Scienza e Tecnologia dei materiali

→ L'obiettivo è definire proprietà dei materiali svincolandosi dalla geometria del materiale stesso, in modo che possa essere caratterizzato da tali proprietà.

→ Proprietà introduttive dei materiali:

- rigidezza: proprietà di un materiale che viene sperimentata con il minimo sforzo applicabile ad un materiale per ottenere una deformazione
- modulo elastico: pendenza della retta nel diagramma σ/ε nel tratto lineare ($\frac{\sigma}{\varepsilon}$)
- sforzo di rottura

(# dalla resistenza a rottura)

- resistenza a rottura

→ (pattern che si può osservare sottoponendo il materiale ad un'indagine microscopica)

→ Le proprietà dei materiali si suddividono in:
- insensibili alla microstruttura
- sensibili alla microstruttura

→ Uno stesso materiale può avere diversi tipi di microstruttura. Uno stesso materiale prodotto con due microstrutture differenti, hanno alcune proprietà uguali (le insensibili) ed altre che variano.

⇓ (stesso materiale = stessa struttura chimica)

→ Per stabilire i criteri di scelta di un materiale, bisogna partire dalle Applicazioni:

Applicazione → proprietà richieste → materiale → lavorazioni → (cambiamento di forma e microstruttura per le proprietà finali)

(perché da essa possono dipendere le proprietà finali del materiale)

→ Terminologia:
- materiale: nel linguaggio ingegneristico è una quantità di materia solida adatta all'impiego per un determinato scopo
- materia: ciò che ha la proprietà intrinseca di possedere massa
- sostanza: quantità di materia con composizione chimica ben definita

→ La maggior parte dei materiali è costituita dall'insieme di più sostanze che in condizioni di esercizio si presentano allo stato solido cristallino, amorfo o parzialmente cristallino

→ Stati di aggregazione della materia:
- solido
- liquido
- gassoso

⇔ schematizzazione semplificata dei 3 diversi gradi di mobilità di atomi, ioni o molecole all'interno di un materiale

master COPY

- fase cristallina: strutture completamente ordinate e periodiche, alto livello di interazione reciproca tra i costituenti, forma e dimensioni proprie
- mesofasi (cristalli liquidi): ordinamento parziale, moderata interazione, dimensioni proprie
- fase liquida (fluido o solido amorfo): strutture disordinate, basso livello di interazione tra i costituenti
- fase vapore o aeriforme: strutture totalmente disordinate, interazioni non rilevanti tra i costituenti, forma e dimensioni dipendenti dal contenitore

⇓

Lo stato di aggregazione dipende dalle interazioni dei costituenti (dal livello di interazione)

- dipende da T e da scambi di energia con l'ambiente circostante
- E di legame che si instaura tra i "mattoni" del materiale => più è alta E di legame e più la materia tende a condensare

→ Se c'è un guadagno di E da parte dei "mattoni", si instaurano legami e aumenta il livello delle interazioni. A seconda del guadagno energetico rapportato a T, posso avere un alto \ basso livello di interazione

→ Classificazione dei materiali:

- metalli: metalli puri, leghe
- polimeri: materiali plastici, resine, gomme
- ceramici: diamante, zaffiro, allumina, ...
- compositi

• L'atomo

→ Uno dei modelli atomici è quello di Bohr: spiega il fatto che un elettrone può acquisire E solo con salti discreti, quanti l'energia è quantizzata (può essere assorbita da e⁻) (ha dei limiti (teoria degli orbitali) ma è risolto a capire l'energia di e⁻ negli atomi di H)

$$E = -\frac{2\pi^2 m e^4}{n^2 h^2} = \frac{-13.6}{n^2}\ eV \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \ldots \quad 1\ eV = 1.602 \cdot 10^{-19}\ J$$

→ L'energia che l'elettrone può avere è dipendente da un numero intero n → con la meccanica quantistica si capisce che l'elettrone è una funzione densità di probabilità di trovare e⁻ nello spazio

↳ ciò dipende da un numero quantico n => se n↑, i livelli successivi tendono ad avvicinarsi

⇓

Ciò vale per ogni elemento, anche se ogni elemento si differenzia per il numero di e⁻ e protoni

↳ (ognuno ha una funzione d'onda e un livello di E)

→ Ogni e⁻ è caratterizzato da 4 numeri quantici (non solo da n) e i livelli di E sono esprimibili con la combinazione dei 4 numeri quantici

