

H1: Materialen

1.1 opdeling op basis van functionele eigenschappen

metalen	= sterk, vervormbaar, elektrisch geleidbaar, onstabiel in chemisch agressieve milieus
keramische materialen	= slecht thermisch en elektrisch geleidbaar, breekbaar, stabiel in chemisch agressieve milieus >> vb: vuurvast materiaal in extreem warme industriële ovens
glazen	= gelijkaardig aan keramische materialen, maar laten licht door
polymeren / plastics	= vervormbaar, chemisch inert
composieten	= combinatie van vorige groepen > vb: vezelsterke polymeren / beton
halfgeleiders	= materialen die nog goede geleiders nog goede isolatoren zijn > vertonen eigenschappen gelijkaardig aan keramische materialen

1.2 opdeling op basis van bindingtype

1.2.1 ionaire binding

ionaire binding	<p>= binding door aantrekking tss positieve en negatieve ionen > binding is niet-gericht, ie: positief ion zal elk aangrenzend negatief ion aantrekken > de elektrostatische potentiële energie is dan: $U_c = \frac{Z_1 e Z_2 e}{4\pi\epsilon_0 r}$</p>
energie ve groep ionen	<p>Voor een structuur van ionen kan je de energie berekenen via: 1: kies ion en bereken totale energie op basis vd vgl met alle ionen in de groep 2: herhaal sommatie voor alle ionen in de groepen 3: deel totale energie door 2, want elk ion zal tweemaal meegeteld worden</p> <p>> voor een ionair materiaal is deze uiteindelijk van de vorm: $U_c = \alpha \frac{Z_1 e Z_2 e}{4\pi\epsilon_0 r}$ met α de Madelung-constante specifiek voor het materiaal</p> <p>Echter, er is ook repulsie wanneer de ionen te dicht bij elkaar komen > deze repulsie-energie wordt gegeven door: $U_{rep} = \frac{B}{r^n}$</p> <p>>> dan is de totale energie: $U_{tot} = -\frac{Z^2 e^2 \alpha N_a}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B N_a}{r^n}$</p>
evenwichts-energie	<p>In evenwicht zullen de krachten elkaar compenseren en hebben we dus: $\frac{dU_{tot}}{dr} = \frac{Z^2 e^2 \alpha N_a}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{n B N_a}{r^{n+1}} = 0$</p> <p>of dus, met r_0 de evenwichts-afstand: $U_{tot}^{(0)} = -\left(\frac{Z^2 e^2 \alpha N_a}{4\pi\epsilon_0 r_0}\right)\left(1 - \frac{1}{n}\right)$</p> <p>>> atomen in een vastestof bevinden zich op evenwichtsposities in energiminimum > er moet energie toegevoegd worden om de atomen uit hun evenwichtspos. te verplaatsen</p> <p>in evenwicht hebben we bvb voor NaCl: $r_0 = r_{Na^+} + r_{Cl^-}$</p>

1.2.2 covalente binding																																																			
covalente binding	= binding waarbij valentie-elektronen worden gedeeld tss atomen > directionele binding																																																		
flexibiliteit van covalente binding	1: polymeren = aaneenschakeling van C en H in covalente binding > elke molecule redelijk neutraal geladen > zwakke interacties > laag smeltpunt 2: diamant = grid van C-atomen die allemaal verbonden zijn via covalente binding > één grote verbonden molecule > hoge hardheid en hoog smeltpunt																																																		
1.2.3 de metaalbinding																																																			
metaalbinding	= delen van elektronen, maar niet-directionele binding (in tegenstelling tot covalent) > valentieelektronen zijn gedelokaliseerd > ie: e ⁻ zijn niet gelokaliseerd aan één of twee atomen, maar aan meerdere > hoge elektrische geleidbaarheid																																																		
1.2.4 van der Waalse binding en waterstofbinding																																																			
vander Waalse binding	e ⁻ zijn gedelokaliseerd rondom kern > fluctuaties in dipoolmoment > induceert dipoolmoment in naburig atoom > aantrekking volgens: $U_{tot} = -\frac{K_{att}}{r^6} + \frac{K_{rep}}{r^{12}}$ >> vb: argon																																																		
binding met permanente dipolen	Bij permanente dipolen kunnen deze interacties tot moleculen leiden > vb: water																																																		
1.2.5 opdeling volgens bindingstype																																																			
opdeling via bindingstype	we kunnen nu de materialen opdelen via bindingstype > echter, in één materiaal kunnen meerdere bindingstypes voorkomen <table><tr><th colspan="10">Kristalstructuren</th></tr><tr><th colspan="8">Centrale binding tussen de structurele eenheden</th><th colspan="2">Gerichte binding tussen de structurele eenheden</th></tr><tr><th colspan="3">Ionair</th><th colspan="2">Metallische</th><th colspan="3">van-der-Waals</th><th colspan="2">covalent</th></tr><tr><th>AB</th><th>AX</th><th>AY</th><th>AA</th><th>AB</th><th>AA</th><th>ZZ</th><th>ZZ'</th><th>AA</th><th>AB</th></tr><tr><td>2 of meerdere elementen</td><td>met X een molecuulair ion</td><td>met Y een complex ion</td><td>1 type element</td><td>2 of meerdere elementen</td><td>1 of 2 type elementen</td><td>1 type molecule</td><td>2 of meerdere moleculen</td><td>1 type element</td><td>2 of meerdere elementen</td></tr></table> >> echter: ionaire, vanderwaals en metallische bindingen hebben centrale kracht op atoom > covalente binding heeft gerichte kracht	Kristalstructuren										Centrale binding tussen de structurele eenheden								Gerichte binding tussen de structurele eenheden		Ionair			Metallische		van-der-Waals			covalent		AB	AX	AY	AA	AB	AA	ZZ	ZZ'	AA	AB	2 of meerdere elementen	met X een molecuulair ion	met Y een complex ion	1 type element	2 of meerdere elementen	1 of 2 type elementen	1 type molecule	2 of meerdere moleculen	1 type element	2 of meerdere elementen
Kristalstructuren																																																			
Centrale binding tussen de structurele eenheden								Gerichte binding tussen de structurele eenheden																																											
Ionair			Metallische		van-der-Waals			covalent																																											
AB	AX	AY	AA	AB	AA	ZZ	ZZ'	AA	AB																																										
2 of meerdere elementen	met X een molecuulair ion	met Y een complex ion	1 type element	2 of meerdere elementen	1 of 2 type elementen	1 type molecule	2 of meerdere moleculen	1 type element	2 of meerdere elementen																																										
gelijkenis van opdeling	vergeleken met vorig opdelingstype vinden we: metallische binding -> metalen ionair + covalent -> keramische materialen en glazen sterk gebonden covalent + vanderwaals -> polymeren																																																		

