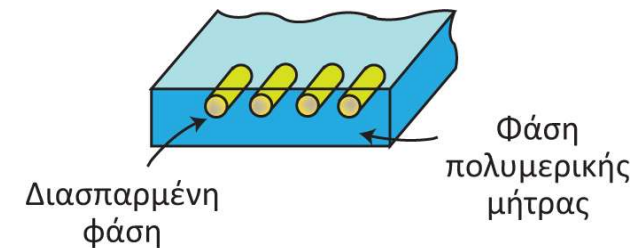
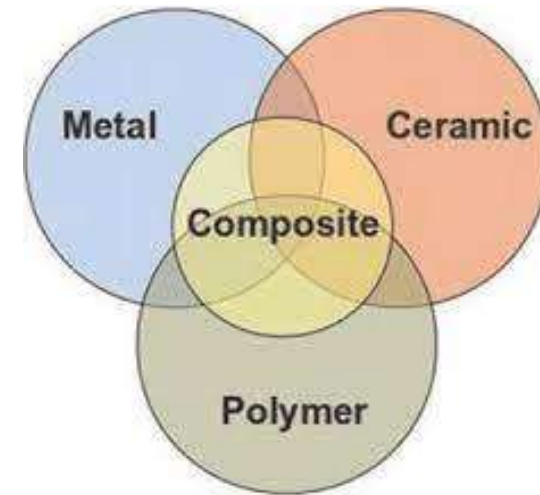
- **Πολυμερή/πλαστικά:** ομοιοπολικοί δεσμοί → διαμοιρασμος ηλεκτρονίων
 - Μαλακά, όλκιμα, χαμηλή αντοχή, χαμηλή πυκνότητα
 - Θερμικοί & ηλεκτρικοί μονωτές
 - Ημιδιαφανή ή διαφανή.



- **Κεραμικά:** ιοντικοί δεσμοί (πυρίμαχα) – ενώσεις μεταλλικών & μη-μεταλλικών στοιχείων (οξειδία, καρβίδια, νιτρίδια, σουλφίδια)
 - Ψαθυρά, υαλώδη, ελαστικά
 - Μη-αγώγιμα (μονωτές)

Β. Ζασπάλης, 2η Έκδ

- **Σύνθετα:** μεταλλικής, πολυμερικής ή κεραμικής μήτρας



Πλεονεκτήματα κεραμικών σε σχέση με τα μέταλλα

- Σχετικά χαμηλή πυκνότητα
- Υψηλό σημείο τήξης
- Υψηλό μέτρο ελαστικότητας
- Χαμηλή θερμική και ηλεκτρική αγωγιμότητα
- Καλή αντίσταση σε θλίψη
- Πολύ υψηλή σκληρότητα
- Πυρίμαχη, αντιδιαβρωτική και αντιτριβική συμπεριφορά



Μειονεκτήματα σε κεραμικών σε σχέση με τα μέταλλα

- Μικρή αντίσταση σε εφελκυσμό
- Ευθραυστότητα
- Υψηλό κόστος παραγωγής (σε ορισμένα από αυτά)
- Εύκολη διάδοση ρωγμών
- Μεγάλη επίδραση μικροδομής, δευτερευουσών φάσεων και πορώδους στην αντοχή σε θραύση και στις φυσικές ιδιότητες
- Μικρή αντοχή σε κόπωση, λυγισμό και κρούση
- Έλλειψη ειδικών μεθόδων μη καταστροφικών δοκιμών για τον έλεγχο τους

