

## Homework 3

La frazione di siti reticolari occupati da vacanze nell'oro a 800°C è  $2.5 \times 10^{-5}$ . Calcolare il numero di vacanze per metro cubo assumendo la densità del metallo  $18.45 \text{ g/cm}^3$  e il peso atomico  $196.97 \text{ g/mol}$ .

**[ $1.41 \times 10^{24}$ ]**

Un metallo a 750°C ha una concentrazione di vacanze all'equilibrio pari a  $2.8 \times 10^{24} \text{ vacanze/m}^3$ . Se la densità ed il peso atomico sono  $5.6 \text{ g/cm}^3$  e  $65.6 \text{ g/mol}$ , calcolare la concentrazione di vacanze a tale temperatura in rapporto ai siti reticolari.

**[ $5.45 \times 10^{-5}$ ]**

Calcolare la concentrazione di vacanze (frazione di siti) nel piombo alla sua temperatura di fusione (327°C) assumendo una energia di attivazione per la formazione di vacanze pari a  $0.55 \text{ eV/atomo}$ . Calcolare inoltre la concentrazione di vacanze a temperatura ambiente (25°C).

**[ $2.4 \times 10^{-5}$ ;  $5.1 \times 10^{-10}$ ]**

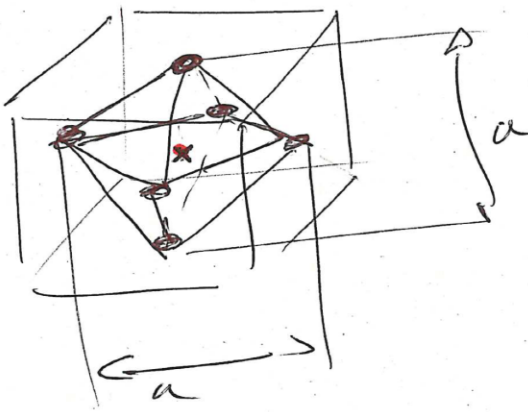
Calcolare l'energia di attivazione per la formazione di vacanze nell'alluminio sapendo che la concentrazione di equilibrio a 500°C è  $7.57 \times 10^{23} \text{ vacanze/m}^3$ . La densità a tale temperatura è  $2.62 \text{ g/cm}^3$  e il peso atomico  $26.98 \text{ g/mol}$ .

**[ $72.3 \text{ kJ/mol} = 0.75 \text{ eV/particella}$ ]**

Calcolare il raggio atomico massimo che può avere un elemento interstiziale che non introduce nessuna distorsione in siti tetraedrici ed ottaedrici di strutture FCC e BCC.

FCC

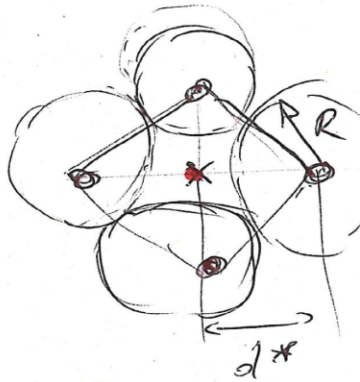
OTTAEDRICO



IL CENTRO DEL SITO OTTAEDRICO DISTA  $a/2$  DA TUTTI GLI ATOMI SUI VERTICI.

$$d^* = \frac{a}{2} = \frac{4R}{2\sqrt{2}} = \sqrt{2}R$$

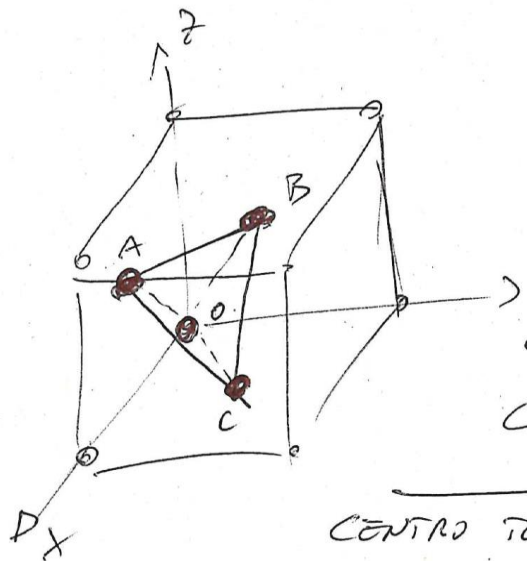
VISTA ALL'ALITO:



PER AVERE LA DIMENSIONE MASSIMA ( $r^*$ ) di UN ATOMO NEL SITO DEVO SOTTRARRE A  $d^*$  IL RAGGIO DEGLI ATOMI  $R$ .

$$r^* = \sqrt{2}R - R = (\sqrt{2} - 1)R \approx 0.41R$$

# FCC TETRAEDRON



POSIZ.

O	0	0	0
A	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
B	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
C	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0

CENTRO TETRAEDRO  $\frac{1}{4} \quad \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}$

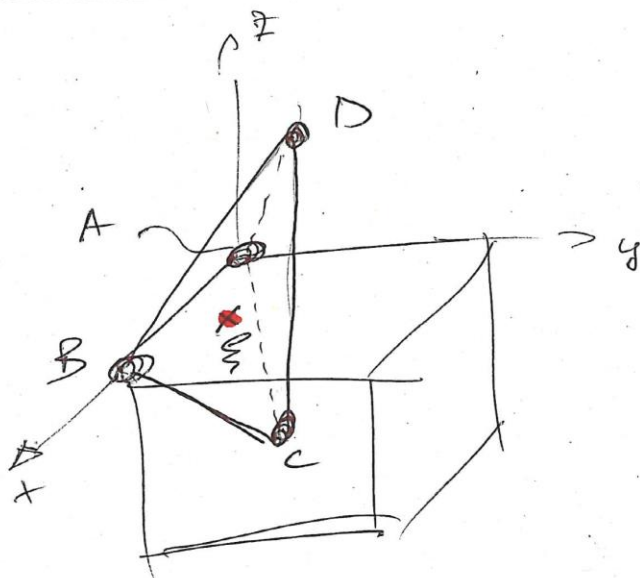
$$\text{CENTRO TET} - O = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4}} \quad a = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} \Rightarrow \text{CENTRO TET} - O = \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot \frac{4R}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{2}} R$$

$$r^* = \sqrt{\frac{3}{2}} R - R = \left( \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \right) R \approx 0.225 R$$



TETRAEDRO BCC



POSIZIONI

A	0	0	0
B	1	0	0
C	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
D	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$
E	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	0

$$\overline{AB} = \overline{CD} = a \quad \overline{BD} = \overline{AD} = \overline{BC} = \overline{AC} = \frac{\sqrt{3}}{2} a \quad (\text{mezza diagonale cubo})$$

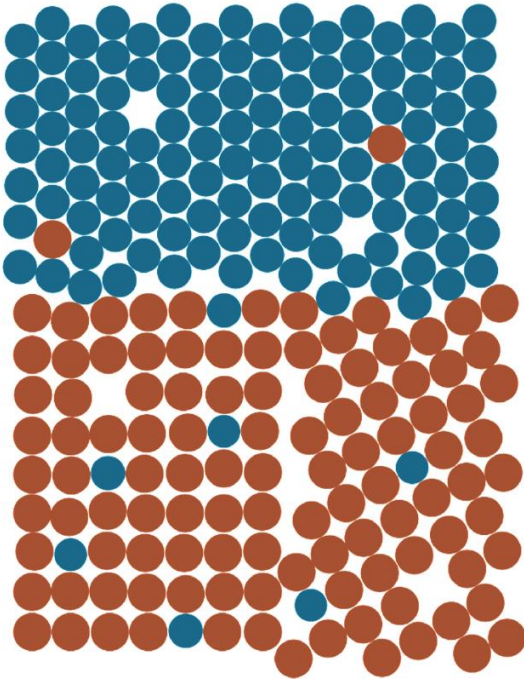
$\frac{Q}{4} \bar{E}$  EQUIDISTANTE DA TUTTI I VERTICI

$$\begin{aligned} \sqrt{\text{VERTICAL}} - e_3 &= \sqrt{\left(\frac{1}{2}a\right)^2 + \left(\frac{1}{4}a\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{1}{16}} a = \frac{\sqrt{5}}{4} a = \\ &= \frac{\sqrt{5}}{4} \cdot \frac{4R}{\sqrt{3}} = \sqrt{\frac{5}{3}} R \end{aligned}$$

$$r^* = \sqrt{\frac{5}{3}} R \quad R = \left( \sqrt{\frac{5}{3}} - 1 \right) R \approx 0.291 R$$

