

INGEGNERIA MECCANICA

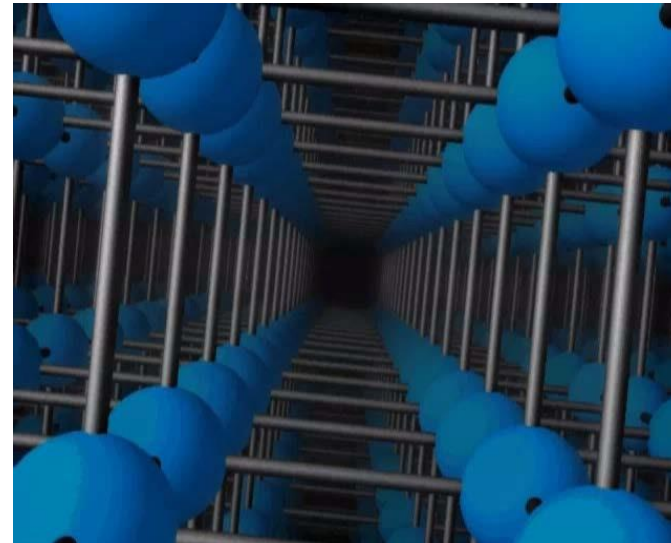
CORSO DI TECNOLOGIA DEI MATERIALI

STRUTTURA CRISTALLINA DEI MATERIALI

INGEGNERIA MECCANICA - CORSO DI TECNOLOGIA DEI MATERIALI

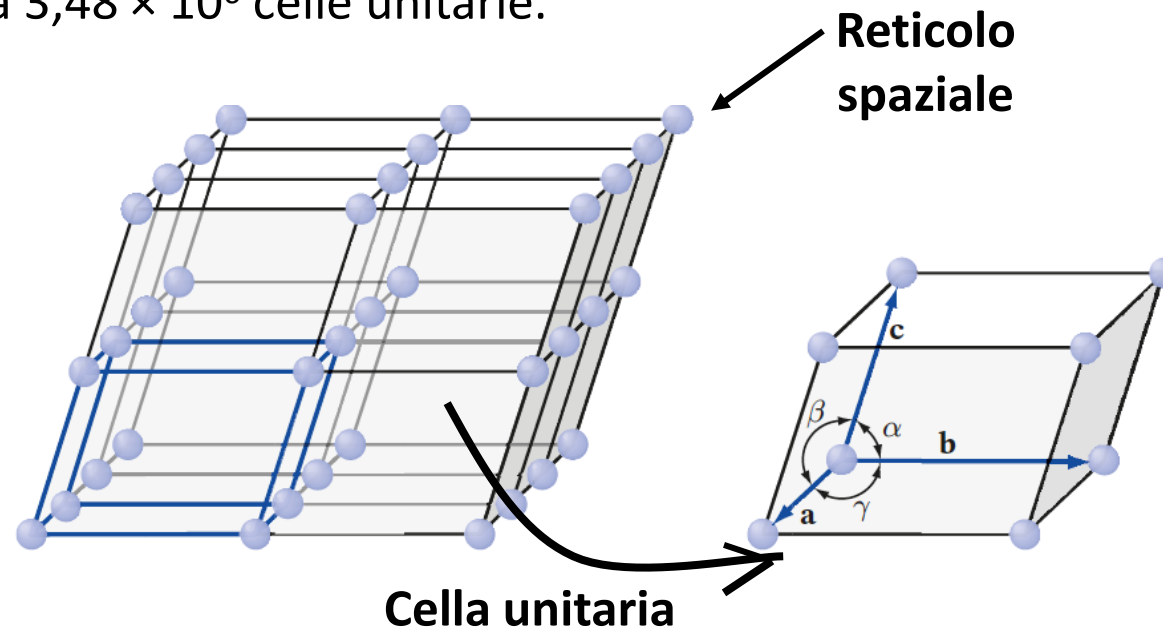
Reticolo Spaziale e Celle Unitarie

- Nella maggior parte dei solidi metallici e in alcune ceramiche, gli atomi sono disposti in uno schema tridimensionale ripetitivo.
- La disposizione ripetitiva degli atomi può essere rappresentata da una rete immaginaria di linee, con atomi all'intersezione delle linee, chiamata *reticolo spaziale*.
- I solidi con la suddetta caratteristica possiedono un ordine a lungo raggio (LRO) o una struttura cristallina e sono chiamati *solidi cristallini*.
- Le proprietà di questi solidi sono influenzate dalla loro struttura cristallina e dalla forza di legame tra gli atomi.
- Gli atomi dei materiali senza struttura cristallina sono disposti solo in ordine a corto raggio (SRO) e sono chiamati *amorfi*



Cella Unitaria

- La *cella unitaria* è quel blocco di atomi che si ripete per formare il reticolo spaziale, come quello delineato in rosso qui sotto
- Una cella unitaria può essere considerata la più piccola suddivisione del reticolo che mantiene le caratteristiche del cristallo complessivo.
- Le celle unitarie sono piccole. Ad esempio, se le celle unitarie del ferro sono allineate una accanto all'altra in 1 mm, la lunghezza conterrà $3,48 \times 10^6$ celle unitarie.

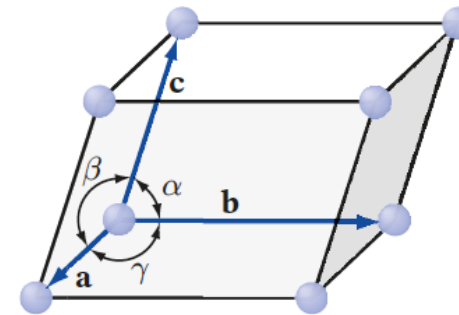


Sistemi Cristallini e Reticoli di Bravais

Solo sette diversi tipologie di celle unitarie sono necessarie per formare tutti i reticoli:

- Cubica, Tetragonale, Ortorombica, Romboedrica, Esagonale, Monoclina e Triclina

Le celle unitarie sono definite dalle lunghezze assiali a , b e c e dagli angoli interassiali α , β e γ .



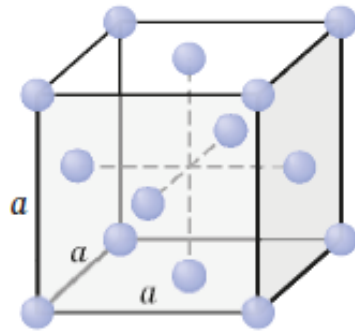
- In accordo con Bravais (1811-1863), 14 celle unitarie possono descrivere tutte le possibili reti di reticolo cristallino

Tipi di celle unitarie

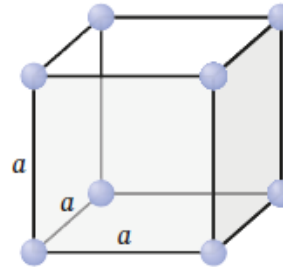
- Cella unitaria cubica

- $a = b = c$

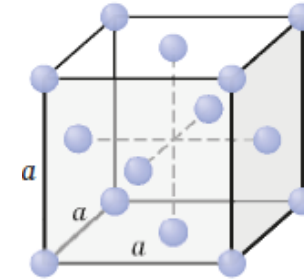
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



A facce centrate



Semplice

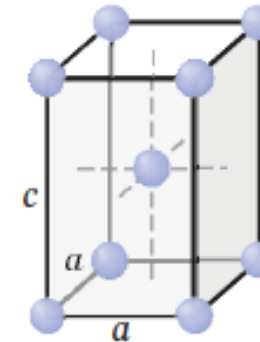
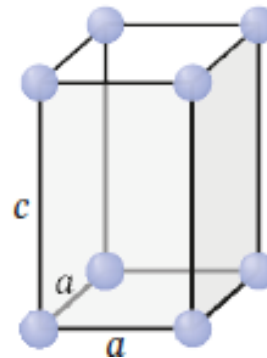


A corpo centrato

- Tetragonale

- $a = b \neq c$

- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

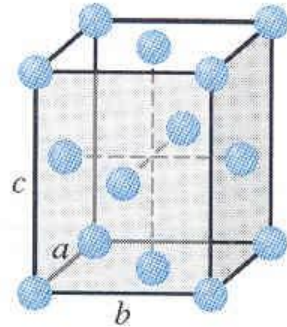


Tipi di celle unitarie

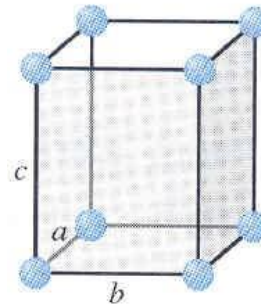
- **Ortorombica**

- $a \neq b \neq c$

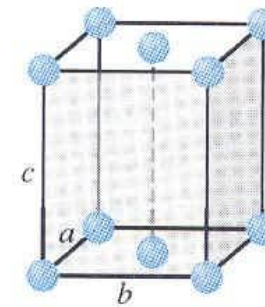
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



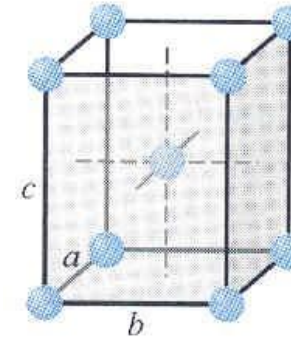
A facce centrate



Semplice



A basi centrate

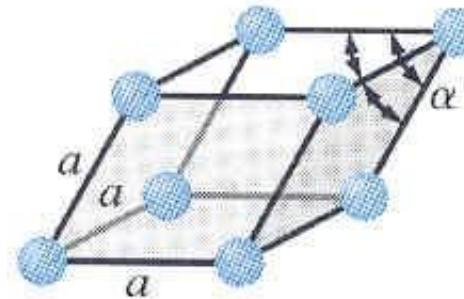


A corpo centrato

- **Romboedrica**

- $a = b = c$

- $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



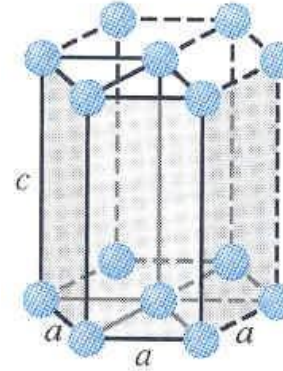
Semplice

Tipi di celle unitarie

- **Esagonale**

- $a \neq b \neq c$

- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

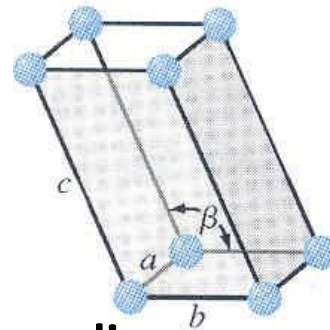


Semplice

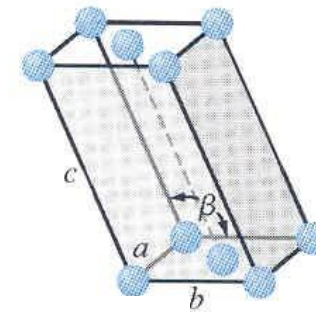
- **Monoclina**

- $a \neq b \neq c$

- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



Semplice

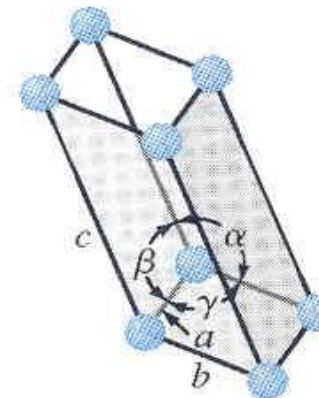


A basi centrate

- **Triclina**

- $a \neq b \neq c$

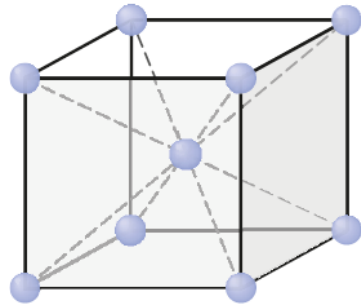
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



Semplice

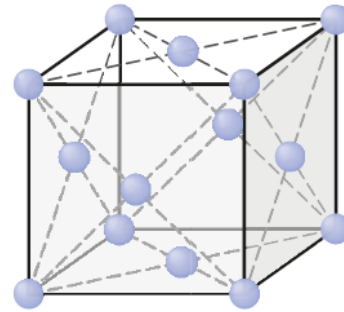
Principali Strutture Cristalline Metalliche

- Il 90% dei metalli ha struttura cristallina Cubica a Corpo Centrato (CCC), Cubica a Facce Centrate (CFC) o Esagonale Compatta (EC)



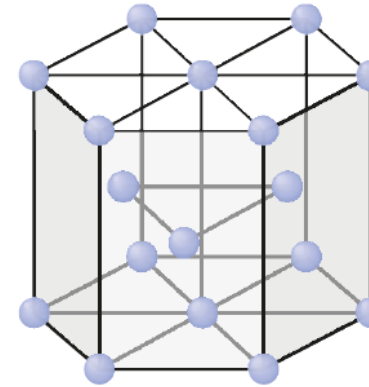
(a)

Struttura CCC



(b)

Struttura CFC



(c)

Struttura EC

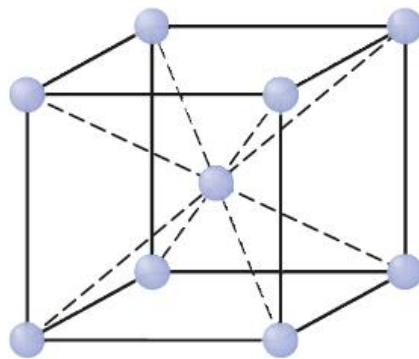
Durante la cristallizzazione, quando gli atomi si avvicinano e si legano strettamente tra loro viene rilasciata energia. Pertanto, le strutture densamente impaccate esistono in stati di energia inferiore e sono più stabili.