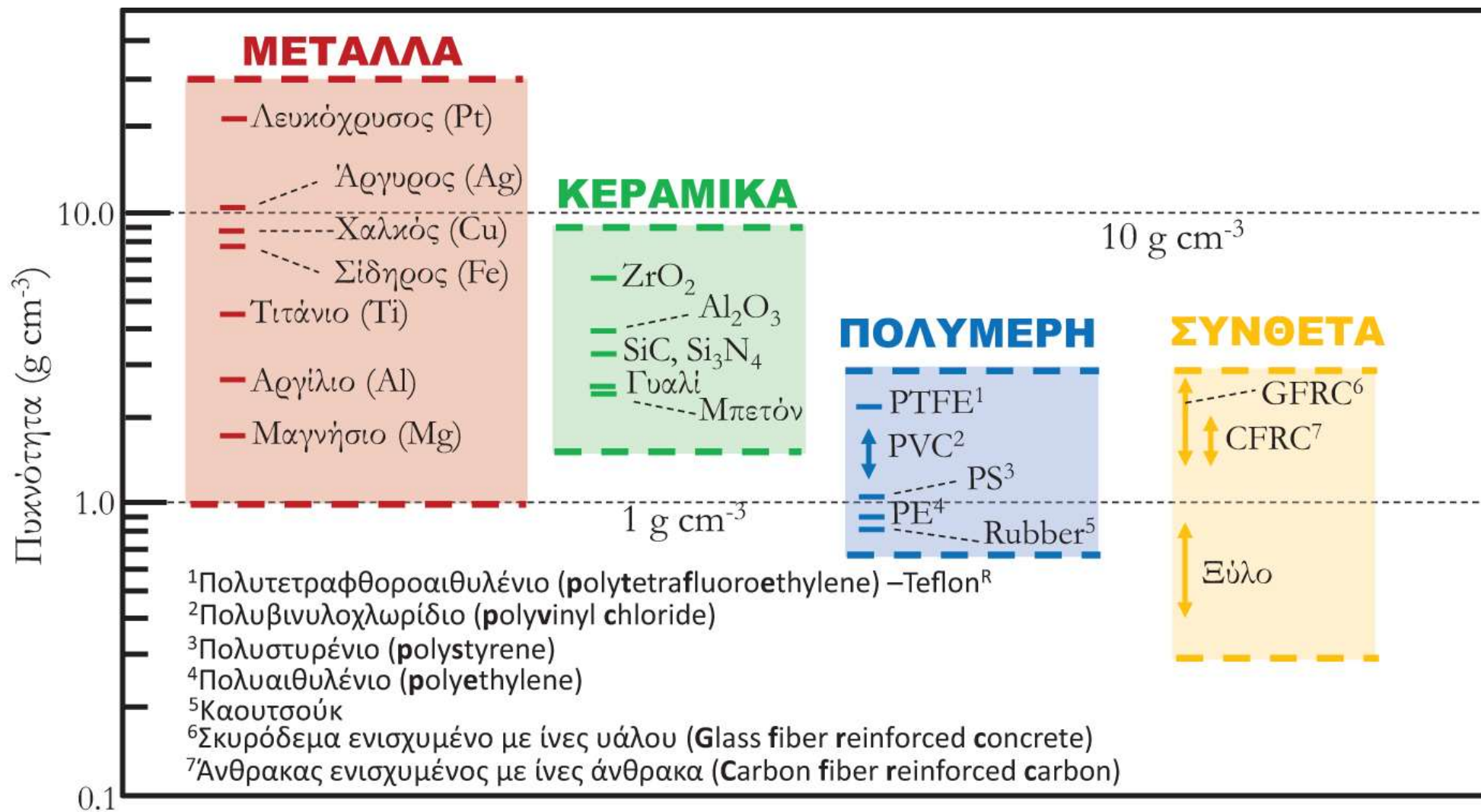
Η διαδικασία επιλογής υλικών

1. **Εφαρμογή:** → καθορίζει τις απαιτούμενες **Ιδιότητες**
Ιδιότητες: μηχανικές, ηλεκτρικές, θερμικές, μαγνητικές, οπτικές, παράγοντες υποβάθμισης.
2. **Ιδιότητες:** → υποδεικνύουν υποψήφιο(α) **Υλικό(α)**
Υλικό: δομή, σύσταση.
3. **Υλικό:** → υπαγορεύει την απαιτούμενη **Επεξεργασία**

