STRUTTURA CRISTALLINA

MASTER COPY
Tel. 050 831226
Cell. 388 9837745

* CCC CUBICA CORPO CENTRATO

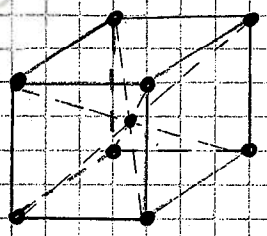
1 atomo centrale e $\frac{1}{8}$ di atomo per ciascun vertice.

$1 + \frac{1}{8} \cdot \underbrace{8}_{\text{VERTICI CUBO}} = 2$ atomi per cella elementare

LATO CUBO: $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$ RAGGIO ATOMICO: $R = \frac{\sqrt{3}\,a}{4}$ $(R = 2r_0)$

perché i raggi atomici sono disposti lungo la diagonale di misura $\sqrt{3}\,a$

FATTORE DI COMPATTAZIONE ATOMICA: $F.C.A. = 0{,}68 = 68\%$



* CFC CUBICA FACCE CENTRATE

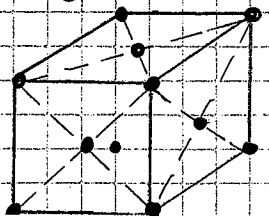
$\frac{1}{8}$ atomo per vertice e $\frac{1}{2}$ atomo per faccia

$\frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot \underbrace{6}_{\text{6 FACCE DEL CUBO}} = 1 + 3 = 4$ atomi per cella elementare

LATO CUBO: $a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$ RAGGIO ATOMICO: $R = \frac{\sqrt{2}\,a}{4}$ $\left(R = \frac{r_0}{2}\right)$

perché i raggi si toccano lungo la diagonale di una faccia

$F.C.A. = 0{,}74 = 74\%$



FATTORE DI COMPATTAZIONE ATOMICA

$$F.C.A. = \frac{\text{VOLUME ATOMI CELLA ELEMENTARE}}{\text{VOLUME DELLA CELLA ELEMENTARE}}$$

* POSIZIONI ATOMI CELLE ELEMENTARI CUBICHE:

Si usano tre assi ortogonali x, y, z sui quali sono prese distanze unitarie coincidenti con la lunghezza di uno spigolo.

DIREZIONI CRISTALLOGRAFICHE: $[\ \overset{x}{u}\ \overset{y}{v}\ \overset{z}{w}\ ]$

Preso un vettore direzione che indica la direzione cristallografica gli indici u, v e w sono le componenti del vettore direzione lungo ciascuno degli assi coordinati.
Questi indici devono essere interi, in caso contrario è necessario ridurre all'intero più piccolo.
Una barretta su un indice indica che è negativo e per rappresentare il vettore bisognerà portare l'origine del sistema di assi coordinati fino a farla coincidere con lo spigolo opportuno.

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 388 9837745

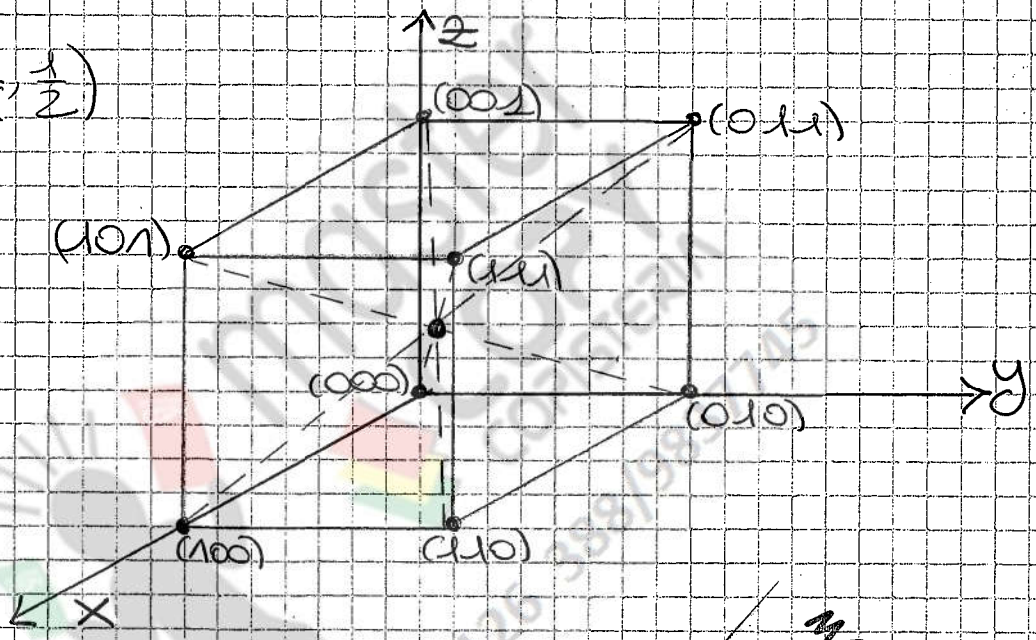
FAMIGLIA DI DIREZIONI EQUIVALENTI

Famiglia di direzioni equivalenti → se la distanza fra gli atomi lungo ogni direzione è la stessa $\langle u\ v\ w \rangle$

ESEMPIO: la famiglia $\langle 100 \rangle$ sarà formata da:

$[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]$

- $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$



X = POSITIVO COL VERSO USCENTE
y = POSITIVO VERSO DESTRA
z = POSITIVO RIVOLTO IN ALTO

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 388 9837745

* INDICI DI MILLER (h k e)

Gli indici di Miller di un piano cristallografico sono definiti come i reciproci delle intercette frazionarie del piano con gli assi cristallografici x, y, z relativi ai 3 spigoli non paralleli della cella 2

elementare cubica.

* Per un sistema cubico gli indici di direzione di una direzione $\perp$ ad un piano cristallografico sono uguali agli indici di Miller di quel piano.

ESEMPIO: La direzione $[100]$ è $\perp$ al piano (100).

FAMIGLIA DI PIANI: $\{hke\}$

FAMIGLIA DI PIANI

SPAZIO INTERPLANARE: nelle strutture cubiche ortogonali lo spazio interplanare tra due piani vicini paralleli con gli stessi indici di Miller è denominato d_{hke} dove hke sono gli indici di Miller di quei piani

SPAZIO INTERPLANARE

$$d_{hke} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+e^2}}$$

con a = COSTANTE RETICOLARE

LEGGE DI BRAGG: Affinché vi sia interferenza costruttiva si deve avere che:

LEGGE DI BRAGG

$$\lambda = 2 d_{hke} \sin\theta$$

θ è metà dell'angolo di diffrazione cioè l'angolo tra i raggi incidenti ed emergenti.

Combinando le due relazioni si ha che per le celle elementari cubiche:

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

- per **CCC**: la diffrazione avviene solo sui piani t.c. $h+k+\ell$ siano pari
- per **CFC**: i piani principali di diffrazione sono quelli t.c. gli indici di Miller sono o tutti pari o tutti dispari

(ES) DETERMINAZIONE INDICI DI MILLER

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 388 9837745

PROCEDIMENTO:

① scegliere un PIANO che NON passa per l'origine (000).

② determinare le INTERSEZIONI DEL PIANO rispetto agli assi cristallografici x, y, z per una cella elementare cubica. Tali intersezioni potrebbero essere delle frazioni.

③ fare il RECIPROCO DI QUESTE FRAZIONI

④ normalizzare le frazioni agli interi e determinare gli INTERI PIÙ PICCOLI tra tutti i numeri che hanno lo stesso rapporto di intersezione.