Struttura Cristallina Cubica a Corpo Centrato (CCC)

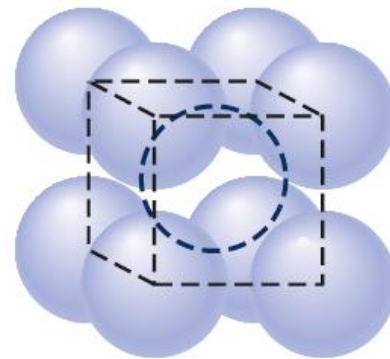
Lo schema di una cella unitaria CCC è mostrato nella Figura a. In questa cella unitaria, le sfere solide rappresentano i centri in cui si trovano gli atomi e indicano chiaramente le loro posizioni relative.

Se rappresentiamo gli atomi in questa cella come sfere rigide, la cella unitaria appare come mostrato nella Figura b.

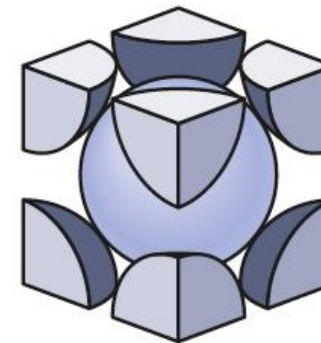
Se isoliamo solo la porzione di atomi all'interno della cella elementare, otteniamo il modello mostrato in Figura c



(a)



(b)



(c)

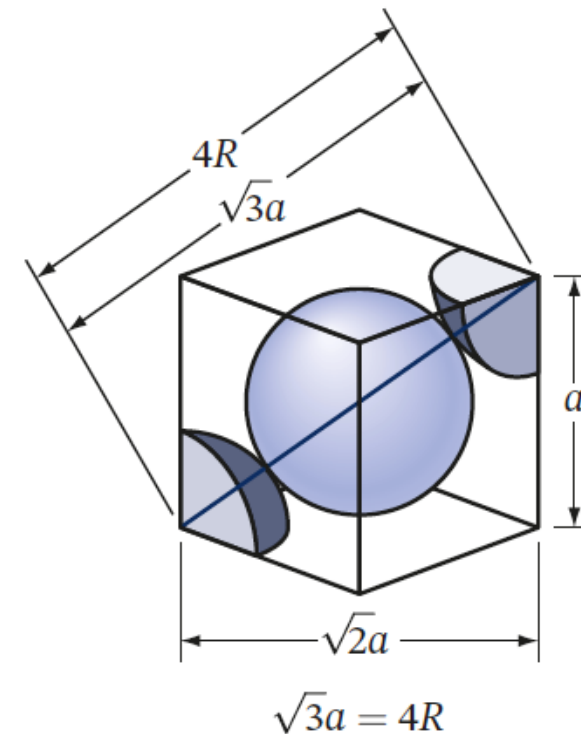
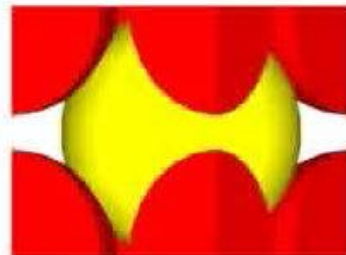
Struttura Cristallina Cubica a Corpo Centrato (CCC)

Il cromo (Cr), il ferro (Fe), il tungsteno (W) e il tantalio (Ta) sono esempi di metalli con strutture cristalline CCC.

Le celle unitarie CCC sono identificate in modo univoco da una costante reticolare a

Nella cella unitaria

- Le lunghezze assiali sono uguali $a = b = c$
- Gli angoli intraassiali $\alpha = \beta = \gamma$ sono di 90°
- Ci sono 2 atomi/cella unitaria (1 al centro + 8 (1/8) angoli)
- La coordinazione # è 8, ogni atomo ha 8 vicini



Struttura Cristallina CCC

Gli atomi nella cella unitaria CCC si contattano tra loro attraverso la diagonale del cubo, quindi la relazione tra la lunghezza assiale a e il raggio atomico R è

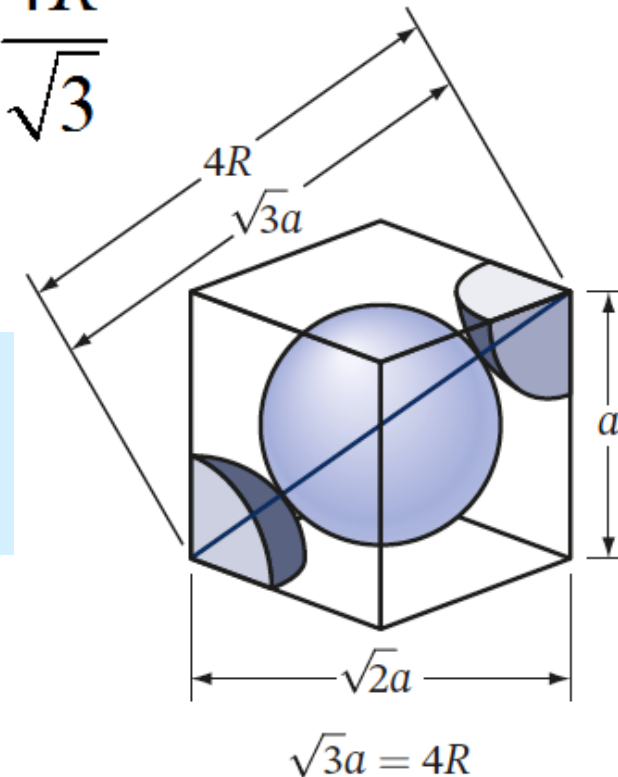
$$\sqrt{3}a = 4R \quad \text{o} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

Come esempio, per il ferro CCC con raggio atomico $R = 0,124 \text{ nm}$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} = \frac{4(0.124 \text{ nm})}{\sqrt{3}} = 0.287 \text{ nm}$$

Altri esempi:

per il Cromo $a = 0.289 \text{ nm}$; per il Sodio $a = 0.429 \text{ nm}$



Fattore di impacchettamento atomico della struttura CCC

Se gli atomi nella cella unitaria CCC sono considerati sfere solide, è possibile calcolare un fattore di impacchettamento atomico (APF) utilizzando l'equazione:

$$\text{Fattore di impacchettamento atomico} = \frac{\text{Volume di atomi nella cella unitaria}}{\text{Volume di cella unitaria}}$$

$$V_{\text{atomi}} = 2 \cdot \left(\frac{4\pi R^3}{3} \right) = 8.373 R^3$$

$$V_{\text{cella unitaria}} = a^3 \left(\frac{4R}{\sqrt{3}} \right)^3 = 12.32 R^3$$

$$\text{Quindi APF} = \frac{8.723 R^3}{12.32 R^3} = 0.68$$

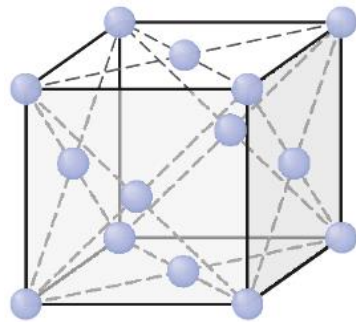
Quindi il 68% del volume della cella unitaria CCC è occupato da atomi e il restante 32% è spazio vuoto

Struttura Cristallina Cubica a Facce Centrate (CFC)

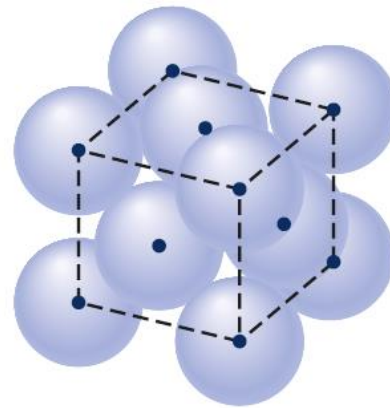
Lo schema di una cella unitaria FCF è mostrato nella Figura a. In questa cella unitaria, le sfere solide rappresentano i centri in cui si trovano gli atomi e indicano chiaramente le loro posizioni relative.

Se rappresentiamo gli atomi in questa cella come sfere rigide, la cella unitaria appare come mostrato nella Figura b.

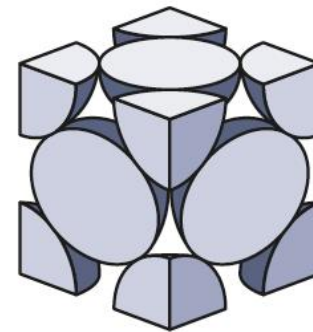
Se isoliamo solo la porzione di atomi all'interno della cella eleme



(a)



(b)



(c)

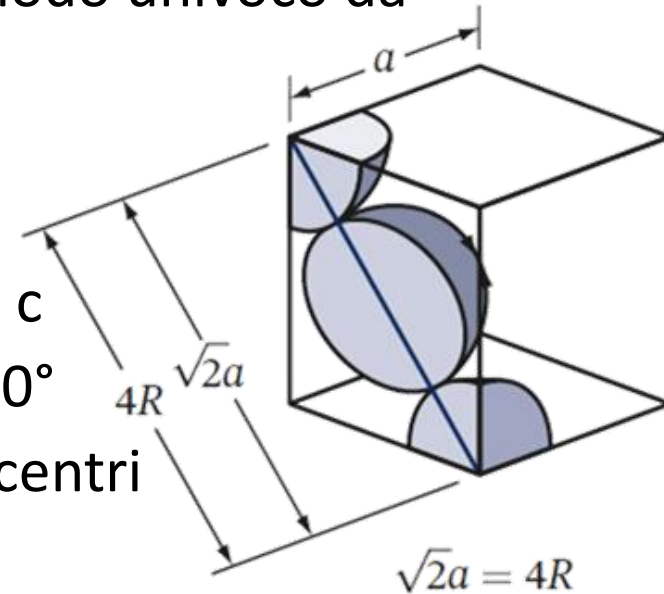
Struttura Cristallina CFC

Alluminio (Al), Rame (Cu), Nichel (Ni) e Oro (Au) sono esempi di metalli con strutture cristalline CFC.

Le celle unitarie FCC sono identificate in modo univoco da una costante reticolare a .