1.3 een indeling op basis van atomische structuur

opdeling op basis van afstand

We kunnen structuren opdelen op basis van hun afstand $r_{ij} = |r_i - r_j|$ tss twee atomen i en j
 > we hebben dus een set van afstanden $\{r_{ij}\}$ tss gemiddeld atoom i en elk ander atoom j,...,N
 > distributie van deze interatomische afstanden wordt gegeven door:

$$\rho(r) = \langle \rho \rangle g(r) = \frac{1}{4\pi N r^2} \sum_i \sum_j \delta(r - r_{ij})$$

met $\langle \rho \rangle$ = gemiddelde deeltjesdichtheid

$\rho(r)$ = paardichtheidsdistributie

$g(r)$ = paardistributie

paardistributie $g(r)$

tel het aantal atomen dn in een smalle sferische schil met volume dv op elke afstand r van een willekeurig gekozen atoom dat als oorsprong dient.

> dan $dv = 4\pi r^2 dr$

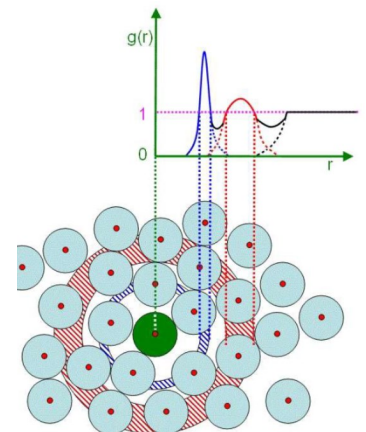
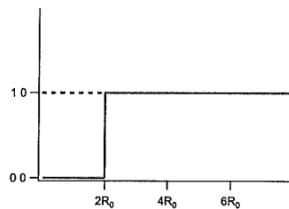
> $g(r)$ is het gemiddelde van deze aantallen voor verschillende willekeurige gekozen atomen

vb: $g(r)$ voor een ideaal gas van atomen met straal R_0

> geen enkel atoom kan zich op $< 2R_0$ bevinden

> $g(r) = 0$ voor afstanden kleiner dan $2R_0$

> hierna is de kans om een atoom te vinden cte



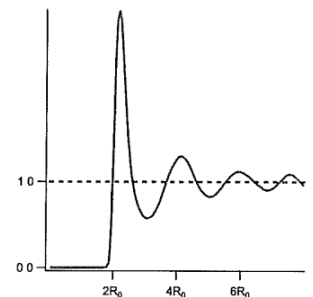
vb: $g(r)$ voor glazen en vloeistoffen

$g(r) = 0$ voor afstanden kleiner dan $2R_0$

> eerste piek het grootst, de gem afstand tot dichtste buren

> volume-integraal onder deze piek is gelijk aan gem. aantal dichtste naburen $\langle NN \rangle$:

$$\langle NN \rangle = \langle \rho \rangle \int_{\text{eerste piek}} g(r) 4\pi r^2 dr$$



vb: $g(r)$ voor goud

reeks scherpe pieken met hoge intensiteit:

> heel andere atoomstructuur vgl met glas

> kristallijne structuur

