Alberto Lorenzi

RIASSUNTI MATERIALI LIBRO + SLIDES

1.1 SCIENZA ED INGEGNERIA DEI MATERIALI

Scienza dei materiali: studia le relazioni che esistono fra le strutture e le proprietà dei materiali.

Ingegneria dei materiali: progettazione o l'ingegnerizzazione della struttura di un materiale, per produrre un determinato insieme di proprietà.

Struttura: fa riferimento alla disposizione dei suoi componenti interni; quella subatomica si riferisce agli elettroni; a livello atomico all'organizzazione reciproca degli atomi o delle molecole e al livello successivo si passa al microscopico; gli elementi ancora successivi fanno parte del mondo macroscopico.

Proprietà: manifestazione in termini di tipo ampiezza di risposta rispetto a una specifica stimolazione imposta:
- Meccaniche: relazione tra la deformazione e il carico o lo sforzo applicato che la determina;
- Elettriche: conduttività, costanti dielettriche, lo stimolo è un campo elettrico;
- Termiche: capacità termica, conduttività termica;
- Magnetiche: lo stimolo è un campo magnetico;
- Ottiche: lo stimolo è elettromagnetico, radiazione luminosa;
- Deterioramento: indicano la reattività chimica del materiale;

Processo di fabbricazione;

Prestazioni;

- La struttura di un materiale dipende da come questo è stato ottenuto; le sue prestazioni sono funzione delle sue proprietà; quindi il processo di fabbricazione impone una determinata struttura ad un materiale che quindi acquisisce determinate proprietà che causano delle specifiche prestazioni

1.4 CLASSIFICAZIONE DEI MATERIALI

Lo schema in base al quale si separano i materiali in tre categorie principali si basa sulla composizione chimica e sulla struttura atomica; a questi si aggiungono le categorie: compositi e materiali avanzati.

Metalli: composti da uno o più elementi metallici e altri elementi non metallici in percentuali molto piccole; gli atomi si dispongono in modo ordinato e sono relativamente densi; i metalli sono relativamente rigidi e resistenti, ma anche duttili e resistenti alla frattura; essi hanno un gran numero di elettroni delocalizzati il che gli conferisce un'ottima conducibilità sia elettrica che termica; normalmente non sono trasparenti alla luce visibile; alcuni hanno anche apprezzabili capacità magnetiche;

Ceramici: Sono composti di elementi metallici e non, costituiti per la maggior parte da ossidi, nitruri e carburi; per esempio ossido di alluminio (o *allumina*, Al_2O_3), il biossido di silicio (o *silice*, SiO_2), inoltre i cosiddetti *ceramici classici* sono quelli argillosi come il vetro e il cemento. Sono relativamente rigidi e resistenti, sono anche molto duri ma anche estremamente fragili. Sono tipicamente isolanti termici e elettrici e hanno ottima resistenza ad alte temperature e agli ambienti corrosivi. Possono essere trasparenti, traslucidi od opachi;

Polimeri: vi appartengono i materiali plastici e le gomme, alcuni sono composti organici basati su carbonio e idrogeno; hanno una struttura molecolare molto voluminosa il che gli conferisce una bassissima densità e proprietà meccaniche molto differenti da quelle dei metalli e dei ceramici, non sono né rigidi né resistenti; anche se le le rigidità e le resistenze specifiche sono paragonabili a quelle dei metalli poiché il loro rapporto con la densità che è molto bassa ne aumenta il valore; sono inoltre estremamente duttili e flessibili; sono quasi totalmente inerti chimicamente, ma ad alte temperature tendono a diventare molto flessibili avendo un punto di fusione relativamente molto basso

master COPY COPISTERIA

Compositi: costituiti da due o più tipi di materiali di classi diverse e il loro scopo è di avere delle specifiche proprietà che nessun materiale semplice può possedere;

