



APPUNTI DELLE LEZIONI DI

Scienza e Tecnologia dei Materiali

Anno Accademico 2017/2018

dott. Francesca Romana Lamastra

ufficio c/o Dip. Scienze e Tecnologie Chimiche (edifici Sogene)

Settore E1

E-mail: lamastra@scienze.uniroma2.it – tel. 06.7259.4495

Testo consigliato:

W. F. Smith, Scienza e Tecnologia dei Materiali, McGraw-Hill

Slides delle Lezioni:

<http://didattica.uniroma2.it/files/index/insegnamento/172770-Tecnologia-Dei-Materiali-E-Chimica-Applicata-2>

Programma



- Legami atomici e struttura cristallina
 - Materiali metallici
- Proprietà meccaniche
 - Materiali polimerici

Scopo del corso

- Conoscenza principali classi di materiali
- Conoscenza elementi di scienza dei materiali
- Conoscenza delle principali proprietà meccaniche

Correlazione struttura/proprietà

**Classificazione dei materiali solidi ...
in base ai legami interatomici!**



Metalli

Ceramici

Polimeri

I legami atomici



- Gli elettroni che occupano il guscio elettronico più esterno, detti **elettroni di valenza**, sono responsabili della formazione dei legami atomici.
- Gli atomi degli elementi unendosi tra loro tendono a raggiungere la configurazione elettronica stabile s^2p^6 (ottetto) tipica dei gas nobili, **cedendo, acquistando o mettendo in comune elettroni**

Quando vengono messi a comune gli elettroni gli orbitali coinvolti nel legame sono **orbitali ibridi**, La caratteristica più importante degli orbitali ibridi è il loro "carattere direzionale"

Legami atomici primari o forti:

- legame ionico
- legame covalente
- legame metallico

Legami atomici e molecolari secondari o deboli

- legame di Van der Waals
- legame idrogeno

Legami primari: Il legame ionico



- Formazione del legame ionico:

1. Mutua ionizzazione che avviene per trasferimento elettronico. Formazione di cationi ed anioni.
2. Gli ioni si attraggono per mezzo di una forte attrazione tra cariche. Ne deriva la non direzionalità del legame (interazione tra cariche sferiche)

11 Protons Na $1S^2 2S^2 2P^6 3S^1$
11 Protons Na⁺ $1S^2 2S^2 2P^6$

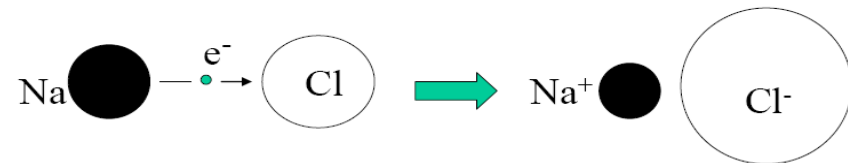


donates e^-
10 e^- left

17 Protons Cl $1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^5$
17 Protons Cl⁻ $1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6$



receives e^-
18 e^-



Legami primari: Il legame ionico



- Avviene tra elementi con differente elettronegatività: tipicamente tra elementi situati alle estremità della tavola periodica. Tra i quali è favorito il **trasferimento elettronico**

Periodic Table

IA		IIA												IIIA		IVA		VA		VIA		VIIA		0											
1	H	2	He											5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne										
3	Li	4	Be											13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar										
11	Na	12	Mg	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
19	K	20	Ca	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
37	Rb	38	Sr	Rare earth series		72	Hf	73	Ta	74	W	75	Re	76	Os	77	Ir	78	Pt	79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn
55	Cs	56	Ba	Actinide series		104	Rf	105	Db	106	Sg	107	Bh	108	Hs	109	Mt	110	Ds																
87	Fr	88	Ra																																

give up 1e⁻
give up 2e⁻
give up 3e⁻

accept 2e⁻
accept 1e⁻
inert gases

Metal
 Nonmetal
 Intermediate

Electropositive elements:
Readily give up electrons
to become + ions.

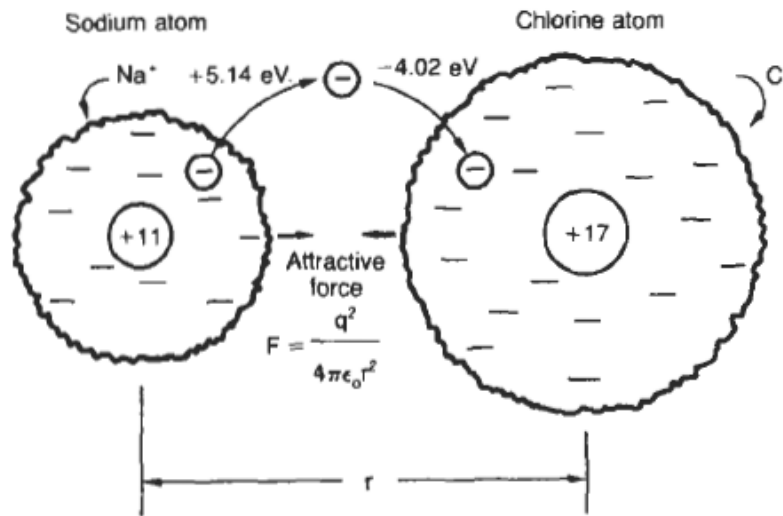
Electronegative elements:
Readily acquire electrons
to become - ions.

Legami primari: Il legame ionico



- Formazione degli ioni richiede energia U_i :
 - 1. **Potenziale di ionizzazione** che è l'energia necessaria a strappare un elettrone di un dato atomo, che diventa così ione positivo (per il sodio pari a 5.14 eV)
 - 2. **Affinità elettronica** che è l'energia che si sviluppa quando un elettrone si unisce ad un atomo formando uno ione negativo (per il cloro pari a 4.02eV)
- Pertanto l'energia necessaria U_i a creare la coppia ionica $\text{Na}^+ \text{Cl}^-$, è pari a

$$U_i = 5.14 \text{ eV} - 4.02 \text{ eV} = 1.12 \text{ eV}$$



Legami primari: Il legame ionico



Una volta formati, gli ioni saranno soggetti a:

- Attrazione coulombiana tra ioni di carica opposta: $F = q^2/4\pi\epsilon_0 r^2$

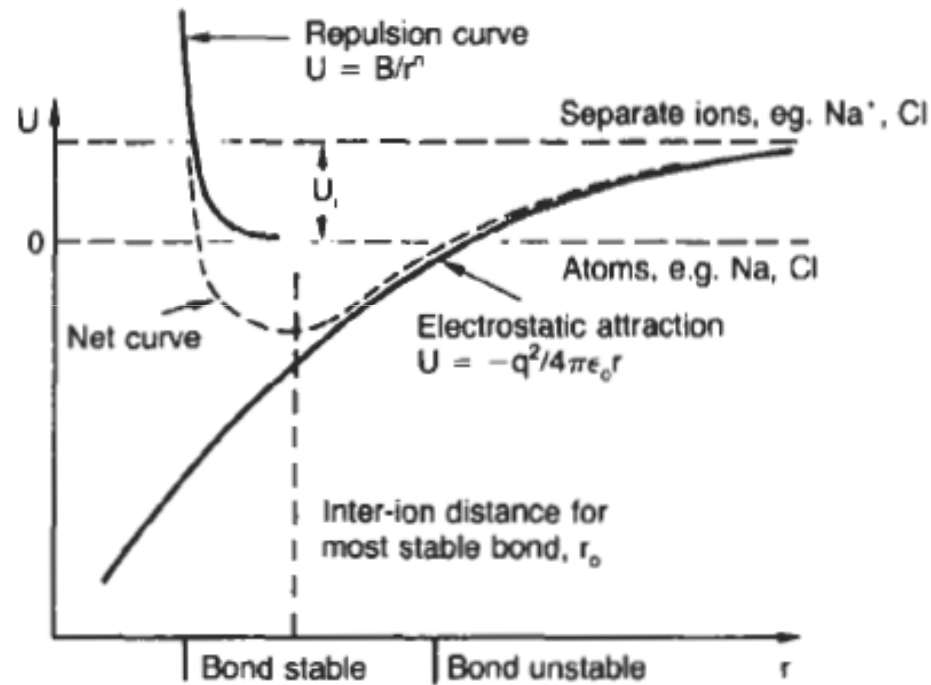
con U_A energia (lavoro) necessario per portare gli ioni da una distanza infinita a r

$$U = \int_r^\infty F dr \quad U_A = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r} = -\frac{A}{r}$$

- Repulsione tra le nubi di elettroni, se gli ioni sono troppo vicini ($n \approx 12$)

$$U_R = \frac{B}{r^n}$$

Legami primari: Il legame ionico

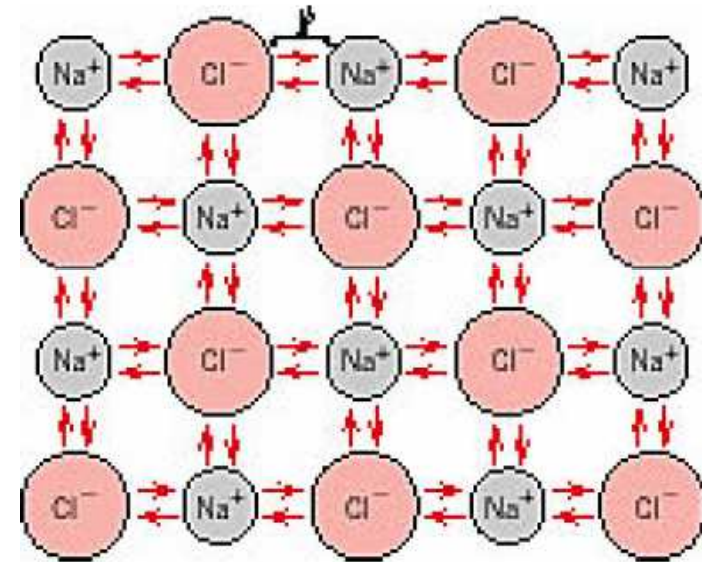
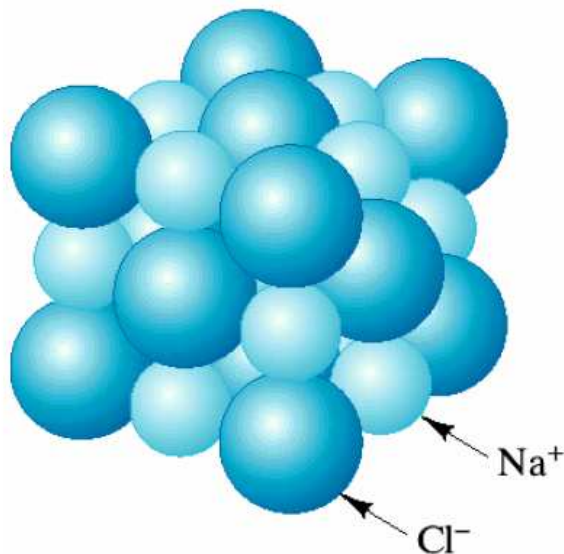


$$U(r) = U_i - \underbrace{\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}}_{\text{attractive part}} + \underbrace{\frac{B}{r^n}}_{\text{repulsive part}}$$

Legami primari: I Solidi ionici



- La forte interazione tra anioni e cationi porta alla formazione di un solido ionico caratterizzato dal fatto che ciascun catione è circondato da anioni e viceversa.
- Ogni forza esterna che tende a disturbare l'equilibrio ionico del reticolo cristallino ionico incontra grandi resistenze: i solidi ionici sono duri e fragili!



Energia di legame ionico (kJ/mole)

Tabella 2.7 Energia di reticolo e punti di fusione di alcuni solidi ionici

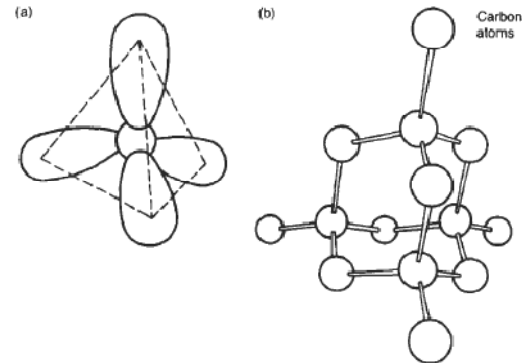
Solido ionico	Energia di reticolo*		Punto di fusione (°C)
	kJ/mol	kcal/mol	
NaCl	766	183	801
KCl	686	164	776
RbCl	670	160	715
CsCl	649	155	646
MgO	3932	940	2800
CaO	3583	846	2580
SrO	3311	791	2430
BaO	3127	747	1923

*Tutti i valori sono negativi per la formazione del legame (l'energia è rilasciata).