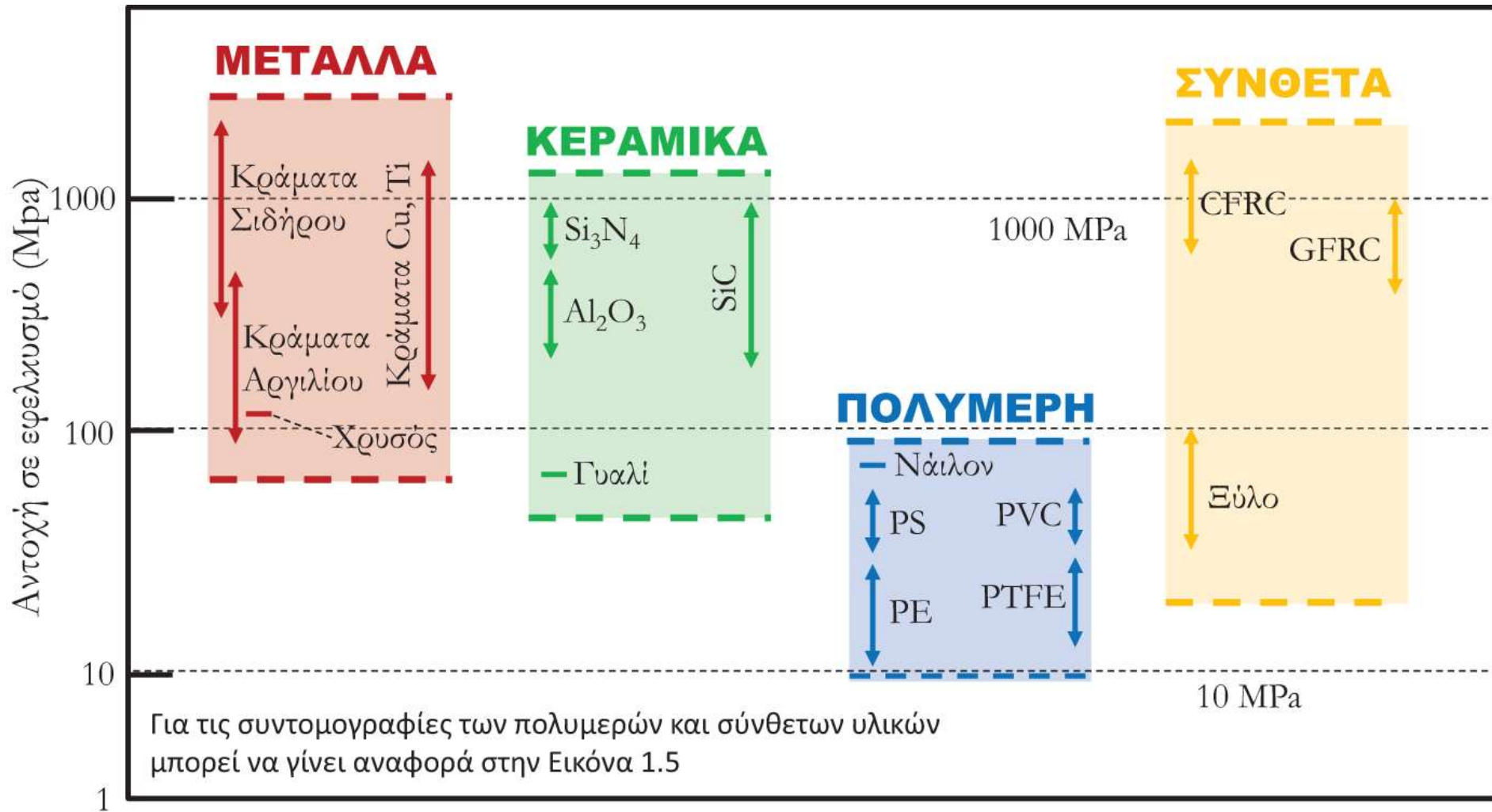
Επεξεργασία: μεταβάλλει τη δομή και το συνολικό σχήμα
Π.χ: χύτευση, πυροσυσσωμάτωση, εναπόθεση από ατμό, νόθευση, διαμόρφωση, συγκόλληση, ανόπτηση.

