

Punti, Piani e Uso dei Raggi X nella Struttura Cristallina

1 Posizioni Atomiche nelle Celle Unitarie Cubiche

- Gli atomi nei cristalli sono organizzati secondo un sistema di coordinate cartesiane.
- In una cella unitaria cubica:
 - L'asse x esce dal foglio.
 - L'asse y punta verso destra.
 - L'asse z si dirige verso l'alto.
 - Le direzioni negative sono opposte a quelle positive.
- Le posizioni atomiche vengono definite in base alle distanze unitarie lungo questi assi.

2 Direzioni nelle Celle Unitarie Cubiche

- Le direzioni nei cristalli cubici sono rappresentate da **indici di direzione**, che sono i componenti di un vettore direzionale ridotti ai minimi numeri interi.
- Per determinare gli indici di direzione:
 1. Determinare le coordinate del punto di partenza e del punto di arrivo del vettore.
 2. Sottrarre le coordinate del punto di origine da quelle del punto di arrivo.
 3. Se necessario, moltiplicare per un numero intero per ottenere valori interi minimi.
 4. Scrivere gli indici tra parentesi quadre $[hkl]$, aggiungendo una barra sopra gli indici negativi.

Esempio: Se un vettore parte da $(\frac{3}{4}, 0, \frac{1}{4})$ e arriva a $(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, sottraendo le coordinate si ottiene $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$. Moltiplicando per 4 per eliminare le frazioni, si ottiene $[-2 \ 2 \ 1]$.

3 Indici di Miller

- Gli **indici di Miller** identificano i piani atomici in un reticolo cristallino.
- Per determinare gli indici di Miller:
 1. Individuare le intercette del piano sugli assi x , y e z .
 2. Calcolare i reciproci delle intercette.
 3. Moltiplicare per un numero intero per ottenere numeri interi minimi.
 4. Scrivere il risultato tra parentesi tonde (hkl) , con una barra sopra gli indici negativi.

Esempio: Un piano con intercette $1, \infty, \infty$ sugli assi x, y, z avrà indici di Miller (100).

4 Indici di Miller-Relazione importante (sistemi cubici)

La distanza interplanare tra piani paralleli vicini con gli stessi indici di Miller (hkl) in un cristallo con struttura cubica è data dalla formula:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

5 Densità Atomica

- **Densità volumica:** rapporto tra massa e volume della cella unitaria.
- **Densità atomica planare:** numero di atomi su un piano diviso per l'area del piano.
- **Densità atomica lineare:** numero di atomi lungo una direzione diviso per la lunghezza della direzione.

6 Diffrazione a Raggi X e Analisi della Struttura Cristallina

- La diffrazione a raggi X permette di determinare la struttura dei cristalli sfruttando il principio che i piani cristallini riflettono i raggi X.

- Perché si abbia interferenza costruttiva, la distanza extra percorsa deve essere un multiplo della lunghezza d'onda:

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \quad (1)$$

dove d_{hkl} è la distanza interplanare e θ l'angolo di diffrazione.

7 Condizioni di Diffrazione per Celle Cubiche

- **Struttura CCC (Cubo Centrato sul Corpo):** la diffrazione avviene solo se la somma degli indici di Miller è pari.
- **Struttura CFC (Cubo a Facce Centrate):** la diffrazione avviene solo se gli indici di Miller sono tutti pari o tutti dispari.

8 Identificazione di un Metallo tramite la Diffrazione a Raggi X

- Si analizza un diffrattogramma con picchi a specifici angoli per determinare se un metallo ha struttura **CCC** o **CFC**.
- Si utilizza la formula:

$$\frac{\sin^2 \theta_A}{\sin^2 \theta_B} = \frac{h_A^2 + k_A^2 + l_A^2}{h_B^2 + k_B^2 + l_B^2} \quad (2)$$

Altre formule:

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2(h^2 + k^2 + l^2)}{4a^2} \quad (3)$$

$$\lambda = \frac{2a \sin \theta}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (4)$$

- Se il rapporto è 0.5, il metallo ha struttura **CCC**; se è 0.75, ha struttura **CFC**.