Legami primari: Il legame covalente

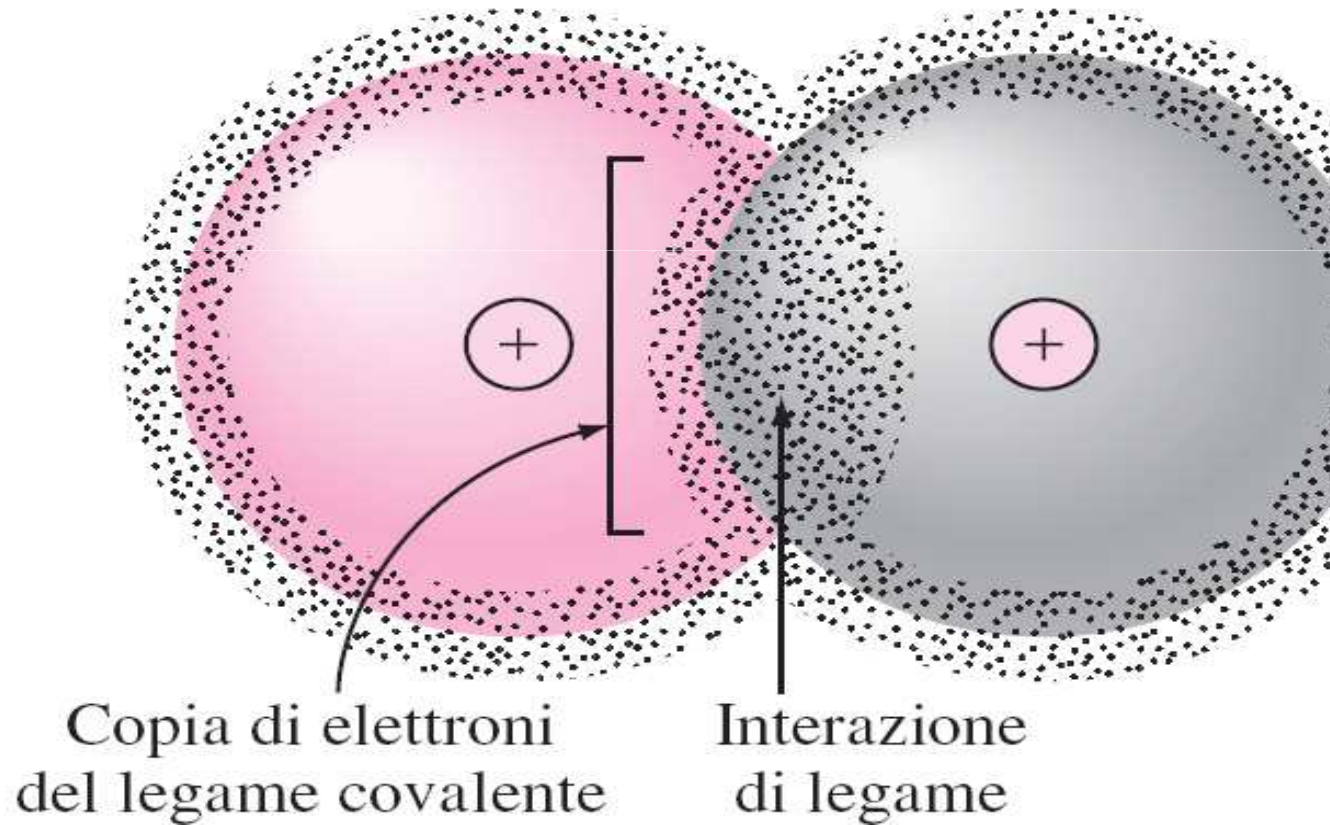


- Il legame covalente avviene tra solidi con elettronegatività simile o la stessa (formazione delle molecole)
- Nel legame covalente gli elettroni vengono *condivisi* per saturare la valenza. In questo caso gli elettroni di legame sono localizzati tra atomi di provenienza e si forma un legame *fortemente direzionale*.
- Formazione del legame covalente:
 1. Condivisione degli elettroni di valenza.
 2. Vi è sovrapposizione degli orbitali atomici a formare l'orbitale molecolare
 3. Il legame avviene nella direzione di maggiore sovrapposizione ed è fortemente direzionale

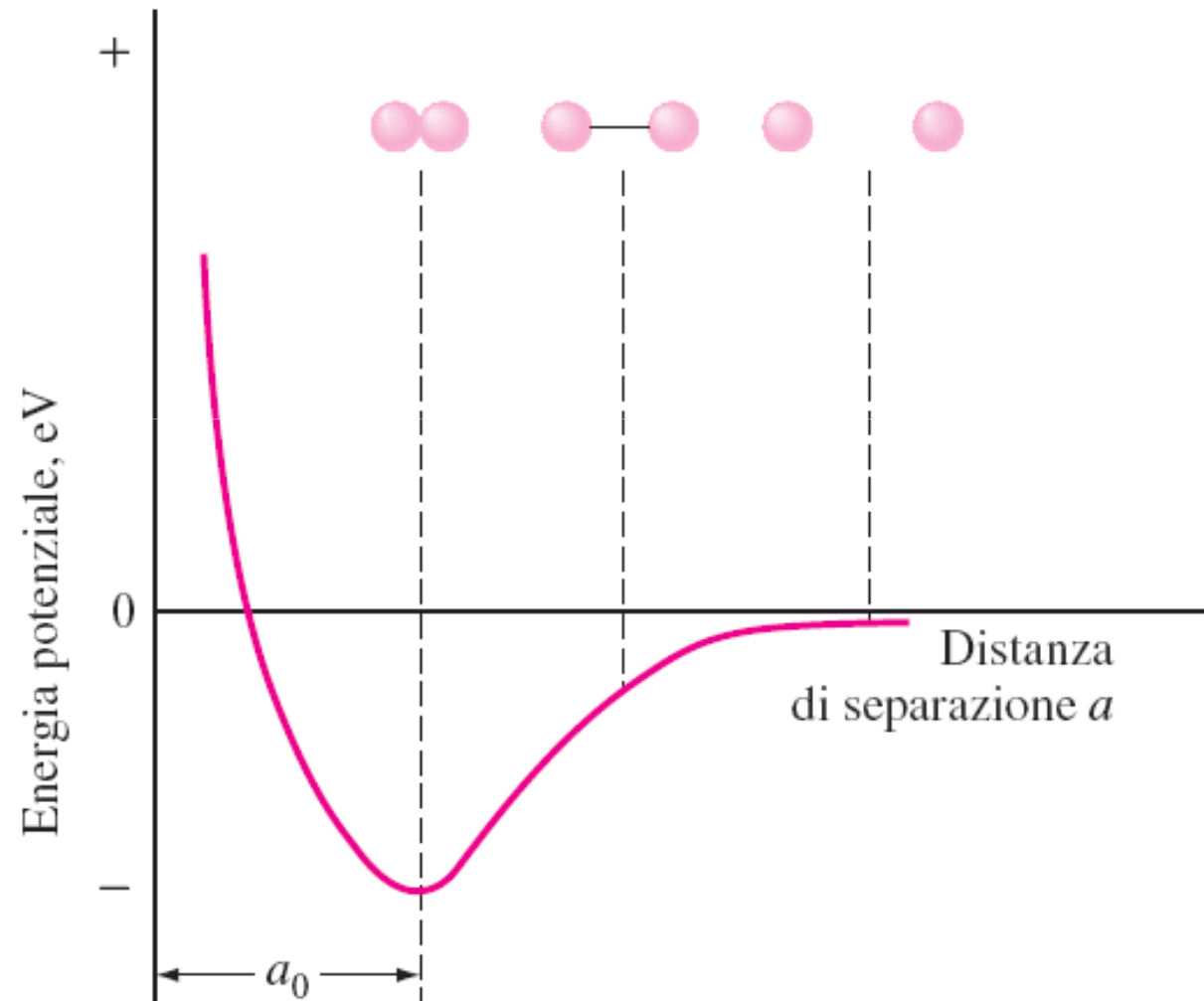


Legame covalente

Molecola
di idrogeno



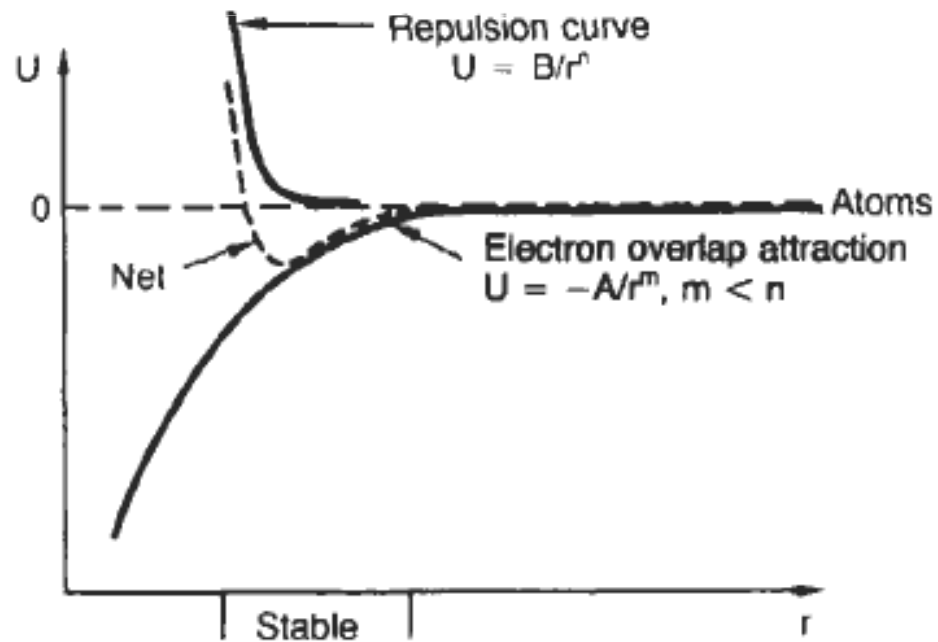
Legame covalente: Energia di legame vs distanza interatomica



Il legame covalente: Energia di legame vs distanza interatomica



- La condivisione di elettroni comporta una riduzione del livello energetico del sistema e la formazione di un legame stabile la cui energia è ben descritta dall'equazione empirica:

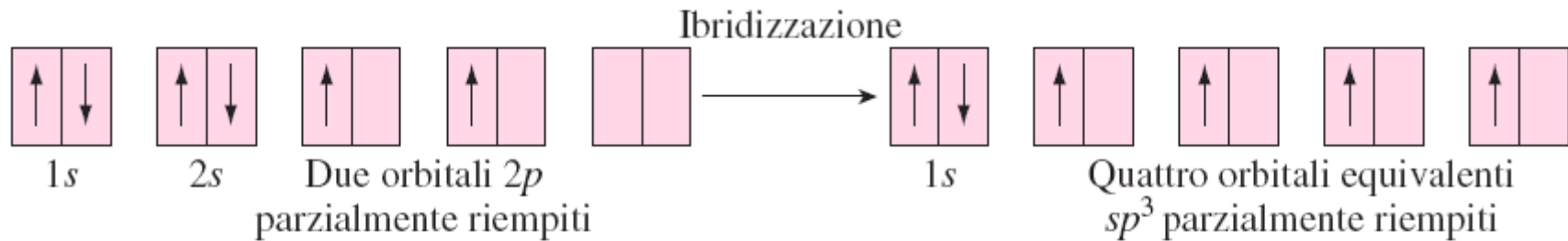


$$U = - \underbrace{\frac{A}{r^m}}_{\text{attractive part}} + \underbrace{\frac{B}{r^n}}_{\text{repulsive part}} \quad (m < n).$$

