

## 1η Εβδομάδα:

### A. Κατάσταση Ύλης / Ιδιότητες φωτός

- Γενικά Φάσεις / Καταστάσεις: Αέρια, Υγρά, Στερεά (Κρυσταλλικά ή μη κρυσταλλικά (άμορφα) (τριπλό σημείο, κρίσιμο σημείο)
- H<sub>2</sub>O: τριπλό σημείο (T=0.0098 °C, P=6.0 10<sup>-3</sup> Atm) Κρίσιμο σημείο (T=647 K=374 °C, P=218 Atm)
- Στερεά: 1) κρυσταλλικά (συμμετρία, επίπεδες έδρες) 2) Μη κρυσταλλικά (άμορφα)
- Κρυσταλλικά υλικά είναι ανισότροπα (διαφορετικές τιμές φυσικοχημικών μεγεθών σε διαφορετικές διευθύνσεις)
- Άμορφα υλικά: Απουσία Σ.Τ. + ισοτροπία δηλ. ίδιες φυσικές ιδιότητες σε διαφορετικές κατευθύνσεις). Ισοτροπικά υλικά. Θεωρούνται υγρά σε κατάσταση υπέρτηξης
- Άμορφα υλικά & Κρυσταλλικά:  $\theta = f(t)$ , φαίνεται αρχή και τέλος κρυστάλλωσης. Κατά τη διάρκεια της κρυστάλλωσης ελευθερώνεται ενέργεια η οποία εξουδετερώνει τις απώλειες θερμότητας  $\theta = ct$
- Κρυσταλλογραφία (Ασχολείται με: 1) ανάπτυξη κρυστάλλων, 2) μελέτη τους, 3) γεωμετρία τους, φυσικές ιδιότητες τους)
- Άλμα κρυσταλλογραφίας: Röntgen 1895: ανακάλυψη ακτίνων X, Ανακάλυψαν την δομή, την κανονικότητα / περιοδικότητα των κρυστάλλων  
Huygens 1690: περιοδικότητα  
Stensen 1669: σταθερές γωνίες στους κρυστάλλους  
Haüy 1774: νόμος αναλογικών δεικτών  
Hessel 1830: Δυνατοί τύποι κρυστάλλων  
Gadolin 1867: 32 τύποι κρυστάλλων
- Ιδιότητες φωτός: (Συμβολή, Ανάκλαση, Διάθλαση, Διάχυση (ανώμαλη ανάκλαση), ολική ανάκλαση (οπτικές ινές), Περίθλαση (εκτροπή από την ευθεία πορεία του, εμπόδιο ή οπή σε παρόμοιο μέγεθος με το μήκος κύματος = ανάκλαση + συμβολή εμπεριέχεται και φαινόμενο διάχυσης κυμάτων), Διάθλαση μέσω πρίσματος, Σκέδαση= Διασκορπισμός (πολλαπλή ανάκλαση και απορρόφηση φωτός)
- Διαφανή / Ημιδιαφανή / Αδιαφανή
- Αρχές Περίθλασης Ακτίνων X (πληροφορίες για μεταλλικά, ιοντικά και μοριακά στερεά)
- Κρυσταλλογραφίας => κατανοούμε τη δομή => Μελετάμε/εξηγούμε ιδιότητες (μηχανικές(πχ ακαμψία), ηλεκτρικές, οπτικές μαγνητικές)
- Μακροσκοπικές ιδιότητες οφείλονται στις διατάξεις και ιδιότητες των ατόμων