Nella cella unitaria,

- Le lunghezze assiali sono uguali: $a = b = c$
- Gli angoli intraassiali $\alpha = \beta = \gamma$ sono di 90°
- Ci sono 4 atomi/cella unitaria $6(1/2)$ ai centri della faccia + $8(1/8)$ agli angoli
- La coordinazione # è 12, ogni atomo ha 12 vicini



Struttura Cristallina CFC

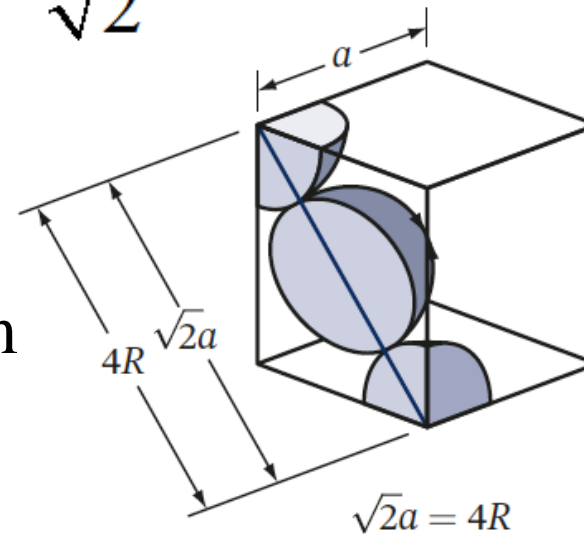
Gli atomi nella cella unitaria CFC si contattano tra loro attraverso la diagonale della faccia, quindi la relazione tra la lunghezza assiale a e il raggio atomico R è

$$\sqrt{2}a = 4R \quad \text{o} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

Ad esempio, per l'alluminio CFC con raggio atomico $R = 0,143$ nm

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = 4(0.143)/1.4142 = 0.405 \text{ nm}$$

Altro esempio: per l'Oro, $a = 0.408$



Fattore di impacchettamento atomico della struttura CFC

Se gli atomi nella cella unitaria CFC sono considerati sfere solide, è possibile calcolare un fattore di impacchettamento atomico (APF) utilizzando l'equazione:

$$\text{Fattore di impacchettamento atomico} = \frac{\text{Volume di atomi nella cella unitaria}}{\text{Volume di cella unitaria}}$$

$$V_{\text{atoms}} = 4 \cdot \left(\frac{4\pi R^3}{3} \right) = 16.746R^3$$

$$V_{\text{unit cell}} = a^3 = \left(\frac{4R}{\sqrt{2}} \right)^3 = 22.63R^3$$

$$\text{APF} = \frac{16.746 R^3}{22.63 R^3} = 0.74$$

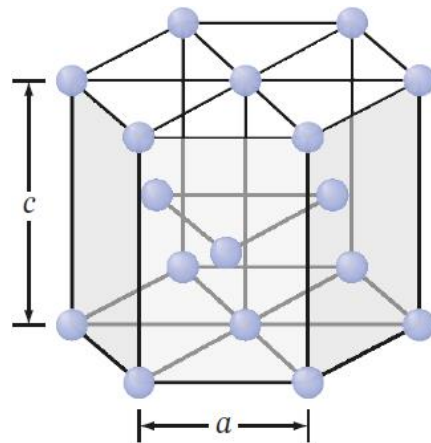
Pertanto, i metalli CFC sono imballati in modo più efficiente (74%) rispetto ai metalli CCC (68%)

Struttura Cristallina Esagonale Compatta (EC)

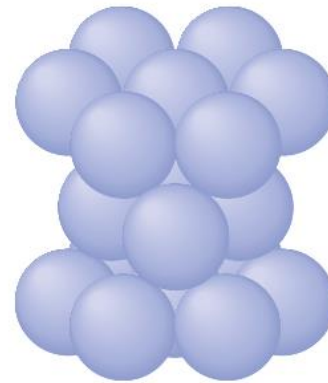
Lo schema di una cella unitaria EC è mostrato nella Figura a. In questa cella unitaria, le sfere solide rappresentano i centri in cui si trovano gli atomi e indicano chiaramente le loro posizioni relative.

Se rappresentiamo gli atomi in questa cella come sfere rigide, la cella unitaria appare come mostrato nella Figura b.

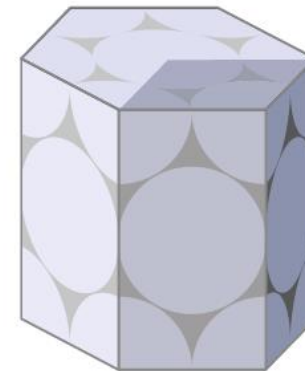
Se isoliamo solo la cella elementare primitiva, otteniamo il modello mostrato in Figura c.



(a)



(b)



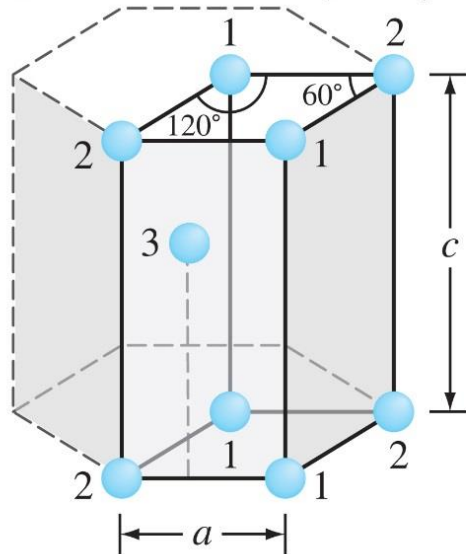
(c)

Struttura Cristallina EC

Cadmio (Cd), Zinco (Zn), Titanio (Ti) e Magnesio (Mg) sono esempi di metalli con strutture cristalline EC.

Le celle unitarie EC sono identificate in modo univoco da costanti reticolari a e c e dagli angoli interassiali α , β , e γ .

Copyright © McGraw-Hill Education. Permission required for reproduction or display.



(c)

Nella cella unitaria primitiva,

- Le lunghezze assiali non sono uguali $a = b \neq c$
- Gli angoli intraassiali $\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$
- Ci sono 2 atomi/cella unitaria primitiva $4(1/6)$ nelle posizioni "1" + $4(1/12)$ nelle posizioni "2", in totale 6 atomi
- La coordinazione # è 12, ogni atomo ha 12 vicini

Struttura Cristallina EC

a è correlato a R attraverso l'equazione $a = 2R$

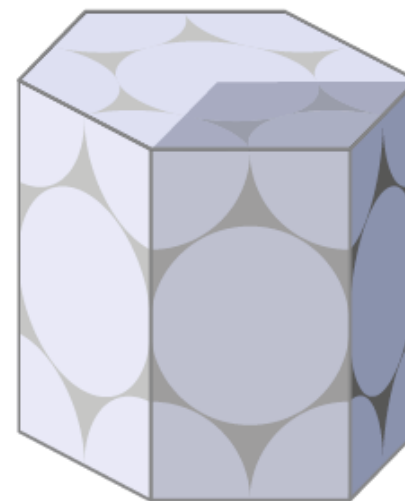
Il rapporto c/a per una struttura cristallina EC ideale costituita da sfere uniformi è 1,633.

Cd e Zn hanno rapporti c/a superiori al rapporto ideale, il che indica che gli atomi sono leggermente allungati lungo l'asse c .

Ti e Mg hanno rapporti c/a inferiori al rapporto ideale, il che indica che gli atomi sono leggermente compressi lungo l'asse c possibile è 1.633.

Esempi:

- Zinco ($a = 0.2665$ nm, $c/a = 1.85$)
- Cobalto ($a = 0.2507$ nm, $c/a = 1.62$)



Fattore di impacchettamento atomico della struttura EC

Se gli atomi nella cella unitaria EC sono considerati sfere solide, è possibile calcolare un fattore di impacchettamento atomico (APF) utilizzando l'equazione:

Fattore di impacchettamento atomico = $\frac{\text{Volume di atomi nella cella unitaria}}{\text{Volume di cella unitaria}}$

$$V_{\text{atoms}} = 4 \cdot \left(\frac{4\pi R^3}{3} \right) = 16.746R^3$$

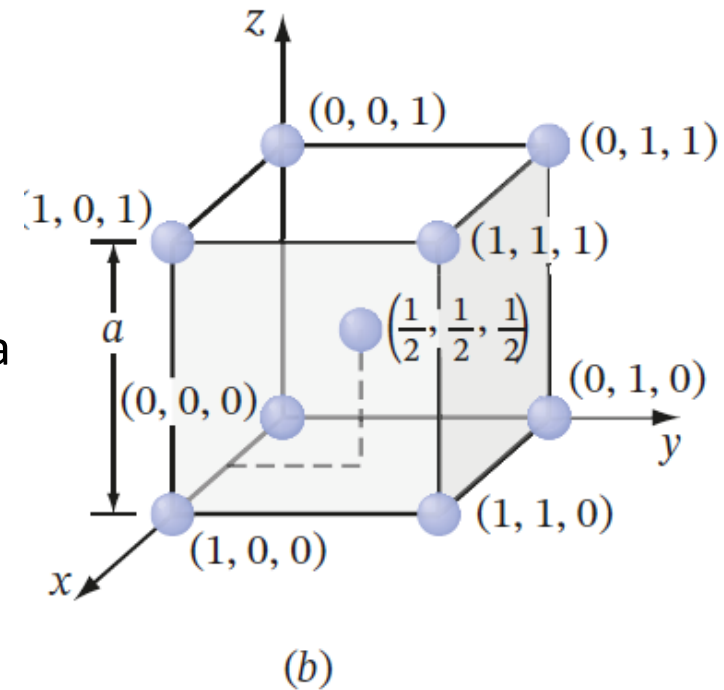
$$V_{\text{unit cell}} = a^3 = \left(\frac{4R}{\sqrt{2}} \right)^3 = 22.63R^3$$

$$\text{APF} = \frac{16.746 R^3}{22.63 R^3} = 0.74$$

Pertanto, i metalli EC sono impaccati come quelli CFC in modo più efficiente (74%) rispetto ai metalli CCC (68%).

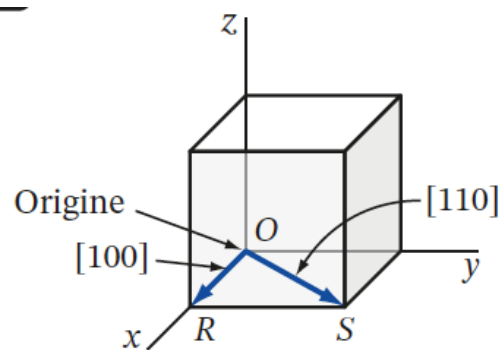
Posizioni Atomiche nelle Celle Unitarie Cubiche

- Il *sistema di coordinate cartesiane* è usato per individuare gli atomi
- In una cella unitaria cubica
 - l'asse y è la direzione verso destra.
 - l'asse x è la direzione che esce dal foglio.
 - l'asse z è la direzione verso l'alto.
 - le direzioni negative sono in direzione opposta a quelle positive.
- **Le posizioni atomiche sono individuate utilizzando le distanze unitarie lungo gli assi**

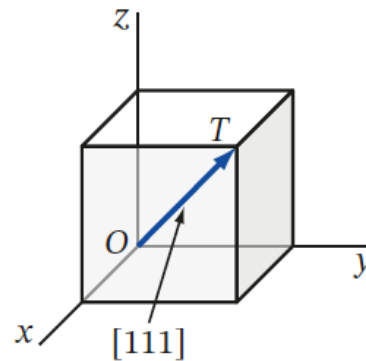


Direzioni nelle Celle Unitarie Cubiche

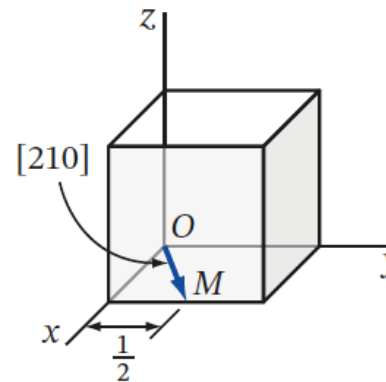
- Nei cristalli cubici, gli **indici di direzione** sono componenti di vettoriali delle direzioni scomposti lungo ciascun asse, risolte ai più piccoli interi
- Gli indici di direzione sono coordinate di posizione di cella unitaria dove il vettore di direzione emerge dalla superficie della cella, convertita ad interi



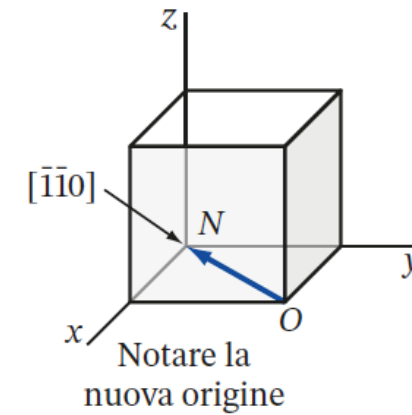
(a)



(b)

