

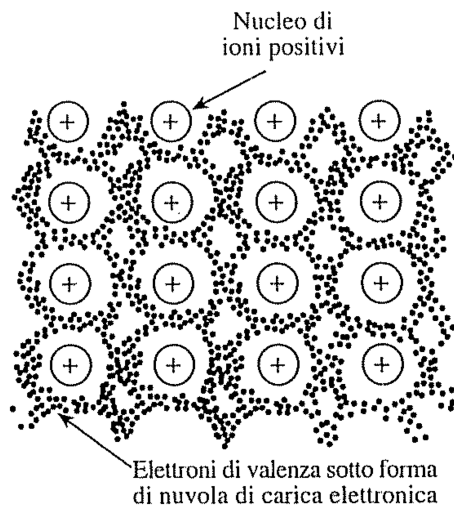
4. Struttura cristallina reale – difetti e proprietà

Riepilogo – breve ripetizione

- 4.1 Terminologia e classificazione dei “difetti” – cristalli reali
- 4.2 Difetti di punto: vacanze, atomi sostituzionali, interstiziali
- 4.3 Difetti di linea – dislocazioni
- 4.4 Difetti di superficie – bordi di grano

Riepilogo

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

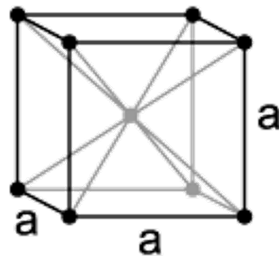
- Energia di legame bassa - media
- legame non-direzionale (forze tipo Coulomb)

Materiali: tutti metalli e leghe

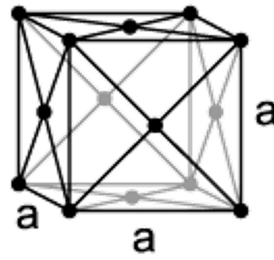
Legami metallici sono non-direzionali e relativamente deboli. Gli atomi possono essere considerati sfere rigidi. Impacchettamento più alto possibile.

Riepilogo

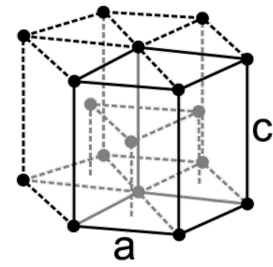
Reticoli cristallini dei metalli



cubico corpo
centrato **CCC**



cubico faccia
centrato **CFC**



Esagonale
compatto **EC**

Atomi per cella $1 + 8 \cdot 1/8 = 2$

$6 \cdot 1/2 + 8 \cdot 1/8 = 4$

2

Atomi vicini **8**

8

12

Grado compattaz. **0.68**

0.74

0.74

CFC e EC sono strutture compatte

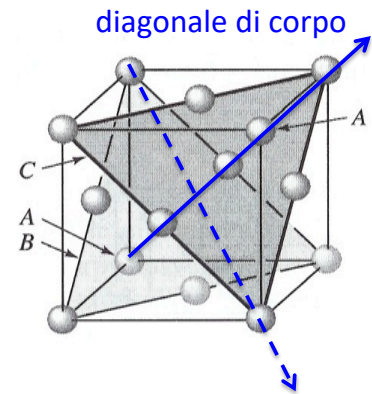
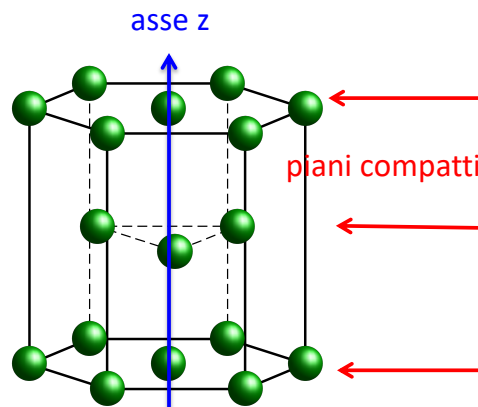
Piani compatti

