

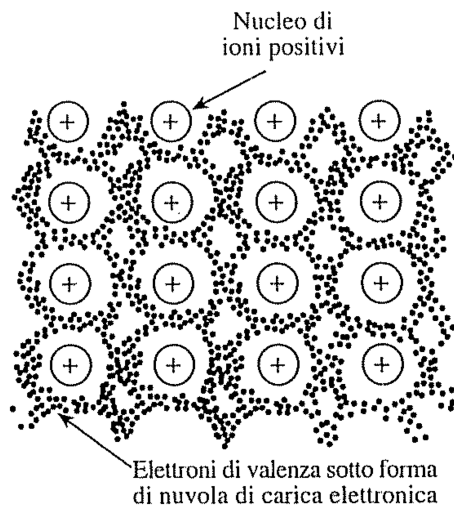
3. Struttura cristallina dei metalli

Struttura e geometria cristallina

- 3.1 Linee guida per ordinamento più compatto
- 3.2 Reticoli cristallini – cella elementare
- 3.3 Reticoli cristallini dei metalli – CCC, CFC, EC
- 3.4 Strutture e piani compatti
- 3.5 Grafite e diamante
- 3.6 Polimorfismo
- 3.7 Indici di Miller
- 3.8 Reticolo vs cristallo
- 3.9 Riassunto

3. Struttura cristallina dei metalli

Legame metallico



I nuclei positivi degli atomi che formano il metallo sono legati tra loro da un “gas di elettroni” costituito dagli elettroni di valenza delocalizzati.

Caratteristiche

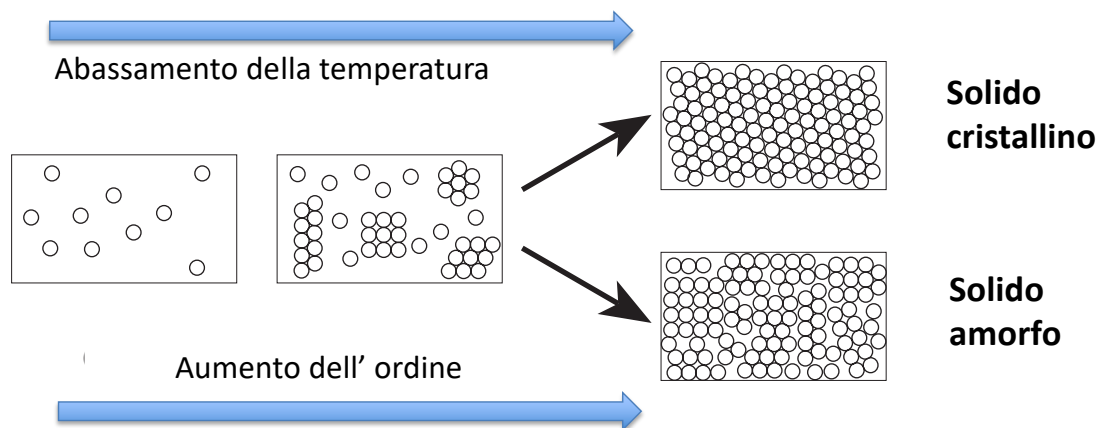
- Energia di legame bassa - media
- legame non-direzionale (forze tipo Coulomb)

Materiali: tutti metalli e leghe

Legami metallici sono non-direzionali e relativamente deboli. Gli atomi possono essere considerati sfere rigide con il diametro atomico

3.1 Linee guide per l'ordinamento più stabile

I metalli si producono partendo dal fuso (liquido) con la solidificazione.

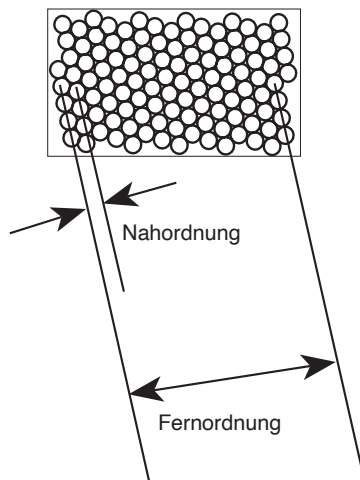


La formazione dei solidi è accompagnato con un aumento dell' ordine.