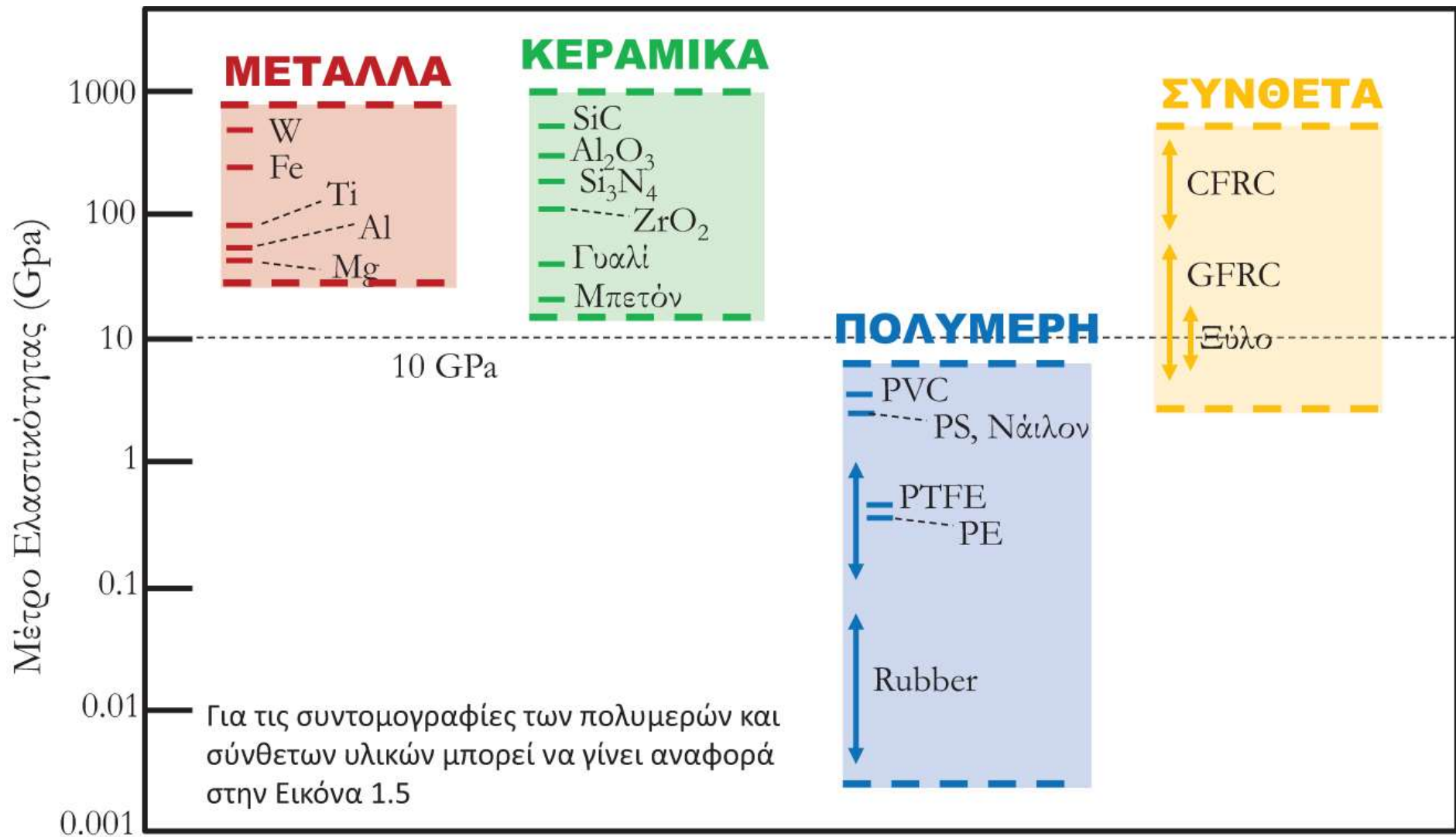
ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

ΦΥΣΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ



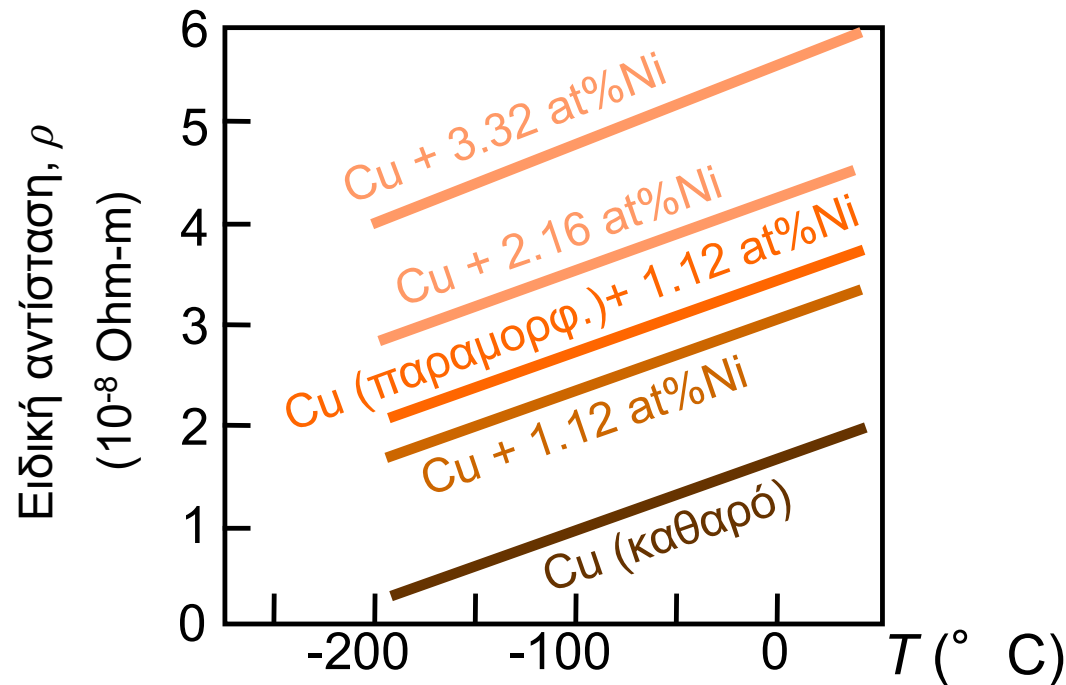
ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ





