

Capitolo I

LA CRISTALLOGRAFIA

L'utilizzo dei materiali solidi e' riconducibile alla cosiddetta eta' della pietra. Bisogna comunque attendere il ventesimo secolo perche' la scienza fornisca gli strumenti di caratterizzazione che hanno condotto alla comprensione della struttura fisica dei materiali solidi e successivamente allo sviluppo tecnologico per poter utilizzare tali conoscenze in maniera tale da poter "progettare" i materiali piu' svariati in funzione dei diversi scopi. Tali materiali vengono infatti prodotti grazie alla profonda conoscenza della struttura atomica e subatomica della materia da un lato e del legame esistente tra le strutture atomiche e le proprieta' fisico-meccaniche macroscopiche derivanti dall'altro.

La metallurgia fisica è la branca relativa alle proprietà fisico-chimiche e meccaniche dei metalli per la definizione delle relazioni intercorrenti tra le diverse strutture e le conseguenti proprietà, da ciò deriva la possibilità di identificare le basi teoriche e i metodi pratici per il controllo e la modifica di tali proprietà.

Schematicamente:

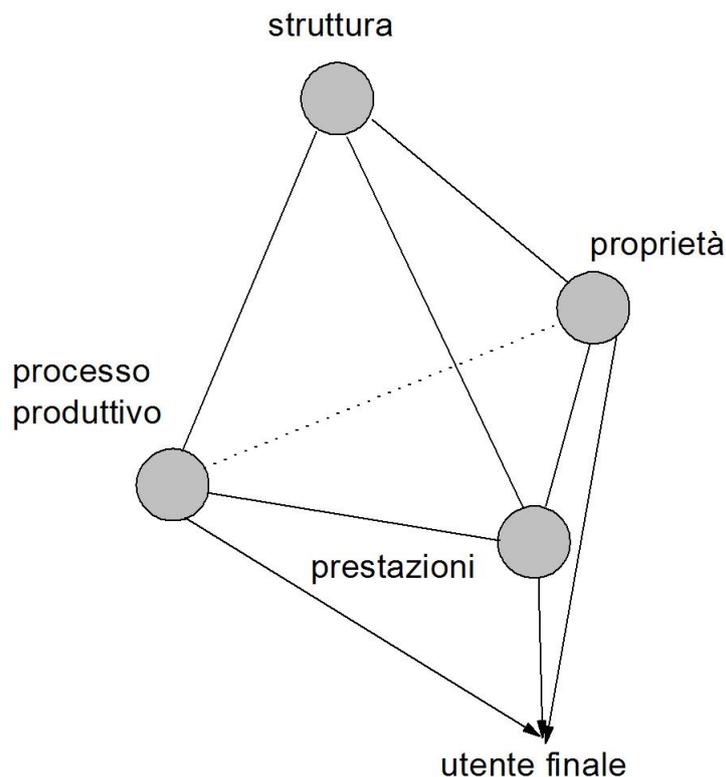


Figura 1.1: legame tra caratteristiche di utilizzo e microstruttura dei materiali.

L'utenza finale è legata al processo produttivo, alle prestazioni e alle proprietà meccaniche, ma tutte queste caratteristiche cambiano al variare delle proprietà microstrutturali dei metalli.

Nel campo metallurgico le diverse fasi possono essere riassunte come segue:

-Processo

Fonderia,

Deformazione plastica,

Trattamento termico

-Microstruttura

Dimensioni,

Forma,

Distribuzione,

Composizione

-Proprietà ingegneristiche

Comportamento meccanico,

Caratteristiche termiche ed elettriche,

Comportamento a corrosione,

Caratteristiche tecnologiche

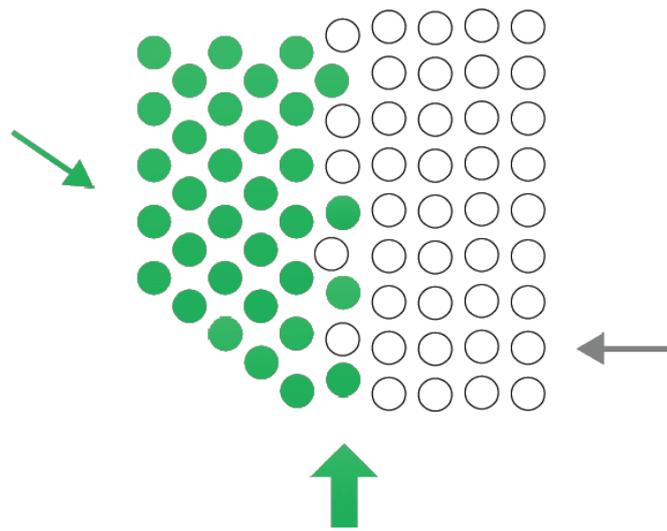
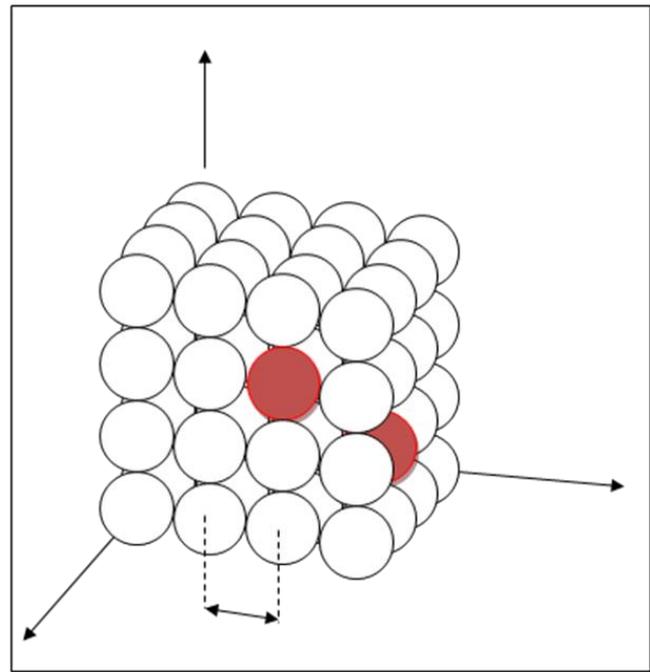
I metalli sono caratterizzati da specifiche proprietà dette metalliche. Sono opachi alla luce (non si lasciano attraversare dalla luce), presentano superfici lucenti, elevate conducibilità termica ed elettrica, e sono, sotto determinate condizioni, suscettibili di deformazioni plastiche. Al di sopra di 0° C tutti i metalli si trovano allo stato solido, ad eccezione del mercurio che solidifica a -39°C. La maggior parte degli elementi del sistema periodico possiede proprietà metalliche, 17 elementi hanno caratteristiche decisamente non metalliche, altri hanno invece in parte caratteristiche assimilabili a quelli dei non metalli tipici. La fascia diagonale comprendente B, Si, As, Te, può considerarsi separare i metalli a sinistra da i metalloidi a destra; gli elementi immediatamente a sinistra di tale fascia, conservano alcune caratteristiche metalloidiche.

I metalli puri contengono un solo tipo di atomo, col termine “lega” si suole comunemente indicare materiali metallici contenenti uno o più tipi di atomi differenti, a meno che l'elemento base sia assolutamente predominante ed altre specie chimiche si trovino presenti solo come impurezze (pochi punti percentuali). L'aggiunta di elementi leganti ad un metallo base ne modifica spesso in modo molto sensibile proprietà e comportamento ed é pertanto largamente sfruttata allo scopo di ottenere materiali con le più idonee caratteristiche d'impiego.

I metalli, puri o sotto forma di leghe, sono i materiali maggiormente utilizzati per la produzione dei più svariati organi meccanici per la fondamentale caratteristica di poter produrre materiali con diversi livelli resistenziali, applicabili in ambienti aggressivi delle specie più disparate e in intervalli di temperatura molto ampi in maniera molto più vasta rispetto a qualunque altra classe di materiali prodotti dall'uomo o esistenti in natura.