## B. Κρυσταλλογραφία

- Κρυσταλλικά συστήματα (7) / Κυψελίδες ίδιας συμμετρίας
- 14 χωρικά πλέγματα ή πλέγματα Bravais / 3-διάστατη διάταξη σημείων 1848
- Μοναδιαία κυψελίδα = (δομική μονάδα, γεωμετρικό σχήμα που επαναλαμβάνεται).
- Στοιχειώδης - πρωτογενής - Θεμελιώδης κυψελίδα
- Διευθύνσεις πλέγματος
- Δικτυωτά επίπεδα
- Κρυσταλλική δόμη (Συμμετρική, 3διαστατη διάταξη ατόμων ή μορίων)
- Στα 7 κρυσταλλικά συστήματα αγνοώ άτομα και βάζω φανταστικά σημεία με σταθερή σχέση ως προς τα άτομα:
 

|                                                                              |                                                    |
|------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------|
| - Κυβικό $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$                              | <b>P, I=body center cubic, F=face center cubic</b> |
| - Τετραγωνικό $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$                    | <b>P, I=bcc</b>                                    |
| - Ορθορομβικό $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$                    | <b>P, I, C, F=fcc</b>                              |
| - Μονοκλινές $a \neq b \neq c$ $\alpha=\gamma=90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ | <b>P, C</b>                                        |
| - Τρικλινές $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$  | <b>P</b>                                           |
| - Τριγωνικό ή Ρομβοεδρικό $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$        | <b>R</b>                                           |
| - Εξαγωνικό $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$           | <b>P</b>                                           |
- Τα ανύσματα , a, b, c φτιάχνουν τη μοναδιαία κυψελίδα
- κρυσταλλογραφικοί άξονες  
(a, b, c) και ( $\alpha, \beta, \gamma$ ) πλεγματικοί παράμετροι
- πλεγματικό σημείο / δομικό μοτίβο / χωρικό πλέγμα (αφηρημένος ιστός)
- Αριθμός πλεγματικών σημείων / κυψελίδα  $N=N_i + N_f/2 + N_c/8$  {P=1, I=2, F=4}
- Μετατροπή κυβικού fcc(4) [(0,0,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2), (1/2,1/2,0)] → ρομβοεδρικό R(1) [(0,0,0)]
- Μετατροπή κυβικού bcc(2) [(0,0,0), (1/2,1/2,1/2)] → ρομβοεδρικό R(1) [(0,0,0)]
- Rosalind Franklin
- Δείκτες Miller h, k, l
- Δικτυωτά επίπεδα: Επίπεδο  $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \infty)$  → (1 2 0) Συμβολισμοί Miller
- Σμήνος επιπέδων {h k l}
- Γραμμές / Διευθύνσεις πλέγματος [h k l], [2h 2k 2l] :ιδία διεύθυνση
- Οικογένειες Διευθύνσεων πλέγματος < >
- Απόσταση {h,k,l}:  $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$   $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$
- Θέση ατόμων (1,2,4)
- Ασκήσεις

## 2<sup>η</sup> Εβδομάδα

- Περίθλαση (ανάκλαση + συμβολή)
  - Röntgen 1895 : ανακάλυψη ακτίνων X
  - von Laue 1912 : Οι X μπορούν να περιθλαθούν κατά τη διέλευση από κρύσταλλο ( $\lambda = 10^{-10}$  m, -μηκος κύματος συγκρίσιμο με απόσταση πλεγματοικών επιπέδων)
  - Ακτίνες X : μετακίνηση εσωτερικών e.  
Χτυπάει δέσμη e<sup>-</sup> υψηλής ενέργειας. Διώχνει e<sup>-</sup> της K, e<sup>-</sup> της L παίρνει την θέση του K και εκπέμπεται ακτινοβολία X
  - Bragg:  $n\lambda = 2d\sin\theta$  {nh,nk,nl} ή  $\lambda = 2d\sin\theta$ , {h,k,l}
  - Ασκήσεις
- 
- Σκέδαση (ανάκλαση + συμβολή)
  - Παράγοντας σκέδασης f, Βαρυ άτομο  $f = 4\pi \int_0^\infty \rho(r) \frac{\sin kr}{kr} r^2 dr$   $k = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$
  - Εμπρόσθια σκέδαση ( $\theta=0$ )  $f=N_e$
  - Ηλεκτρονιακή πυκνότητα
  - Πρόβλημα φάσης,  $I_{hkl}$
  - $\lambda = h/p$  Σχέση de Broglie h: σταθερά Planck
  - $E_K = 1/2KT$ ,  $E_K$ =κινητική ενέργεια, K σταθερά Boltzman,
  - Σύγκριση περίθλασης n και e<sup>-</sup>.
  - Ασκήσεις

