

ΦΥΛΛΟ ΤΑΥΤΟΤΗΤΑΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ



Κωδ. Αριθ.

5291

ΕΜΠ

Τίτλος

Σχέσεις Δομής και Ιδιοτήτων Υλικών

Στοιχεία
Μαθήματος

T.Π	Ενот.Μαθ.	ΕΞ	Ω / Ε
XM	BA.ΕΠ	8°	
	TE.ΕΠ	KOP	YΠX
	TXΛ.	KAT	ΕΠΑ
	O.A.K.		Π.ΤΜ
	Ξ.Γ.		ΘΕ
			ΦΡ
			ΕΡΓ
			ΥΠΑ

Προαπαιτ.
Γνώσεις

Φυσικοχημεία (Δομή και Καταστάσεις της Ύλης), Μαθηματικά, Φυσική (Μηχανική, Ηλεκτρομαγνητισμός), Θερμοδυναμική, Φαινόμενα Μεταφοράς

Σκοπός

Μελέτη και ποσοτική ερμηνεία των μακροσκοπικών ιδιοτήτων (μηχανικών, θερμικών, ηλεκτρικών, μαγνητικών, οπτικών, μεταφοράς) της στερεάς φάσης (κυρίως κρυσταλλικά στερεά) με αναφορά στη μικροσκοπική και θεμελιώδη δομή.

Περιεχόμ.

- **ΕΙΣΑΓΩΓΗ.** Σημασία και πρόσφατα επιτεύγματα της Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών. Το τετράεδρο «Δομή – Ιδιότητες – Επεξεργασία – Επιδόσεις». Κατηγορίες υλικών και ιδιοτήτων. Κρυσταλλικά και άμορφα στερεά. Σύνθετα υλικά.
- **ΔΟΜΗ ΤΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ.** Εισαγωγή στην κρυσταλλογραφία και την περιγραφική κρυσταλλοχημεία: Συμμετρία σημείου και συμμετρία χώρου, πλέγματα και μοναδιαίες κυψελίδες, πυκνή στοιβαξη, σχέσεις ισομορφίας και πολυμορφίας. Δείκτες Miller και δείκτες κατευθύνσεων. Υπολογισμός αποστάσεων κρυσταλλικών επιπέδων. Υπολογισμοί πυκνότητας από τη δομή για μεταλλικούς, κεραμικούς και πολυμερικούς κρυστάλλους. Θεωρία και εφαρμογές της περίθλασης ακτίνων X. Το αντίστροφο πλέγμα.
- **ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΤΟΥ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ.** Ατομική δομή και δεσμοί στα μόρια και στα στερεά. Συνεκτική ενέργεια και υπολογισμός της από πειραματικές μετρήσεις μέσω θερμοδυναμικών κύκλων. Υπολογισμός συνεκτικής ενέργειας από τη γεωμετρία του πλέγματος και το δυναμικό των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων για κρυστάλλους που συγκρατούνται από δυνάμεις διασποράς. Συνεκτική ενέργεια ιοντικών κρυστάλλων: Σταθερά Madelung. Υπολογισμός του μέτρου όγκου από τη συνεκτική ενέργεια. Συνεκτική ενέργεια μεταλλικών ομοιοπολικών κρυστάλλων (π.χ. διαμαντιού) και κρυστάλλων που συγκρατούνται από δεσμούς υδρογόνου. Συνεκτική ενέργεια μεταλλικών κρυστάλλων.
- **ΔΙΑΧΥΣΗ ΣΤΗ ΣΤΕΡΕΑ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ.** Μετανάστευση ατόμων και συντελεστές διάχυσης. Αυτοδιάχυση. Μικροσκοπικοί μηχανισμοί διάχυσης: Διάχυση μέσω κενών θέσεων και μέσω παραπλεγματικών θέσεων. Στοιχειώδη διαχυτικά άλματα. Θεωρία μεταβατικών καταστάσεων για τον υπολογισμό της σταθεράς ρυθμού αλμάτων. Η διαχυτική τροχιά ως τυχαίος περίπατος. Σύνδεση με τη μακροσκοπική εξίσωση διάχυσης. Υπολογισμός της διαχυτότητας και της θερμοκρασιακής της εξάρτησης. Λύσεις της εξίσωσης διάχυσης υπό διάφορες αρχικές και συνοριακές συνθήκες. Τάξεις χημικών αντιδράσεων στα στερεά: Αντιδράσεις στερεού-αερίου και στερεού-στερεού. Απλό μοντέλο διάχυσης στις αντιδράσεις στερεού-στερεού.
- **ΔΟΝΗΣΕΙΣ ΤΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ.** Προσδιορισμός των κανονικών τρόπων δόνησης από τη συνάρτηση δυναμικής ενέργειας και τις ατομικές μάζες. Δονήσεις απλού κυβικού κρυστάλλου. Διάδοση ελαστικών κυμάτων σε γραμμική αλυσίδα: σχέση διασποράς, ζώνες Brillouin. Δονήσεις κρυστάλλων με περισσότερα του ενός άτομα ανά μοναδιαία κυψελίδα. Οπτικοί και ακουστικοί κλάδοι.
- **ΘΕΡΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΣΤΕΡΕΩΝ.** Στατιστική μηχανική του αρμονικού ταλαντωτή. Φωνόνια. Μοντέλο Einstein. Μοντέλο Debye: εξαγωγή της πυκνότητας δονητικών καταστάσεων, θερμοκρασία Debye, υπολογισμός της ενέργειας και της