La microstruttura è caratterizzata da una dimensione, una forma, una frazione volumetrica e dall'arrangiamento dei singoli grani di singola fase o più fasi.

Ogni solido metallico è costituito da gruppi di atomi arrangiati, con diverse orientazioni, in strutture dette “grani” legati uno con l'altro. All'interno di ogni singolo grano gli atomi sono organizzati secondo un ordine periodico proprio di uno stato di equilibrio corrispondente al livello energetico più basso. Tutte le proprietà macroscopiche dei metalli dipendono dalla struttura dei singoli cristalli, dalla loro forma e dimensione, dalla distribuzione e dalla relativa orientazione degli uni rispetto agli altri.



Bordo grano

Figura 1.2: disposizione degl'atomi metallici nello spazio (sinistra), variazione dell'orientazione nella struttura atomica tra due grani adiacenti (destra).

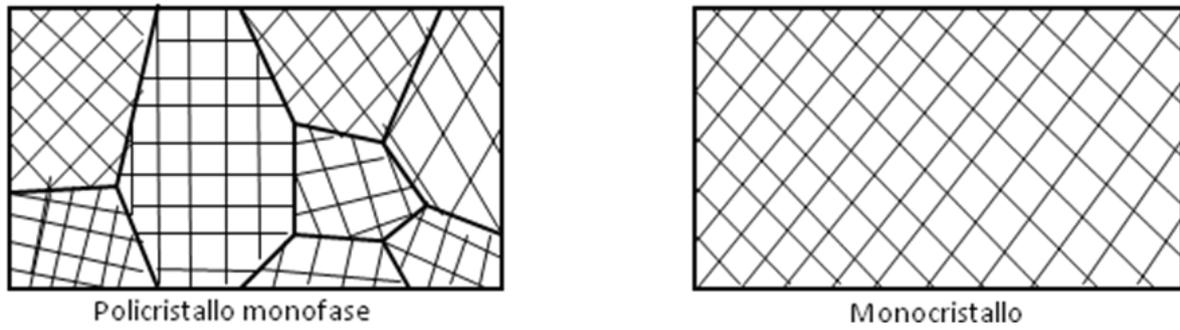


Figura 1.3: diversa orientazione nei policristalli (sinistra), uniformità cristallografica propria delle strutture monocristalline (destra).

Tra i diversi grani vi è uno strato di spessore pari a diverse distanze interatomiche che si trova ad un livello energetico più elevato, tale zona è detta "bordo grano".