3.1 Linee guide per l'ordinamento più stabile

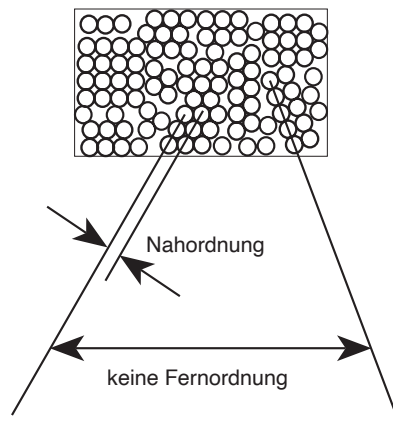
Solido **cristallino**

Ordine di lungo raggio



Solido **amorfo**

Ordine di breve raggio



Materiali cristallini hanno un ordine di lungo raggio (cristallo) in un **reticolo** esteso in tre dimensioni

3.1 Linee guide per l'ordinamento più stabile

Le linee guide per l'ordinamento più stabile sono

1. Assicurare la neutralità elettrica
2. In accordo con ev. legami covalenti presenti
3. Minimizza la repulsione elettrostatica
4. Impacchetta gli atomi più strettamente possibile

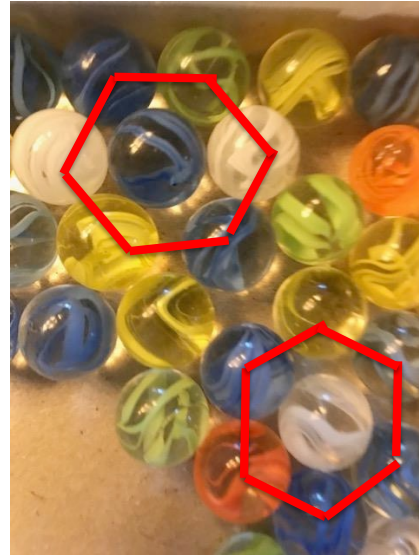
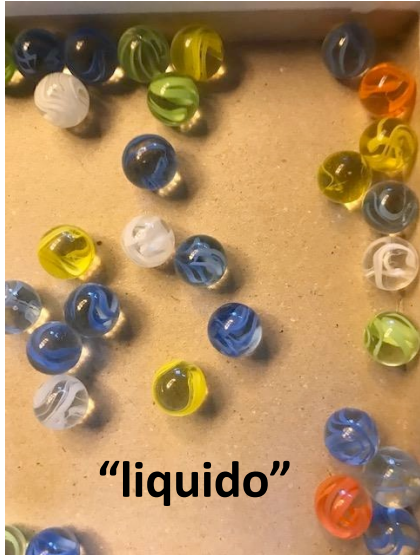
Il legame metallico è non-direzionale, la neutralità elettrica (elettroni di valenza / nuclei) è sempre assicurata, le forze elettrostatiche sono deboli...

-> Punto 4: un reticolo con impacchettamento più alto possibile

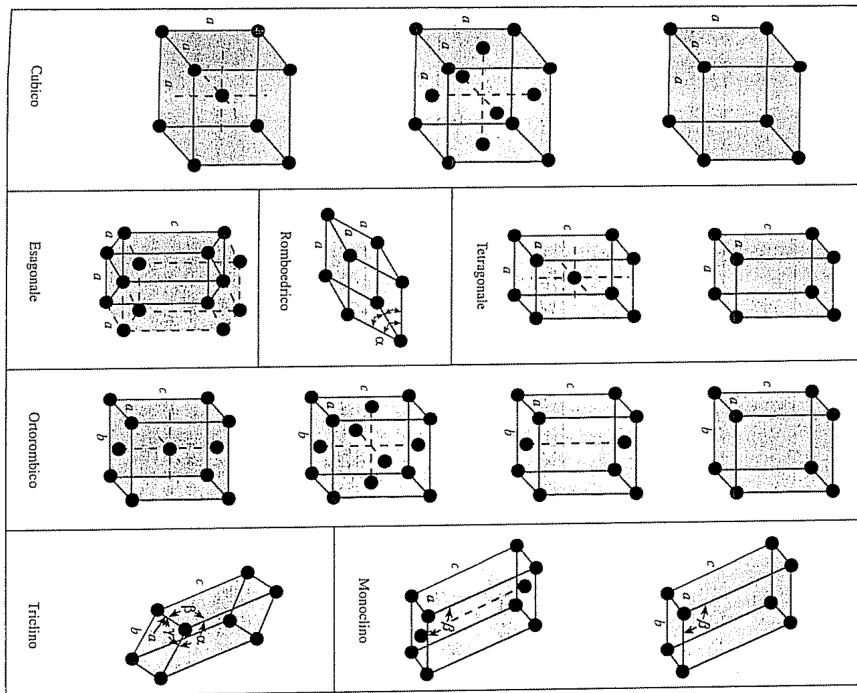
3.1 Linee guide per l'ordinamento più stabile