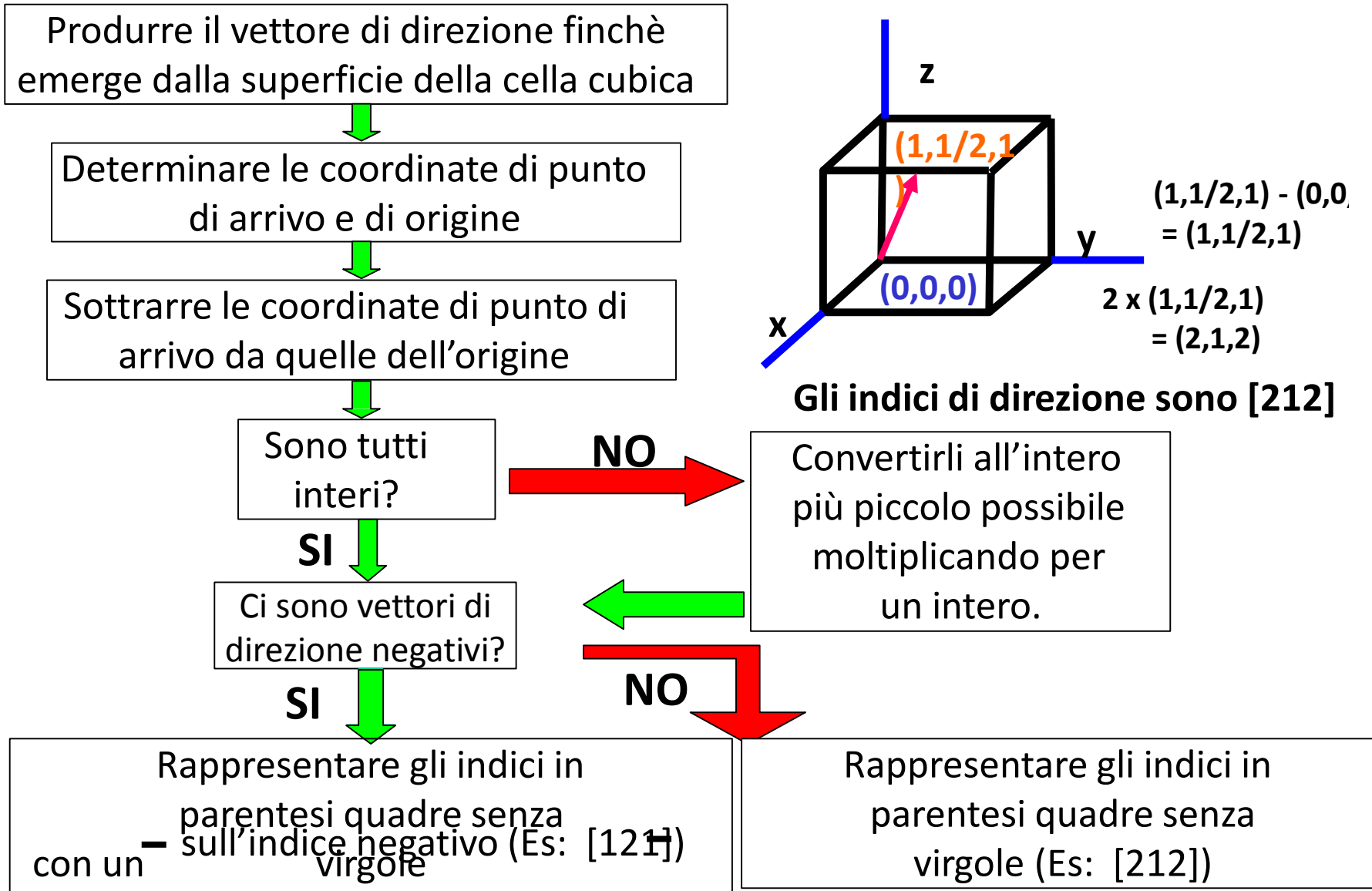


(c)



(d)

Procedura per Trovare gli Indici di Direzione



Indici di Direzione - Esempio

- Determinare gli indici di direzione di un dato vettore.

Le coordinate di origine sono $(\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4})$

Le coordinate di arrivo sono $(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

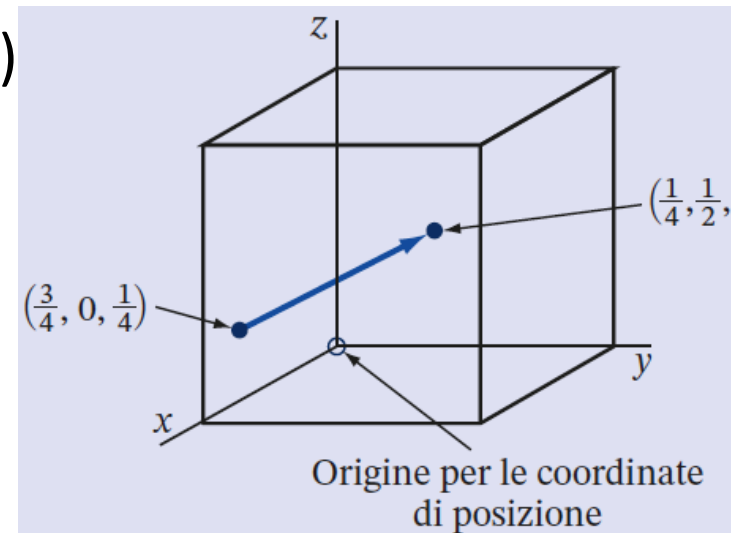
Sottraendo le coordinate di origine da quelle di arrivo:

$$(\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4}) - (\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$$

Moltiplicando per 4 per convertire tutte le frazioni in numeri interi:

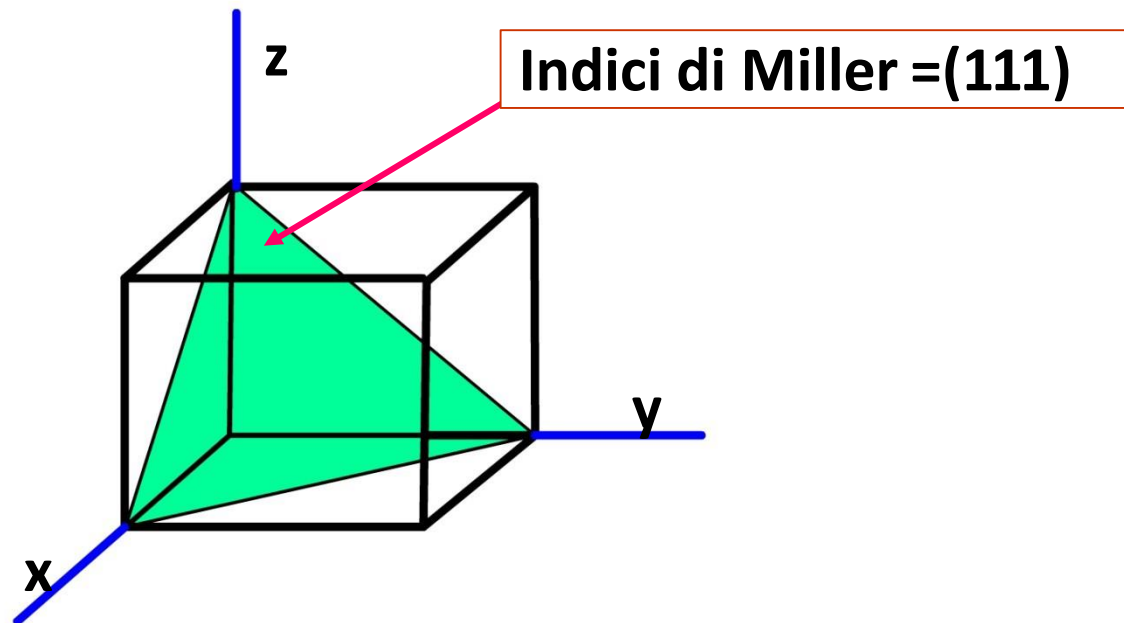
$$4 \times (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}) = (-2, 2, 1)$$

Quindi, gli indici di direzione sono $[2 \ 2 \ 1]$

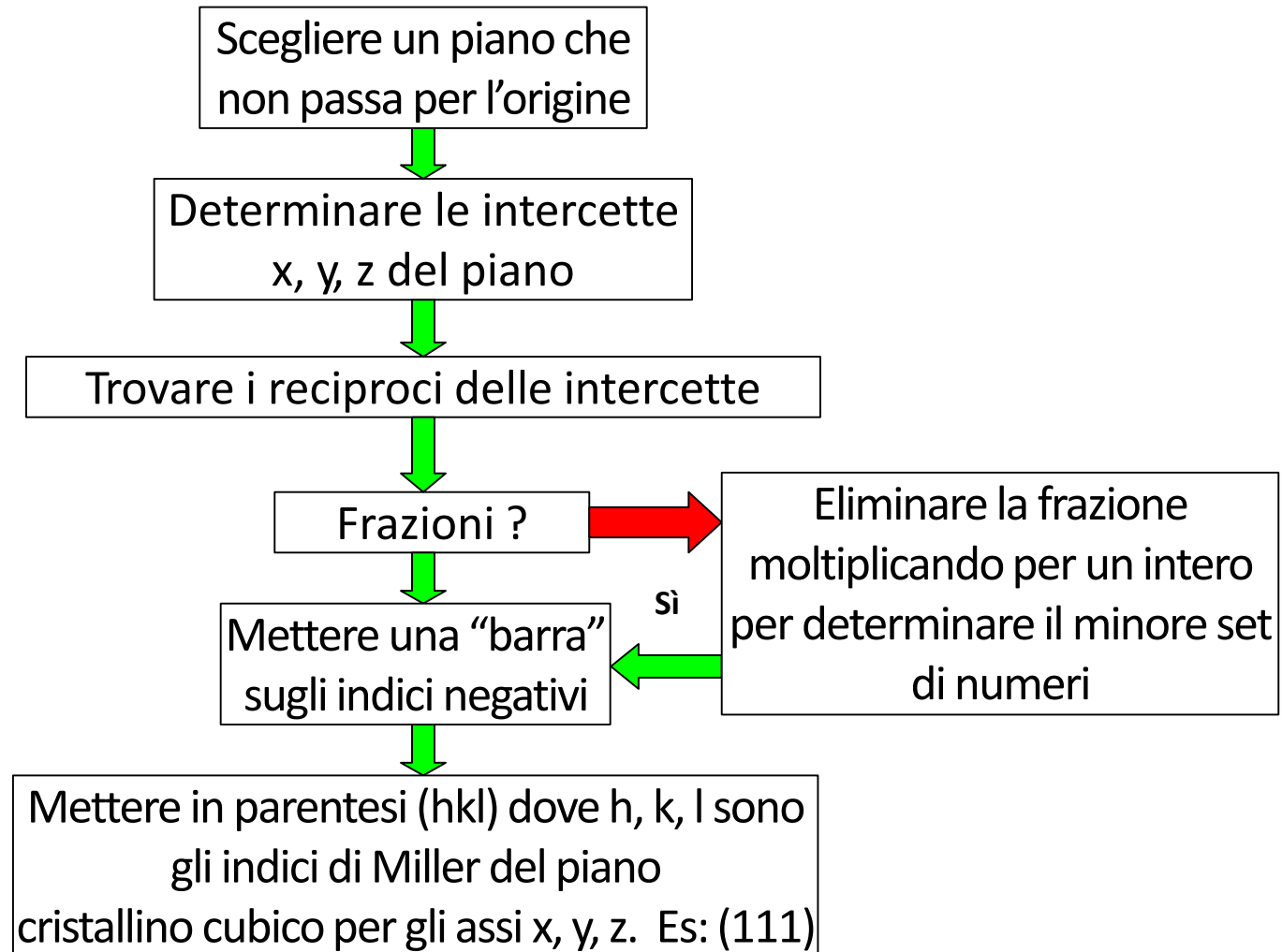


Indici di Miller

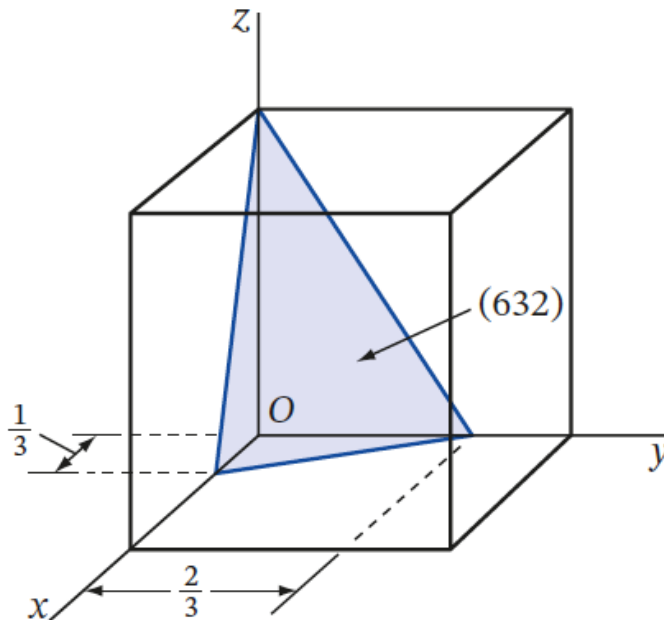
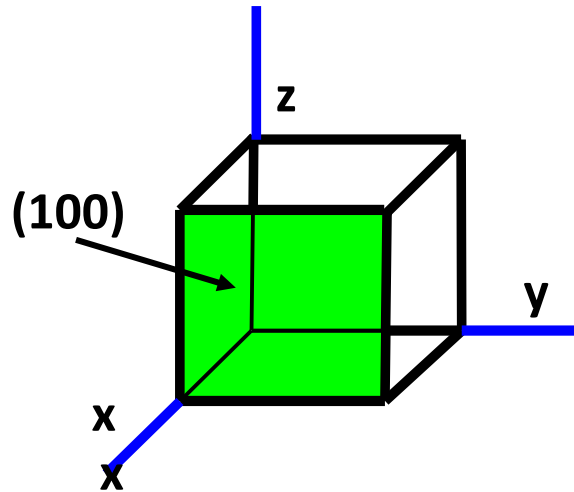
- Gli *indici di Miller* sono utilizzati per riferirsi a piani di atomi di uno specifico reticolo cristallino
- Sono i reciproci delle frazioni delle intercette del piano con gli assi cristallografici x , y , z dei tre spigoli non paralleli della cella cubica unitaria