Il legame covalente: Molecole biatomiche

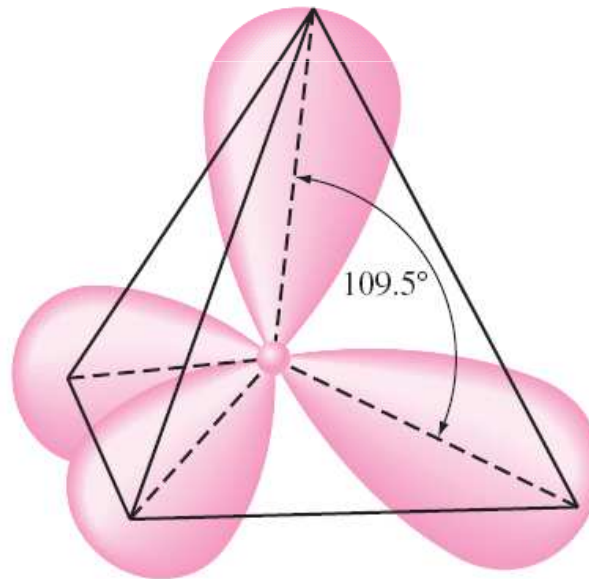


Il legame covalente: Composti a base carbonio



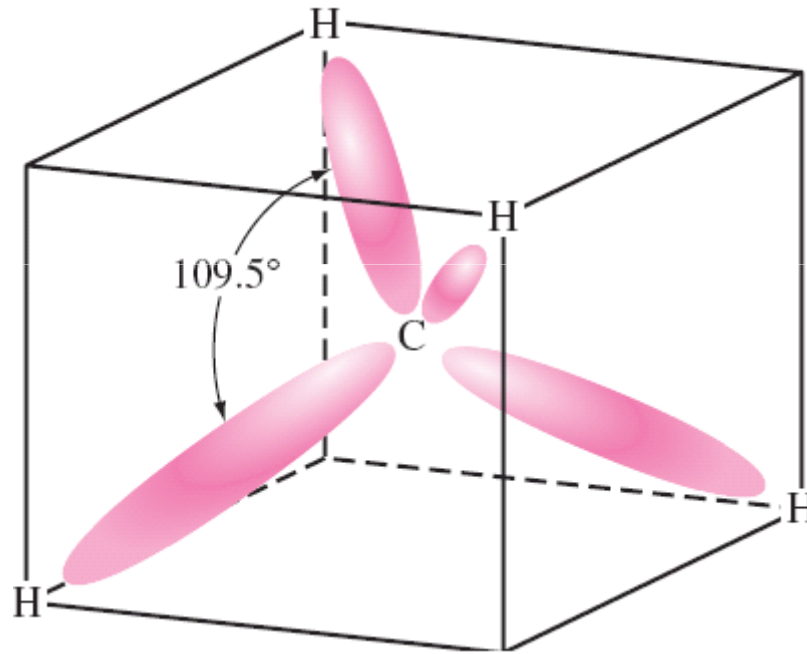
Disposizione base degli orbitali

Disposizione ibridizzata degli orbitali sp^3

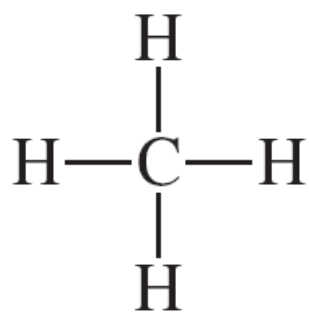


Il legame covalente: Metano

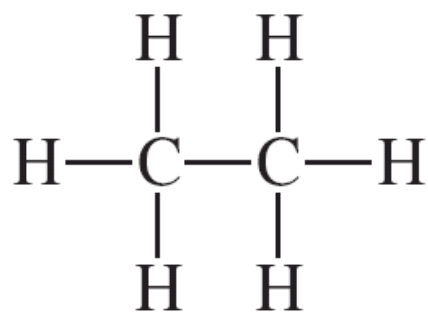
(CH₄)



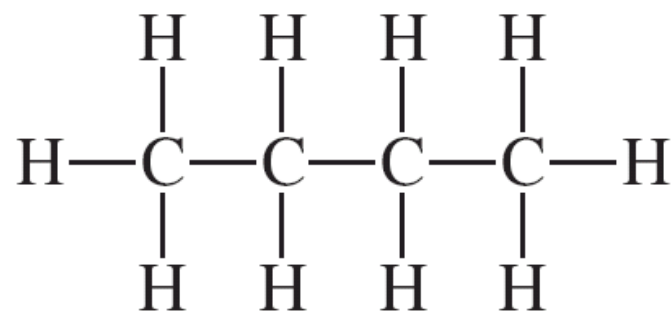
Il legame covalente: esempi



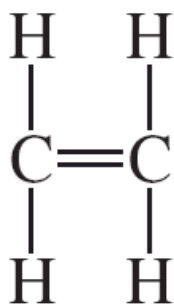
Metano
tf = $-183\text{ }^{\circ}\text{C}$



Etano
tf = $-172\text{ }^{\circ}\text{C}$



n-Butano
tf = $-135\text{ }^{\circ}\text{C}$



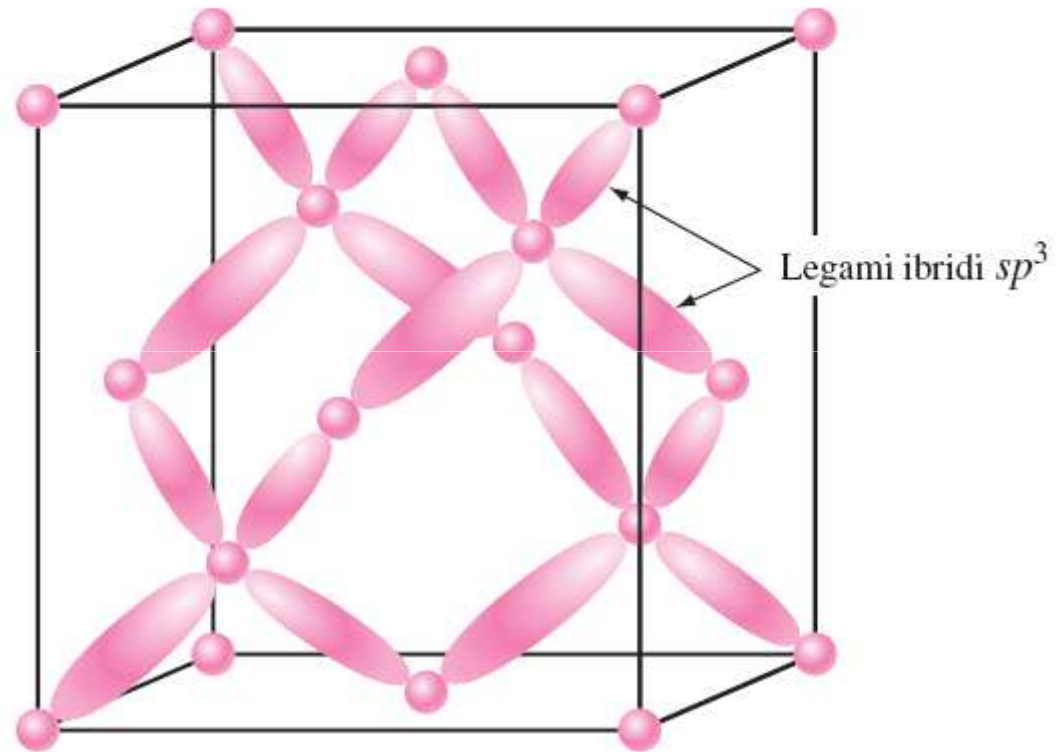
Etilene
tf = $-169.4\text{ }^{\circ}\text{C}$



Acetilene
tf = $-81.8\text{ }^{\circ}\text{C}$

Il legame covalente: esempi

Diamante



Energia di legami covalenti semplici (kJ/mole)

Tabella 9.2 Energie di legame medie (kJ/mol)

Legame	Energia	Legame	Energia	Legame	Energia	Legame	Energia
Legami singoli							
H—H	432	N—H	391	Si—H	323	S—H	347
H—F	565	N—N	160	Si—Si	226	S—S	266
H—Cl	427	N—P	209	Si—O	368	S—F	327
H—Br	363	N—O	201	Si—S	226	S—Cl	271
H—I	295	N—F	272	Si—F	565	S—Br	218
		N—Cl	200	Si—Cl	381	S—I	~170
C—H	413	N—Br	243	Si—Br	310		
C—C	347	N—I	159	Si—I	234	F—F	159
C—Si	301					F—Cl	193
C—N	305	O—H	467	P—H	320	F—Br	212
C—O	358	O—P	351	P—Si	213	F—I	263
C—P	264	O—O	204	P—P	200	Cl—Cl	243
C—S	259	O—S	265	P—F	490	Cl—Br	215
C—F	453	O—F	190	P—Cl	331	Cl—I	208
C—Cl	339	O—Cl	203	P—Br	272	Br—Br	193
C—Br	276	O—Br	234	P—I	184	Br—I	175
C—I	216	O—I	234			I—I	151

Energia di legami covalenti doppi e tripli (kJ/mole)

Tabella 9.2 Energie di legame medie (kJ/mol)

Legame	Energia	Legame	Energia	Legame	Energia	Legame	Energia
Legami multipli							
C=C	614	N=N	418	C≡C	839	N≡N	945
C=N	615	N=O	607	C≡N	891		
C=O	745	O ₂	498	C≡O	1070		
	(799 in CO ₂)						

Energia legame covalente vs ordine di legame

Tabella 9.4 Relazione tra ordine di legame, lunghezza di legame ed energia di legame

Legame	Ordine di legame	Lunghezza di legame media (pm)	Energia di legame media (kJ/mol)
C—O	1	143	358
C=O	2	123	745
C≡O	3	113	1070
C—C	1	154	347
C=C	2	134	614
C≡C	3	121	839
N—N	1	146	160
N=N	2	122	418
N≡N	3	110	945

Solidi ionico-covalenti

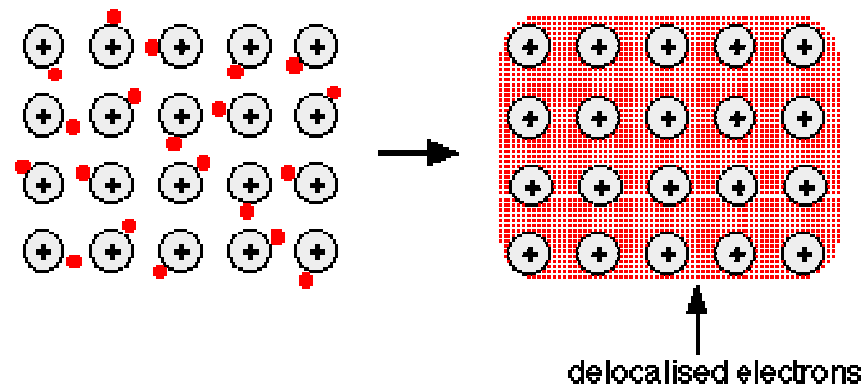
Tabella 10.2 Percentuale di carattere ionico e covalente nel legame di alcuni composti ceramici

Composto ceramico	Atomi di legame	Differenza di elettronegatività	% di carattere ionico	% di carattere covalente
Biossido di zirconio, ZrO_2	Zr-O	2.3	73	27
Ossido di magnesio, MgO	Mg-O	2.2	69	31
Ossido di alluminio, Al_2O_3	Al-O	2.0	63	37
Biossido di silicio, SiO_2	Si-O	1.7	51	49
Nitruro di silicio, Si_3N_4	Si-N	1.3	34.5	65.5
Carburo di silicio, SiC	Si-C	0.7	11	89

Legami primari: Il legame metallico

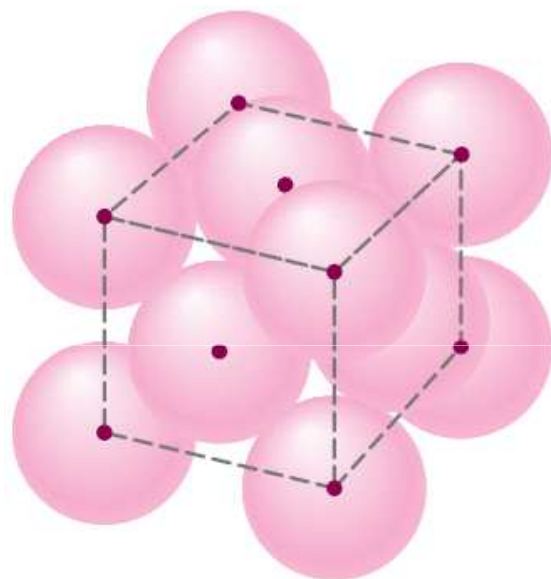


- Nel legame metallico gli elettroni di valenza formano una nube elettronica dislocata tra gli ioni positivi. In questo caso gli elettroni di legame sono delocalizzati tra atomi di provenienza e si forma un legame *adirezionale*.
- le strutture cristalline risultanti sono molto dense.

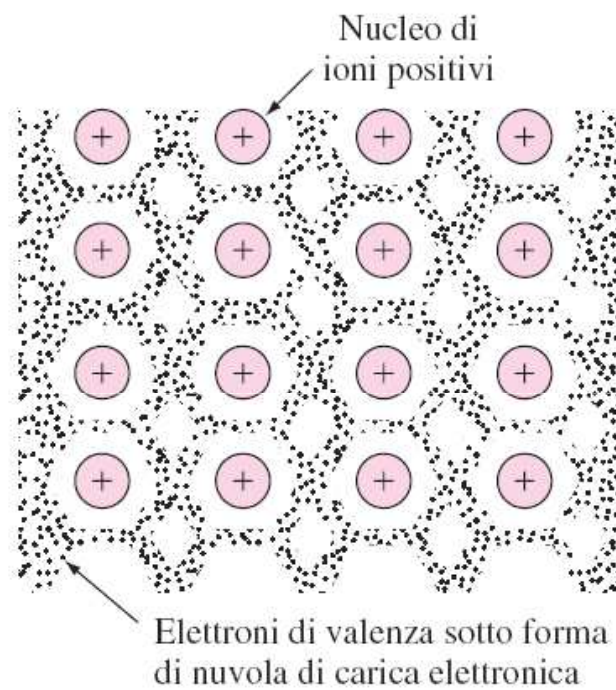


- Quando vi è un riarrangiamento atomico i legami non si rompono e questo consente una buona deformabilità dei metalli.
- I metalli di transizione (Fe, Ni, ecc.) hanno un legame intermedio tra quello metallico e quello covalente, pertanto sono meno duttili di Au o Cu!