θερμοχωρητικότητας. Νόμος της τρίτης δύναμης σε χαμηλές θερμοκρασίες. Μοντέλο ιδανικού αερίου ελευθέρων ηλεκτρονίων του Fermi για τα μέταλλα. Πυκνότητα ηλεκτρονικών καταστάσεων. Ενέργεια και θερμοκρασία Fermi. Υπολογισμός της συνεισφοράς των ελευθέρων ηλεκτρονίων στη θερμοχωρητικότητα μετάλλων. Αναρμονικές αλληλεπιδράσεις σε κρυστάλλους και συντελεστής θερμικής διαστολής. Κριτήριο Lindemann για την τήξη στερεών. Καταστατική εξίσωση Debye, παράμετρος Grüneisen. Θερμική αγωγιμότητα μη μεταλλικών στερεών: διεργασίες Umklapp, εξάρτηση της θερμικής αγωγιμότητας από τη θερμοκρασία. Θερμική αγωγιμότητα μετάλλων: συνεισφορά των ελευθέρων ηλεκτρονίων.

• **ΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΣΤΕΡΕΩΝ.** Εξαγωγή της ηλεκτρικής αγωγιμότητας μετάλλων από το απλό μοντέλο Fermi. Ευκινησία ηλεκτρονίων. Σχέση ηλεκτρικής και θερμικής αγωγιμότητας σε καθαρά μέταλλα: νόμος Wiedemann-Franz. Εξάρτηση της ηλεκτρικής αγωγιμότητας μετάλλων από τη θερμοκρασία. Ρόλος προσμίξεων και πλαστικής παραμόρφωσης.

Σκέδαση των ελευθέρων ηλεκτρονίων από τα ιόντα του πλέγματος. Μοντέλο σχεδόν ελευθέρων ηλεκτρονίων. Ενεργειακές ζώνες και ενεργειακά χάσματα. Στοιχειώδης θεωρία ενεργειακών ζωνών (προσέγγιση LCAO). Οι ηλεκτρονικές ιδιότητες των μετάλλων, μονωτών και ημιαγωγών. Ενδογενείς και εξωγενείς ημιαγωγοί – υπολογισμός της αγωγιμότητας και εξάρτησή της από τη θερμοκρασία. Κίνηση των φορέων σε μαγνητικό πεδίο – φαινόμενο Hall. Φωτοβολταϊκό φαινόμενο. Οργανικοί ημιαγωγοί.

• **ΔΙΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.** Διηλεκτρική σταθερά και διηλεκτρικά υλικά. Πολωσιμότητα: Ηλεκτρονική, ιοντική και διπολική συνεισφορά. Διηλεκτρική σταθερά και διηλεκτρική επιδεκτικότητα. Σχέση Clausius-Mossotti. Εξάρτηση πολωσιμότητας από τη συχνότητα. Διηλεκτρική φασματοσκοπία. Πιεζοηλεκτρικοί κρύσταλλοι.

• **ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.** Τάση-Παραμόρφωση, Ελαστική συμπεριφορά, Ανισοτροπία, Πλαστική συμπεριφορά, Αντοχή, Ολκιμότητα.

Σκληρότητα, κόπωση(αντοχή σε κόπωση), ερπυσμός, γήρανση, απόσβεση δονήσεων, θραύση, (ψαθυρή θραύση, μηχανική των θραύσεων, μορφολογία των επιφανειών θραύσης). Μαθηματική προσέγγιση και μηχανισμοί. Κατηγορίες υλικών: πολυμερή, μέταλλα, κεραμικά, προηγμένα υλικά (βαθμωτής δομής, υπερκράματα, σύνθετα). Συνήθειες – προηγμένες τεχνικές μέτρησης μηχανικών ιδιοτήτων.

