

# Strutture Cristalline e Celle Unitarie

## 1 Introduzione

La struttura cristallina dei materiali determina molte delle loro proprietà fisiche e meccaniche. In particolare, i metalli tendono a organizzarsi in strutture cristalline compatte che ne influenzano la densità, la conducibilità elettrica e la resistenza meccanica.

## 2 Legami Chimici nei Solidi

I materiali solidi si formano grazie a diversi tipi di legami chimici:

- **Legami ionici:** es. NaCl (cloruro di sodio), caratterizzati da alta temperatura di fusione e fragilità.
- **Legami covalenti:** es. diamante e silice, molto resistenti e con alte temperature di fusione.
- **Legami metallici:** tipici dei metalli, conferiscono buona conducibilità termica ed elettrica.
- **Legami molecolari:** es. ghiaccio e polimeri, hanno bassa temperatura di fusione e sono generalmente meno densi.

## 3 Densità e Compattamento Atomico

La densità dei materiali dipende dalla loro struttura cristallina:

- I metalli hanno **alta densità** per il forte impacchettamento degli atomi.
- I ceramici hanno **densità intermedia** per via dei legami covalenti e ionici.
- I polimeri hanno **bassa densità** perché spesso sono amorfi e costituiti da elementi leggeri (C, H, O).

### 3.1 Atomic Packing Factor (A.P.F.)

L'Atomic Packing Factor (APF), o fattore di impacchettamento atomico, è una misura di quanto efficientemente gli atomi sono disposti in una struttura cristallina. Si definisce come il rapporto tra il volume occupato dagli atomi in una cella unitaria e il volume totale della cella unitaria stessa:

$$APF = \frac{N_{Atomi} \cdot V_{sfera}}{V_{cella}} = \frac{N_{atomi} \cdot \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{a^3}$$

## 4 Cristalli Singoli e Policristalli

- **Cristalli singoli:** hanno un'unica struttura ordinata, possono avere anisotropia nelle proprietà meccaniche (es. turbine e diamanti industriali).
- **Policristalli:** formati da molti piccoli cristalli (grani), le loro proprietà sono spesso isotrope se i grani sono orientati casualmente.

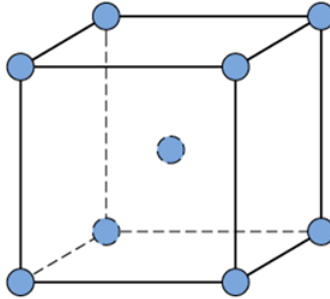
## 5 Strutture Cristalline nei Metalli

I metalli presentano principalmente tre strutture cristalline:

### 5.1 Cubica a Corpo Centrato (BCC)

Direzioni di impacchettamento: diagonali del cubo.

Numero di coordinazione: 8.

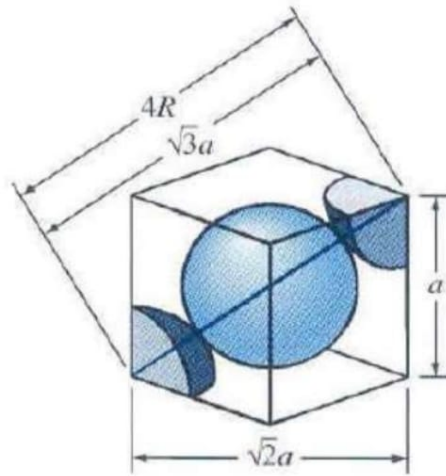


Calcolo APF

- **N.atomi**

$$\left( 8 \times \left( \frac{1}{8} \right) \right) + 1 = 2 \text{ atomi}$$

- **Parametro reticolare**



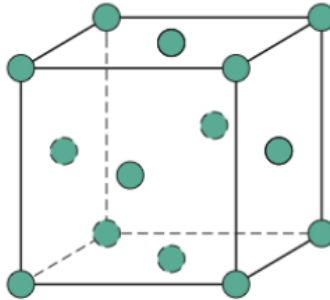
$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

- A.P.F

$$APF = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3}{a^3} = 0.68\%$$

## 5.2 Cubica a Corpo Centrato (FCC))

Direzioni di impacchettamento: diagonali delle facce del cubo.  
Numero di coordinazione: 12.

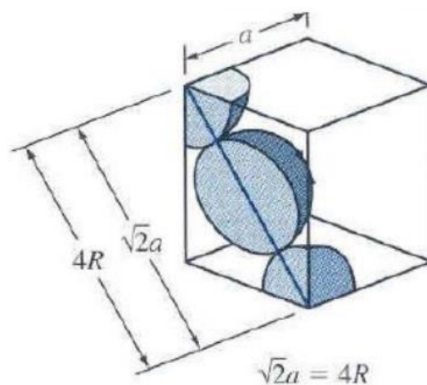


Calcolo APF

- N.atomi

$$\left(8 \times \frac{1}{8}\right) + \left(6 \times \frac{1}{2}\right) = 4 \text{ atomi}$$

- Parametro reticolare



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

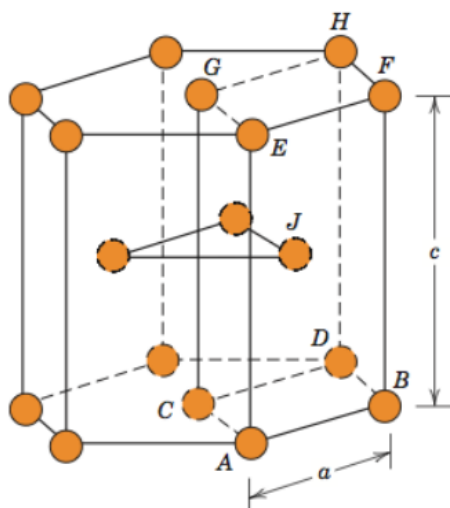
- A.P.F

$$APF = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{2}a}{4}\right)^3}{a^3} = 0.74\%$$

### 5.3 Esagonale Compatta (HCP)

Direzioni di impacchettamento: diagonali delle facce del cubo.

Numero di coordinazione: 12.



### Calcolo APF

- **N.atomi**

$$\left(8 \times \frac{1}{8}\right) + \left(6 \times \frac{1}{2}\right) + 1 = 6 \text{ atomi}$$

- **A.P.F**

$$APF = 0.74\%$$

## 6 Densità teorica

$$\rho_{\text{teorica}} = \frac{PM \cdot n_{\text{atomi}}}{V_{\text{cella}} \cdot N_A}$$

## 7 Polimorfismo e Allotropia

Alcuni metalli possono esistere in più forme cristalline a seconda delle condizioni di temperatura e pressione:

- Il **ferro** cambia struttura in base alla temperatura:
  - Ferro- $\alpha$  (BCC) a temperatura ambiente.
  - Ferro- $\gamma$  (FCC) sopra i 912°C.
  - Ferro- $\delta$  (BCC) sopra i 1394°C.

## 8 Conclusioni

Le strutture cristalline influenzano in modo significativo le proprietà dei materiali. Comprendere le strutture BCC, FCC e HCP è fondamentale per l'ingegneria dei materiali, poiché aiuta a prevedere il comportamento meccanico e termico dei solidi.