### 3<sup>η</sup> Εβδομάδα

#### I. Κατηγορίες Στερεών

##### A. Μεταλλικά Στερεά

- Πυκνή διάταξη ccp, hcp : 12
- hexagonal close-packing ABABABAB
- cubic close-packing ABCABC
- $V_{\text{κυβ}} = 8^{3/2}R^3$
- $V_{\text{σφαιρας}} = 4/3 \pi R^3$
- Υπολογισμός κατάληψης fcc, bcc (ccp is fcc)
- Αριθμός ατόμων ανά στοιχειώδες κυψελίδα
- Ελάχιστη ενδοατομική απόσταση
- Αριθμός συνδιάταξης (CN=8, bcc) (CN=12, fcc)
- Αριθμός ατομικής πλήρωσης ή λόγος κατάληψης
- Ασκήσεις

##### B. Ιοντικά Στερεά

CsCl (8,8): 2 P cubic το ένα μέσα στο άλλο

NaCl (6,6) : 2fcc το ένα μέσα στο άλλο

Σφαλερίτης ZnS

Ορισμός ακτίνας ιόντος

Αρ. Σύνταξης (n+, n-) γειτονικά άτομα αντίθετου φορτιού

$$\gamma = r_{\text{μικροτερο ιον}} / r_{\text{μεγαλυτερο ιον}}$$

Ενέργεια πλέγματος (απόδειξη)

Κύκλος Born-Haber

- Ασκήσεις

##### Γ. Μοριακά Στερεά

- Στερεά ομοιοπολικού Δικτύου
- Μοριακά Στερεά

## II. Ιδιότητες Υλικών

### A . Μηχανικές Ιδιότητες

- Μέτρο ελαστικότητας young
- Μέτρο ελαστικότητας όγκου
- Μέτρο διατμηματικής τάσης

Stress (τάση) =  $f$  (παραμόρφωση)

Νόμος Hooke, ελαστικό όριο, όριο θραύσης

### 4<sup>η</sup> Εβδομάδα

### B. Ηλεκτρικές Ιδιότητες

- Μεταλλικοί αγωγοί
- Ημιαγωγοί
- Μονωτές
- Υπεραγωγοί (I και II)  
Ζευγος Cooper e
- Ζώνη αγωγιμότητας, Ζώνη σθένους
- Φασματοσκοπία:  
Απορρόφηση, εκπομπή (φθορισμός, φωσφορισμός)  
Δονητικές στάθμες  
Καταστάσεις  $S_0, S_1, S_2, T_1, T_2$

### Γ. Μαγνητικές Ιδιότητες

- Διαμαγνητικά (απωθείται απο μαγν. Πεδιο)  $\chi < 0$
- Παραμαγνητικά (έλκεται απο μαγν. Πεδιο)  $\chi > 0$  Ασύζευκτα e
- Σιδηρομαγνητικά
- Αντισιδηρομαγνητικά
- Σιδηριμαγνητικά
- TIP
- Υπερμαγνητικά

$\chi$ : μαγνητικη επιδεκτικότητα όγκου

Βρόγχος υστέρησης

#### **Δ. Οπτικές Ιδιότητες**

- Εξιτόνια
- Πλήρες φάσμα, λ
- Φασματοσκοπικές Ιδιότητες

#### **Εργαστήριο**

Crystallography open database

Απεικόνιση / Σχεδιασμός κρυστάλλων