Data la rappresentazione qualitativa di una microstruttura sotto riportata, rispondere se le seguenti affermazioni sono vere o false:

- a) Tutte le fasi hanno una simile concentrazione di vacanze
- b) Sono presenti due tipi di elementi e due fasi
- c) Nessuna fase presenta elementi interstiziali
- d) Solo un grano cristallino della fase rossa è presente
- e) Sono presenti difetti sostituzionali
- f) La concentrazione di impurezza sostituzionali nelle due fasi è simile



[V; V; V; F; V; F]

Data la tabella sotto riportata stimare quali elementi hanno completa solubilità sostituzionale, quali solubilità sostituzionale parziale e quali possono formare soluzioni interstiziali nel rame.

<i>Element</i>	<i>Atomic Radius (nm)</i>	<i>Crystal Structure</i>	<i>Electronegativity</i>	<i>Valence</i>
Cu	0.1278	FCC	1.9	+2
C	0.071			
H	0.046			
O	0.060			
Ag	0.1445	FCC	1.9	+1
Al	0.1431	FCC	1.5	+3
Co	0.1253	HCP	1.8	+2
Cr	0.1249	BCC	1.6	+3
Fe	0.1241	BCC	1.8	+2
Ni	0.1246	FCC	1.8	+2
Pd	0.1376	FCC	2.2	+2
Pt	0.1387	FCC	2.2	+2
Zn	0.1332	HCP	1.6	+2

**[Ni,Pd,Pt= sostituzionale completa; Ag, Al, Co,Cr,Fe,Zn=sostituzionale incompleta; C, H, O = interstiziali]**

Determinare la composizione atomica di una lega contenete 30wt% di Zn e 70wt% di Cu (usare la tavola periodica per reperire i dati mancanti).

**[Zn=29.4 at%; Cu=70.6 at%]**

Calcolare la composizione in peso di una lega contenente 6 at% Pb e 94 at% Sn (usare la tavola periodica per reperire i dati mancanti).

**[Pb=10.0 wt%; Sn=90.0 wt%]**

Una lega viene prodotta a partire da 218.0 kg di Ti, 14.6 kg di Al, e 9.7 kg di V. Calcolare la composizione in wt% e at%(usare la tavola periodica per reperire i dati mancanti).

**[Ti = 90.0wt%=86.2 at%; Al = 6wt% = 10.2 at%; V = 4 wt% = 3.6 wt%]**

Una lega Al-Mg viene prodotta fondendo una miscela contenente 2 vol% di Mg. Conoscendo la densità di Al (2.70 g/cm<sup>3</sup>) e Mg (1.74 g/cm<sup>3</sup>), determinare la composizione in at%.

**[Mg = 1.44 at%; Al = 98.56 at%]**

Calcolare la composizione molare degli ossidi che formano un vetro sodico calcico con la seguente composizione ponderale:

71.4 SiO<sub>2</sub>; 1.0 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; 13.9 Na<sub>2</sub>O; 0.4 K<sub>2</sub>O; 4.1MgO; 9.2 CaO

Calcolare altresì la composizione atomica. Utilizzare la tavola periodica per reperire eventuali dati mancanti.

[

	mol%
SiO <sub>2</sub>	70.2
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.6
Na <sub>2</sub> O	13.3
K <sub>2</sub> O	0.3
MgO	6.0
CaO	9.7

	at%
Si	24.6
Al	0.4
Na	9.3
K	0.2
Mg	2.1
Ca	3.4
O	60.0
]	