Qual'è un reticolo con impacchettamento più alto possibile ?
Giochiamo con le biglie....

Quale struttura è ?



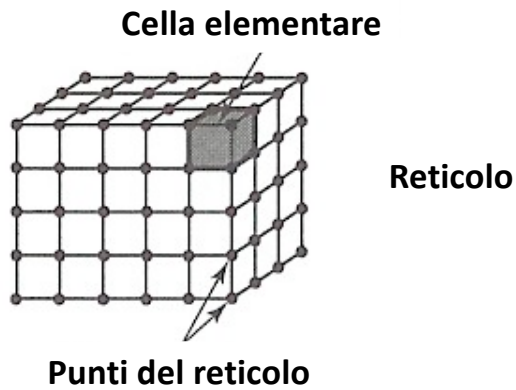
3.2 Reticoli cristallini (14 reticoli Bravais)



Cubico

3.2 Cella elementare

La cella elementare è l'**unità più piccola** di un reticolo cristallino che contiene tutte le informazioni del reticolo. Il reticolo si crea con una traslazione della cella elementare in tutte le tre dimensioni.

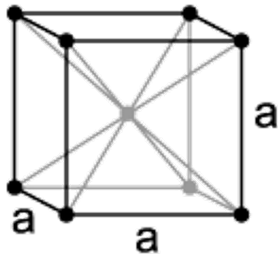


La cella elementare viene definita con l'angolo (qui 90 deg) tra i lati e la lunghezza dei lati

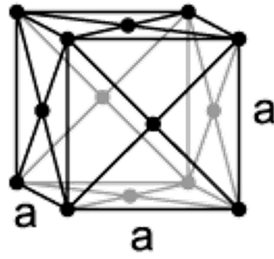
= **parametri reticolari**

Qual'è la cella elementare del piano delle biglie ?

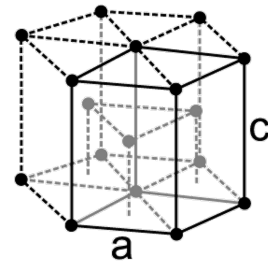
3.3 Strutture cristalline dei metalli



cubico corpo
centrato



cubico faccia
centrato

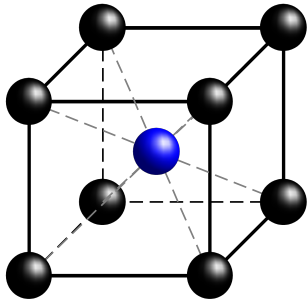


Esagonale
compatto

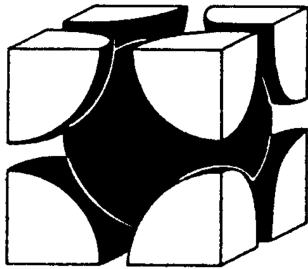
Perché non esistono metalli con il reticolo cubico semplice ?

3.3 Strutture cristalline dei metalli

Struttura cubico corpo centrato (CCC)



Esempio di metalli: cromo, ferro, molibdeno, tantalio, tungsteno, vanadio...

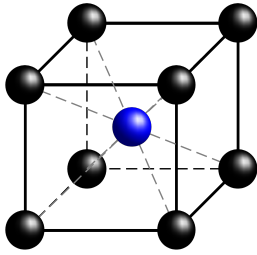


Atomi per cella elementare ?