Ανάλυση Διδασκαλίας :

Διδακτική Εβδομάδα	Αντικείμενο	Κεφάλαια Συγγραμματος
1 ^η	Εισαγωγή στην επιστήμη και τεχνική των υλικών. Κρυσταλλικά πλέγματα, γεωμετρικοί υπολογισμοί.	Σ/μα 1: Κεφ.1.1-1.7
2 ^η	Ενέργεια πλέγματος και υπολογισμός της	Σ/μα 1: Κεφ. 1.8-1.10
3 ^η	Ατέλειες κρυστάλλων: Σημειακές, γραμμικές. Διάχυση στη στερεά κατάσταση	Σ/μα 1: Κεφ. 1.11-1.13, 2
4 ^η	Δονήσεις πλεγμάτων, θεωρίες Einstein και Debye, θερμοχωρητικότητα μη μεταλλικών στερεών.	Σ/μα 1, Κεφ. 3.1-3.3
5 ^η	Μοντέλο Fermi ελευθέρων ηλεκτρονίων, θερμοχωρητικότητα μετάλλων	Σ/μα 1, Κεφ. 3.4
6 ^η	Θερμική αγωγιμότητα, θερμική διαστολή, τήξη	Σ/μα 1, Κεφ. 3.5-3.7
7 ^η	Θεωρία ενεργειακών ζωνών ηλεκτρονίων: αγωγοί, μονωτές, ημιαγωγοί.	Σ/μα 1, Κεφ. 4.1
8 ^η	Διηλεκτρικές ιδιότητες στερεών.	Σ/μα 1, Κεφ. 4.2
9 ^η	Μηχανικές ιδιότητες στερεών: ελαστικότητα, πλαστικότητα, αντοχή, ολκιμότητα	Σ/μα 3

Απ.Σπ. Ω /Ε Ξ

ΘΕ	32	ΦΡ	4	ΕΡΓ	4	Κ. ΟΙΚ	135	175
----	----	----	---	-----	---	--------	-----	-----

Διδάσκοντες

Δώρος Θεοδώρου, Καθηγητής ΕΜΠ (Συντονιστής) - Κώστας Χαριτίδης, Καθηγητής ΕΜΠ
--

Διδάσκοντες

Θ. Θεοδώρου, Καθ., Α. Καραντώνης, Αναπλ. Καθ., Κ. Δέρβος, Καθ., Κ. Χαριτίδης, Καθ., Ν.
--

Εργαστηρίων Παπαδόπουλος, Επίκ. Καθ.
ΕΔΙΠ: Σ. Σούλης, Π. Γεωργίου

Διδ. Βοηθ. 1. Τσαγκάρης, Γ. *Δομή και Ιδιότητες της Στερεάς Κατάστασης*, ΕΜΠ, Αθήνα, 2001.
2. Δ. Θεοδώρου, Κ. Χαριτίδης, Α. Καραντώνης, Γ. Τσαγκάρης, *Σχέσεις Δομής – Ιδιοτήτων Υλικών: Εργαστηριακές ασκήσεις*, ΕΜΠ, Αθήνα 2010.
3. Κ. Χαριτίδης, *Σχέσεις Δομής – Ιδιοτήτων Υλικών 1. Από τα στερεά υλικά στις επιφάνειες και λεπτά υμένα, 2. Μηχανικές Ιδιότητες*, ΕΜΠ, Αθήνα 2010.
4. Δ. Θεοδώρου, Κ. Χαριτίδης, *Φροντιστηριακές ασκήσεις: Σχέσεις δομής – ιδιοτήτων υλικών*, ΕΜΠ, Αθήνα 2010

Πρόσθετη Βιβλιογραφία 5. Kittel, C. *Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης*, 5^η Έκδοση, 1979, Επιστημονικές Τεχνολογικές Εκδόσεις Α.Γ. Πνευματικός, ISBN 960-7258-51-7, κωδικός «Ευδόξου» 6847.
6. Kittel, Ch. *Introduction to Solid-State Physics*, 7th Edition, J. Wiley & Sons, 1996.
7. Callister, W.D. Jr. *Materials Science and Engineering: An Introduction*, 5th Edition, J. Wiley, 2000.
8. Γ. Χρυσουλάκης και Δ. Παντελής, *Επιστήμη και Τεχνολογία των Μεταλλικών Υλικών*, Παπασωτηρίου, Αθήνα, 1996.