Strutture compatte sono composti da piani compatti



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

1 gruppo di piani compatti



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

4 gruppi di piani compatti

Esperimento virtuale

La struttura cristallina dei metalli permette di calcolare la loro densità secondo questa formula

$$\text{Densità } \rho = n * M / V_{EZ} * N_A$$

n = numero di atomi per cella elementare

M = peso molare

V_{EZ} = volume della cella elementare

N_A = $6.02 \cdot 10^{23}$ atomi/mole (Avogadro)

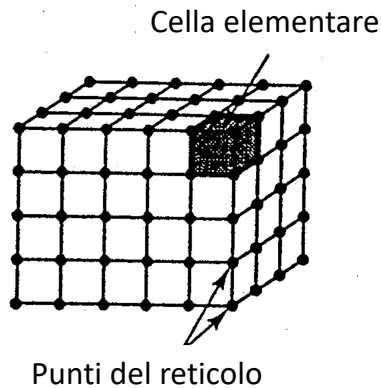
Per il ferro reticolo CCC a temperatura ambiente la densità teorica si calcola 7.882 g/cm^3 , la densità sperimentale è 7.870 g/cm^3 .

Domanda: Che cosa si osserva, che cosa si può concludere di questo risultato ?

Confronto fra 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 ?

4.1 Tipi e classificazione dei difetti

Difetti reticolari sono imperfezioni nel reticolo geometrico (che è per definizione infinito e perfetto) – ma fanno intrinsecamente parte dei cristalli reali.

Dalla presenza dei difetti cristallini non si può concludere che il materiale sia difettoso – al contrario: questi difetti sono molto utili e determinano le proprietà fisiche e meccaniche dei metalli.

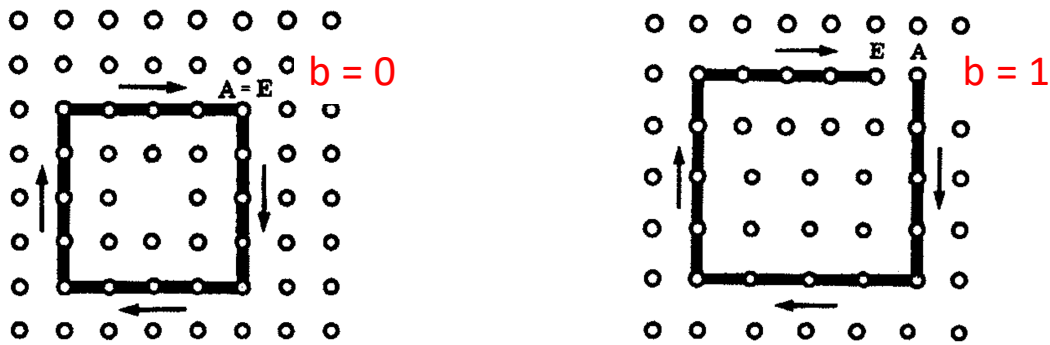
I difetti cristallini possono essere aggiunti intenzionalmente ai metalli per modificare e migliorare le proprietà fisiche e meccaniche dei metalli.

I difetti determinano / influenzano le proprietà meccaniche dei metalli.

4.1 Tipi e classificazione dei difetti

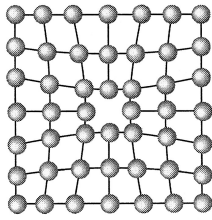
Difetti reticolari vengono classificati secondo la loro dimensione, la classificazione viene fatto con il vettore di Burgers b :

1. Difetti di punto (dimensione zero) – vacanze, atomi sostituzionali, intertiziali
2. Difetti di linea (dimensione uno) - dislocazioni
3. Difetti di superficie (dimensione due) – bordi di grano

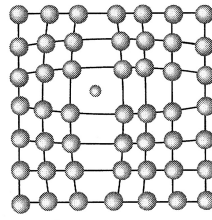


I difetti determinano / influiscono le proprietà meccaniche dei metalli.

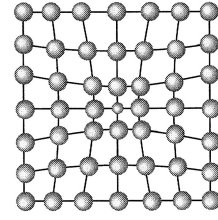
4.2 Difetti di punto



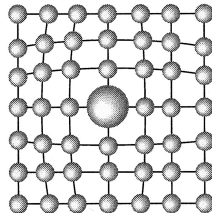
Vacanza



Atomo interstiziale



Atomo sostituzionale piccolo



Atomo sostituzionale grande

Domanda: che cosa succede con il reticolo intorno alla posizione del difetto di punto ?