Legame metallico

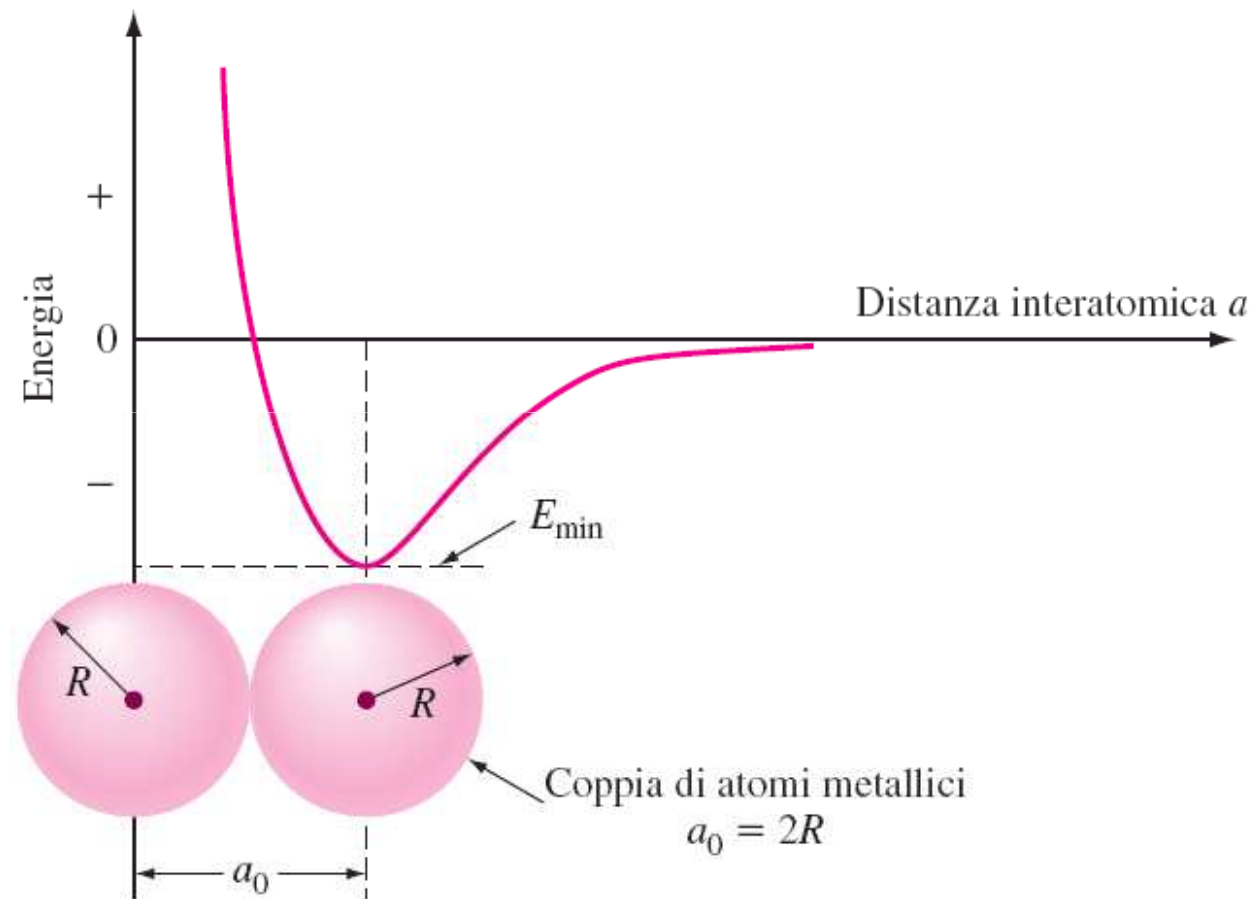


(a)



(b)

Legame metallico: *Energia di legame vs distanza interatomica*



Legame metallico:

Energia di legame (kJ/mole) e temperatura di fusione (°C)

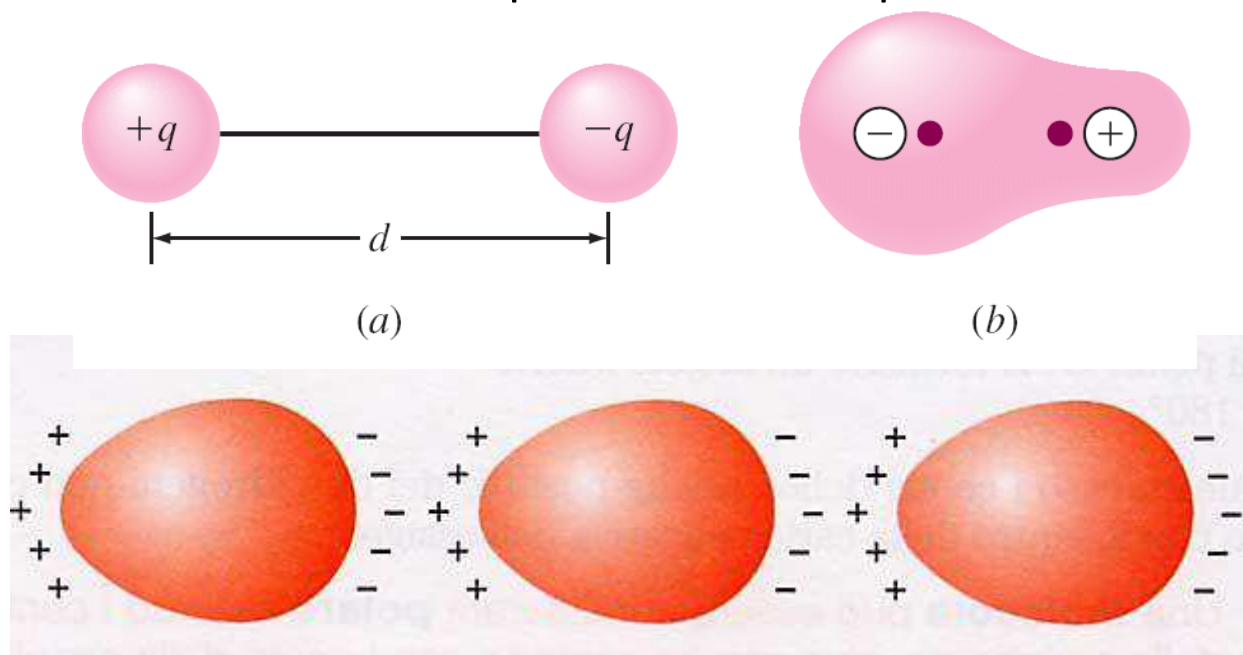
Tabella 2.9 Energie di legame, temperature di fusione e configurazioni elettroniche dei metalli del quarto periodo della tavola periodica degli elementi

Elemento	Configurazione elettronica	Energia di legame		Temperatura di fusione (°C)
		kJ/mol	kcal/mol	
K	$4s^1$	89.6	21.4	63.5
Ca	$4s^2$	177	42.2	851
Sc	$3d^1 4s^2$	342	82	1397
Ti	$3d^2 4s^2$	473	113	1660
V	$3d^3 4s^2$	515	123	1730
Cr	$3d^5 4s^1$	398	95	1903
Mn	$3d^5 4s^2$	279	66.7	1244
Fe	$3d^6 4s^2$	418	99.8	1535
Co	$3d^7 4s^2$	383	91.4	1490
Ni	$3d^8 4s^2$	423	101	1455
Cu	$3d^{10} 4s^1$	339	81.1	1083
Zn	$4s^2$	131	31.2	419
Ga	$4s^2 4p^1$	272	65	29.8
Ge	$4s^2 4p^2$	377	90	960

Legami secondari: Interazioni di Van der Waals

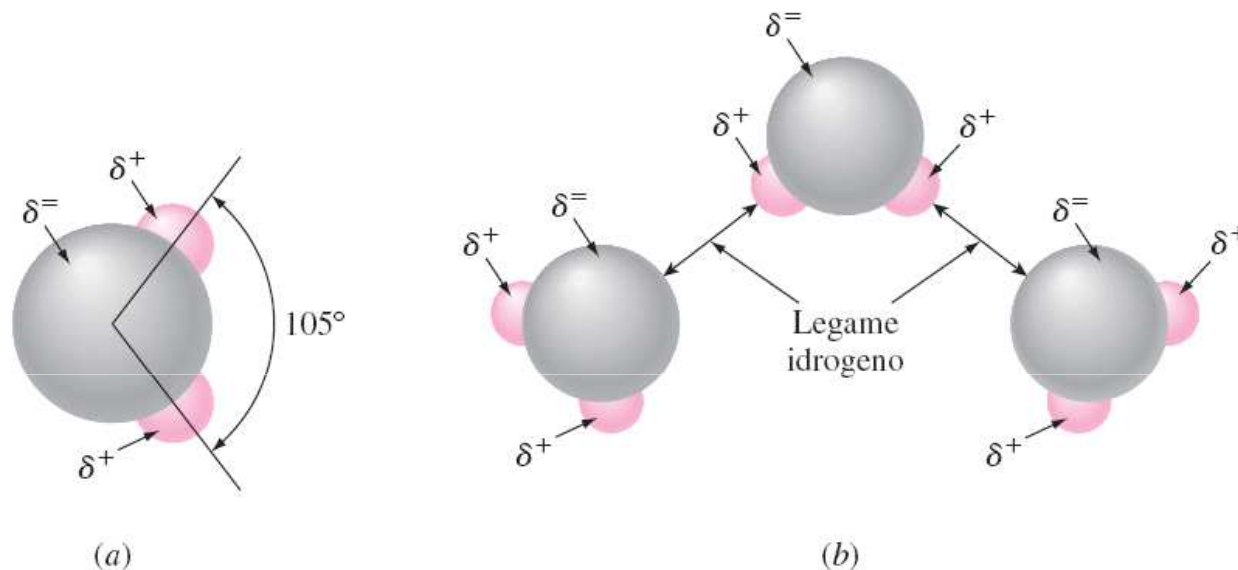
legami dipolo-dipolo in molecole polari (es. H_2O , NH_3)

Quando gli atomi si uniscono a formare le molecole può succedere che si creino degli spostamenti di carica che portano alla separazione del centro di massa delle cariche positive e negative, con la conseguente formazione di un momento di dipolo elettrico. Le molecole di questo tipo vengono dette “polari”. Un esempio illustre di molecola polare è quello dell’acqua. In questo modo le due distribuzioni di carica positiva e negativa hanno i loro baricentri in due punti diversi e quindi la molecola si comporta come un dipolo elettrico.



Legami secondari: Legame idrogeno

Esempi: H₂O, HF, HCl,...

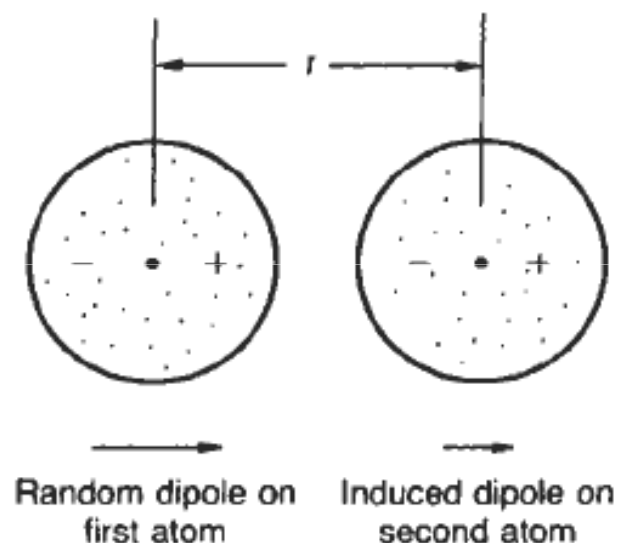


E' un legame dipolo-dipolo particolarmente forte che si stabilisce tra molecole in cui il polo positivo è sull'H e quello negativo su uno dei seguenti atomi: F , O , N , Cl caratterizzati da una elevata elettronegatività.

