SCIENZA ED INGEGNERIA DEI MATERIALI

1° LEZIONE 03/03/2020

I materiali vengono per comodità raggruppati in 3 classi basilari:

METALLI → gli atomi nei metalli e nelle loro leghe si dispongono in maniera ordinata. I metalli sono relativamente densi, rigidi e resistenti, ma anche duttili e resistenti alla frattura. Hanno un gran numero di elettroni delocalizzati, ovvero elettroni che non sono legati ad un atomo specifico e diverse delle loro proprietà sono da attribuire a tali elettroni, per esempio l'essere ottimi conduttori di calore ed elettricità e il non essere trasparenti alla luce visibile. Metalli come Fe, Co, Ni hanno buone proprietà magnetiche.

CERAMICI → Sono composti formati da elementi metallici e non metallici; sono per la maggior parte costituiti da OSSIDI, NITRURI e CARBURI. Sono relativamente rigidi e resistenti, confrontabili con i metalli, sono tipicamente molto duri, ma anche estremamente fragili e sono molto sensibili alla frattura fragile. I ceramici sono tipicamente isolanti termici ed elettrici e sono + resistenti dei metalli e dei polimeri alle alte temperature e agli ambienti aggressivi. Per quel che riguarda le proprietà ottiche, possono essere trasparenti, traslucidi o opachi e alcuni ossidi ceramici (Fe_3O_4) mostrano comportamento magnetico.

master COPY

POLIMERI → Appartengono ad essi le familiari plastiche e le gomme. Hanno una struttura molecolare vitreo-amorfa, configurata in genere in catene con una struttura portante formata da atomi di carbonio. Hanno tipicamente bassa densità, non sono né rigidi né resistenti. Data la bassa densità hanno spesso rigidità e resistenza specifiche. Molti polimeri in genere sono estremamente duttili e flessibili. In generale sono inerti chimicamente e non reattivi ad un gran numero di ambienti. Uno dei maggiori svantaggi dei polimeri è la loro tendenza a rammollire e/o a decomporsi a temperature non elevate. Hanno basse conduttività elettriche e sono amagnetici.

COMPOSITI → Un composito è costituito da 2 o + materiali appartenenti ai metalli, ai ceramici e ai polimeri. La progettazione di un materiale composito ha per obbiettivo quello di ottenere una combinazione di proprietà che non sono possedute da nessun particolare materiale, e di sommare anche le proprietà migliori di ciascuno dei materiali componenti. Dalla differente combinazione di metalli, ceramici e polimeri si ottiene una grande varietà di materiali compositi. In natura sono considerati compositi il legno e le ossa, ma comunque la maggior parte dei materiali compositi sono creati dall'uomo.

LEGAMI CHIMICI E PROPRIETÀ

- L'ATOMO DI BOHR -



Orbitali elettronici
n = numero quantico

Nucleo: Z = # protoni = 1 per l'H fino a 94 per il Plutonio

elettroni orbitali

N = # neutroni

Massa atomica $A \approx Z + N$

- MODELLO MECCANICO ONDULATORIO -

Dato che il modello di Bohr presenta notevoli limitazioni essendo inadeguato a spiegare i diversi fenomeni riguardanti il comportamento degli elettroni venne trovata una soluzione con il modello meccanico ondulatorio.
Esso stabilisce che gli elettroni possiedono le caratteristiche tipiche sia delle particelle che delle onde. Secondo questo modello un elettrone non è + considerato come una particella che si muove su un determinato orbitale, ma piuttosto la posizione dell'elettrone è rappresentata dall'insieme delle posizioni intorno al nucleo dove vi è un'alta probabilità di trovare l'elettrone stesso.

- NUMERI QUANTICI -

Ogni elettrone è caratterizzato da 4 parametri: la dimensione, la forma, l'orientamento spaziale sono descritte da 3 di questi numeri quantici.

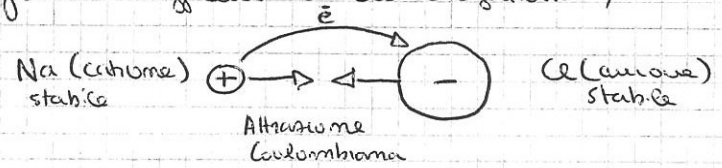
Valore di n	Valore di l	Valore di m	Sottolivelli	N. di orbitali	N. di elettroni
1	0	0	1s	1	2
2	0	0	2s	1	2
	1	-1, 0, 1	2p	3	6
3	0	0	3s	1	2
	1	-1, 0, 1	3p	3	6
	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	5	10
4	0	0	4s	1	2
	1	-1, 0, 1	4p	3	6
	2	-2, -1, 0, 1, 2	4d	5	10
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	4f	7	14