Difetti di punto **distorcono il reticolo**. Un unico difetto di punto influisce la posizione di circa 100 atomi.

4.2 Difetti di punto - vacanze

Vacanze sono posti del reticolo non occupati da atomi, gli atomi mancano. Le vacanze si creano durante la solidificazione dei metalli.

Vacanze sono in equilibrio termico, la loro concentrazione è dato dalla T.

$$n_v = n \exp(-Q / RT)$$

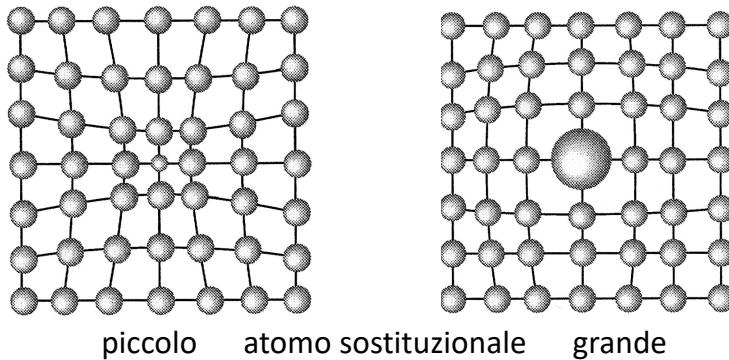
- n_v = numero di vacanze per cm^3
- N = numero di atomi per cm^3
- Q = energia necessaria per creare una vacanza
- R = costante di gas
- T = temperatura K

Le vacanze sono importanti per processi dove atomi devono muoversi nel cristallo (diffusione, ricristallizzazione)

Domanda: Da quale parametro (fondamentale) dipende l'energia Q per creare una vacanza ?

4.2 Difetti di punto – atomi sostituzionali

Difetti sostituzionali si creano quando atomi della matrice (atomi reticolari) vengono sostituiti da altri atomi (chimica diversa) che occupano posti del reticolo.



Quando il raggio dell'atomo sostituzionale è (molto) più grande o più piccolo dell'atomo della matrice il reticolo viene fortemente distorto.

Aggiungere intenzionalmente atomi sostituzionali = **alligazione**.

4.2 Solubilità degli atomi sostituzionali

Un atomo estraneo prende un posto di un atomo della matrice. La solubilità, cioè quanti atomi estranei possono stare in un cristallo, dipende da diversi fattori:

- 1) Differenza del raggio atomico: $\Delta r < 15\%$ miscibilità completa
- 2) Dal reticolo cristallino: per miscibilità completa il reticolo deve essere uguale
- 3) Dalla differenza di elettronegatività

Esempio:

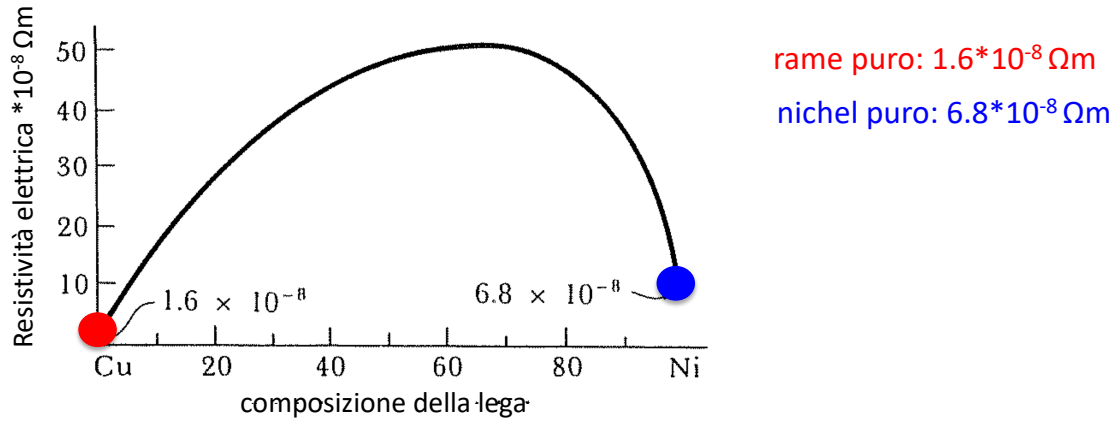
Leghe di rame	Cu/Pb	Δr 37%	ΔEN 0.2	CFC/CFC
	Cu/Ni	Δr -2%	ΔEN 0	CFC/CFC
	Cu/Zn	Δr 4%	ΔEN 0.3	CFC/EC