Legami secondari: Interazioni di Van der Waals

legami dipolo istantaneo-dipolo indotto in molecole simmetriche quindi apolari (es. gas nobili)

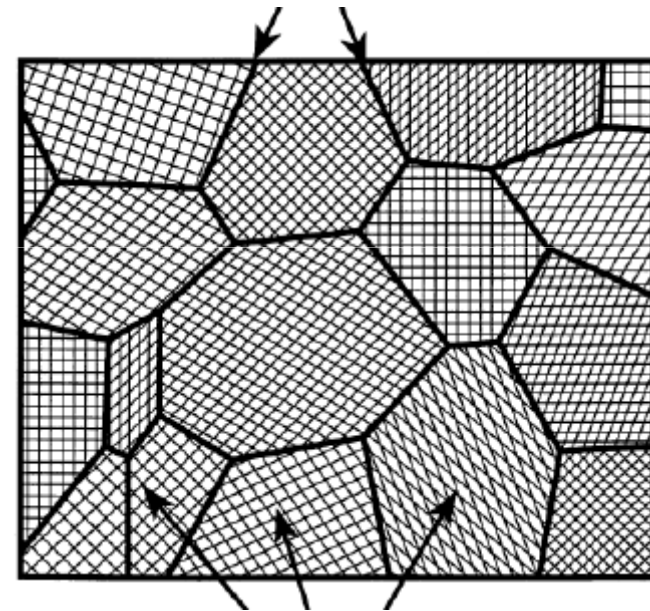
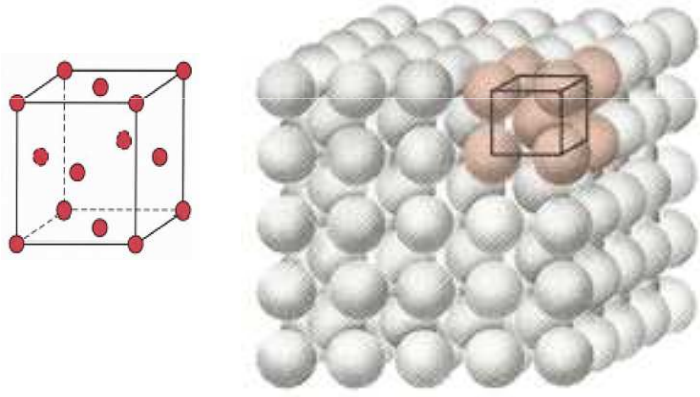
In una molecola apolare il movimento degli elettroni determina la formazione di un dipolo istantaneo che determina una piccolissima forza di attrazione tra le molecole.



$$U = - \underbrace{\frac{A}{r^6}}_{\text{attractive part}} + \underbrace{\frac{B}{r^n}}_{\text{repulsive part}}$$

Struttura dei materiali: materiali cristallini

- I materiali cristallini sono caratterizzati da una distribuzione regolare e ripetitiva degli atomi nello spazio che definisce la **struttura cristallina**.
- L'unità strutturale di base la cui trasposizione nello spazio dà luogo ai cristalli si chiama **cella unitaria o cella elementare**.

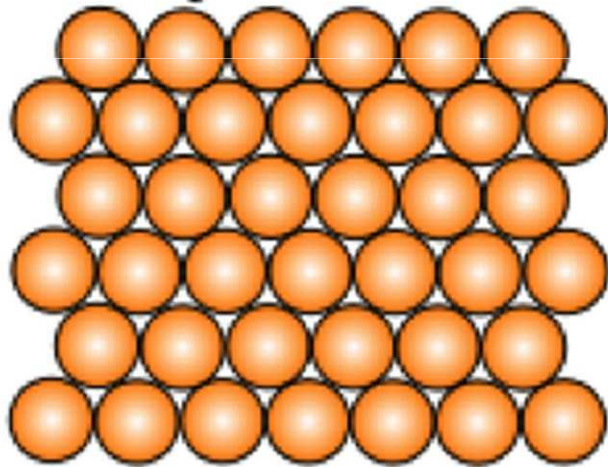


- Materiale monocristallino: la cella unitaria si ripete in tutto il materiale
- Materiale policristallino: è formato da un insieme di regioni cristalline dette grani cristallini a diversa orientazione

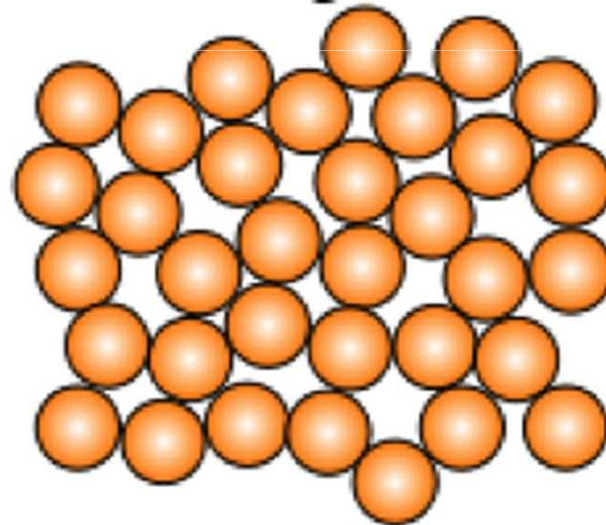
Struttura dei materiali: materiali amorfi

I materiali amorfi sono caratterizzati da una distribuzione disordinata degli atomi nello spazio.

Crystalline



Amorphous



Sistemi cristallini



Le diverse strutture cristalline possono essere divise in gruppi sulla base della forma della cella unitaria, indipendentemente dalla posizione occupata dagli atomi all'interno della cella. Questi gruppi prendono il nome di **sistemi cristallini**

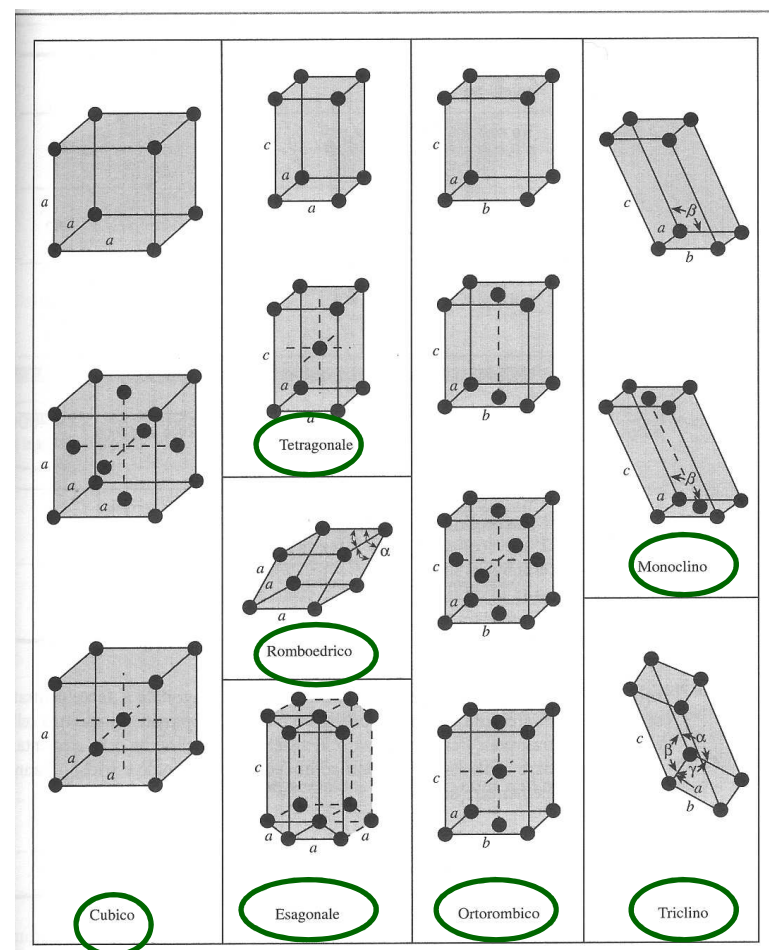
I sistemi cristallini sono completamente descritti da **6 parametri**, individuati su un sistema di coordinate x,y,z la cui origine viene posta in corrispondenza di un vertice della cella ed i cui assi vengono fatti coincidere con tre spigoli della cella. I sei parametri reticolari risultano così essere:

a,b,c dimensioni reticolari lungo i tre assi

α,β,γ angoli tra gli assi

Tutte le strutture cristalline sono raggruppate in

7 sistemi cristallini

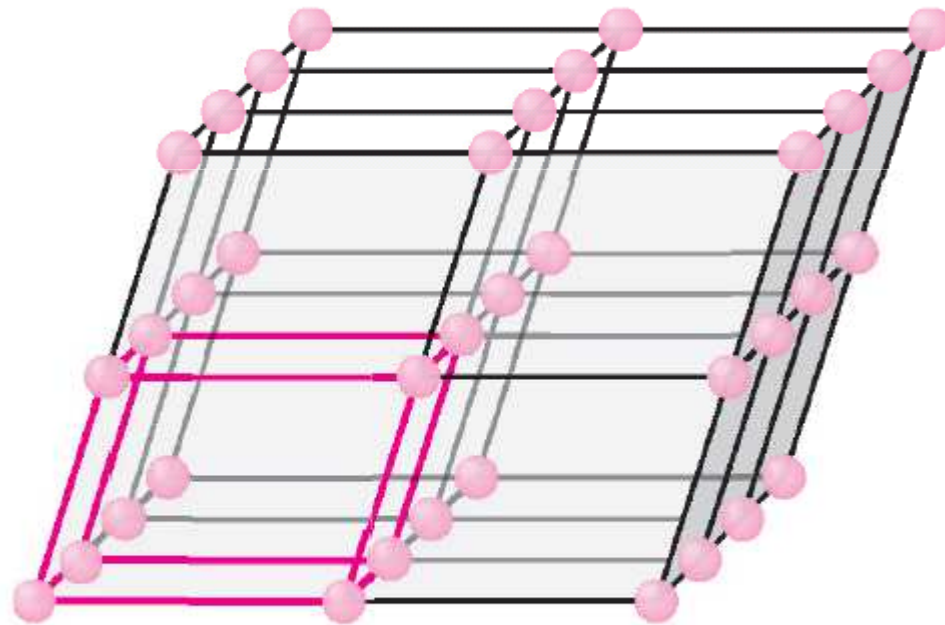


Sistemi cristallini

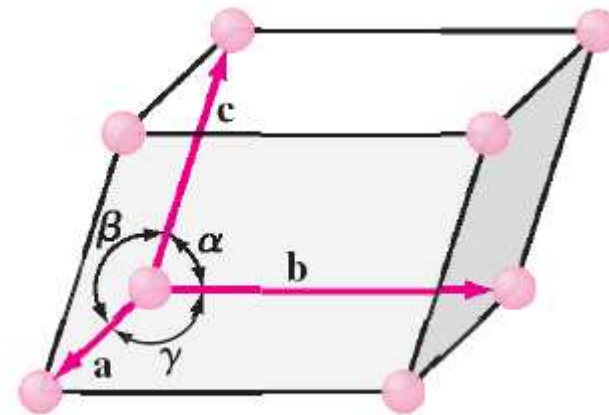
sistema di coordinate (x, y, z):

origine in un **vertice** della cella

assi coincidono gli **spigoli** della cella



(a)
solido cristallino



(b)
cella unitaria

Le strutture cristalline

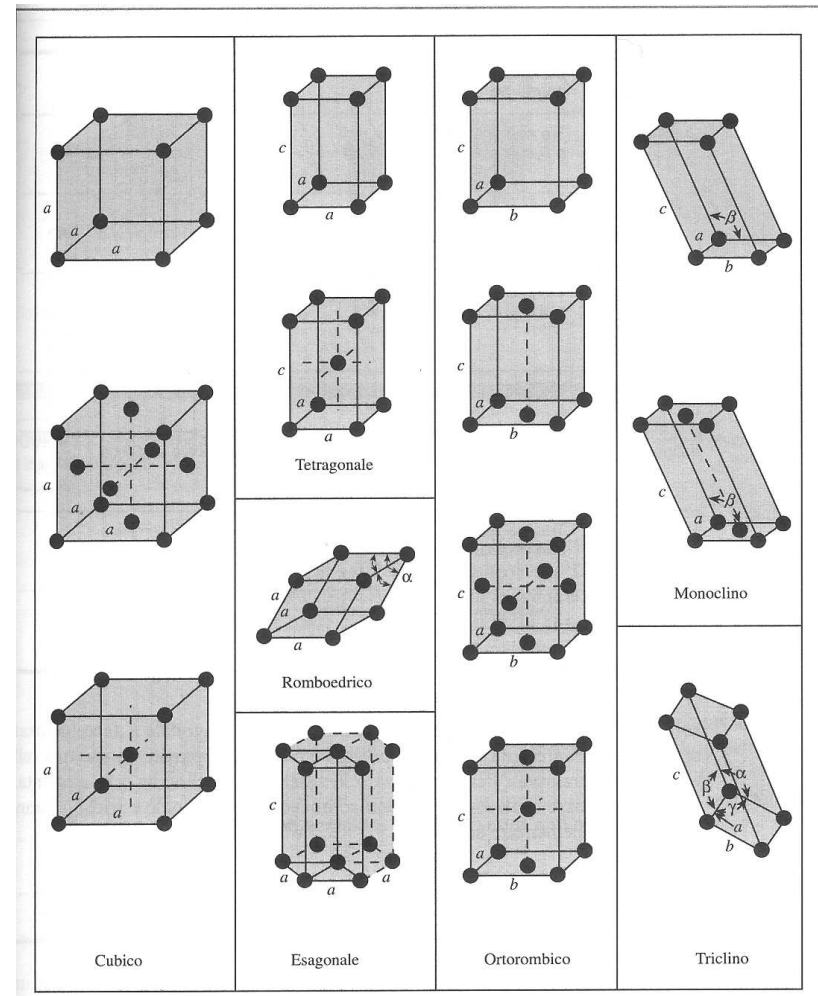


7 tipi di sistemi cristallini danno origine a tutti i possibili tipi di reticolo
Possibili varianti nell'unità elementare base