- LEGAME IONICO -

- Si instaura tra ioni + e ioni -;
- Richiede trasferimento di elettroni;
- Richiede grandi differenze di elettronegatività;

master COPY COPISTERIA

Ex. NaCl



- FORZE ED ENERGIE DI LEGAME -

Due ioni puntiformi (A e B) con cariche Z_A e Z_B e poste a distanza r_{AB} interagiscono con una forza elettrostatica pari a:

$$\vec{F}_{AB} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z_A Z_B}{r_{AB}^2} = K_c e^2 \frac{Z_A Z_B}{r_{AB}^2} \qquad \varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12} \ \frac{C^2}{Nm^2}$$

dove per integrazione si ricava l'energia potenziale elettrostatica:

$$\vec{V}_{AB} = \int_{\infty}^{r_{AB}} \vec{F}_{AB}(r)\, dr = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z_A Z_B}{r_{AB}} = -K_c e^2 \frac{Z_A Z_B}{r_{AB}}$$

Tra i 2 ioni oltre a questo potenziale attrattivo esiste anche un'interazione repulsiva che è stata definita da Born nella forma:

$$V_{AB} = \frac{B}{4\pi\varepsilon_0 r_{AB}^n}$$

e

dove B = costante e n = esponente di Born = (5-12) dipende dalla configurazione elettronica degli elementi.

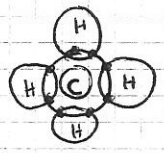
L'energia totale di interazione di 2 ioni nel vuoto è data dalla somma del termine repulsivo e quello attrattivo, ed è, quindi, pari a:

$$V_{AB} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{z_A z_B}{r_{AB}} + \frac{B}{4\pi\varepsilon_0 r_{AB}^n}$$

- LEGAME COVALENTE -

- Richiede ELETTRONI CONDIVISI

Ex. CH_4



C: ha valenza 4 e ha bisogno di altri 4 e^-

H: ha valenza 1 e ha bisogno di 1 e^-

Le elettronegatività sono comparabili

- LEGAME METALLICO -

- Origina da un "mare" di elettroni di valenza donati (1, 2 o 3 da ciascun atomo)
- Legame primario per metalli e le loro leghe

- LEGAMI SECONDARI -

Originano da un interazione tra dipoli

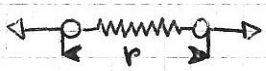
- Dipoli fluttuanti



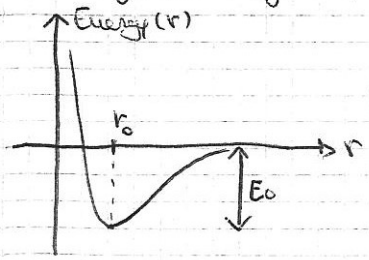
- Nelle con dipoli permanenti - indotti

- PROPRIETÀ DEI LEGAMI -

- Distanza di legame, r



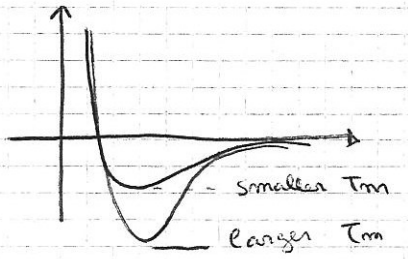
- Energia di legame, E_0



- Coefficiente di espansione termica, α

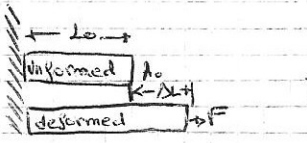
$$\frac{\Delta L}{L_0} = \alpha (T_2 - T_1)$$

- Temperatura di fusione, T_m



$T_m >$ se $E_0 >$

- Modulo elastico, E



$$\frac{F}{A_0} = E\frac{\Delta L}{L_0}$$

modulo elastico

$E >$ se $E_0 >$

- SOMMARIO: LEGAMI PRIMARI -

- CERAMICI (legame ionico e covalente)
  - Grande energia di legame
  - grande Tm
  - grande E
  - piccola α

- METALLI (legame metallico)
  - Energia di legame variabile
  - Tm moderata
  - E moderata
  - α moderato

- POLIMERI (Covalente e secondari)
  - Proprietà direzionali
  - Dominano i legami secondari
  - basse Tm
  - E piccoli
  - grande α

master COPY COPISTERIA

master COPY COPISTERIA