Indici di Miller - Procedura



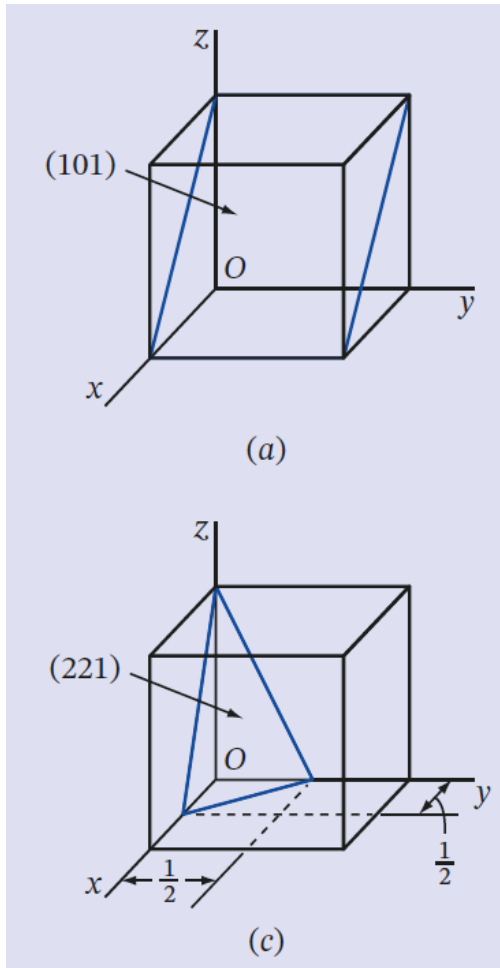
Indici di Miller - Esempi



- Le intercette del piano agli assi x, y, z sono 1, ∞ e ∞
- Prendendo i reciproci, si ottiene (1,0,0)
- Gli indici di Miller sono (100)

- Le intercette sono $\frac{1}{3}$, $\frac{2}{3}$ e 1
- Prendendo i reciproci, si ottiene (3, 3/2, 1)
- Moltiplicando per 2, si ottiene (6,3,2)
- Gli indici di Miller sono (632).

Indici di Miller - Esempi



- Diagrammare il piano (101)
Prendendo i reciproci degli indici, si ottiene $(1 \infty 1)$
Le intercette del piano sono $x = 1$, $y = \infty$ (parallelo a y) e $z = 1$

- Diagrammare il piano (2 2 1) Prendendo i reciproci degli indici, si ottiene $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1)$
Le intercette del piano sono $x = \frac{1}{2}$, $y = \frac{1}{2}$ e $z = 1$

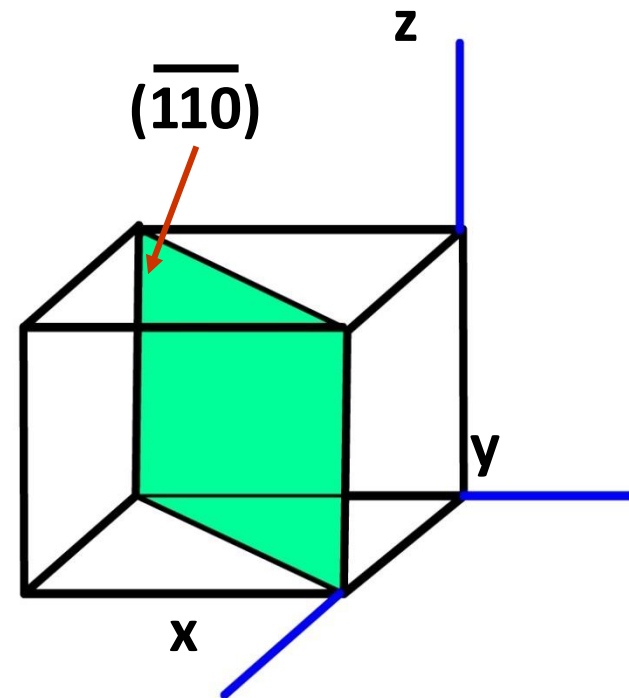
Indici di Miller - Esempi

Diagrammare il piano $(\bar{1}10)$

I reciproci sono $(1, -1, \infty)$

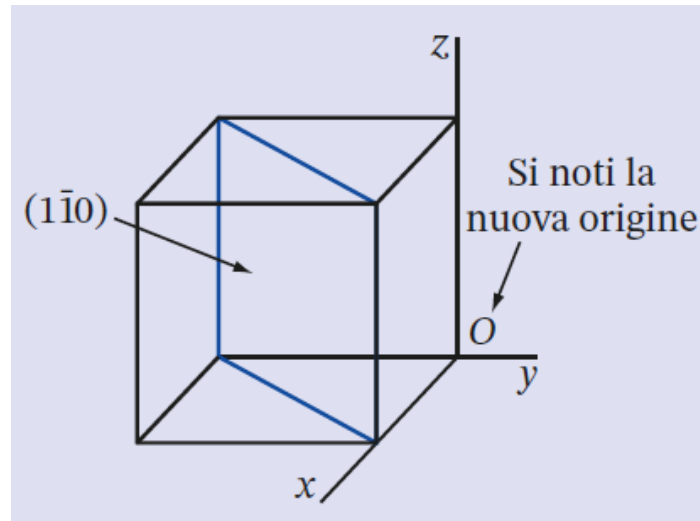
Le intercette sono $x = 1, y = -1$ e $z = \infty$ (parallela all'asse z)

Per mostrare questo piano di una singola cella unitaria si sposta l'origine lungo la direzione positiva dell'asse di 1 unità



Indici di Miller – Importante Relazione

- Gli indici di direzione di una direzione perpendicolare ad un piano del cristallo sono gli stessi degli indici di Miller del piano
- Esempio :

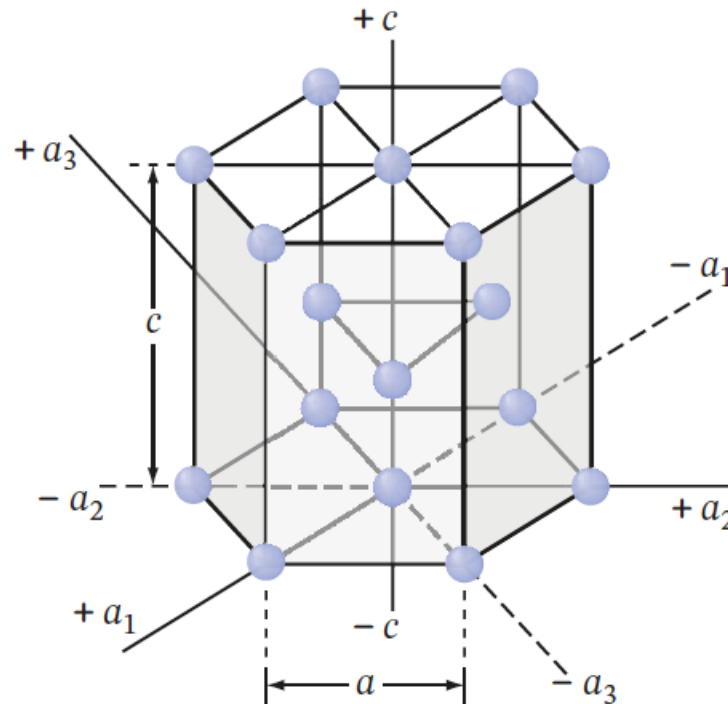


- Lo spazio interplanare tra piani paralleli vicini con gli stessi indici di Miller sono dati da

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

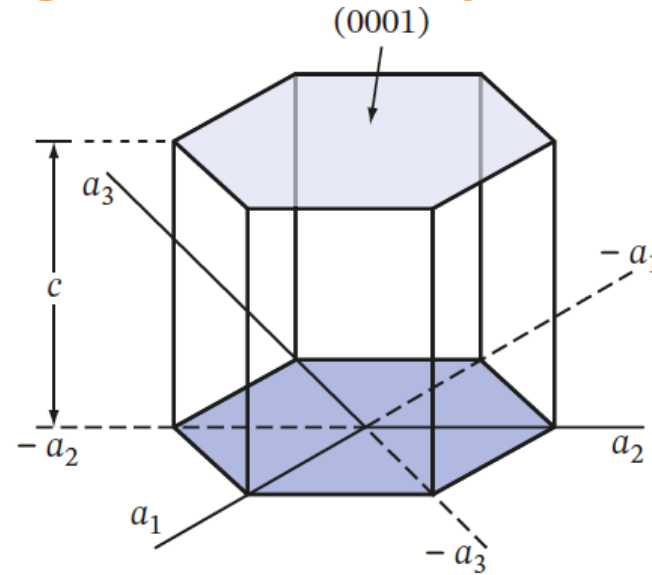
Piani e Direzioni in Celle Unitarie Esagonali

- Si usano quattro indici (hkil), detti indici *Miller-Bravais*
- Sono utilizzati quattro assi (a_1 , a_2 , a_3 e c)
- I reciproci dell'intercetta che un piano cristallino ha con gli assi a_1 , a_2 , a_3 e c danno, rispettivamente, gli indici h , k , i e l

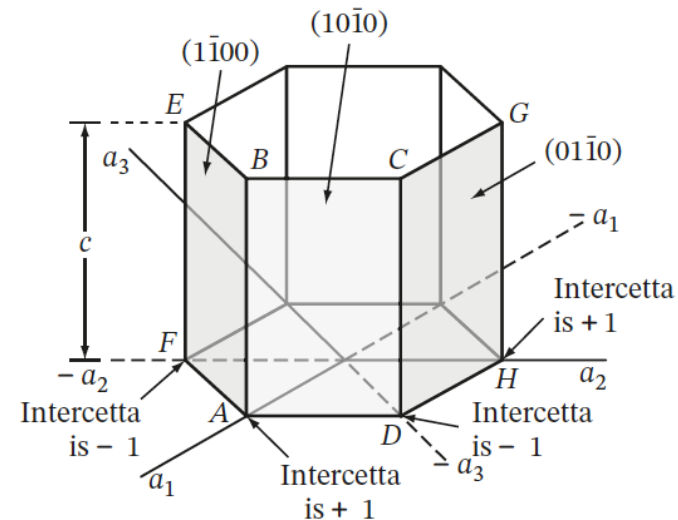


Cella Unitaria Esagonale - Esempi

- Piani basali:
 Intercette $a_1 = \infty$
 $a_2 = \infty$
 $a_3 = \infty$ $c = 1$
 $(hkli) = (0001)$