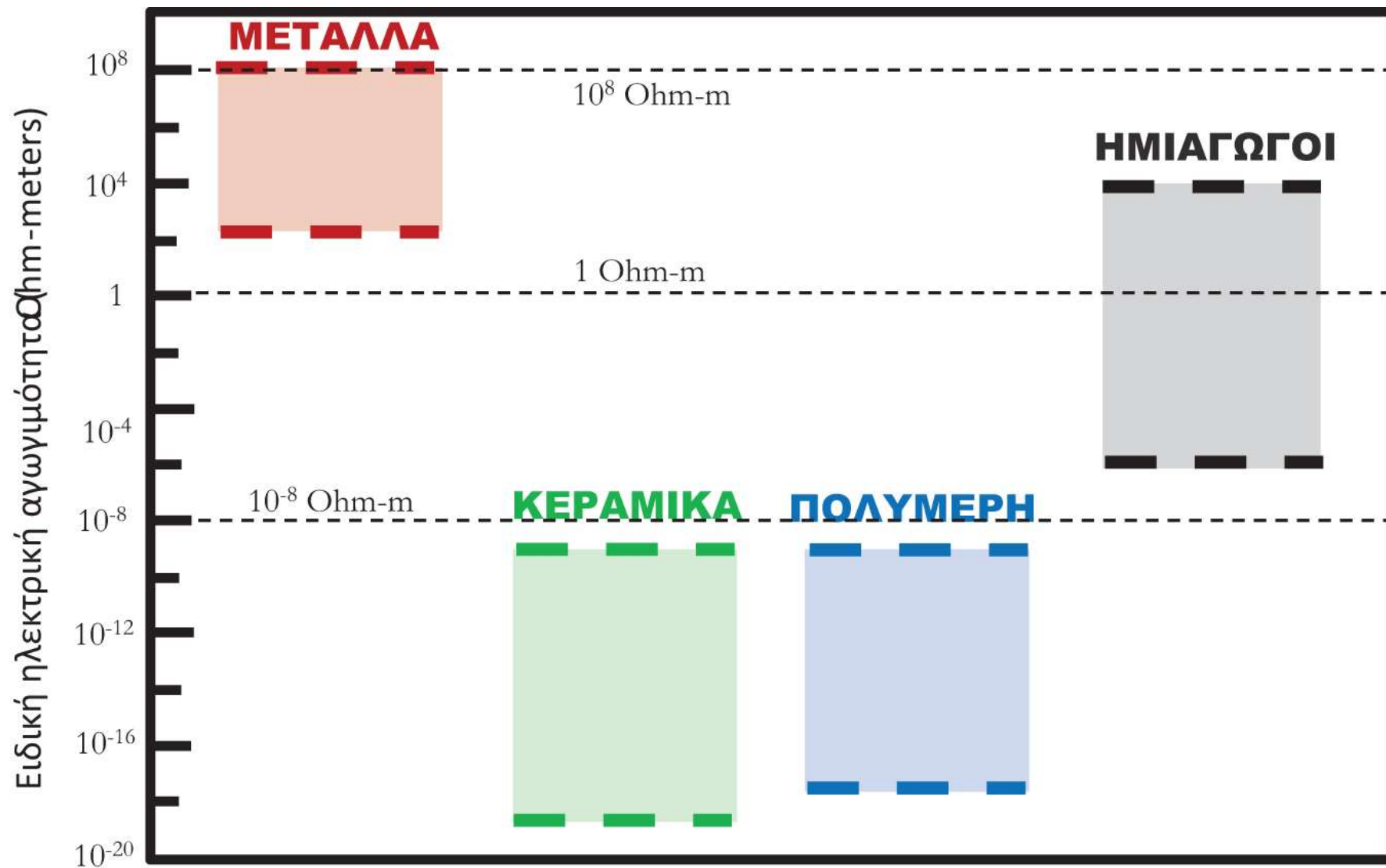
ΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

- Ηλεκτρική ειδική αντίσταση του χαλκού:



Σχ. 19.8, Callister & Rethwisch 9η έκδ.
[Διασκευή από: J.O. Linde, *Ann Physik* **5**, 219 (1932); and
C.A. Wert and R.M. Thomson, *Physics of Solids*, 2nd
edition, McGraw-Hill Company, New York, 1970.]