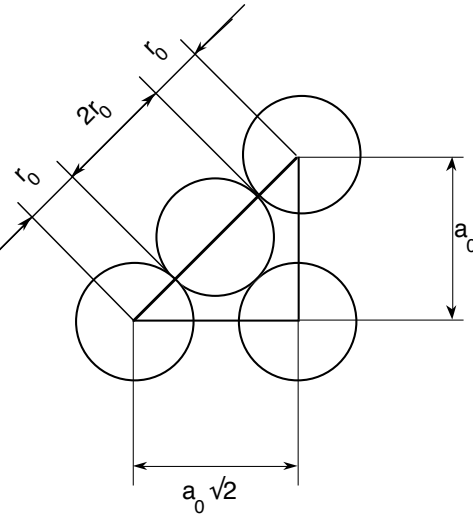
Quanti atomi vicini ?

3.3 Strutture cristalline dei metalli

Relazione tra costante reticolare e (CCC)



Esaminare dove
Gli atomi si
toccano ?



$$\rho = \frac{n \cdot V_{Atom}}{V_{Zelle}}$$

$$a\sqrt{3} = 4 \cdot r$$

sostituzione di r con a

$$V_{Kugel} = \frac{a^3 \cdot \sqrt{3}\pi}{16}$$

2 atomi per cella elementare

$$\frac{2a^3 \cdot \sqrt{3}\pi}{16a^3} = 0,68$$

3.3 Strutture cristalline dei metalli

Relazione tra costante reticolare e (CCC)

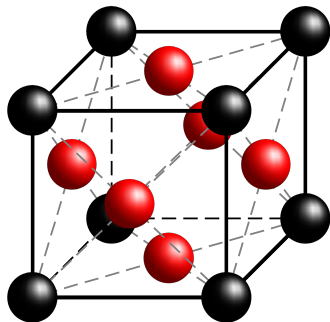
Metallo	Costante reticolare a , nm	Raggio atomico R^* , nm
Cromo	0.289	0.125
Ferro	0.287	0.124
Molibdeno	0.315	0.136
Potassio	0.533	0.231
Sodio	0.429	0.186
Tantalio	0.330	0.143
Tungsteno	0.316	0.137
Vanadio	0.304	0.132

CCC:

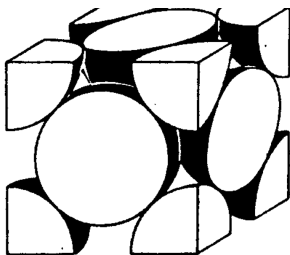
$$R = \sqrt{3} * a / 4$$

3.3 Strutture cristalline dei metalli

Struttura cubico faccia centrata (CFC)



Esempio di metalli: rame, nichel, alluminio, piombo, oro, argento, platino ...

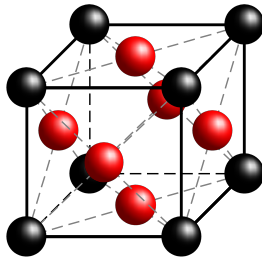


Atomi per cella elementare ?

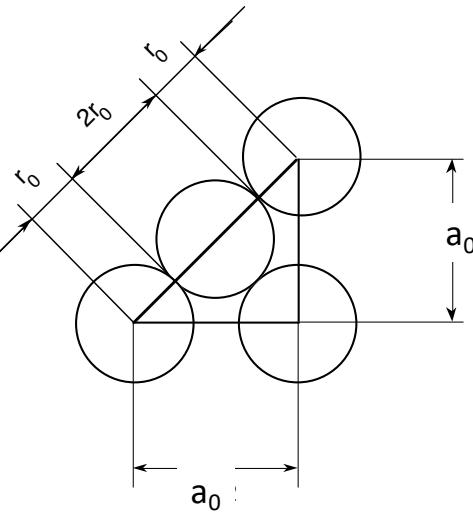
Quanti atomi vicini ?