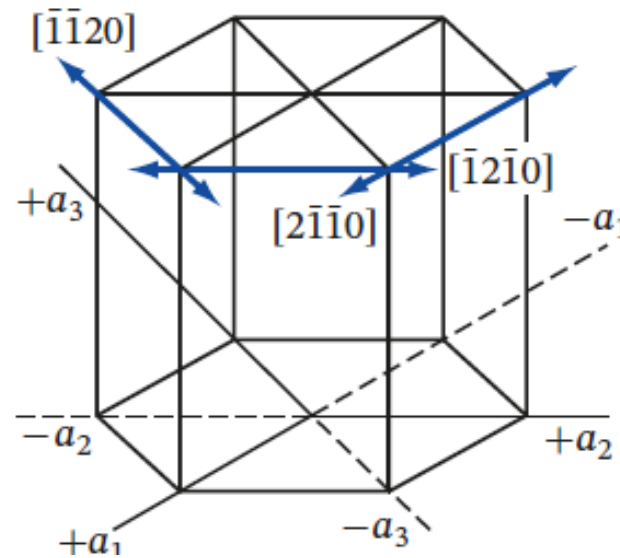
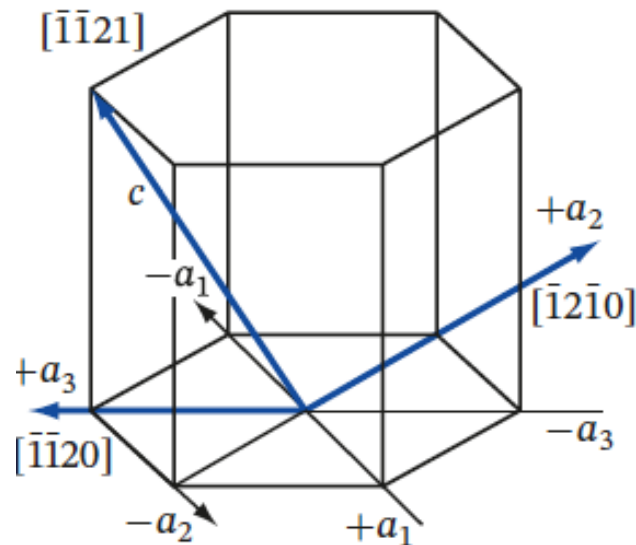
- Piani prismatici:
 Per il piano ABCD,
 Intercette $a_1 = 1$
 $a_2 = \infty$
 $a_3 = -1$
 $c = \infty$
 $(hkli) = (1010)$



Direzioni nelle Celle Unitarie EC

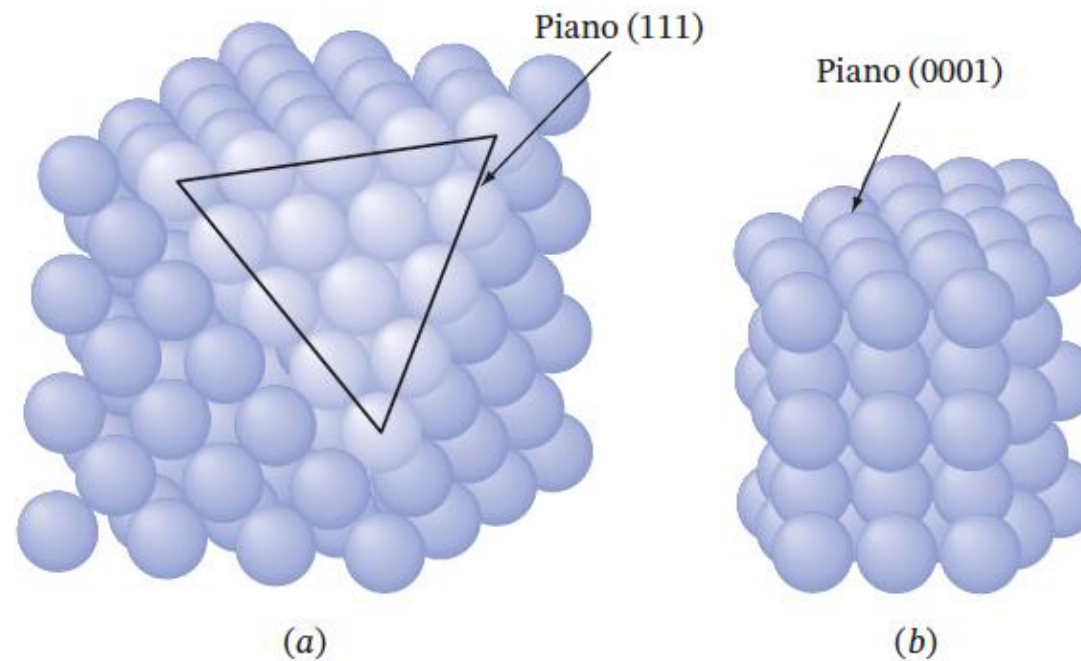
- Indicati dai 4 indici $[uvtw]$
- u, v, t e w sono i vettori reticolari, rispettivamente, nelle direzioni a_1, a_2, a_3 e c
- Esempio: per le direzioni a_1, a_2, a_3 , gli indici di direzione sono, rispettivamente,

$$[2\bar{1}\bar{1}0], [1\bar{2}\bar{1}0] \text{ e } [1\bar{1}\bar{2}0]$$



Confronto tra i cristalli CFC ed EC

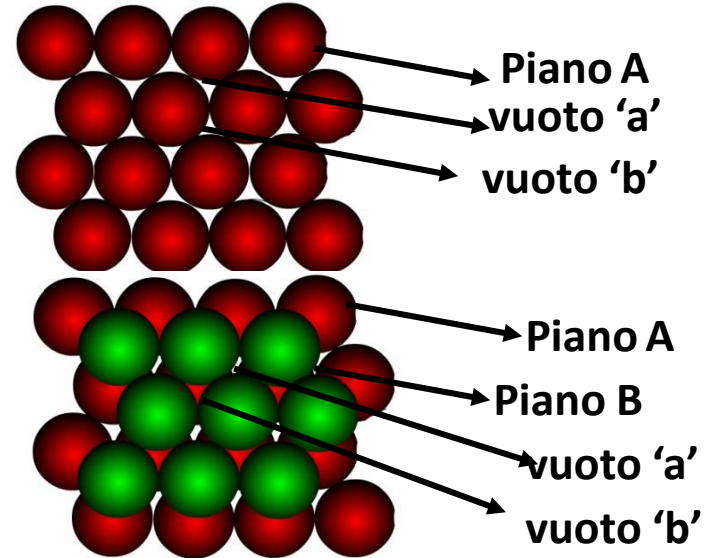
- Sia CFC che EC sono fortemente impaccati e hanno APF = 0.74
- Il cristallo CFC è fortemente impaccato nel piano (111), mentre EC nel piano (0001)



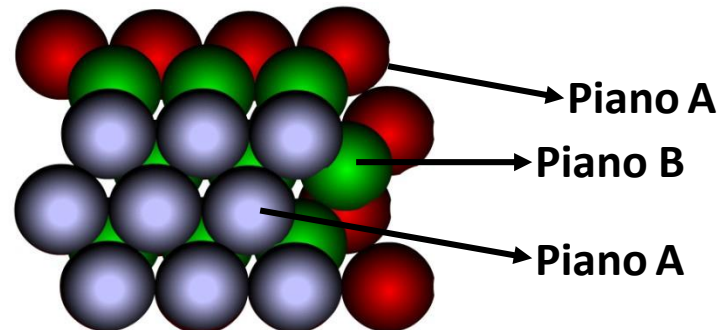
Differenze Strutturali tra EC e CFC

Si consideri un piano di atomi (Piano 'A')

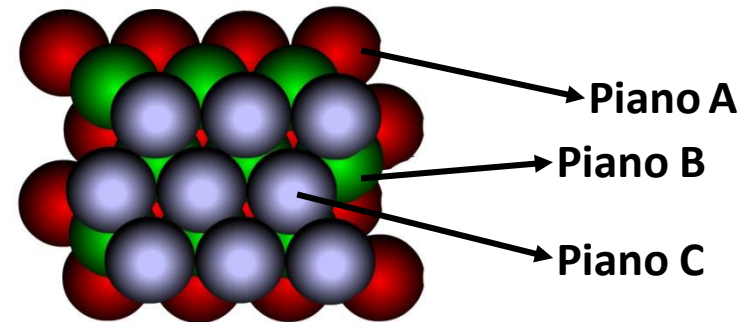
Un altro piano di atomi (piano 'B') è posto sui vuoti 'a' del piano 'A'



Il terzo piano di atomi è posto sui vuoti 'b' del piano 'B' (identico al piano 'A') → cristallo EC



Il terzo piano di atomi è posto sui vuoti 'a' del piano 'B'. Si ottiene un terzo piano C → cristallo CFC



Densità di Volume

- Densità di volume del metallo = ρ_v

$$= \frac{\text{Massa/Cella unitaria}}{\text{Volume/cella unitaria}}$$
- Esempio : il rame (CFC) ha massa atomica 63.54 g/mol e raggio atomico pari a 0.1278 nm.

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 0.1278 \text{ nm}}{\sqrt{2}} = 0.361 \text{ nm}$$

Volume di cella unitaria = $V = a^3 = (0.361 \text{ nm})^3 = 4.7 \times 10^{-29} \text{ m}^3$ La

cella unitaria CFC ha 4 atomi

Massa di cella unitaria = $m = \frac{(4 \text{ atoms})(63.54 \text{ g/mol}) \left(\frac{10^{-6} \text{ Mg}}{\text{g}} \right)}{4.7 \times 10^{23} \text{ atoms/mol}} = 4.22 \times 10^{-28} \text{ Mg}$

$$\rho_v = \frac{m}{V} = \frac{4.22 \times 10^{-28} \text{ Mg}}{4.7 \times 10^{-29} \text{ m}^3} = 8.98 \frac{\text{Mg}}{\text{m}^3} = 8.98 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

Densità Atomica Planare

- Densità atomica planare = $\rho_p =$

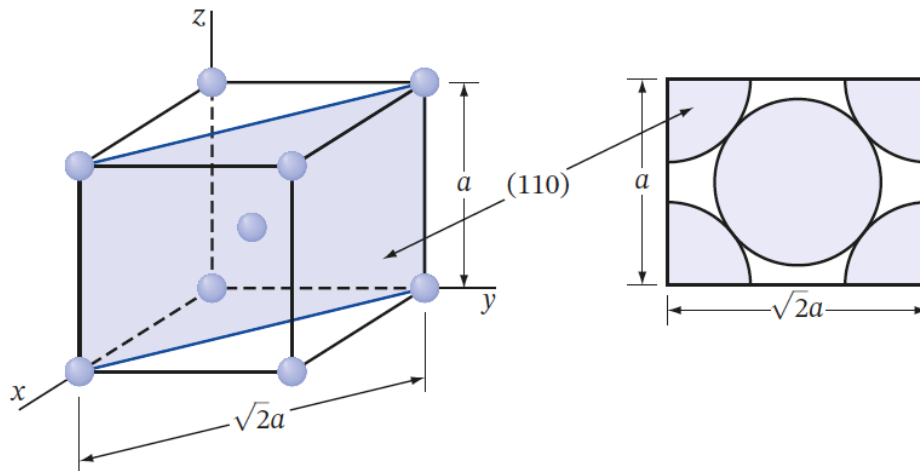
Numero equivalente di atomi i cui centri sono intersecati da un'area selezionata

Area selezionata

- Esempio : Nel ferro (CCC, $a = 0.287$), il piano (100) interseca il centro di 5 atomi (quattro $\frac{1}{4}$ e 1 atomo intero).

- Numero di atomi equivalente = $(4 \times \frac{1}{4}) + 1 = 2$ atomi

$$\text{Area del piano 110} = \sqrt{2}a \times a = \sqrt{2}a^2$$

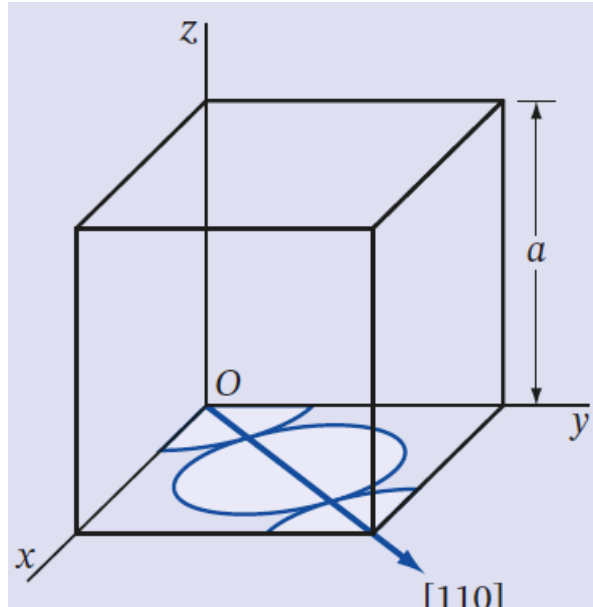


$$\rho_p = \frac{2}{\sqrt{2}(0.287)^2}$$

$$= \frac{17.2 \text{ atom}}{i \frac{\text{nm}}{2}} = \frac{1.72 \times 10^{13}}{\frac{\text{mm}}{2}}$$

Densità Atomica Lineare

- Densità atomica lineare = $\rho_l = \frac{\text{Numero di diametri atomici intersecati da una linea di lunghezza nota nella direzione di interesse}}{\text{Lunghezza della linea selezionata}}$
- Esempio : Per un cristallo di rame CFC ($a = 0.361$), la direzione $[110]$ interseca 2 semi-diametri ed un diametro intero.
- Quindi, interseca $\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1 = 2$ diametri atomici.