Materiali avanzati: sono alla base di processi altamente tecnologici come per esempio le apparecchiature elettroniche:
- Semiconduttori: hanno proprietà elettriche intermedie e hanno possibile la costruzione dei circuiti integrati;
- Biomateriali: impiegati negli impianti inseriti all'interno del corpo umano e sono compatibili con esso;
- Smart Materials: sono i cosiddetti materiali intelligenti poiché sono in grado di reagire automaticamente a degli stimoli esterni attraverso dei sensori e degli attuatori; quindi essi si adattano alle condizioni esterne; gli attuatori sono normalmente leghe a memoria di forma, ceramici piezoelettrici, materiali magnetostrittivi e fluidi elettroreologici e magnetoreologici
- Nano-materiali: sono caratterizzati dalle loro dimensioni microscopiche; vengono assemblati a piccoli pezzi prendendo così la struttura voluta (bottom-up)

2 STRUTTURA ATOMICA E LEGAMI INTERATOMICI

Ogni elemento è caratterizzato dal numero di protoni presenti nel nucleo, ovvero il numero atomico Z; la massa atomica A può essere espressa come la somma delle masse dei protoni e dei neutroni presenti nel nucleo; il numero dei neutroni però può cambiare all'interno di atomi diversi dello stesso elemento, questi si chiamano isotopi. Il peso atomico di un elemento corrisponde alla media pesata della presenza in natura dei singoli isotopi. L'u.m.a. È definita come 1/12 della massa del carbonio 12 -> le masse dei protoni e dei neutroni sono circa 1. In una mole sono contenuti/e 6,022 X 10^{23} atomi/molecole; il peso atomico del ferro per esempio è 55,85 u.m.a./atomo o 55,85 g/mole.

2.2. GLI ELETTRONI NEGLI ATOMI

Molti fenomeni a cui vanno incontro gli elettroni non sono spiegati dalla meccanica classica ed è qui che interviene la meccanica quantistica, che andando a studiare L'atomo ha definito i nuovi modelli atomici:
- Bohr: si suppone che gli elettroni ruotino attorno al nucleo in orbitali discreti e che la posizione di ciascun elettrone è descritta abbastanza bene dal suo orbitale; ogni orbitali ha un livello di energia ben determinato e quindi si parla di *livelli energetici*; questa energia non varia con continuità, ma a pacchetti, i cosiddetti quanti di energia.
- Meccanico-ondulatorio: gli elettroni possiedono caratteristiche tipiche sia delle particelle sia delle onde;

Numeri quantici: ogni elettrone è caratterizzato da essi; i livelli o *gusci* sono identificati dal *numero quantico principale* n che può assumere solo valori interi n = 1,2,3,4,5...; questo numero indica la distanza dell'elettrone del nucleo; il secondo numero quantico, l, caratterizza i sotto-livelli contrassegnati dalle lettere *s, p, d* e *f*. Il secondo numero quantico va da 0 a n-1. Poi esiste il numero quantico che indica la quantità e l'orientamento dei singoli orbitali in un sotto-livello, esso dipende da l e precisamente va da -l a l. Poi esiste un ultimo numero quantico ossia quello di spin ms che può valere ½ o -½.

2.5 FORZE ED ENERGIE DI LEGAME

Un metallo è un elemento con bassa elettronegatività, che è predisposto quindi a cedere elettroni per formare cationi. Un non metallo invece è un elemento con alta elettronegatività che tenda ad acquistare elettroni e quindi formare anioni. Gli elementi intermedi sono detti semimetalli.
A grandi distanze le interazioni sono trascurabili, mentre al diminuire della distanza tra gli atomi ognuno di essi esercita delle forze sull'altro. Riportando su un grafico le due forze che tendono a + o - infinito a seconda che siano attrattive o repulsive in prossimità dello 0; e facendo la differenza calcolando la risultante si vede che c'è un punto nel quale la forza netta interseca l'asse della distanza, questa viene chiamata r0 ed è la distanza di legame. Passando alle energie potenziali i grafici si invertono e l'energia potenziale netta ha un minimo in corrispondenza del raggio di legame in corrispondenza della cosiddetta energia di legame; essa rappresenta l'energia necessaria per separare i due atomi fino a distanza infinita. Grandi energie di legame corrispondono ad alte temperature di fusione e viceversa; così se le energie di legame sono alte si formano dei solidi mentre se sono basse tendono a formarsi dei gas. La pendenza della curva forza-distanza al valore della distanza di

legame di un materiale caratterizza la sua capacità elastica o la sua rigidità, più la pendenza è elevata e più il materiale è relativamente rigido. Invece la forma della curva energia-distanza influenza l'espansione con l'aumentare della temperatura, una curva stretta e profonda corrisponde a bassi coefficienti di espansione termica.