- Η προσθήκη ατόμων “**πρόσμειξης**” στον χαλκό αυξάνει την **ειδική αντίστασή** του.
- Η μηχανική **παραμόρφωση** του χαλκού αυξάνει την **ειδική αντίστασή** του.

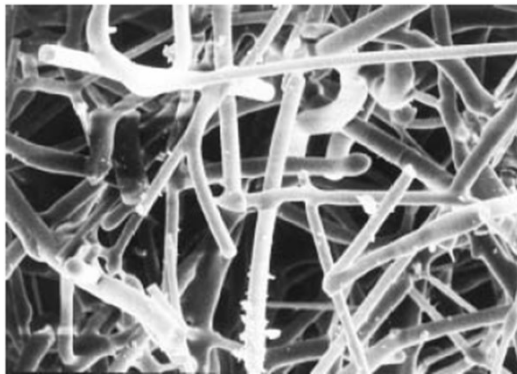


ΘΕΡΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

- Πλακίδια επίστρωσης του διαστημικού λεωφορείου:
 - Η μόνωση από ίνες πυριτίας παρέχει χαμηλή **αγωγή θερμότητας**.



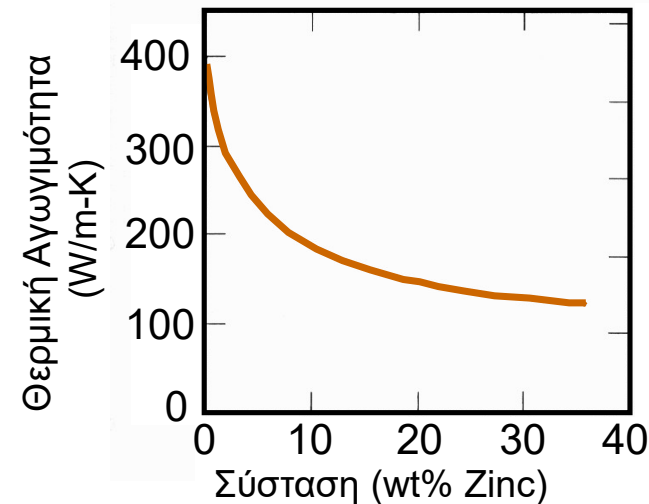
Αρχική φωτογραφία Κεφαλαίου 17,
Callister & Rethwisch 3e.
(Πηγή: Lockheed
Missiles and Space
Company, Inc.)



100 μm

Σχ. 19.4W, *Callister 6e*. (Πηγή:
Lockheed Aerospace Ceramics
Systems, Sunnyvale, CA)
(Σημείωση: το "W" υποδεικνύει
σχήματα στο συνοδευτικό CD-
ROM.)

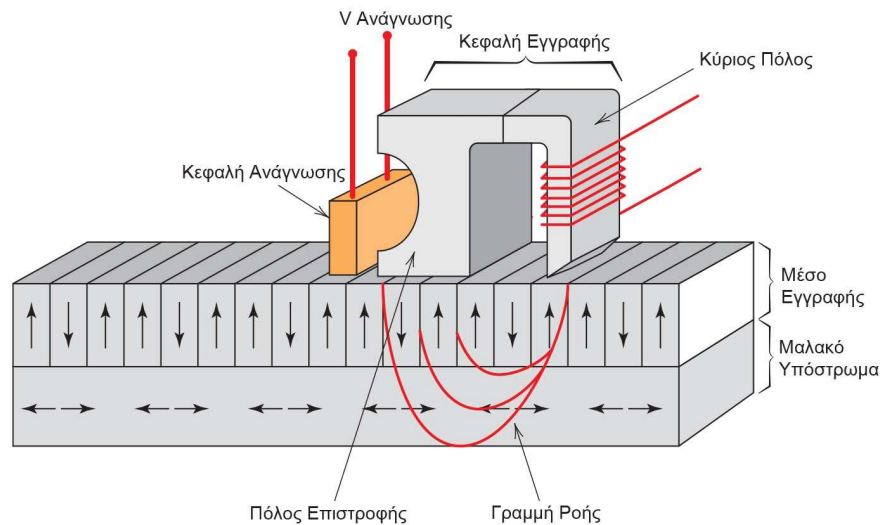
- **Θερμική αγωγιμότητα**
του χαλκού:
 - Μειώνεται με την προσθήκη
ψευδαργύρου!