4 tipi di celle elementare:

- Semplice
- Corpo centrato
- Facce centrate
- Base centrata

• Reticoli di Bravais: 14 celle elementari standard



Le strutture cristalline

Le strutture cristalline sono raggruppabili in:

7 sistemi cristallini

e 14 reticoli di Bravais

Tabella 3.1 Classificazione dei reticoli spaziali per mezzo del sistema cristallino

Sistema cristallino	Lunghezza degli assi e angoli tra gli assi	Reticolo spaziale
Cubico	Tre assi uguali con angoli retti $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Cubico semplice Cubico corpo centrato Cubico facce centrate
Tetragonale	Tre assi con angoli retti, due uguali $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Tetragonale semplice Tetragonale corpo centrato
Ortorombico	Tre assi disuguali con angoli uguali $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Ortorombico semplice Ortorombico corpo centrato Ortorombico assi centrati Ortorombico facce centrate
Romboedrico	Tre assi uguali, ugualmente inclinati $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Romboedrico semplice
Esagonale	Due assi uguali a 120° , terzo asse con angoli retti $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Esagonale semplice
Monoclino	Tre assi disuguali, una coppia non con angolo retto $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Monoclino semplice Monoclino basi centrate
Triclino	Tre assi disuguali, inclinati in modo disuguale, nessuno con angoli retti $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Triclino semplice

Materiali metallici

(a) cubica a corpo centrato (CCC)

Fe α , Cr, W, Mo...

(b) cubica a facce centrate (CFC)

Cu, Ni, Ag, Au, Fe γ , ...

(c) esagonale compatta (EC)

Zn, Cd, Co, Ti...

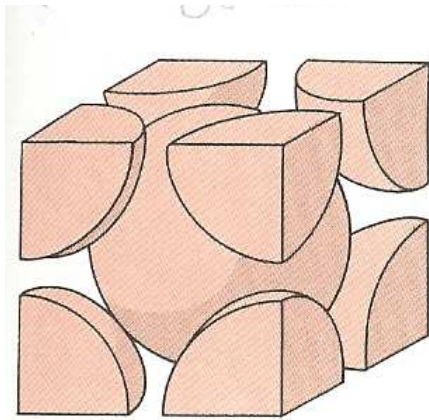
Le strutture cristalline nei metalli



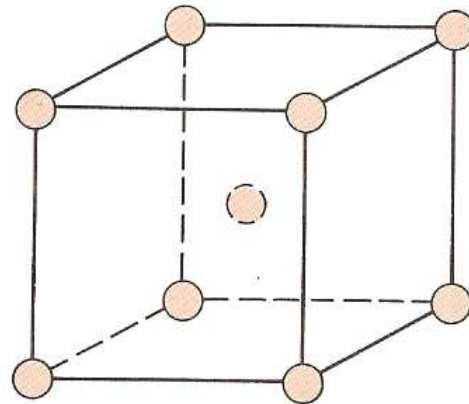
CCC

- Fattore di compattazione atomica (FCA)=0,68
- Numero di atomi per cella = 2
- Numero di coordinazione = 8

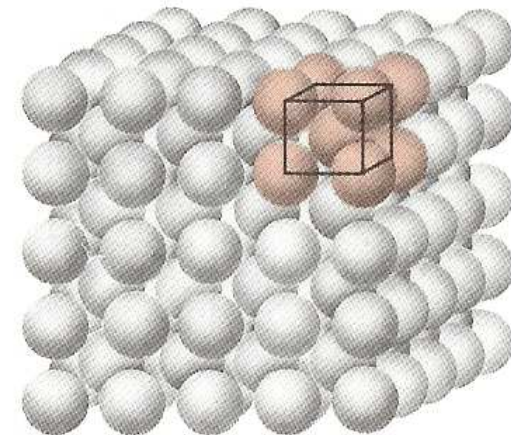
$$FCA = \frac{\text{Vol}_{\text{atomi nella cella}}}{\text{Vol}_{\text{cella}}}$$



(a)

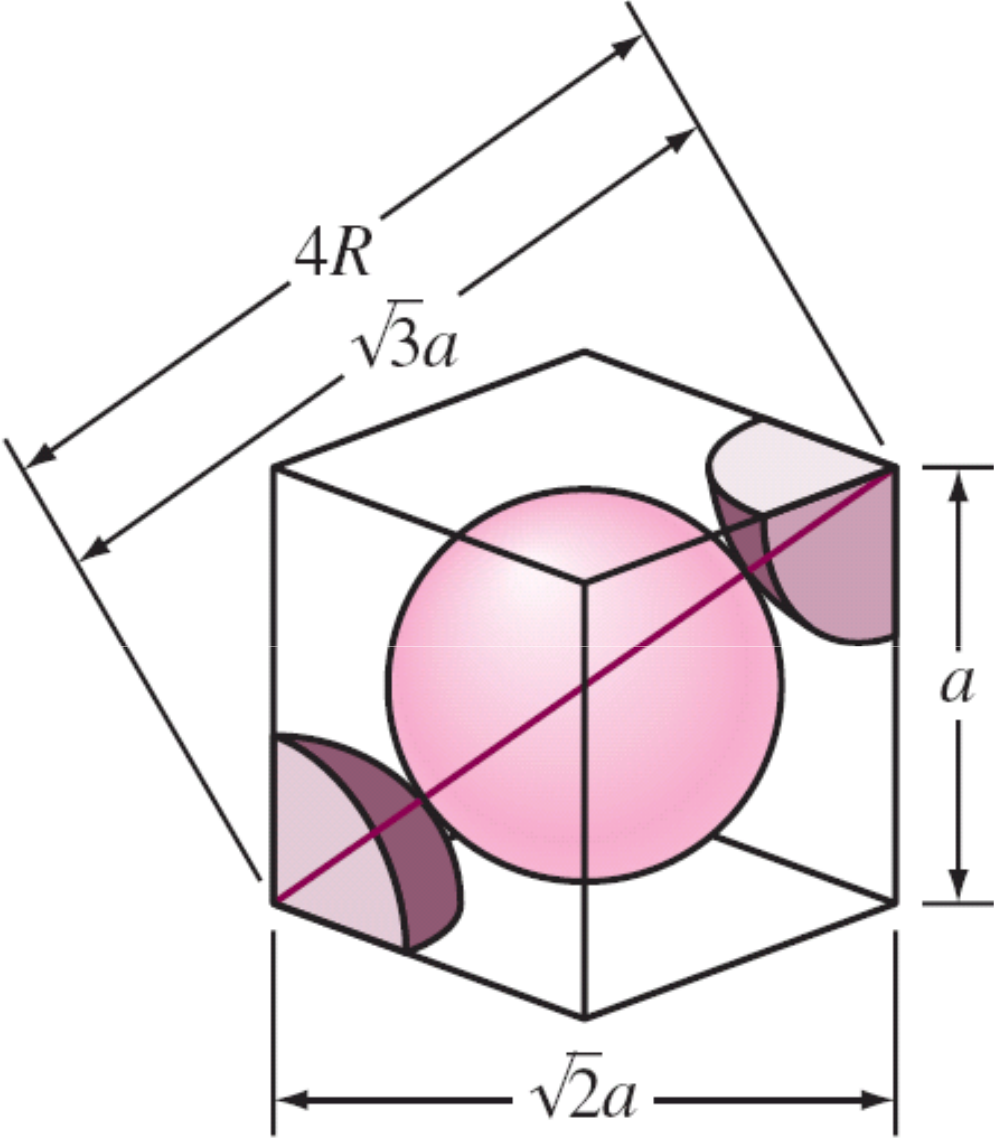


(b)



(c)

CCC



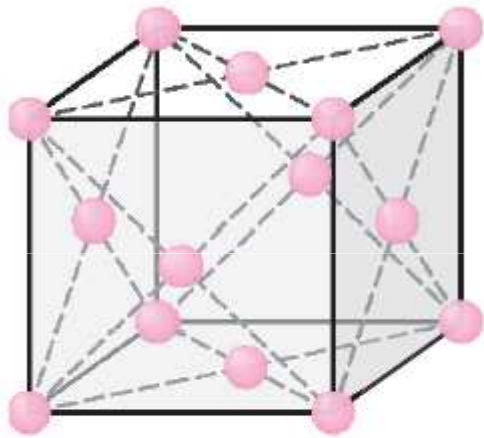
$$\sqrt{3}a = 4R$$

Tabella 3.2 Metalli con struttura cristallina CCC a temperatura ambiente (20 °C) e valori delle costanti reticolari e dei raggi atomici

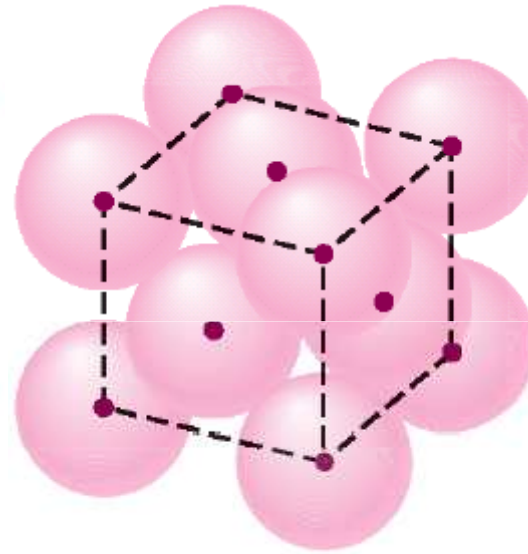
Metallo	Costante reticolare a (nm)	Raggio atomico R^* (nm)
Cromo	0.289	0.125
Ferro	0.287	0.124
Molibdeno	0.315	0.136
Potassio	0.533	0.231
Sodio	0.429	0.186
Tantalio	0.330	0.143
Tungsteno	0.316	0.137
Vanadio	0.304	0.132

*Calcolato dalle costanti reticolari usando l'Equazione (3.1), $R = \sqrt{3}a/4$.

