

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

1. ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ		
ΤΜΗΜΑ			
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	Προπτυχιακό		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	5291	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	8 ^ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΣΧΕΣΕΙΣ ΔΟΜΗΣ ΚΑΙ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ		ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ/ECTS
Διαλέξεις		4	7
Φροντιστηριακές Ασκήσεις		0.5	
Εργαστηριακές Ασκήσεις		0.5	
ΣΥΝΟΛΟ		5	
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ:	Ειδικότητας		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	-		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνική		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS:	ΝΑΙ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL):	https://helios.ntua.gr/course/view.php?id=1321&lang=el		

2. ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Το μάθημα είναι βασικό της κατεύθυνσης των Υλικών, στην εμβάθυνση των Λειτουργικών και Πολλαπλής Κλίμακας Υλικών.

Σκοπός του μαθήματος είναι η 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.

Με την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος ο φοιτητής /-τρια θα:

- διαθέτει ποσοτική κατανόηση της δομής των κρυσταλλικών στερεών σε ατομικό επίπεδο και της πειραματικής της διερεύνησης με μετρήσεις σκέδασης.
- μπορεί να υπολογίζει πυκνότητες, συνεκτικές ενέργειες και ελαστικές σταθερές στερεών από τη δομή της μοναδιαίας κυψελίδας του πλέγματός τους και να χρησιμοποιεί αυτούς τους υπολογισμούς για την επιλογή των καταλληλότερων υλικών σε κατασκευές
- κατανοεί τους βασικούς μηχανισμούς διάχυσης στη στερεά κατάσταση και μπορεί να σχεδιάζει διεργασίες επεξεργασίας υλικών στηριζόμενες σε φαινόμενα διάχυσης μέσα από επίλυση της εξίσωσης διάχυσης με κατάλληλες αρχικές και συνοριακές συνθήκες.
- μπορεί να εκτιμά τη θερμοχωρητικότητα, την ειδική θερμότητα και το συντελεστή θερμικής διαστολής μη μεταλλικών και μεταλλικών στερεών με βάση τις δονήσεις των πλεγμάτων τους και τις καταστάσεις των ελευθέρων ηλεκτρονίων που περιέχουν.
- μπορεί να εκτιμά την ηλεκτρική αγωγιμότητα μετάλλων, ενδογενών και εξωγενών ημιαγωγών με βάση τις ηλεκτρονικές καταστάσεις των πλεγμάτων τους και τις προσμείξεις που περιέχουν.
- κατανοεί τις διηλεκτρικές ιδιότητες μη αγώγιμων υλικών και την εξάρτησή τους από τη συχνότητα με βάση τους χαρακτηριστικούς χρόνους κίνησης των δομικών τους λίθων.
- έχει μια καθαρή εικόνα των εργαλείων που παρέχουν η φυσική στερεάς κατάστασης, η στατιστική μηχανική, η θερμοδυναμική, τα φαινόμενα μεταφοράς και η ηλεκτρομαγνητική θεωρία για το σχεδιασμό νέων ή βελτιωμένων υλικών που ικανοποιούν συγκεκριμένες απαιτήσεις επιδόσεων σε εφαρμογές.

Γενικές Ικανότητες

- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης
- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών
- Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις – Λήψη αποφάσεων
- Αυτόνομη εργασία
- Ομαδική Εργασία
- Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

3. ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

• **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 Χ. 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 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 ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΩΝ 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.

ΤΙΤΛΟΙ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΩΝ ΑΣΚΗΣΕΩΝ (εκτελούνται 4 το εξάμηνο)

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
7. Υπολογιστική προσομοίωση διάχυσης στη στερεά κατάσταση.

4. ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ:	Στην τάξη	
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ:	Χρήση ιστοσελίδας helios για επικοινωνία με τους φοιτητές, ανάρτηση σημειώσεων, κλπ.	
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ:	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου
	Διαλέξεις (8 εβδομάδες)	24
	Επίλυση φροντιστηριακών ασκήσεων στην τάξη	4
	Εργαστηριακές ασκήσεις: εκτέλεση από τετραμελείς ομάδες σπουδαστών στο εργαστήριο	12
	Εργαστηριακές ασκήσεις: ομαδική εργαστηριακή αναφορά, που περιλαμβάνει επίλυση προβλημάτων εφαρμογής.	32
	Μελέτη κατ' οίκον	103
	Σύνολο Μαθήματος	175
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ:	Η αξιολόγηση γίνεται: • μέσω τελικής Γραπτής Εξέτασης (ΓΕ) που περιλαμβάνει την επίλυση λογιστικών ασκήσεων με ανοικτά βιβλία και άλλα βοηθήματα, • μέσω αξιολόγησης 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. Όλοι οι βαθμοί που αποδίδονται ανακοινώνονται μέσω της ιστοσελίδας του μαθήματος στο helios. Ο τελικός βαθμός προκύπτει ως : Τελικός Βαθμός = (ΓΕ)*0.6 + (ΕΑ)*0.4 Εάν ΓΕ < 5, ο σπουδαστής δεν προβιβάζεται.	

5. ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Διδακτικά βοηθήματα που μοιράζονται:

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 που συνιστάται:

1. 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.
2. Kittel, Ch. Introduction to Solid-State Physics, 7th Edition, J. Wiley & Sons, 1996.
3. Callister, W.D. Jr. Materials Science and Engineering: An Introduction, 5th Edition, J. Wiley, 2000.
4. Χρυσουλάκης και Δ. Παντελής, Επιστήμη και Τεχνολογία των Μεταλλικών Υλικών, Παπασωτηρίου, Αθήνα, 1996.