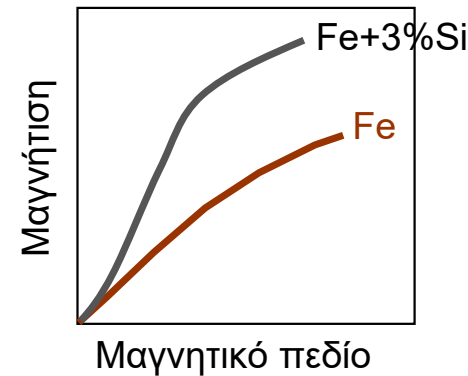
Σχ. 20.4, *Callister & Rethwisch 9η έκδ.*
[Διασκευή από *Metals Handbook: Properties and
Selection: Nonferrous alloys and Pure Metals*, Vol. 2, 9th
ed., H. Baker, (Managing Editor), ASM International, 1979,
p. 315.]

ΜΑΓΝΗΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

- **Μαγνητική αποθήκευση:**
 - Το μέσο εγγραφής μαγνητίζεται από την "κεφαλή εγγραφής".
- **Μαγνητική διαπερατότητα**
 - Η προσθήκη 3 ατ.% Si κάνει τον Fe καλύτερο μέσο μαγν. εγγραφής!



Σχ. 21.23, Callister & Rethwisch 9η έκδ.
(Πηγή: HGST, a Western Digital Company.)



Διασκευή από C.R. Barrett, W.D. Nix, and A.S. Tetelman, *The Principles of Engineering Materials*, Σχ. 1-7(a), p. 9, 1973.
Electronically reproduced by permission of Pearson Education, Inc., Upper Saddle River, New Jersey.

ΟΠΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

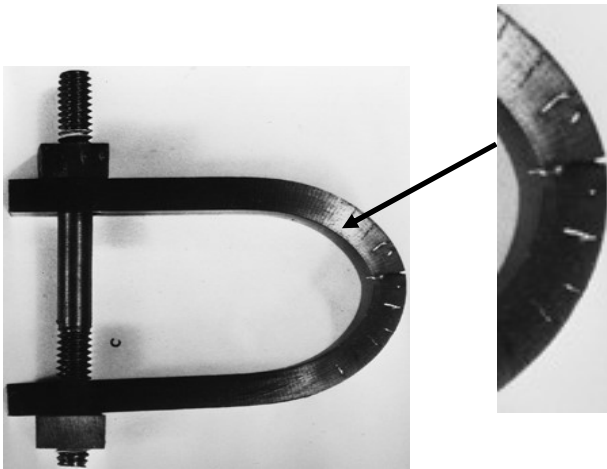
- (Φωτο)Διαπερατότητα:
 - Το οξείδιο του αλουμινίου μπορεί να είναι διαφανές, ημιδιαφανές, ή αδιαφανές, ανάλογα με τη δομή του υλικού (δηλ. μονοκρυσταλλικό έναντι πολυκρυσταλλικού, και βαθμός πορώδους).



Σχ. 1.2, Callister & Rethwisch 9η έκδ.
(Προετοιμασία δοκιμίου:
P.A. Lessing)

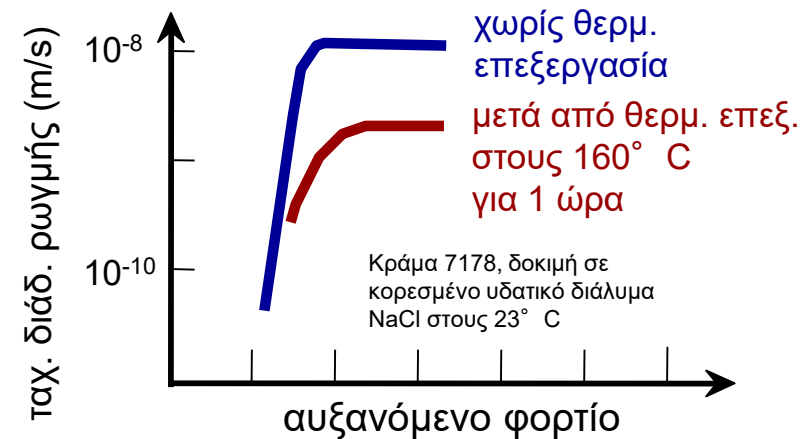
ΠΑΡΑΓΟΝΤΕΣ ΥΠΟΒΑΘΜΙΣΗΣ

- Μηχανική τάση & θαλάσσιο νερό...
-- προκαλούν ρωγμές!