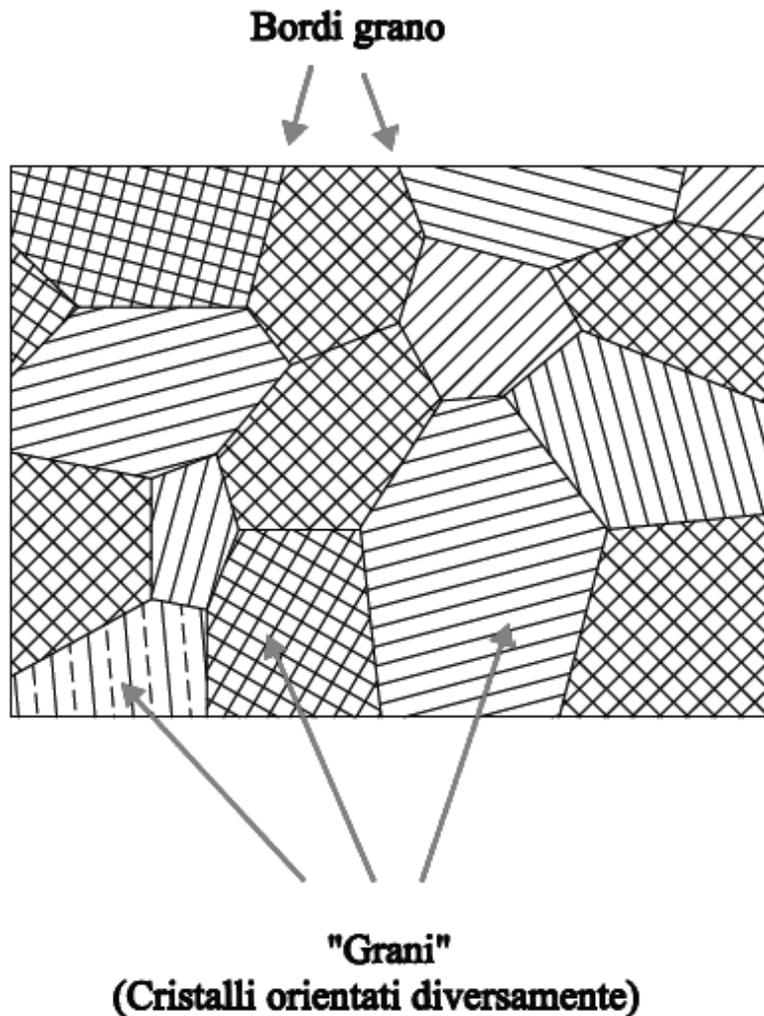


Figura 1.4: schema delle differenti orientazioni di disposizione atomica e bordi di grano di separazione.

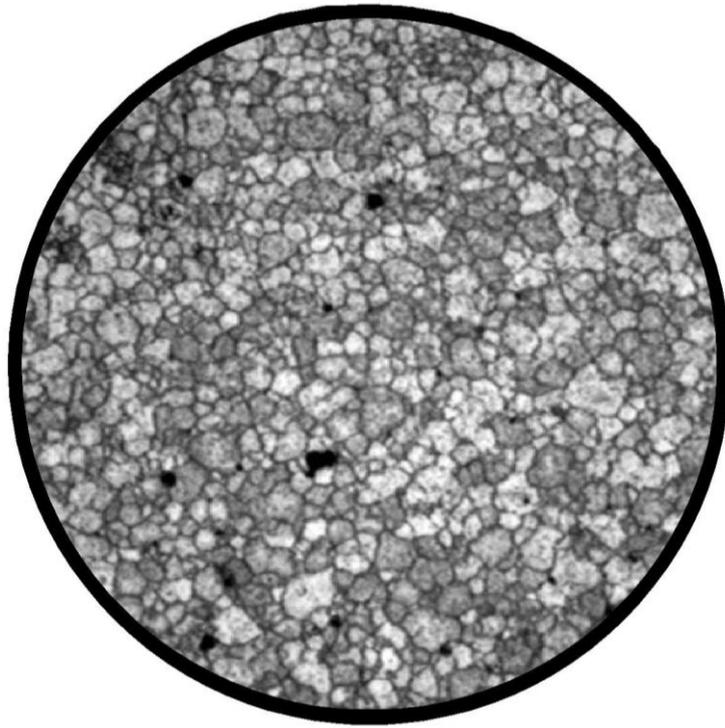


Figura 1.5: tipica microstruttura ottica di un metallo policristallino.

Le proprietà dei solidi cristallini sono dipendenti dal tipo di atomi dall'ordine in cui sono disposti e dal tipo di legame esistente. I solidi amorfi sono omogenei e isotropi perché non presentano alcun ordine periodico nel loro arrangiamento atomico interno.

Il legame metallico è non-direzionale e gli elettroni di legame sono "liberi", la forza di legame aumenta all'aumentare della densità degli elettroni di legame quindi la forza di legame aumenta con l'impacchettamento degli atomi metallici.

La cristallografia descrive le leggi geometriche che determinano la posizione degli atomi o degli ioni all'interno del reticolo cristallino.

Nei solidi cristallini (metalli, alcuni ceramici) gli atomi, gli ioni o i gruppi di ioni sono disposti in modo regolare secondo una struttura ordinata e ripetitiva chiamata reticolo cristallino. In un metallo gli atomi occupano posizioni geometriche ben definite secondo degli arrangiamenti periodici. In un solido cristallino le particelle costituenti il reticolo occupano nello spazio posizioni ben definite e la regolarità periodica della disposizione si manifesta anche macroscopicamente con il caratteristico cristallo.