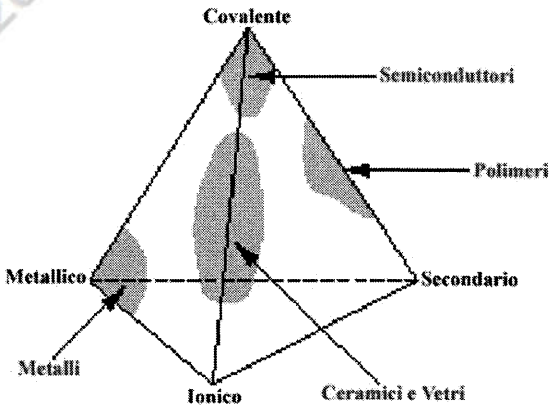
2.6 LEGAMI INTERATOMICI PRIMARI

Legame ionico: composti formati da un elemento metallico e uno non metallico; gli atomi dell'elemento metallico cede facilmente gli elettroni a quel non metallico che invece tende ad accettarne il più possibile; tutti gli atomi così acquisiscono la configurazione elettronica di un gas nobile trasformandosi in ioni, positivi (cationi) i metalli e negativi (anioni) i non metalli. Le forze attrattive sono di tipo coulombiano ovvero di attrazione reciproca dei due ioni di carica opposta; l'energia di attrazione è -A/r dove A è la forza coulombiana tra due corpi considerati carichi rispettivamente come Ze, essendo Z la valenza ed e la carica dell'elettrone. Esso è un legame non direzionale è infatti l'energia di legame è la stessa in tutte le possibili direzioni introno allo ione. Il legame ionico è il tipo di legame maggiormente presente nei ceramici; le energie di legame vanno da 600 a 1500 KJ/mol che sono relativamente alte. I materiali ionici sono quindi tipicamente duri e fragili e sono anche isolanti termici ed elettrici.

Legame covalente: condivisione di alcuni elettroni tra atomi adiacenti; due atomi che formano un legame di questo tipo forniscono entrambi una stessa quantità di elettroni da scambiare con l'altro, gli elettroni condivisi sono da considerarsi appartenenti ad entrambi gli atomi. Questo tipo di legame è direzionale poiché esiste solo lungo la congiungente dei due atomi. Se un atomo ha n elettroni di valenza il massimo numero di legami covalenti con atomi diversi è 8-n. Possono essere molto forti e quindi dare vita a materiali molto duri come il diamante oppure possono essere anche molto deboli dando vita a sostanze con basse temperature di fusione. Legame tipico dei polimeri. Dobbiamo osservare anche che è molto difficile trovare una sostanza in cui i legami siano totalmente ionici o covalenti poiché c'è quasi sempre uno dei due elementi che tende ad accettare elettroni più dell'altro; più distanti sono gli elementi sulla tavola periodica è più aumenta la percentuale di legame ionico e viceversa. Per i materiali ceramici infine esiste una formula per trovare la percentuale di ionica del legame che aumenta all'aumentare della differenza di elettronegatività ΔX:

$$\%\mathrm{Cov} = e^{-0,25\cdot(\Delta X)^2} \times 100$$

Legame metallico: si trova nei metalli e e nelle loro leghe, che possiedono massimo tre elettroni di valenza; è schematizzato dal modello del mare elettronico poiché tutti gli elettroni di valenza sono più o meno liberi di muoversi lungo tutto il metallo , mentre i nuclei e gli elettroni rimasti vanno a formare dei centri ionici positivi che non si respingono a causa della forza del mare di elettroni negativi che tende a trattenerli al loro posto. Questo tipo di legame non è direzionale, e gli elettroni liberi agiscono da "collante" per i centri ionici. Possono essere sia deboli che forti e la loro energia variano tra 68 e 849 KJ/mol. Tipici degli elementi del primo e del secondo gruppo. Tipicamente sono materiali che subiscono una rottura duttile.