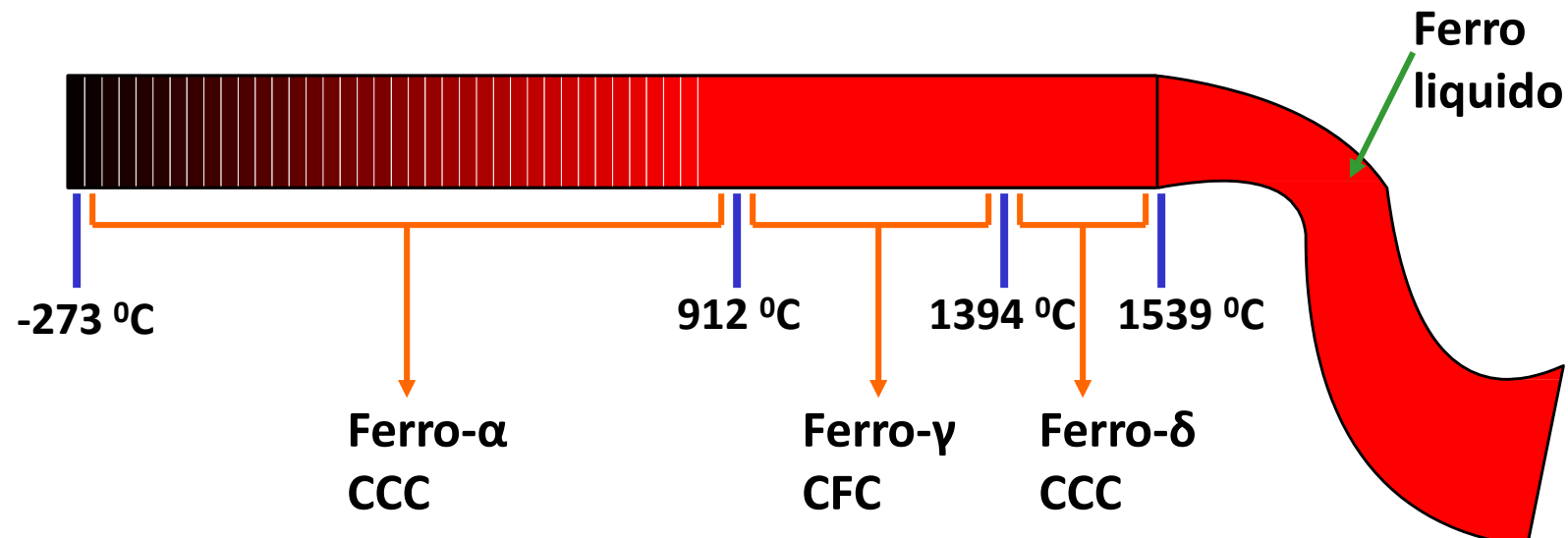


$$\text{Lunghezza di linea} = \sqrt{2} \times 0.361 \text{ nm}$$

$$\rho_l = \frac{2 \text{ atom}}{\sqrt{2} \times 0.361 \text{ nm}} = \frac{3.92 \text{ atomi}}{\text{nm}} = \frac{3.92 \times 10^6 \text{ atom}}{\text{m}}$$

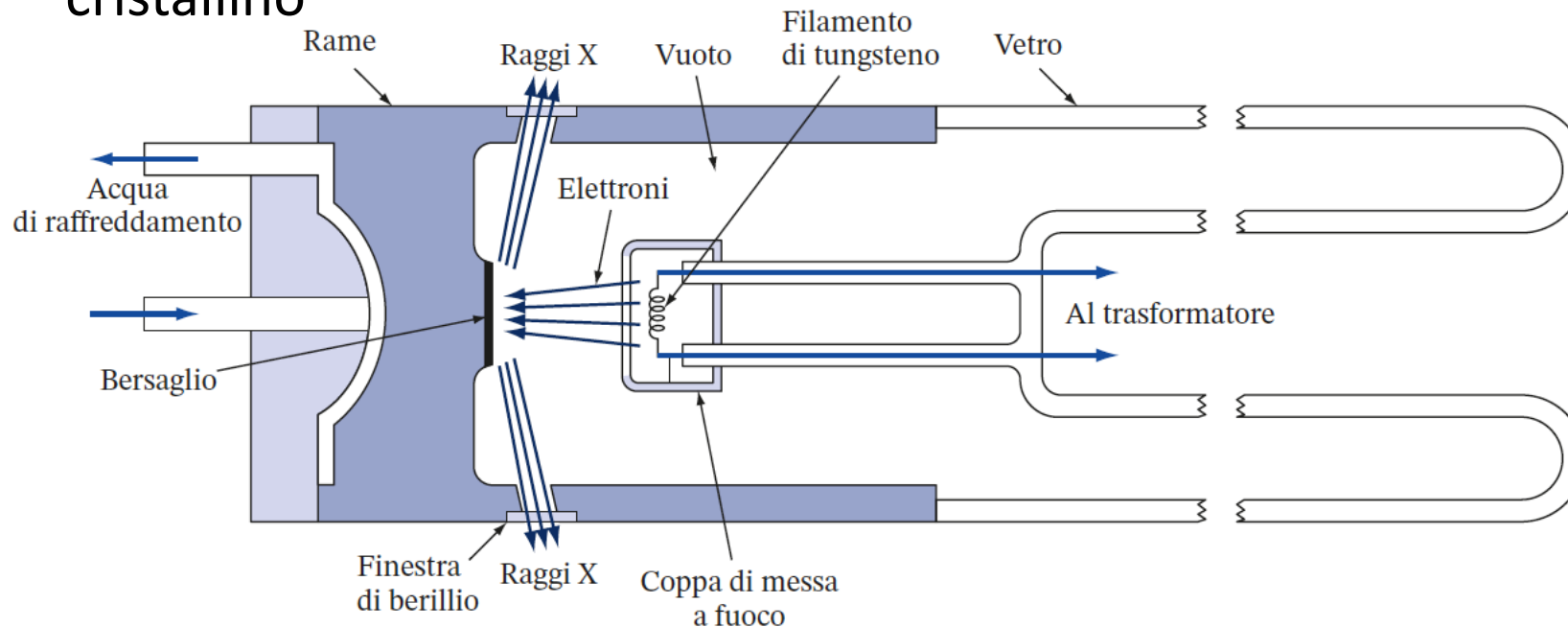
Polimorfismo o allotropia

- I metalli esistono in più forme cristalline. Questo è detto polimorfismo o allotropia.
- La temperatura e la pressione provocano cambiamenti nelle forme cristalline.
- Esempio: il ferro esiste sia nella forma CCC sia CFC in funzione della temperatura.



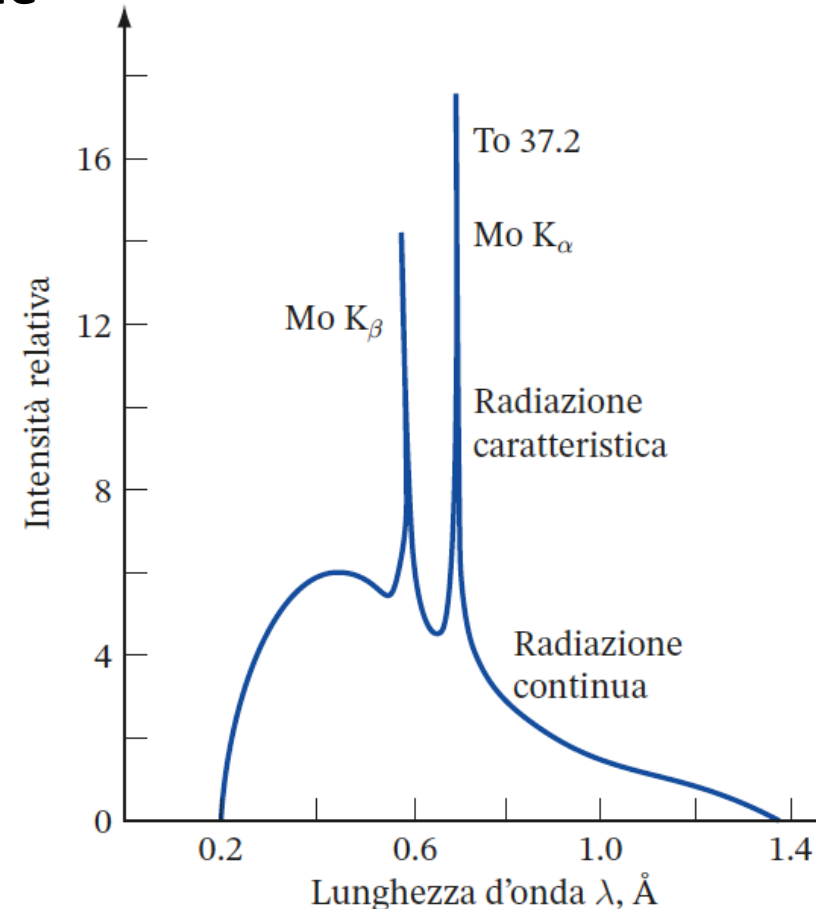
Analisi della Struttura Cristallina

- Informazioni sulla struttura cristallina si ottengono con i raggi-X
- I raggi-X utilizzati hanno circa la stessa lunghezza d'onda (0.05 - 0.25 nm) come distanza tra i piani del reticolo cristallino



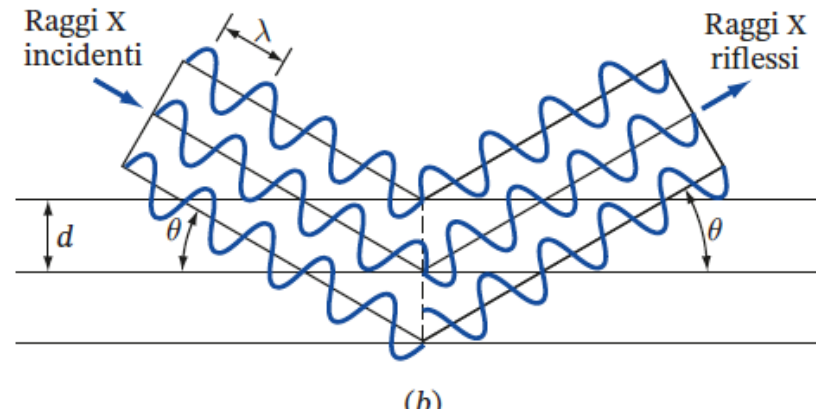
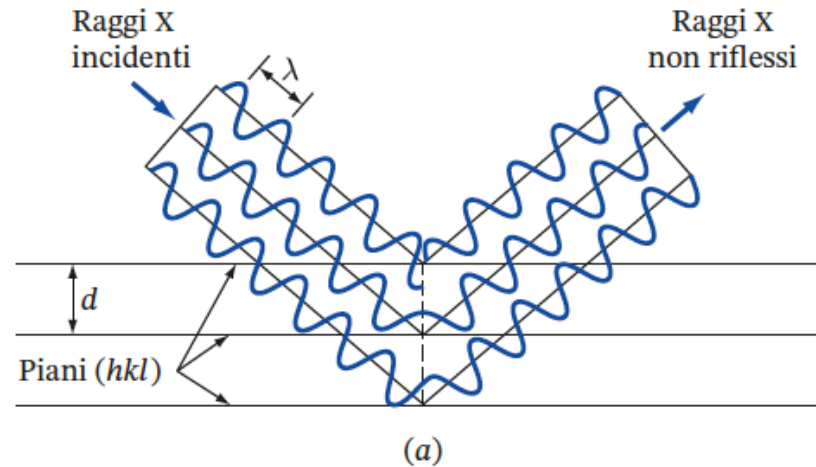
Spettro a Raggi-X del Molibdeno

- Lo spettro a raggi X del molibdeno è ottenuto quando il molibdeno viene usato come *metallo bersaglio*
- $K\alpha$ e $K\beta$ sono caratteristici di un elemento
- Per il molibdeno, $K\alpha$ si trova a una lunghezza d'onda di circa 0.07 nm
- Gli elettroni dello strato $n = 1$ del metallo bersaglio sono espulsi dagli elettroni che bombardano
- Gli elettroni del livello superiore cadono rilasciando energia per sostituire gli elettroni persi



