CLASSIFICAZIONE DEI MATERIALI

I materiali solidi vengono classificati in tre classi basilari:

- **Metalli**:
  sono composti da uno o più elementi metallici e spesso anche da elementi non metallici in quantità piccole. Gli atomi si dispongono in modo molto ordinato, sono densi, rigidi e resistenti e duttili e ha una particolare resistenza alla frattura. Gli elettroni sono in gran numero dislocati e perciò si spiegano molte proprietà di tali materiali come l'elevata conducibilità elettrica.

- **Ceramici**:
  Sono composti da elementi metallici e non e per la maggior parte sono costituiti da ossidi, nitruri e carburi. Sono molto rigidi, resistenti ma estremamente fragili poiché non hanno duttilità e sono sensibili alla frattura fragile. Sono isolanti termici e elettrici e resistono alle alte temperature.

- **Polimeri**:
  Sono composti organici basati su carbonio e idrogeno; hanno strutture molecolari molto estese. Hanno basse densità e non sono rigidi e non sono resistenti. Molti polimeri però sono estremamente duttili e plastici e sono inerti chimicamente. A temperature elevate si possono perfino decomporre.

- **Compositi**:
  sono materiali costituiti da due o più tipi di materiali (vedi sopra). Combinando le proprietà di diverse classi di materiali si ottengono materiali con proprietà e caratteristiche meccaniche volendi come la vetroresina.

- **semiconduttori**:
  Sono materiali avanzati e hanno permesso la creazione dei circuiti integrati; hanno proprietà elettriche intermedie fra i conduttori e gli isolanti.

- **Biomateriali**:
  sono materiali compatibili con i tessuti umani e non producono sostanze tossiche.

- **Smart Materials**:
  Materiali che reagiscono e cambiano in relazione alle variazioni dell'ambiente. Sono formati da un sensore e da un attuatore, che possono essere leghe a memoria di forma ecc...

- **Nanomateriali**:
  Materiali caratterizzati dalle piccole dimensioni; prima si studiava dal grande al piccolo (top-down) ora con le nanotecnologie si studia dal piccolo al grande (bottom up).

LEGAME IONICO

Si forma dall'unione di un metallo e di un non metallo; gli atomi metallici cedono i loro elettroni di valenza e i due atomi diventano ioni, cioè acquistano carica. Il legame ionico non è direzionale cioè l'energia di legame è la stessa in tutte le possibili direzioni intorno allo ione. Il legame ionico è il principale legame presente nei materiali ceramici e presenta alte energie di legame (600 - 1500 kJ/mol). Sono poco deformabili perché ioni di segno opposto non possono avvicinarsi troppo fra loro e non conducono perché gli elettroni non hanno libertà di movimento nel reticolo

LEGAME COVALENTE

È un legame che si forma fra elementi non metallici con bassa differenza di elettronegatività; è fortemente direzionale, medio-alte energie di legame (500 - 1200 kJ/mol) e ha bassa conducibilità perché gli elettroni sono confinati spazialmente ed è fragile a causa dell'alta direzionalità che ne impedisce le distorsioni.

In generale un legame non è puramente ionico o puramente covalente; si usa la formula di Pauling

$\%\ \text{covalente} = e^{-0,25(\Delta x)^2} \times 100$ dove Δx = differenza di elettronegatività.

LEGAME METALLICO

Si trova nei metalli e nelle loro leghe. I metalli possiedono al massimo 3 elettroni di valenza i quali sono liberi di muoversi all'interno dell'intero reticolo metallico: si parla infatti di mare di elettroni. Gli elettroni liberi agiscono da collante fra i vari cationi che si sono formati e schermano le cariche positive impedendo che si generino forze repulsive. Per questo i solidi risultano essere molto compatti e molto deformabili e inoltre hanno un'alta conducibilità.

LEGAME DI WAN DER WALLS

È un legame secondario ed è più debole dei legami primari (10 kJ/mol) Si generano in molecole in cui sono presenti legami covalenti in quanto sono dovuti dai dipoli che si formano in queste molecole. Sono molto importanti nei materiali polimerici in quanto uniscono le varie catene dei polimeri. Sono di diverso tipo, dipolo - dipolo, dipolo - dipolo indotto o legame a idrogeno

master COPY

STRUTTURE CRISTALLINE

Le strutture cristalline sono caratterizzate dalla presenza di un ordine atomico a lungo raggio. La più piccola unità che si ripete è denominata cella e la disposizione spaziale periodica delle celle è detta reticolo.

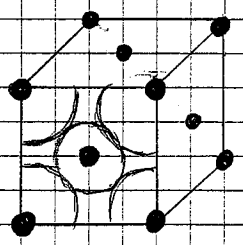
CELLA ELEMENTARE

La cella elementare base in tre dimensioni è un parallelepipedo di dimensione a, b, c che vengono chiamati parametri della cella elementare.
Le strutture cristalline possibili sono moltissime per cui esse sono divise in sistemi cristallini che raggruppano strutture cristalline che hanno cella unitaria della stessa forma. I sistemi sono 7: cubico, tetragonale ortorombico, romboedrico, triclino, monoclino, esagonale.
All'interno di ogni sistema sono possibili diversi tipi di reticolo; in tutto ci sono 14 tipi di reticoli possibili detti reticolo di Bravais.

STRUTTURE CRISTALLINE METALLICHE

Il legame metallico permette ai reticoli metallici di assumere le più svariate strutture reticolari. Tuttavia le principali strutture cristalline metalliche sono tre: cubico a facce centrate, cubico corpo centrato esagonale compatto. Le strutture cristalline inoltre sono caratterizzate da tre importanti grandezze: numero di coordinazione (n° di atomi con cui ciascun atomo è legato), numero di atomi per cella (1/2 per ogni atomo su una faccia, 1/4 per gli atomi sullo spigolo e 1/8 per gli atomi sui vertici) e fattore di impacchettamento atomico (frazione di volume occupata dalle sfere nella cella).