3.3 Strutture cristalline dei metalli

Relazione tra costante reticolare e (CFC)



Esaminare dove
gli atomi si
toccano ?



$$p = \frac{n \cdot V_{Atom}}{V_{Zelle}}$$

$$a \sqrt{2} = 4 r$$

sostituzione di r con a

$$V_{Kugel} = \frac{a^3 \cdot \sqrt{3}\pi}{16}$$

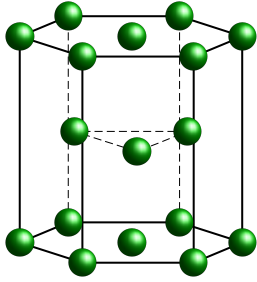
4 atomi per cella elementare

$$p = 0.74$$

grado di compattazione

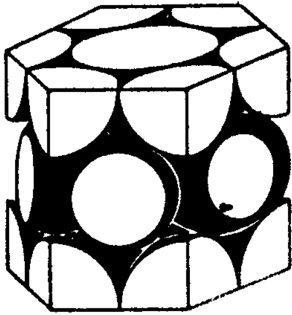
3.3 Strutture cristalline dei metalli

Struttura esagonale compatto (EC)



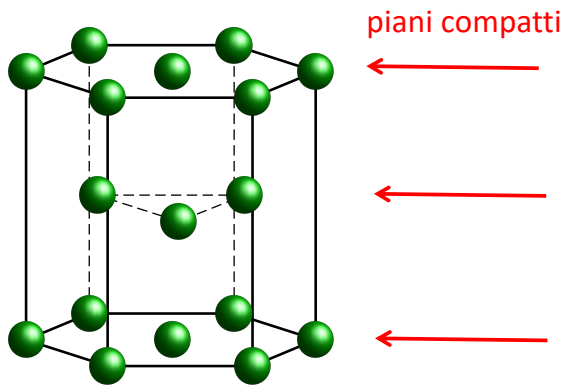
Esempio di metalli: titanio, cobalto, zinco, magnesio...

grado di compattazione 0.74
struttura compatta

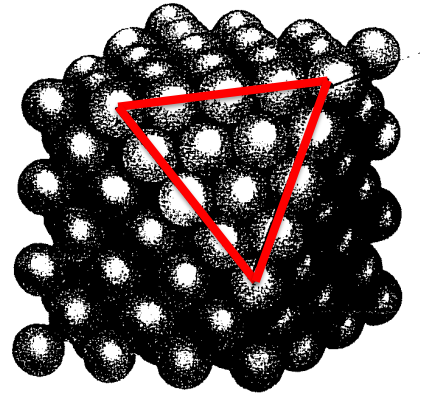


3.4 Strutture e piani compatti

Il grado di compattazione di 0.74 è il massimo che si può raggiungere. Dunque le strutture cristalline di CFC e EC sono strutture compatte con **piani compatti**.



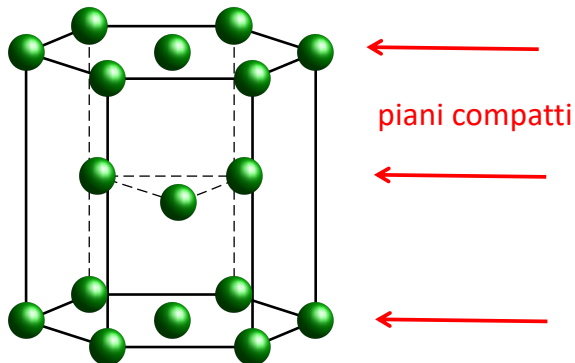
Nel reticolo EC i piani compatti sono **perpendicolo all' asse z**



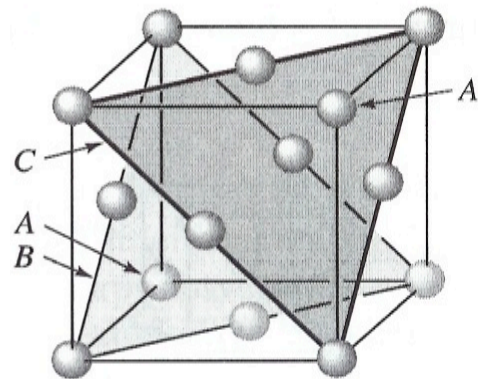
Nel reticolo CFC i piani compatti sono **perpendicolo alla diagonale di corpo**

3.4 Strutture e piani compatti

Il grado di compattazione di 0.74 è il massimo che si può raggiungere. Dunque le strutture cristalline di CFC e EC sono strutture compatte con **piani compatti**.