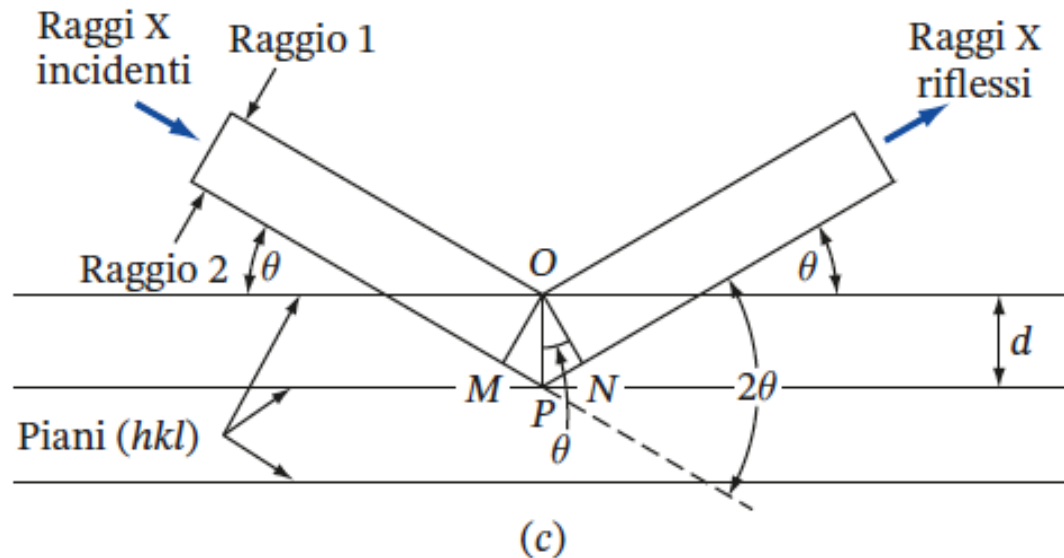
Diffrazione a Raggi-X

- I piani cristallini del metallo bersaglio agiscono come specchi che riflettono il fascio di raggi-X
- Se i raggi emessi da una famiglia di piani sono *fuori fase* (come nel caso di angolo di incidenza arbitrario) non viene prodotto un fascio rinforzato
- Se i raggi emessi sono in fase, sono prodotti fasci rinforzati



Diffrazione a Raggi-X

- Per raggi riflessi da piani differenti, per essere in fase la distanza extra percorsa da un raggio dovrebbe essere un intero multiplo della lunghezza d'onda λ



$$n\lambda = MP + PN \quad (n = 1, 2, \dots)$$

n è l'ordine di diffrazione

Se d_{hkl} è la distanza interplanare,

allora, $MP = PN = d_{hkl} \cdot \sin\theta$

Quindi, $\lambda = 2 d_{hkl} \cdot \sin\theta$

Interpretazione dei Dati di Diffrazione

Sappiamo che

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

poiché

$$\lambda = 2d \sin \theta$$

Sostituendo a d ,

$$\lambda = \frac{2a \sin \theta}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Quindi

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2 \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{4a^2}$$

Si noti che la lunghezza d'onda λ e la costante reticolare a sono le stesse per la radiazione entrante ed uscente

Interpretazione dei dati di diffrazione

Per i piani 'A' e 'B', abbiamo due equazioni:

$$\sin^2 \theta_A = \frac{\lambda^2 (h_A^2 + k_A^2 + l_A^2)}{4a^2} \quad (\text{per il piano 'A'})$$

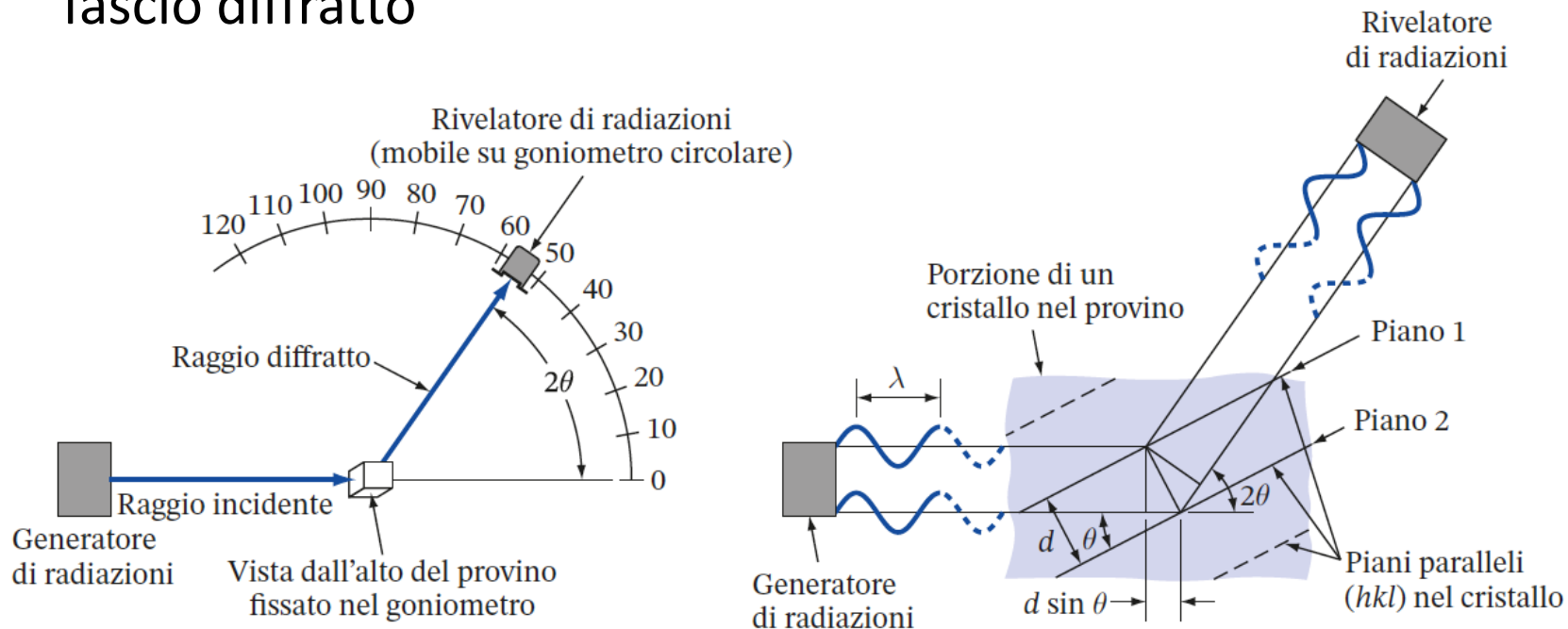
$$\sin^2 \theta_B = \frac{\lambda^2 (h_B^2 + k_B^2 + l_B^2)}{4a^2} \quad (\text{per il piano 'B'})$$

Dividendo le due equazioni, si ottiene:

$$\frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{(h_A^2 + k_A^2 + l_A^2)}{(h_B^2 + k_B^2 + l_B^2)}$$

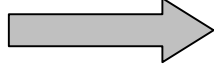
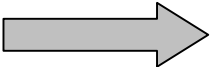
Analisi di diffrazione a Raggi-X

- Il campione in polvere è utilizzato per le analisi di diffrazione a raggi-X perchè l'orientamento casuale permette differenti angoli di incidenza
- Il contatore di radiazione rileva l'angolo e l'intensità del fascio diffratto


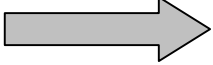



Condizioni di diffrazione per celle cubiche

- Per la struttura CCC, la diffrazione avviene solamente su piani i cui indici di Miller, quando sommati insieme danno un numero pari

I.e. $(h+k+l) = \text{pari}$  riflessioni presenti
 $(h+k+l) = \text{dispari}$  riflessioni assenti

- Per la struttura CFC, la diffrazione avviene solamente su piani i cui indici di Miller sono tutti pari o tutti dispari

I.e. (h,k,l) tutti pari  riflessioni presenti
 (h,k,l) tutti dispari  riflessioni presenti
 (h,k,l) non tutti pari o tutti
dispari  riflessioni assenti

Interpretazione dei dati sperimentali

- Per i cristalli CCC, i primi due set di piani diffrattografici sono i piani {110} e {200}

Quindi,

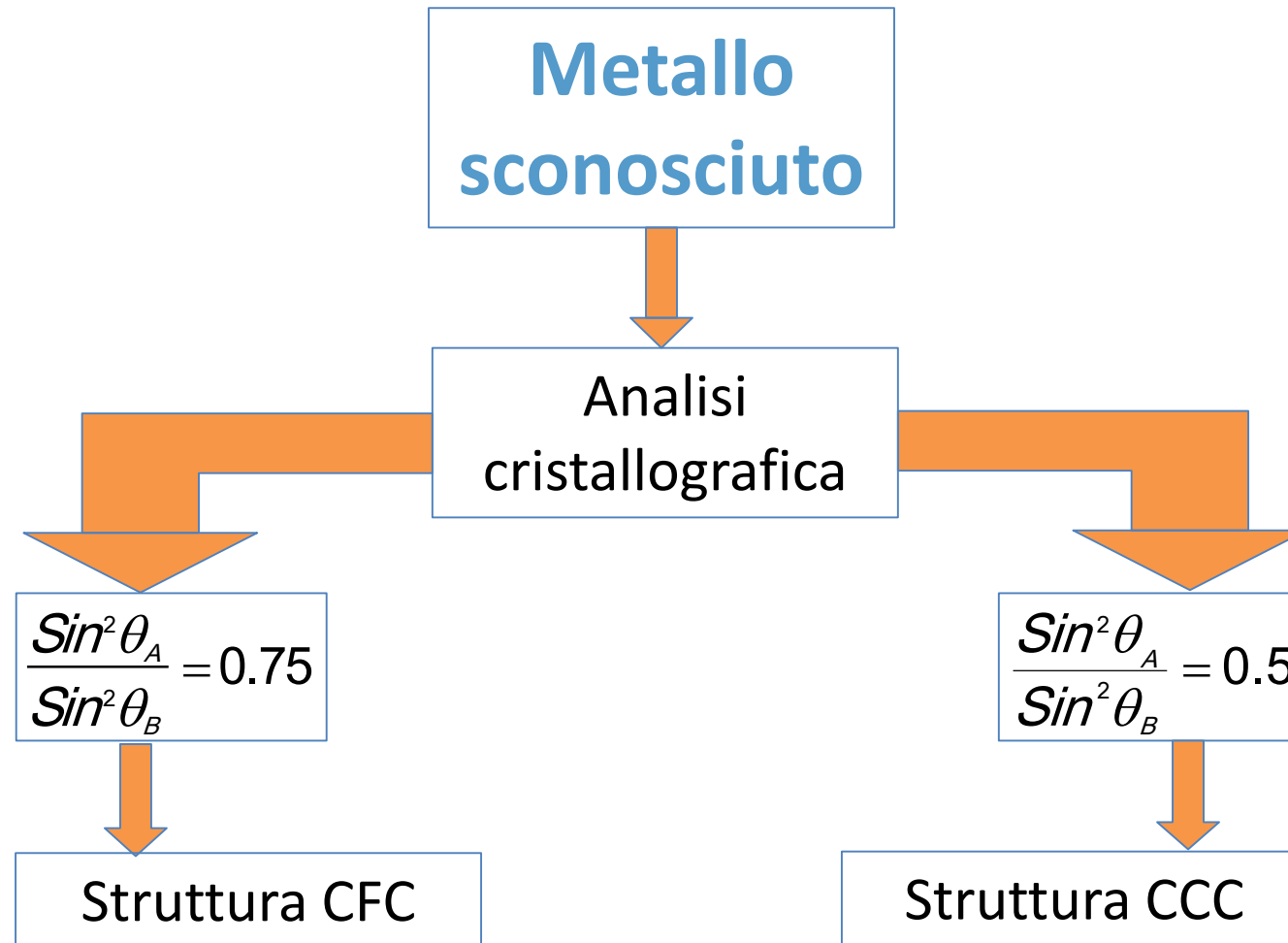
$$\frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{(1^2 + 1^2 + 0^2)}{(2^2 + 0^2 + 0^2)} = 0.5$$

- Per i cristalli CFC, i primi due set di piani diffrattografici sono i piani {111} e {200}

Quindi,

$$\frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{(1^2 + 1^2 + 1^2)}{(2^2 + 0^2 + 0^2)} = 0.75$$

Struttura cristallina di metalli non noti



Materiali amorfi

- Posizioni spaziali casuali degli atomi
- Polimeri: legami secondari non permettono la formazione di catene parallele e strettamente impaccate durante la solidificazione
 - I polimeri possono essere semicristallini
- Il vetro è un ceramico formato da sub-unità tetraedriche di SiO_4^{4-} - mobilità limitata
- Il raffreddamento rapido dei metalli (10^8 K/s) può dare luogo a strutture amorfe (vetro metallico)
- Il vetro metallico ha proprietà superiori al metallo