Si indica con il termine "cristallino" un solido nel quale gli atomi siano posizionati con un ordine periodico che si ripete su distanze atomiche sufficientemente ampie. Grazie al fatto che esiste un ordine a lungo raggio, gli atomi, all'atto della solidificazione, si sistemano in "arrangiamenti" tridimensionali ripetitivi, all'interno dei quali ciascun atomo si trova a diretto contatto con gli atomi più vicini.

Diverse delle proprietà tipiche dei materiali metallici dipendono proprio dalla struttura cristallina del materiale, cioè dal modo in cui gli atomi si dispongono nello spazio; esistono sistemazioni spaziali molto diverse, che però nel caso dei metalli non sono molto complesse (a differenza di quanto accade, per esempio, per molti ceramici).

Per descrivere il reticolo cristallino si fa di solito riferimento al modello che rappresenta il singolo atomo con una sfera rigida di diametro ben definito; nel caso degli atomi metallici più vicini l'uno all'altro, quindi, le sfere si toccano reciprocamente. Si introduce inoltre il concetto di reticolo, a definire una sistemazione tridimensionale di punti, ciascuno dei quali rappresenta la posizione di uno degli atomi.

Nei cristalli le particelle sono animate da un moto vibrazionale attorno al nodo reticolare (rappresenta la posizione media delle particelle nel reticolo). I solidi cristallini sono anisotropi ossia le loro proprietà dipendono dalla direzione (cristallografica) lungo la quale vengono misurate.

Legame metallico

Esso si esplica nei metalli e nei composti intermetallici. In prima approssimazione si può dire di essere in presenza di un legame metallico quando ciascun atomo presente nel reticolo cede i suoi elettroni di valenza con conseguente formazione di una nube elettronica. Il reticolo cristallino metallico deve quindi ritenersi costituito da un insieme di ioni positivi mantenuti in equilibrio dalla interazione di tutti gli elettroni di valenza, i quali hanno nell'ambito del cristallo una grande libertà di movimento, a questa è collegata la caratteristica conducibilità elettrica.

I conduttori che hanno il legame metallico sono detti conduttori di prima specie. I conduttori che conducono la corrente per migrazione degli ioni sono detti conduttori di seconda specie (es.: scoria siderurgica).

I cristalli metallici tendono a disporsi secondo strutture altamente simmetriche e molto compatte.

I cristalli possiedono una simmetria traslazionale, e' possibile individuare una serie regolare di punti noti come punti reticolari ognuno dei quali ha le stesse caratteristiche.

Un monocristallo geometricamente perfetto è un insieme di ioni regolarmente ripartiti nello spazio. Per descrivere comodamente questa sistemazione, si definisce un reticolo cristallino attraverso un insieme di nodi ottenuti da una maglia elementare che fissa la periodicità tridimensionale di ripetizione di un motivo elementare.

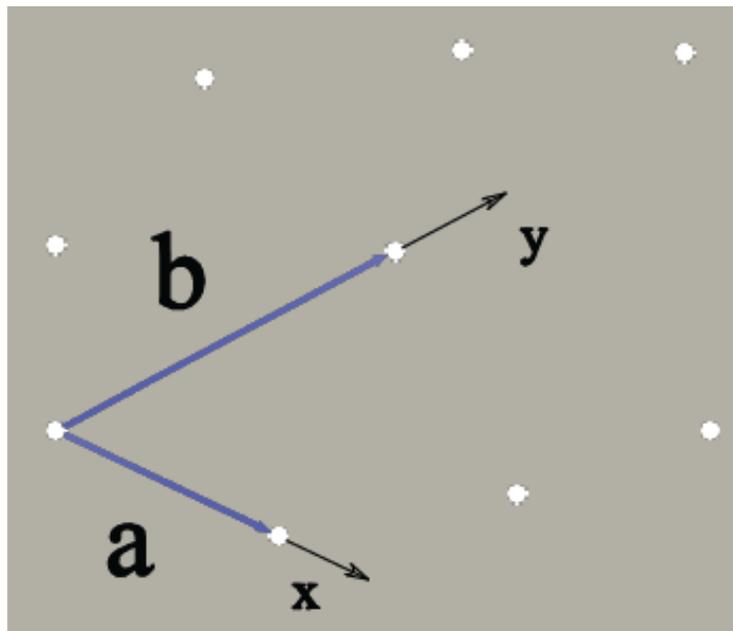


Figura 1.6: tipico sistema di vettori congiungenti due atomi disposti nello spazio.