2.7 LEGAMI SECONDARI O LEGAMI DI VAN DER WAALS

Sono legami di tipo fisico e sono decisamente più deboli di quelli chimici e le energie di legame sono circa 10 KJ/mol. Sono presenti tra tutti gli atomi o molecole, ma se è presente un legame primario essi sono completamente ininfluenti. Essi agiscono solo nei gas nobili e tra molecole covalenti. Queste forze sono dovute alla presenza di dipoli che possono essere sia tra dipoli indotti sia tra dipoli indotti e molecole polari. Il legame a idrogeno è un tipo i di legame secondario che si forma quando è presente l'idrogeno nelle molecole che partecipano al legame.

- Legami tra dipoli indotti fluttuanti: un dipolo può essere creato anche in una molecola o atomo che apparentemente è neutra poiché essi sono sempre sottoposti a dei moti vi razionale che istantaneamente possono far "sbilanciare" le cariche creando un piccolo dipolo che influenza la molecola adiacente è così via cosicché è possibile creare un gran numero di dipoli semplicemente da una piccola variazione di carica iniziale. Queste sono le forze attrattive e fluttuanti che nel tempo possono aumentare di numero. Se il legame predominante in una sostanza è di questo tipo le temperature di fusione e di ebollizione sono relativamente basse, poiché questi sono i legami intermolecolari più deboli esistenti.
- Legami tra molecole polari e dipoli indotti: Sono dei momenti di dipolo permanente causati dalle molecole polari che inducono dei dipoli nelle molecole adiacenti che a loro volta causano altri dipoli indotti; la forza di questo tipo di legame è leggermente maggiore della precedente.
- Legami tra dipoli permanenti: sono presenti tra due molecole polari adiacenti e quindi le energie son molto maggiori dei due precedenti legami. Il legame a idrogeno è un tipo di legame tra dipoli permanenti ed è il più forte legame secondario esistente; la sua energia può arrivare fino a 51 KJ/mol; infatti le temperature di fusione e di ebollizione delle sostanze come l'acqua sono molto maggiori rispetto a quelle teoriche dato i loro bassi pesi molecolari.

3 STRUTTURA DEI SOLIDI CRISTALLINI

3.2 CONCETTI FONDAMENTALI

Materiale cristallino: gli atomi sono disposti in modo ripetitivo e periodico, con un ordine che si mantiene su grandi distanze; tutti i metalli alcuni polimeri e ceramici formano strutture cristalline;

Materiale amorfo: sono quelli che non cristallizzano durante la solidificazione nei quali l'ordine atomico a lungo raggio è assente.

Molte proprietà dei solidi dipendono dalla struttura cristallina, definita normalmente dal *modello atomico a sfere rigide,* nel quale gli atomi sono delle sfere tra loro tangenti. Si utilizza il reticolo, che è una griglia tridimensionale nella quale i punti di intersezione delle linee coincidono con i centri delle sfere.

3.3 CELLE UNITARIE

In un materiale cristallino si può identificale la più piccola unità ripetitiva, che mostra pienamente le simmetrie e la struttura del cristallo, all'interno del reticolo, questa viene chiamata cella unitaria. Normalmente ha forma di parallelepipedo e di prisma avente tre coppie di facce parallele; essa descrive il tipo di simmetria presente all'interno di tutto il cristallo. Quindi la cella unitaria è l'unità strutturale di base per la costruzione del reticolo cristallino.

3.4 STRUTTURE CRISTALLINE DEI METALLI

Il legame è di tipo metallico ha quindi una natura adirezionale. Le strutture cristalline dei metalli più comunemente usati sono tre: cubica a corpo centrato (BCC), cubica a facce centrate (FCC) ed esagonale compatta (HCP).

- Cubica a facce centrate (FCC): gli atomi sono disposti ai vertici del cubo e al centro di ciascuna faccia (alluminio, argento, oro). Le sfere si toccano lungo la diagonale della faccia quindi la lunghezza dello spigolo del cubo a = 2Rsqrt(2). Gli atomi presenti ai vertici del cubo sono condivisi da altre otto celle unitarie mentre gli atomi sulle facce solo da due; quindi il numero di atomi presenti nella singola cella è quattro. Il numero di coordinazione è il numero di atomi adiacenti ad un singolo atomo che in questo caso è 12; il fattore di compattazione atomico (FCA) è il rapporto fra la somma dei volumi delle sfere contenute in una cella e il volume della cella stessa; rappresenta la densità teorica del materiale; FCA (FCC) = 0,74 che è il massimo valore possibile nel caso di sfere dello stesso diametro. Struttura tipica dei metalli come Cu, Al, Ag, Au...
- Cubica a corpo centrato (BCC): un atomo situato al centro e gli altri sui vertici (cromo, ferro e tungsteno); le sfere si toccano lungo la diagonale del cubo e quindi lo spigolo del cubo è a = 4R/sqrt(3). In ogni cella