Quando il raggio del atomo sostituzionale è (molto) più grande o più piccolo dell' atomo della matrice il reticolo viene fortemente distorto.

Aggiungere intenzionalmente atomi sostituzionali = **alligazione**.

4.2 Resistività elettrica

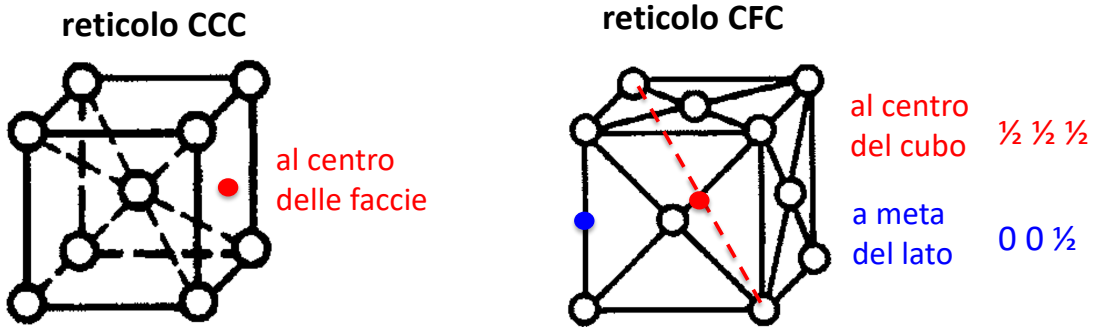
Il sistema Cu/Ni è completamente miscibile, significa che si possono sostituire atomi di rame con atomi di nichel da 0 a 100%.



Metalli sostituzionali aumentano la resistività elettrica (disturbano il reticolo).

4.2 Difetti di punto – atomi interstiziali

Atomi piccoli (C, N, H,...) occupano un posto fuori del reticolo (interstiziale)



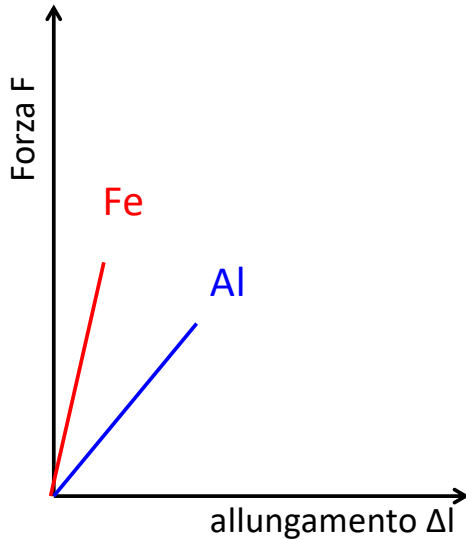
Quando gli atomi interstiziali sono più grande del posto a disposizione, il **reticolo** viene fortemente **distorto**.

Domanda: In quale reticolo, CCC o CFC, il posto interstiziale è più grande ?

La dimensione dei posti interstiziali (raggio) influisce fortemente la solubilità degli atomi piccoli. Vedi ferro / carbonio.

4.3 Difetti di linea – dislocazioni

Sotto sforzo di trazione materiali metallici si deformano in maniera elastica, cioè si allungano proporzionalmente alla forza applicata.



Esercizio

1. Spiegare la differenza tra Fe e Al
2. Che cosa succede quando in un metallo con struttura cristallina ideale la forza F viene aumentato sempre di più ?
3. Che cosa succede in realtà ?