CUBICO A FACCE CENTRATE



(esempi di FCC sono il Cu, Al, As, Au)

Si hanno atomi disposti ai vertici di un cubo e al centro di ogni faccia. Il numero di coordinazione è 12 e il numero di atomi per cella elementare è 4.
Poichè in teoria ogni sfera è tangente alle altre è possibile ricavare una importante relazione fra il raggio atomico e la lunghezza dello spigolo detta a; in particolare si avrà che:

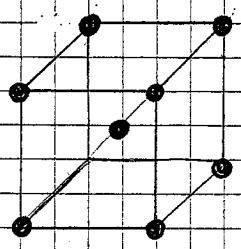
$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = 2R\sqrt{2}$. Questa relazione sarà molto utile per il calcolo del fattore di impacchettamento atomico. In particolare si ha che il fattore di impacchettamento è dato dal numero di atomi per la cella per il volume atomico tutto fratto il volume della cella elementare. Per il cubico facce centrate si ha quindi:

$V_{cella} = a^3 = 16\sqrt{2}R^3$ $\quad V_{occupato} = 4 \cdot \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{16}{3}\pi R^3$

e quindi $APF = \frac{16/3\pi R^3}{16\sqrt{2}R^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$

Il valore ottenuto è il massimo possibile per un atomo di raggio R; non esistono strutture con un APF maggiore.

CUBICO CORPO CENTRATO



(esempi di BCC sono Cr, Mo α-Fe)

Si hanno gli atomi disposti al vertice di un cubo e uno al centro della cella unitaria. Il numero di coordinazione è 8 e il numero di atomi per cella è 2. Anche in questo caso è possibile stabilire una relazione fra il lato del cubo e il raggio atomico; infatti le sfere sono tangenti lungo la diagonale della cella. Allora si avrà che:

$\sqrt{3}\,a = 4R$. A questo punto come prima si calcola il fattore di impacchettamento atomico (APF) e si scopre avere un valore di circa 0,68 (minore ovviamente dell'FCC).

ESAGONALE COMPATTO

È possibile trovare metalli con strutture esagonali. Tra le due facce esagonali vi è un piano intermedio nel quale sono situati 3 atomi. Ogni faccia contiene $\frac{1}{6}$ atomi. In totale ogni cella contiene l'equivalente di sei atomi. Inoltre il rapporto a/c (altezza per lato esagono) dovrebbe essere 1,63 (succede solo per alcuni metalli). Ha lo stesso numero di coordinazione dell'FCC e lo stesso APF (cioè 12 e 0,74). Un esempio è il cadmio, il magnesio.

INDICIZZAZIONE DEI PIANI E DELLE DIREZIONI CRISTALLOGRAFICHE

Si usano gli indici di Miller Bravais; per un piano si segue la seguente procedura:

- si determinano la direzione dei punti che giacciono lungo la direzione di interesse.
- si sottraggono alle coordinate della punta quelle della coda.
- si eliminano i numeri e si riduce ai minimi termini.
- si racchiudono gli indici in una parentesi quadra.

Per un piano invece si segue una procedura diversa:

- si identificano le intercette con gli assi in termini di numero di parametri cristallini.
- si fa il reciproco delle intercette.
- si eliminano le frazioni senza ridurre agli interi più piccoli.
- si racchiudono gli indici in una parentesi tonda.

master COPY

DENSITÀ PLANARE E LINEARE

Viene definita densità planare il rapporto fra l'area occupata dei atomi e l'area totale di un piano. Essa risulterà essere un fattore importante per comprendere i meccanismi di scorrimento in quanto esso avviene sui piani con una maggiore densità.
Ad esempio la densità per un FCC lungo il piano (1;1;0) risulta essere 0,55. Si definiscono per un FCC i piani di massimo addensamento atomico cioè i piani (1;1;1) e si calcola inoltre che la densità planare per questi piani risulta essere 0,9.

Allo stesso modo viene definita la densità lineare: si calcola per un BCC la densità lineare lungo la direzione [1;1;0] e si ottiene un valore di 0,866 e allo stesso modo si calcola la densità lineare lungo la direzione di massimo addensamento atomico ottenendo come valore 1.

DENSITA' TEORICA

La densità teorica di un materiale è il rapporto fra il numero di atomi per il volume di un atomo e il volume della cella cioè:

$$\rho = \frac{n \cdot A}{V_C \cdot N_A}$$

n = numero di atomi
A = peso di un atomo
V_C = Volume cella
N_A = numero di Avogadro (numero di atomi in 1 mole)

STRUTTURE CRISTALLINE COMPATTE

Impilando piani di massima densità atomica è possibile generare diversi tipi di strutture. Per [redacted] l'esagonale compatto si può avere la struttura AB o AC dove il centro di un atomo si dispone nella conca generata da altri due atomi tangenti. Nel cubico centrato invece si ha la struttura ABC poichè non esiste un piano di massima densità atomica basale ma i piani di massima densità sono i piani (1;1;1) e perciò gli atomi dei piani successivi dovranno occupare prima la posizione B e poi quella C per avere una struttura compatta.

ALLOTROPIA

Si ha quando un solido assume più di una forma cristallina; ne è un esempio il carbonio che può essere grafite, diamante, fullerene e nanotubi di grafene.

MONOCRISTALLI

Se in un solido gli atomi sono perfettamente ordinati secondo una ripetizione che si estende all'intero campione si parla di materiale monocristallino.

POLICRISTALLI

In generale un materiale sarà formato da tanti piccoli cristalli detti grani congiunti fra loro dai bordi di grano.