sono presenti due sfere; il numero di coordinazione è 8 e l'FCA (BCC) = 0,68, che è minore della FCC. Tipica dei metalli Cr, Mo, α-Fe…

- Esagonale compatta (HCP): Gli atomi sono presenti ai vertici del prisma, poi al centro delle due facce esagonali e a metà dell'altezza è presente un triangolo equilatero sfalsato rispetto alle facce superiore e inferiore (cadmio, magnesio, titanio e zinco). Ogni cella contiene l'equivalente di 6 atomi; il numero di coordinazione e l'FCA sono uguali a quelli della FCC. Tipica dei metalli Cd, Mg, Zn, Ti…

3.5 CALCOLO DELLA DENSITÀ

La densità reale di una struttura cristallina è regolata dalla seguente formula: dove n è il numero di atomi per cella unitaria, A è il peso atomico, V_c è il volume della cella unitaria, N_A è il numero di Avogadro 6,022 X 10^23 atomi/mole.

$$\rho = \frac{n \cdot A}{V_c \cdot N_A}$$ ρ acciaio = 7,8 Mg/m^3 ρ alluminio = 2,6 Mg/m^3 ρ titanio = 5,2 Mg/m^3

3.6 POLIMORFISMO E ALLOTROPIA

Alcuni metalli, ma che altri materiali possono presentare diverse strutture cristalline, fenomeno noto come polimorfismo. Quando questo fenomeno si verifica per i solidi elementari è chiamato allotropia. Per esempio il ferro puro è BCC fino a 912°C e poi si trasforma in FCC; questa trasformazione è spesso accompagnata da variazioni di proprietà e densità.

3.7 SISTEMI CRISTALLINI

Se la cella unitaria è un parallelepipedo si prende un sistema di riferimento con origine in uno dei vertici e tre assi lungo tre spigoli; quindi la geometria della cella è definita da sei parametri, le lunghezze dei lati a, b e c e gli angoli tra i lati α, β, γ. Questi sono chiamati parametri reticolari e quindi si possono avere sette diverse combinazioni ciascuna delle quali individua un determinato sistema cristallino. I sistemi sono: cubico, tetragonale, esagonale, ortorombico, romboedrico, monoclino, triclino.

3.8 COORDINATE DEI PUNTI

La posizione di qualsiasi punto è individuata dalle sue coordinate come multipli frazionari delle lunghezze dei lati della cella unitaria (a,b,c).

3.9 DIREZIONI CRISTALLOGRAFICHE

1. Si posiziona un vettore tra il punto è l'origine del sistema di coordinate; si mantiene il parallelismo.
2. Si determina la lunghezza della proiezione del vettore su ciascuno dei tre assi in termini di a,b,c.
3. Si moltiplicano le tre coordinate così da ridurle al più piccolo valore intero.
4. I tre indici non separati da virgole sono posti in parentesi quadre [uvw] che corrispondono a x,y,z.
5. Gli indici negativi si indicano con un segno sopra il numero.
6. Anche se alcune direzioni sono diverse tra loro, esistono quelle equivalenti, cioè quelle nelle quali si conserva la distanza tra gli atomi, queste si raggruppano in famiglie e si indicano <uvw>; per esempio nei cristalli cubici risultano equivalenti le direzioni che hanno gli stessi indici numerici indipendentemente dal segno e dall'ordine delle cifre.

Cristalli esagonali: [uvtw], la trasformazione da [u'v'w'] -> [uvtw] è regolata dalle seguenti formule:
u = ⅓(2u'-v'); v = ⅓(2v'-u'); t = -(u+v); w = w'.

3.10 PIANI CRISTALLOGRAFICI

Specificati attraverso i tre indici di Miller nella forma (hkl);

master COPY COPISTERIA