Μεθ. Διε - Διδασκαλία θεωρίας και παραδειγμάτων από έδρας από τους διδάσκοντες.
- Επίλυση επιλεγμένων ασκήσεων από τους διδάσκοντες και τους σπουδαστές στα φροντιστήρια.
- Εργαστηριακές Ασκήσεις: εκτέλεση εργαστηριακών ασκήσεων από τετραμελείς ομάδες σπουδαστών και ομαδική εργαστηριακή αναφορά εντός δεκαπέντε ημερών από την εκτέλεση κάθε άσκησης.

ΤΙΤΛΟΙ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΩΝ ΑΣΚΗΣΕΩΝ

1. Ανάλυση κρυσταλλικών δομών με περίθλαση ακτίνων Χ
2. Υπολογισμός διπολικής ροπής από μετρήσεις ηλεκτρικής διαπερατότητας και δείκτη διάθλασης
3. Προσδιορισμός της κινητικότητας των ηλεκτρονίων με εφαρμογή του φαινομένου Hall
4. Φωτοβολταϊκό φαινόμενο
5. Αυτο-συναρμολογούμενα πολυστρωματικά νανοϋλικά: ηλεκτροχημική σύνθεση πολυστρωματικού Cu / Cu₂O με ταλαντώσεις του δυναμικού υπό γαλβανοστατικές συνθήκες
6. Σύνθεση, δομή και ιδιότητες νανοσωλήνων άνθρακα και γραφενίου μέσω της τεχνικής θερμικής εναπόθεσης ατμών

Αξιολ. Επιδ. Η αξιολόγηση θα γίνει:

- μέσω τελικής Γραπτής Εξέτασης (ΓΕ) που θα περιλαμβάνει την επίλυση λογιστικών ασκήσεων με ανοικτά βιβλία και άλλα βοηθήματα
- μέσω της επίδοσης στα εργαστήρια. Ο βαθμός εργαστηρίου, ΕΑ, προκύπτει ως μέσος όρος των επί μέρους βαθμών των εργαστηριακών ασκήσεων. Ο βαθμός κάθε εργαστηριακής άσκησης βασίζεται στη γραπτή αναφορά που θα παραδοθεί και στην προετοιμασία και συμμετοχή του φοιτητή κατά την εκτέλεση της άσκησης.

Ενιαίος Βαθμός **Ο τελικός βαθμός προκύπτει ως : Τελικός Βαθμός = (ΓΕ)*0.6 + (ΕΑ)*0.4**

Διδακτικό Έργο :

1. Διδασκαλία θεωρίας : 4 ώρες/εβδομάδα. Αναλαμβάνεται από τους διδάσκοντες.
2. Φροντιστηριακές Ασκήσεις : κατά μέσον όρο 1 ώρα κάθε δεκαπενθήμερο. Αναλαμβάνεται από τους διδάσκοντες.
3. Εργαστηριακές Ασκήσεις : 5 εργαστηριακές περίοδοι, των οποίων το πρόγραμμα καθορίζεται κατά τη διάρκεια του εξαμήνου.

Επεξήγηση Συντμήσεων

Τ. Π. : Τμήμα Προέλευσης

Ενот. Μα	Ενότητα Μαθημάτων
ΒΑ. ΕΠ.	Βασικών Επιστημών
ΤΕ. ΕΠ.	Τεχνικών Επιστημών (engineering)
ΤΧΛ	Τεχνολογικών
Ο.Α.Κ	αναγράφεται Ο=οικονομικά , Α = ανθρωπιστικά και Κ = κοινωνιολογικά
Ξ. Γ.	ξένες γλώσσες
ΕΞ	εξάμηνο σπουδών που διδάσκεται το μάθημα
ΚΟΡ	μαθήματα κορμού που απευθύνονται στο σύνολο της τάξης
ΚΑΤ	μαθήματα κατεύθυνσης
ΥΠΧ	υποχρεωτικό μάθημα
ΕΠΛ	μάθημα επιλογής
Π.ΤΜ	παράλληλα τμήματα
Ω/Ε	ώρες /εβδομάδα που περιλαμβάνονται στο ωρολόγιο πρόγραμμα
ΘΕ	θεωρητική διδασκαλία (Ω/Ε)
ΦΡ	φροντιστήριο (Ω/Ε)
ΕΡΓ	εργαστήριο (Ω/Ε)
ΥΠΛ	υπολογιστικές ασκήσεις (Ω/Ε)
Τυπικό Δ. Σ	Τυπικό Διεθνές Σύγγραμμα
Απ.Σπ. Ω /ΕΞ	ώρες απασχόλησης σπουδαστή ανά εξάμηνο
Κ. ΟΙΚ.	κατ' οίκον