→ NB: [E di legame e⁻ < 0 ⇒ se n↑, allora aumenta |E| ma E diminuisce (l'elettrone e⁻ più libero)] ~3~

→ "l" dice quante sottoregioni ci sono all'interno di n e va da 0 a n-1 (in n=1 c'è 1 sottoregione, in n=2 ho 2 sottoregioni possibili) ⇒ In realtà, anche se di poco, anche se l varia si ha una variazione di E intorno al valore definito (medio)

→ "m" = numero quantico magnetico → $-l \leq m \leq l$

→ numero quantico di spin = $\pm 1/2$ → verso di rotazione dell'elettrone intorno al proprio asse (non è proprio così perché l'~~elettrone~~ elettrone è un'onda)

⇓

[Ogni e⁻ ha una quaterna di numeri n, l, m, spin e Pauli ci dice che ognuna è diversa per ogni elettrone]

NB

[Il principio di esclusione di Pauli vale per ogni sistema quantistico composto da particelle identiche

⇓

Un aggregato di più atomi è un sistema quantistico ma quando gli atomi entrano in contatto devo mettere altri numeri quantici ⇒ Devono avere tutti E ≠ e quindi si formano delle bande di energia]

→ La disposizione degli elettroni è dettata dalla minimizzazione dell'energia → ha effetto sugli orbitali d, f, ...

→ Il parziale riempimento di gusci esterni è ciò che rende più o meno reattivi certi elementi rispetto ad altri

→ Esempio:
Il Li ha un e⁻ che tende a formare interazioni perché il primo guscio scherma completamente la carica + ed in più tende ad allontanare e⁻ per repulsione (dal momento che il guscio ha carica negativa)

↳ NB: [una situazione di guscio completo rende minima l'energia]

→ Elettronegatività: è la tendenza ad accettare un elettrone per completare i gusci (o cedere)

↓

[gli elementi metallici hanno bassa elettronegatività perché tendono a liberare ioni]

↳ se n↑, aumentano le dimensioni medie dell'atomo e, in uno stesso periodo, se Z↑ le dimensioni diminuiscono (perché si ha un'acquisizione di stabilità energetica sempre maggiore)

→ [A 25°C, le interazioni che si instaurano tra atomi dello stesso tipo metallici, rispetto a quelle dei gas nobili, sono più forti ⇒ per questo motivo i metalli sono solidi e i gas nobili gassosi

↳ Inoltre, cambia anche il tipo di legame → I legami covalenti creano molecole e formano stati condensati non tanto come quelli che ne derivano dal legame metallico]



- Legami atomici primari → (i secondari sono più deboli)
  - Legame ionico (grande Δ nella elettronegatività)
  - Legame covalente (piccola Δ nella elettronegatività)
  - Legame metallico (elettronegatività praticamente identiche)

→ Il legame chimico tra gli atomi avviene poiché vi è una netta diminuzione dell'energia potenziale degli atomi nello stato legato. Ciò vuol dire che gli atomi nello stato legato sono in una condizione energetica più stabile di quella che hanno se non sono legati. In generale, i legami chimici tra gli atomi possono essere divisi in primari e secondari

→ Il tipo di legame definisce le proprietà dell'elemento → è il "collante" dei "mattoni" (atomi)

1) Legame ionico

↳ avviene tra atomi con grande Δ di elettronegatività → si formano anioni e cationi e si instaura un'attrazione elettrostatica
↳ i due si avvicinano fino a che le nubi elettroniche non si "toccano" per respingersi ⇒ si ha quindi una posizione di equilibrio (quella del legame)

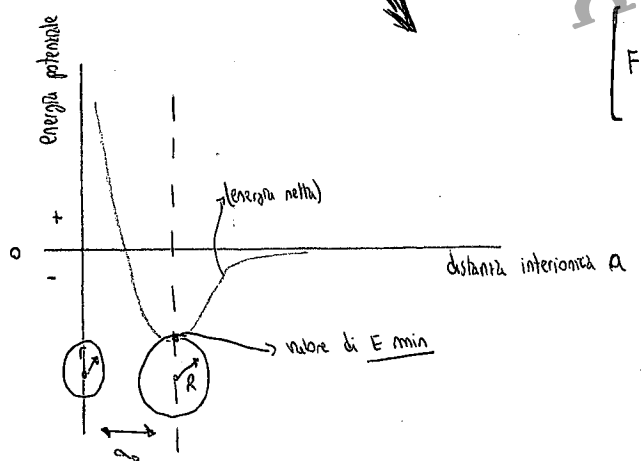
⇒ Gli elettroni vengono trasferiti dagli atomi degli elementi elettropositivi agli atomi degli elementi elettronegativi ⇒ Avviene il passaggio di elettroni per raggiungere la situazione a minore energia (quindi il legame avviene se la coppia di ioni ha un'energia globale minore rispetto agli ioni separati)