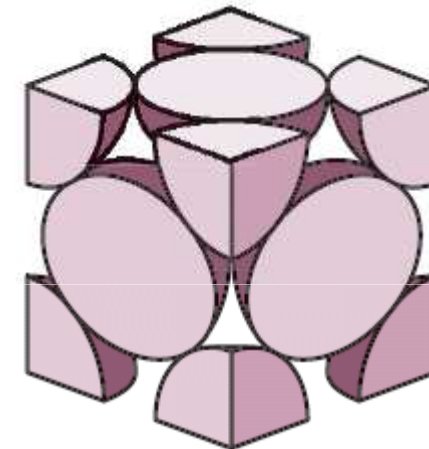
Cubica a facce centrate (CFC)



(a)



(b)



(c)

- 4** atomi per cella
- 12** numero di coordinazione
- 0.74** fattore di compattazione atomica

Cubica a facce centrate (CFC)

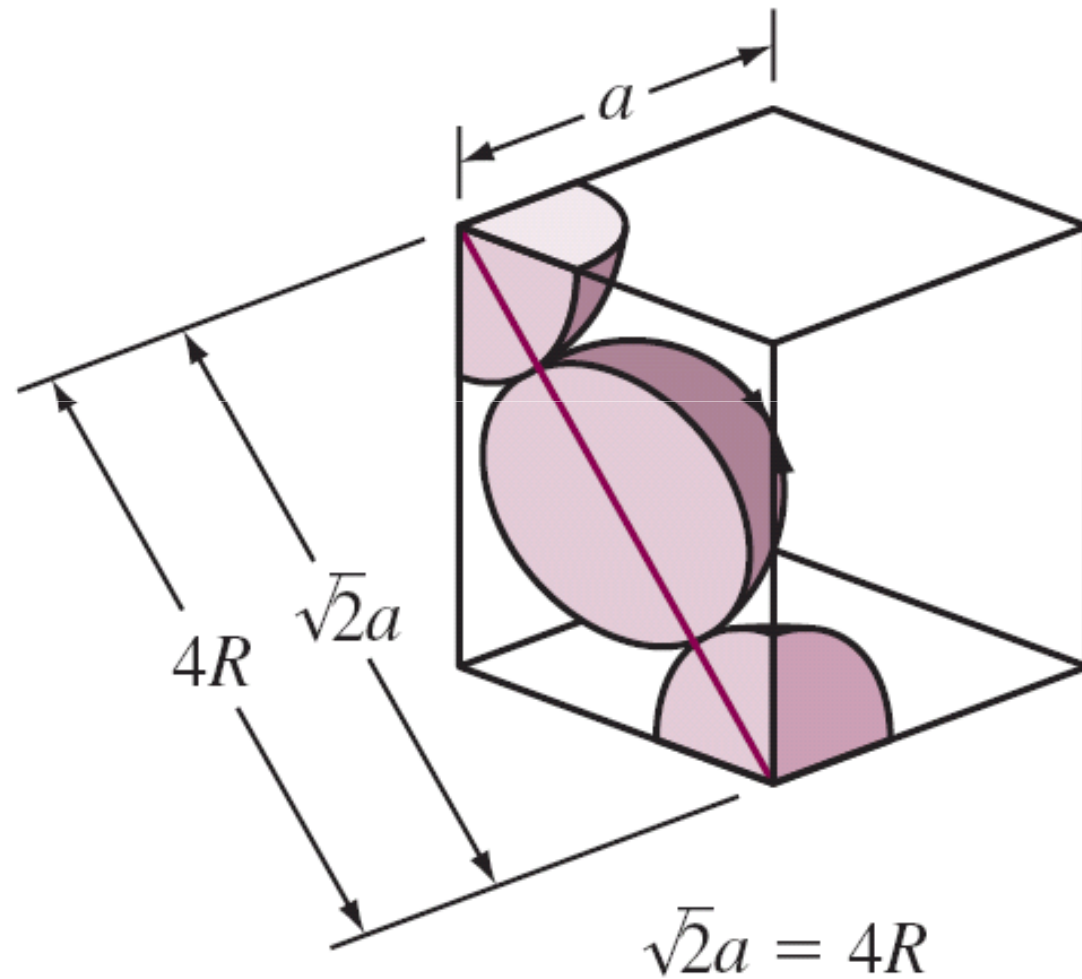
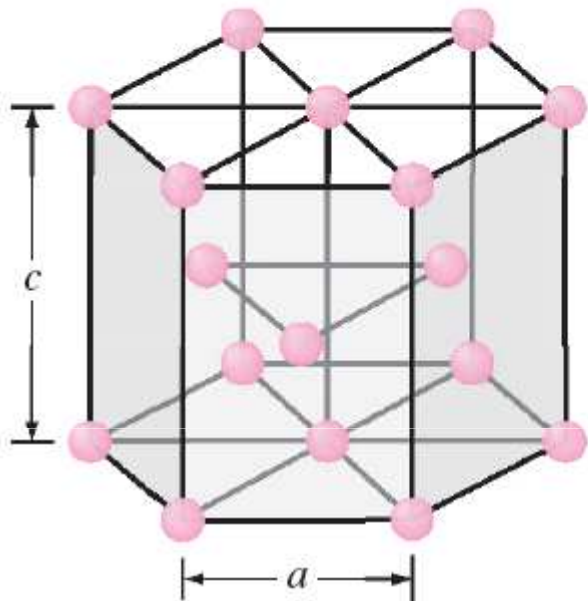


Tabella 3.3 Metalli che hanno struttura cristallina CFC a temperatura ambiente (20 °C) e valori delle costanti reticolari e dei raggi atomici

Metallo	Costante reticolare a (nm)	Raggio atomico R^* (nm)
Alluminio	0.405	0.143
Rame	0.3615	0.128
Oro	0.408	0.144
Piombo	0.495	0.175
Nichel	0.352	0.125
Platino	0.393	0.139
Argento	0.409	0.144

*Calcolato dalle costanti reticolari usando l'Equazione (3.3), $R = \sqrt{2}a/4$.

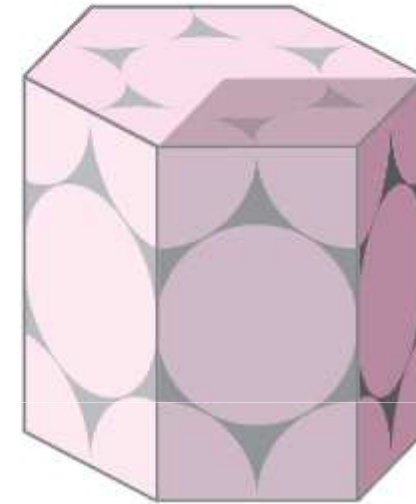
Esagonale compatta (EC)



(a)



(b)



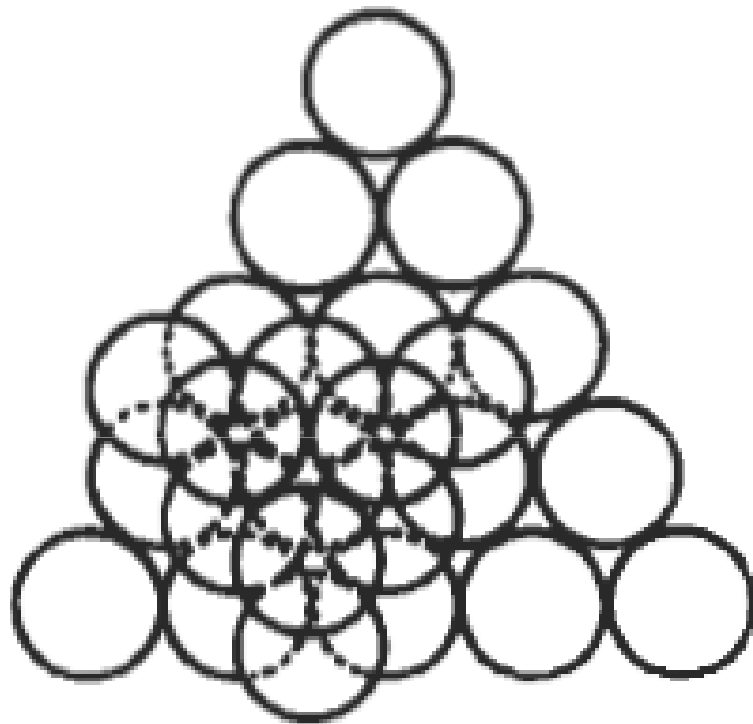
(c)

- 6** numero di atomi per cella
- 12** numero di coordinazione
- 0.74** fattore di compattazione atomica
- 1.633** valore teorico di c/a

Tabella 3.4 Metalli con struttura cristallina EC a temperatura ambiente (20 °C) e valori delle costanti reticolari, dei raggi atomici e dei rapporti c/a

Metallo	Costanti reticolari (nm)			Raggio atomico R (nm)	Rapporto c/a	% di deviazione dall'EC ideale
	a	c				
Cadmio	0.2973	0.5618		0.149	1.890	+15.7
Zinco	0.2665	0.4947		0.133	1.856	+13.6
EC ideale					1.633	0
Magnesio	0.3209	0.5209		0.160	1.623	-0.66
Cobalto	0.2507	0.4069		0.125	1.623	-0.66
Zirconio	0.3231	0.5148		0.160	1.593	-2.45
Titanio	0.2950	0.4683		0.147	1.587	-2.81
Berillio	0.2286	0.3584		0.113	1.568	-3.98

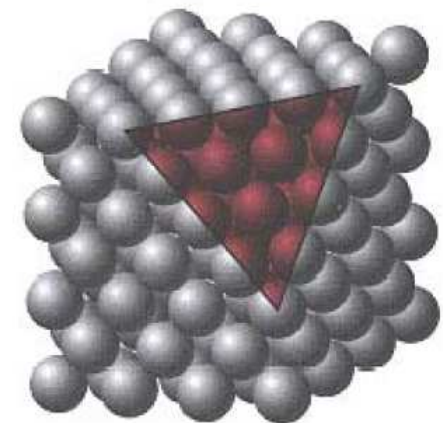
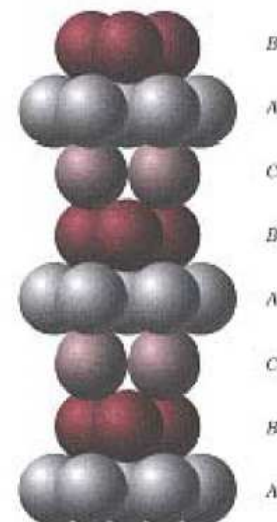
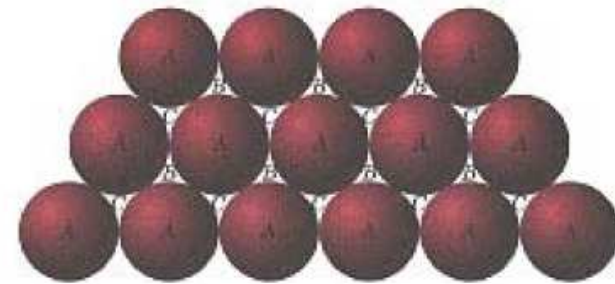
Le strutture cristalline nei metalli



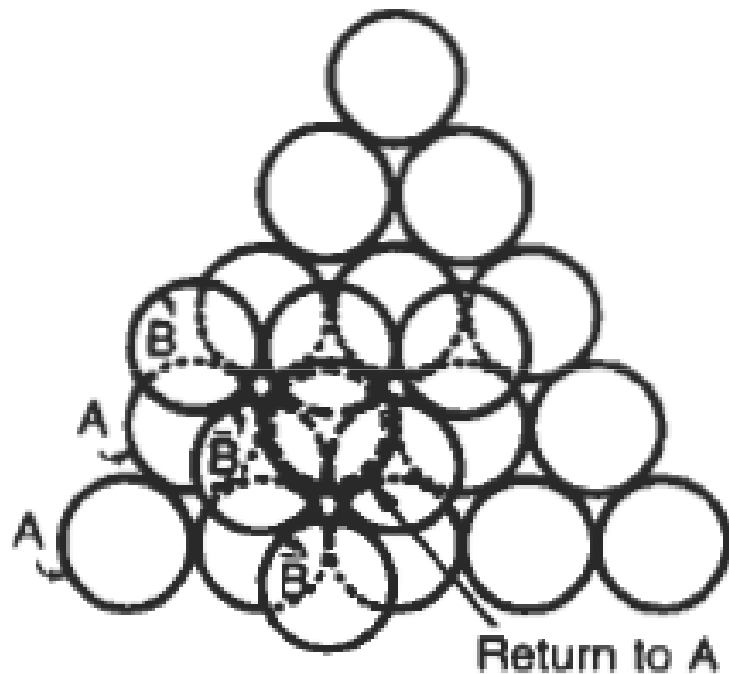
C added

Stacking sequence is ABCABC

CFC: sequenza ABC ABC ABC

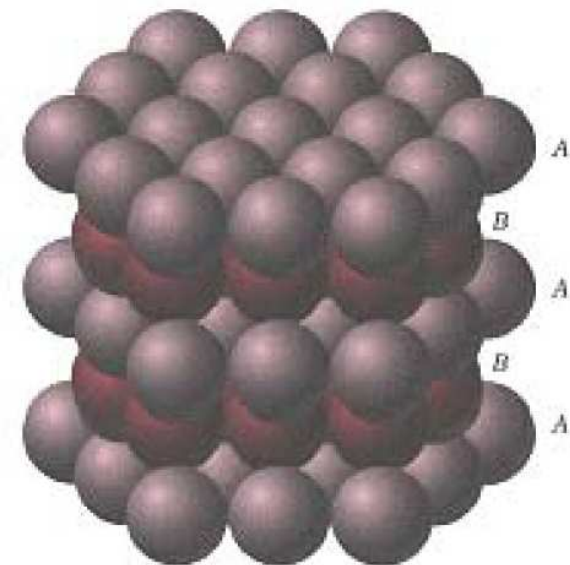


Le strutture cristalline nei metalli



Stacking sequence is ABAB...