Nel reticolo EC i piani compatti sono perpendicolari all'asse z

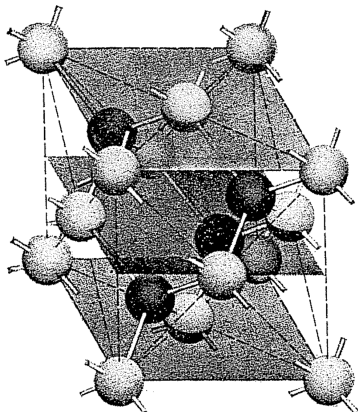


Nel reticolo CFC i piani compatti sono **perpendicolari alla diagonale di corpo**

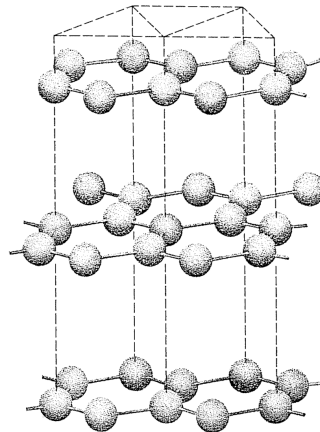
Quanti piani compatti sono presenti nel reticolo EC e nel reticolo CFC ?

3.5 Grafite e diamante

Grafite e diamante sono due modificazioni di materiali basate sul carbonio.



Diamante: ogni atomo di carbonio è circondato di altri quattro C con legami covalenti.



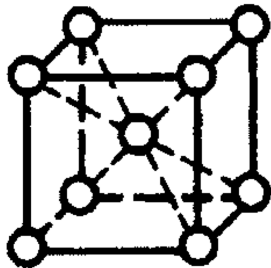
Nella **grafite** ogni atomo di carbonio è legato covalente a tre altri C (piani).

Che cosa si può concludere di queste informazioni sulle proprietà ?

3.6 Polimorfismo

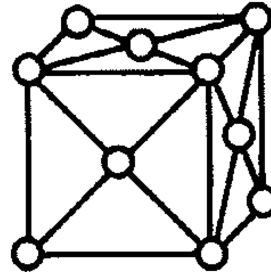
Molti metalli cambiano la struttura cristallina al variare della temperatura.

Temperatura ambiente
Ferro α struttura CCC



911 °C

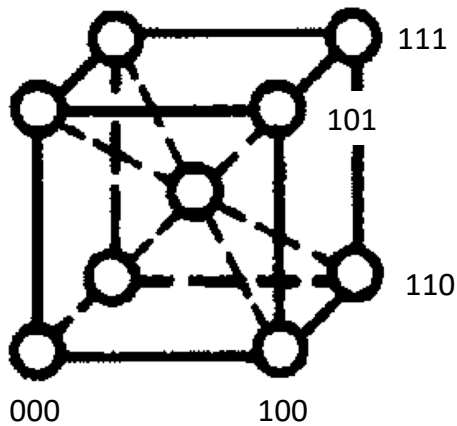
Temperature alte
Ferro γ struttura CFC



Ragionare sul cambiamento nella struttura reticolare. Che cosa sono le conseguenze ?

3.7 Indici di Miller - punti

Sistema di coordinate che permette l'identificazione di **punti**, direzioni e piani in un reticolo cristallino (esempio reticolo cubico).

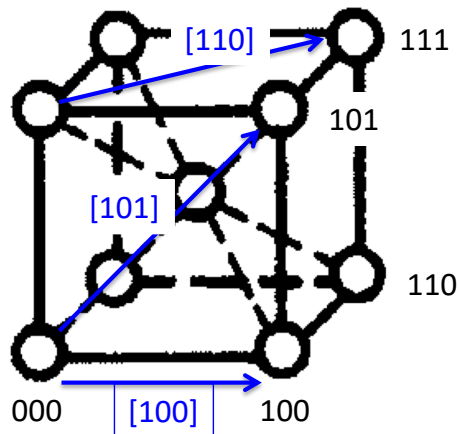


La posizione dei **punti** è uguale come in un sistema di coordinate tradizionale (xyz).

Quale sarebbe la posizione dell' atomo nel centro del cubo ?

3.7 Indici di Miller - direzioni

Sistema di coordinate che permette l'identificazione di punti, **direzioni** e piani in un reticolo cristallino (esempio reticolo cubico).