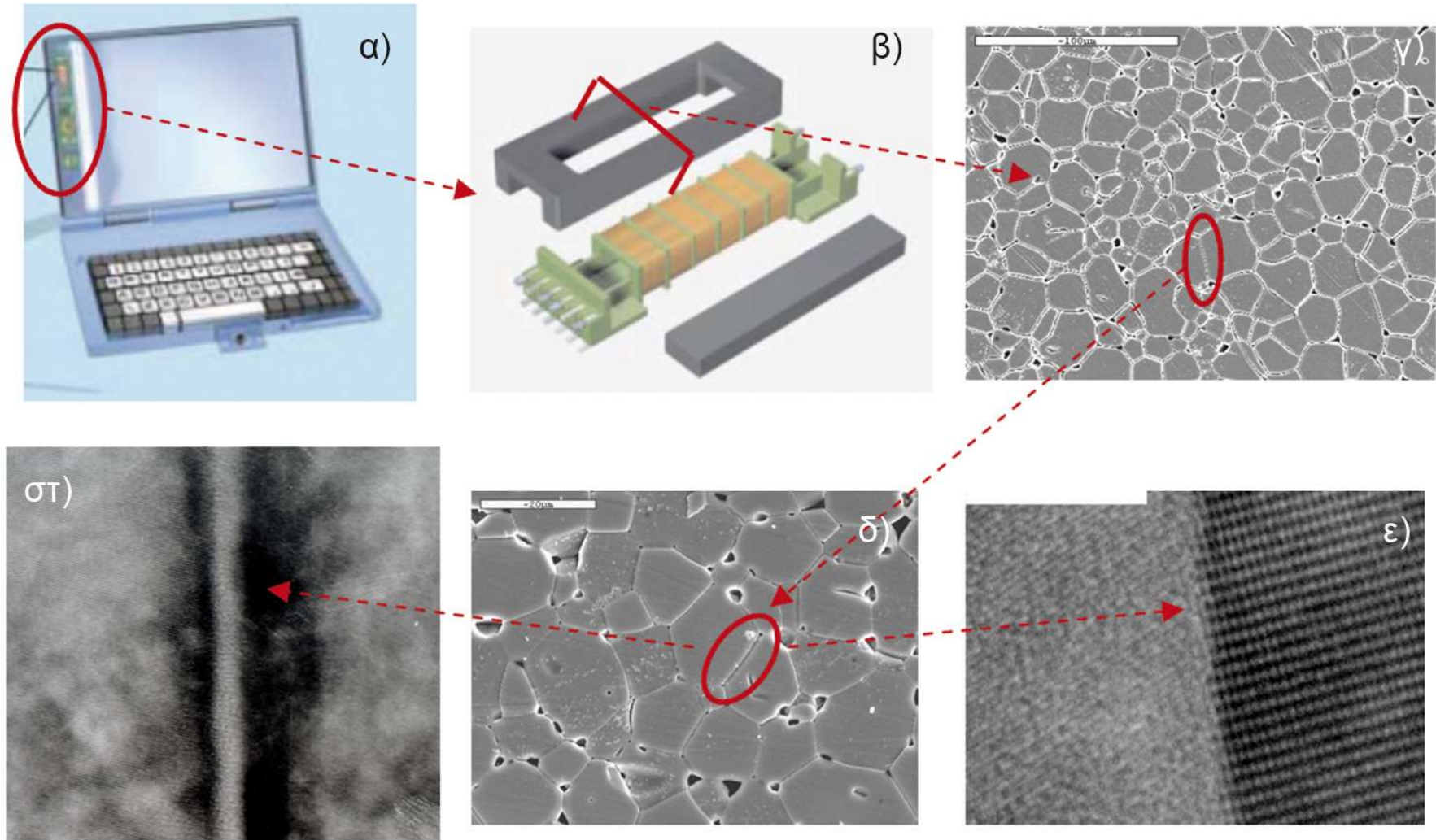
Σχ. 18.21, Callister & Rethwisch 9η έκδ.
(Από *Marine Corrosion, Causes, and Prevention*, John Wiley and Sons, Inc., 1975.)

- Θερμική κατεργασία: επιβραδύνει την ταχύτητα διάδοσης ρωγμών στο θαλάσσιο νερό!



Διασκευή από Σχ. 11.20(β), R.W. Hertzberg, "Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials" (4th ed.), p. 505, John Wiley and Sons, 1996. (Αρχ. Πηγή: Markus O. Speidel, Brown Boveri Co.)

Ρόλος μικροδομής





ΣΥΝΟΨΗ

Στόχοι μαθήματος:

- Χρήση του σωστού υλικού για την εκάστοτε εφαρμογή.
- Κατανόηση της σχέσης μεταξύ των **ιδιοτήτων**, **δομής**, και της **επεξεργασίας**.
- Αναγνώριση νέων σχεδιαστικών δυνατοτήτων και ευκαιριών που καθίστανται διαθέσιμες μέσω της επιλογής υλικών.