EC: sequenza AB AB AB



Le strutture cristalline nei metalli

CCC: sequenza AB AB AB

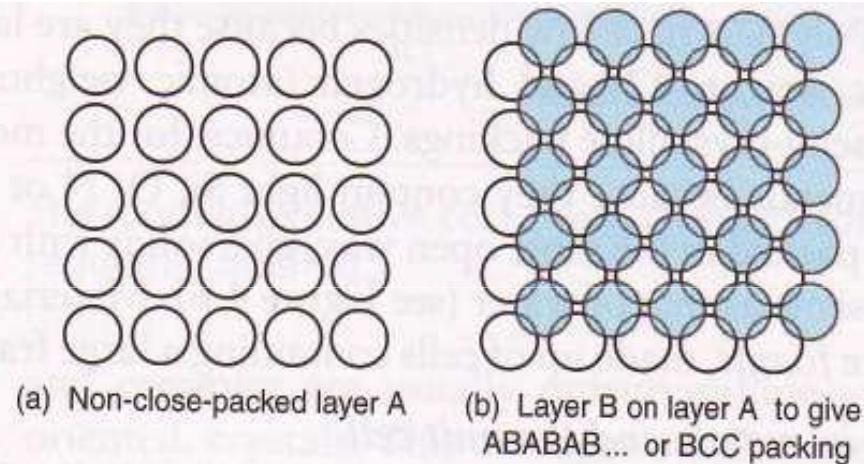


Figure 4.9 (a) A square grid of spheres; it is a less efficient packing than that of the previous figure. (b) A second layer, B, nesting in the first, A; repeating this sequence gives ABAB... packing. If the sphere spacing is adjusted so that the gray spheres lie on the corners of a cube, the result is the non-close-packed BCC structure.

Polimorfismo



- **Attenzione:** la forma cristallina stabile, che garantisce il conseguimento della minima energia del cristallo, dipende dalle condizioni di temperatura e può variare con questa

Polimorfismo e allotropia

• Quando un composto (polimorfismo) o un elemento (allotropia) presenta strutture cristalline diverse in funzione di P e T.

• Forme cristalline diverse possono occupare volumi diversi!

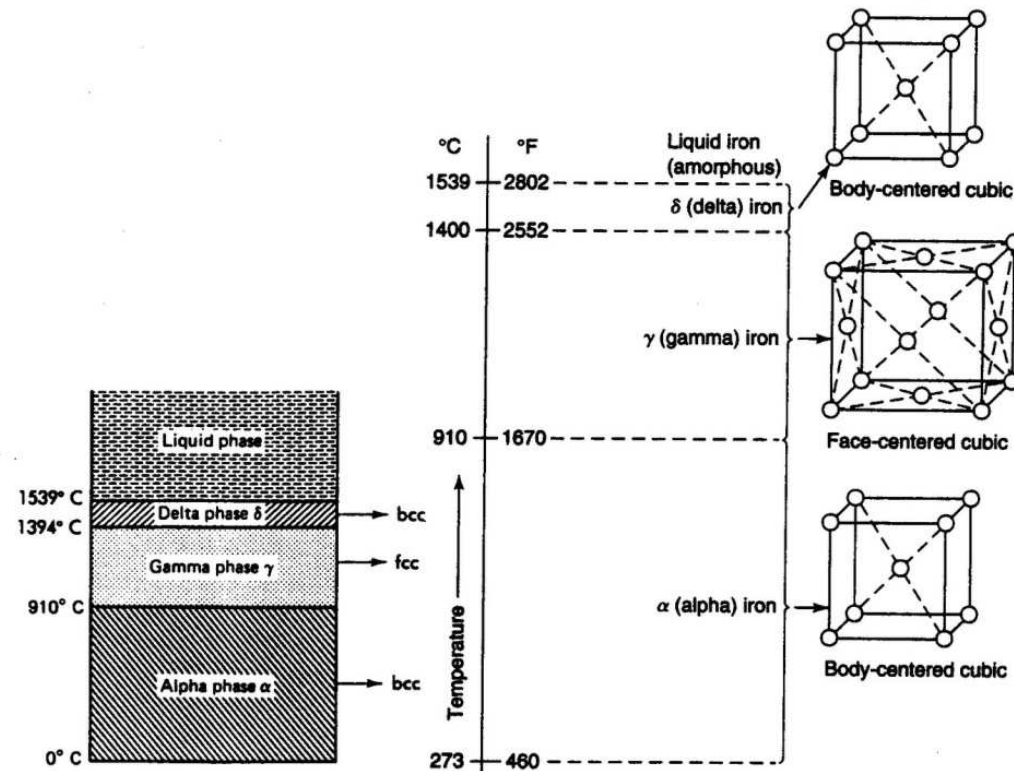


Figure 3-54 Allotropic forms of iron (three phases: bcc, fcc, bcc).

Polimorfismo o allotropia

Tabella 3.5 Forme cristalline allotropiche di alcuni metalli

Metallo	Struttura cristallina a temperatura ambiente	Ad altre temperature
Ca	CFC	CCC (> 447 °C)
Co	EC	CFC (> 427 °C)
Hf	EC	CCC (> 1742 °C)
Fe	CCC	CFC (912–1394 °C) CCC (> 1394 °C)
Li	CCC	EC (< -193 °C)
Na	CCC	EC (< -233 °C)
Tl	EC	CFC (> 234 °C)
Ti	EC	CFC (> 883 °C)
Y	EC	CFC (> 1481 °C)
Zr	EC	CFC (> 872 °C)

Esercizio

Si calcoli il FCA per la cella CCC.

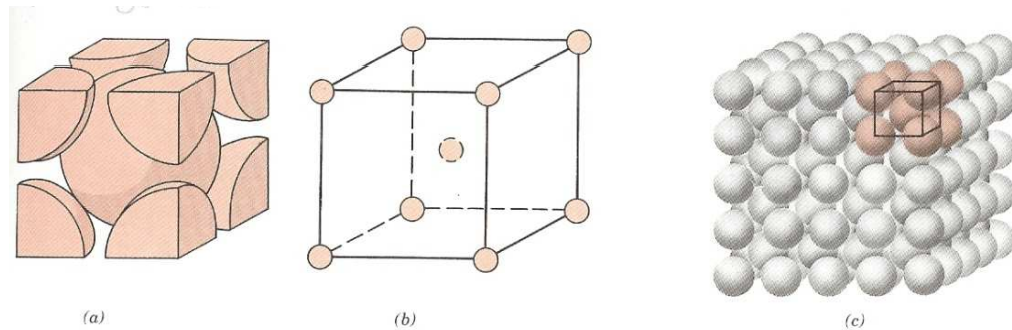
$$FCA = \frac{\text{Vol cella occupato dagli atomi}}{\text{Vol cella}}$$

Numero di atomi per cella = 2

Volume della cella = a^3

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

$$\text{Fattore di compattazione atomica (FCA)} = \frac{2 * (4/3\pi R^3)}{a^3} = 0,68$$



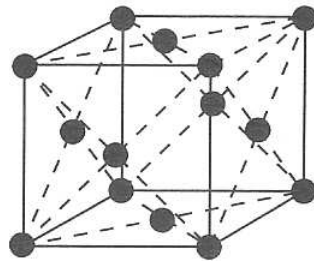
Esercizio

Si calcoli il FCA per la cella CFC.

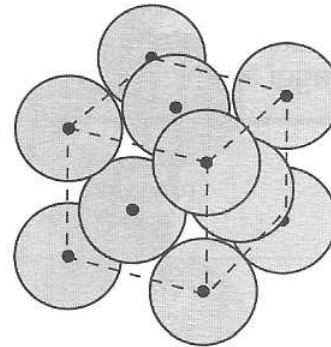
Numero di atomi per cella = 4

Volume della cella = a^3

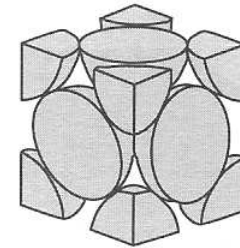
$$a\sqrt{2} = 4R$$



(a)



(b)



(c)

$$\text{Fattore di compattazione atomica (FCA)} = \frac{4 * (4/3\pi R^3)}{a^3} = 0,74$$

Densità volumetrica

La conoscenza della struttura cristallina permette di calcolare la densità nel modo seguente:

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

- n è il numero di atomi che appartengono alla cella
 - A è il peso atomico
 - V_c è il volume della cella unitaria
 - N_A è il numero di Avogadro
-

Es. – densità volumetrica

Esercizio: il molibdeno Mo ha un raggio atomico di 0.136 nm, un peso atomico di 95.94 g/mole e una struttura cristallina CCC. Calcolarne la densità.

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

$$n = 2 \text{ atomi}$$

$$V_c = a^3 = \left(\frac{4R}{\sqrt{3}} \right)^3 = \left(\frac{4 \cdot 0.136 \text{ nm}}{\sqrt{3}} \right)^3 = 0.031 \text{ nm}^3$$

$$N_A = 6.023 \times 10^{23} \text{ atomi / mole}$$

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{n \cdot A}{V_c \cdot N_A} = \frac{2 \cdot 95.94 \text{ g / mol}}{0.031 \text{ nm}^3 \cdot 6.023 \times 10^{23} / \text{mol}} = \frac{2 \cdot 95.94 \text{ g / mol}}{0.031 \times 10^{-21} \text{ cm}^3 \cdot 6.023 \times 10^{23} / \text{mol}} = \\ &= \frac{2 \cdot 95.94 \text{ g}}{0.031 \cdot 6.023 \times 10^2 \text{ cm}^3} = 10.28 \text{ g / cm}^3 \end{aligned}$$

Es. – densità volumetrica

Esercizio: l' alluminio Al ha un raggio atomico di 0.143 nm, un peso atomico di 26.98 g/mole e una struttura cristallina FCC. Calcolarne la densità.

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

$$n = 4 \text{ atomi}$$

$$V_c = a^3 = \left(\frac{4R}{\sqrt{2}} \right)^3 = \left(\frac{4 \cdot 0.143 \text{ nm}}{\sqrt{2}} \right)^3 = 0.066 \text{ nm}^3$$

$$N_A = 6.023 \times 10^{23} \text{ atomi / mole}$$

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{n \cdot A}{V_c \cdot N_A} = \frac{4 \cdot 26.98 \text{ g / mol}}{0.066 \text{ nm}^3 \cdot 6.023 \times 10^{23} / \text{mol}} = \frac{4 \cdot 26.98 \text{ g / mol}}{0.066 \times 10^{-21} \text{ cm}^3 \cdot 6.023 \times 10^{23} / \text{mol}} = \\ &= \frac{4 \cdot 26.98 \text{ g}}{0.066 \cdot 6.023 \times 10^2 \text{ cm}^3} = 2.71 \text{ g / cm}^3 \end{aligned}$$

Es. – densità volumetrica

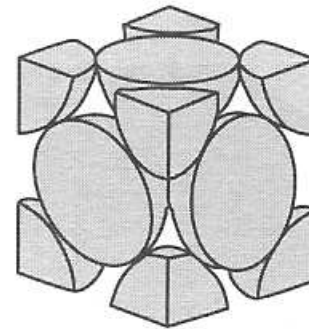
- *Esercizio*

Calcolare la densità volumetrica in Mg/m³ del rame che presenta una struttura cristallina CFC.

Dati: $R_{\text{Cu}}=0,1278$ nm, $M_{\text{Cu}}=63,54$ g/mole, $N_{\text{A}}=6,02 \cdot 10^{23}$ atomi/mole

Soluzione:

$$\rho_v = \frac{\text{massa cella}}{\text{volume cella}}$$



(c)

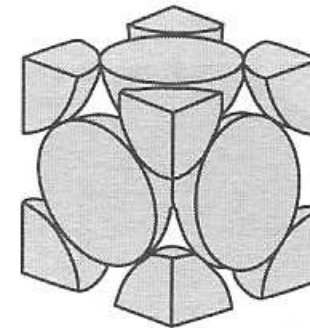
Es.- densità volumetrica

Soluzione:

$$m = \frac{(4\text{atomi}) \cdot \left(63.54 \frac{\text{g}}{\text{mol}}\right)}{6.02 \cdot 10^{23} \frac{\text{atomi}}{\text{mol}}} = 4.22 \cdot 10^{-22} \text{g} = 4.22 \cdot 10^{-28} \text{Mg}$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = \frac{4 \cdot (0,1278 \cdot 10^{-9} \text{m})}{\sqrt{2}} = 0,361 \cdot 10^{-9} \text{m}$$

$$V = a^3 = (0,361 \cdot 10^{-9} \text{m})^3 = 4.70 \cdot 10^{-29} \text{m}^3$$



(c)

$$\rho_v = \frac{m}{V} = \frac{4.22 \cdot 10^{-28} \text{Mg}}{4.70 \cdot 10^{-29} \text{m}^3} = 8.98 \text{Mg} / \text{m}^3$$