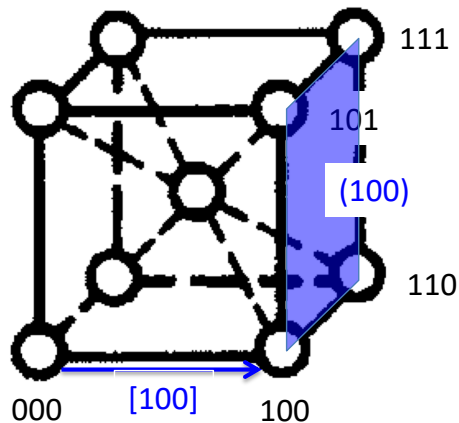
Le **direzioni** vengono indicati come vettore di differenza con coordinate **in parentesi rettangolari**.

Partendo dall' origine la direzione è uguale come il punto finale.

Come sarebbe la denominazione della diagonale di corpo ?

3.7 Indici di Miller - piani

Sistema di coordinate che permette l'identificazione di punti, **direzioni** e piani in un reticolo cristallino (esempio reticolo cubico).



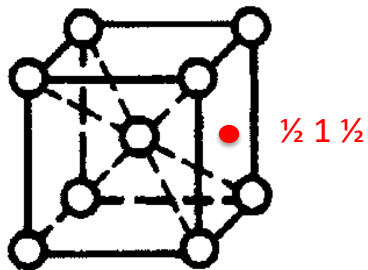
I **piani** hanno gli stessi indici di Miller come la direzione perpendicola al piano ma con coordinate **in parentesi tonde**.

Come sarebbe la denominazione del piano perpendicolo alla diagonale ?

3.7 Indici di Miller – posizioni interstiziali

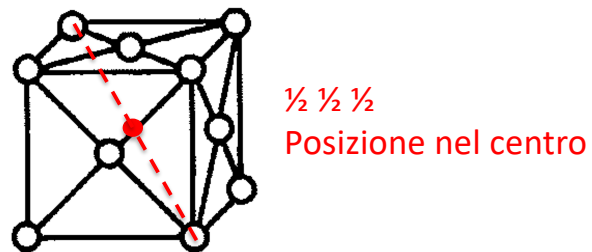
In tutte le strutture cristalline oltre agli atomi sulla posizione del reticolo (matrice) esistono vuoti piccoli, dove si possono mettere atomi piccoli.

Reticolo CCC



Piccoli spazi liberi
nel centro dei piani
(octaedrico, KZ 6)

Reticolo CFC



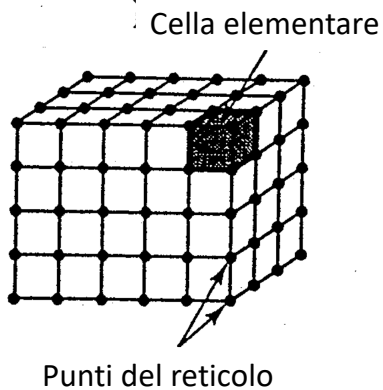
Grande spazio libero
nel centro del cubo
(octaedrico, KZ 6)

Numero e dimensione dei posti interstiziali determinano la solubilità degli atomi piccoli come C, N, O

3.8 Reticolo e cristallo

Un reticolo è un collettivo di punti (**punti del reticolo**) con un ordine perfetto in tre dimensioni (costante reticolare a) ed infinito.

geometria



Un cristallo è un collettivo di **atomi** (con raggio r) che si trovano sulle posizioni reticolari (costante a).

realtà



Che cosa è uguale e cosa è diverso fra reticolo e cristallo ?

3.8 Riassunto

Metalli sono **materiali (poli)cristallini**, gli atomi hanno un ordine di breve e lungo raggio.

L'ordine periodico degli atomi in un cristallo viene descritto dalla **struttura cristallina o reticolo**. Per i metalli sono CCC, CFC, EC

La struttura cristallina viene descritto dai parametri della cella elementare (costante reticolare a , angolo).

Punti, direzioni e piani in un reticolo (struttura cristallina) vengono indicati con gli **indici di Miller**.

Il reticolo CFC contiene 4 piani compatti (111), quello CCC non ne ha.

In posizioni fuori dal reticolo (interstiziali) possono stare atomi molto piccoli (H, C, N). Come si vedrà questo è molto importante per proprietà tecnologici.