→ Il legame è NON direzionale ma è privilegiato
↳ per questo motivo si possono formare legami multipli, quindi aggregati ionici e quindi il materiale
↳ gli elettroni che si spostano vengono sottratti agli orbitali di una specie

⇒ NB: [Le specie devono essere diverse tra loro] ↳ [ciò è alla base del comportamento elastico del materiale]

⇒ NB: [L'Energia potenziale ha un profilo di una curva con un minimo (al variare della distanza interionica) dal momento che si ha la presenza di una posizione di equilibrio → ciò poiché se sono troppo vicini gli atomi c'è forza repulsiva (tra i nuclei e tra le nubi di e⁻) (infatti $\frac{du}{dr} < 0$), mentre invece se sono lontani prende la forza attrattiva ($\frac{du}{dr} > 0$)]

[Energia potenziale con profilo di buca semiinfinita e semi aperta]



{r = catione, R = anione} ⇓ ($a_0 = r + R$)

$$F = -\frac{|z_1||z_2|e^2}{4\pi\varepsilon_0 a^2} + \frac{nb}{a^{n+1}}$$

z_1, z_2 = numero di e⁻ rimossi o aggiunti
e = carica elementare
a = distanza interionica
ε_0 = permittività dielettrica vuoto
n, b = costanti

2) Legame covalente → (Il profilo di energia potenziale è come quello del legame ionico)

↳ considerando l'esempio di H_2, H tende a perdere un e⁻ oppure ad acquistarne 1 => due H mettono a comune l'orbitale (zona con più alta densità di probabilità di trovare e⁻) per raggiungere la configurazione vantaggiosa

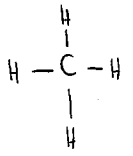
⇓ Si ottiene quindi una distanza interatomica di equilibrio a_0 nella molecola di H_2, in corrispondenza del minimo di E potenziale

→ In un legame covalente quindi, ciascuno dei 2 atomi contribuisce con e⁻ a formare un legame costituito da una coppia di elettroni e le energie dei due atomi uniti dal legame diminuiscono (diventano quindi più stabili) a causa della interazione elettronica. Nel legame covalente possono formarsi legami multipli tra coppie di e⁻ di un atomo con atomi dello stesso tipo o diversi

→ Il legame e⁻ una condivisione ristretta, direzionale e privilegiata (gli e⁻ rimangono confinati nella zona)

↳ (la condivisione e⁻ basata su una similarità di elettronegatività

→ (Nel legame CH_4 può essere:



~> C instaura 4 legami covalenti mettendo e⁻ in condivisione con H)



NB: All'aumentare della massa molecolare aumenta il punto di fusione (Pf)

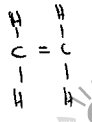
(CH_4 ; C_2H_6 ; C_4H_{10})

CH_4 Pf = -183°C ; C_2H_6 Pf = -172°C ; C_4H_{10} Pf = -135°C

↳ Pf bassi indicano che per avere solidi devo scendere di T => poiché la natura del legame covalente è tale che l'energia è tale da non far interagire molecole tra loro poiché è minima

↳ sono libere di muoversi => gas

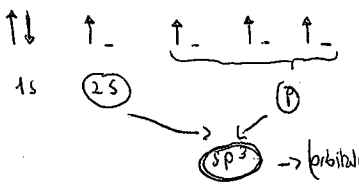
NB: All'aumentare dell'intensità del legame C-C aumenta il Pf

↳ C_2H_4 ->  Pf = -169,4°C

C_2H_2 ->  Pf = -81.8°C

→ Nel C, quello che succede per portarsi ad E minore è che, anziché riempire 2s, si preferisce disporsi in modo tale da raggiungere una configurazione ibridizzata -> non si distinguono s e p ma si formano orbitali ibridizzati e quindi si ottengono geometrie particolari (tetraedrica per sp^3)

↳



-> (orbitale ibridizzato)