Una serie di punti reticolari costituisce un reticolo tridimensionale detto “cella unitaria”.

La maglia elementare è definita attraverso tre vettori **a**, **b**, **c** ognuno dei quali rappresenta una traslazione tra due punti reticolari. Dopo aver scelto una origine degli assi, questi vettori sono i vettori di base su Ox, Oy, Oz. Questi sono i parametri del reticolo. La posizione di uno qualsiasi dei nodi del reticolo è dato dal vettore:

$$\bar{r} = u\bar{a} + v\bar{b} + w\bar{c} \quad (1.1)$$

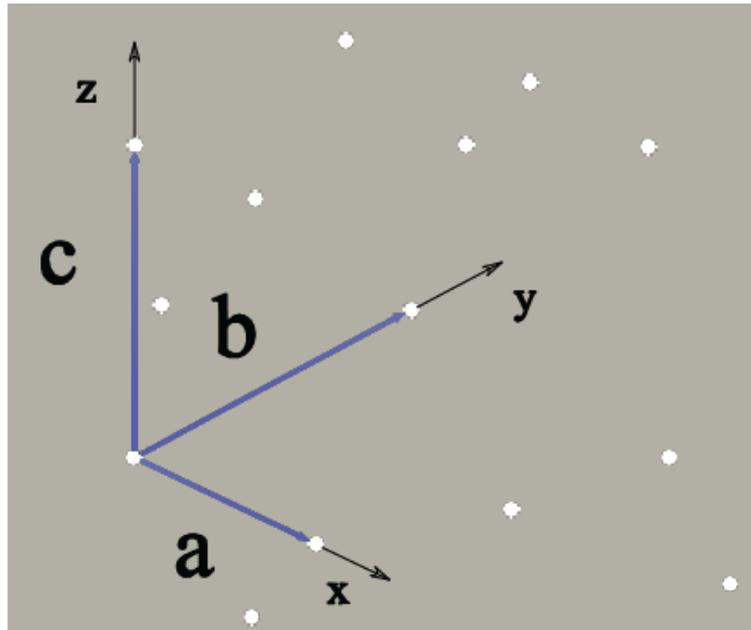
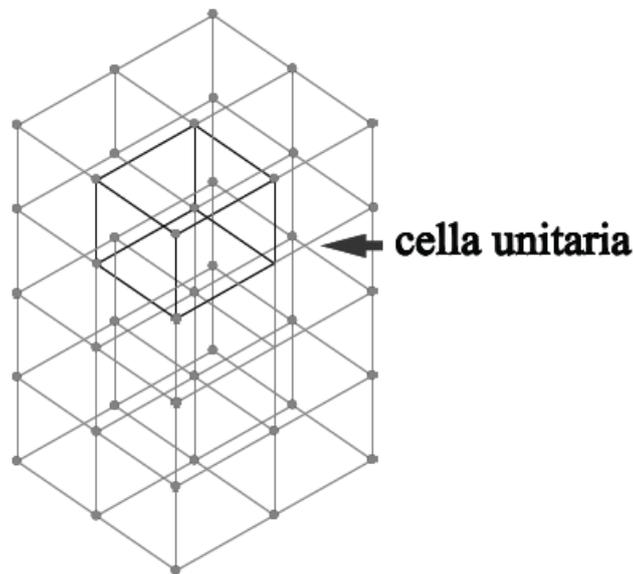


Figura 1.7: sistema cartesiano di individuazione delle posizioni reticolari.

ove u, v, w sono degli interi



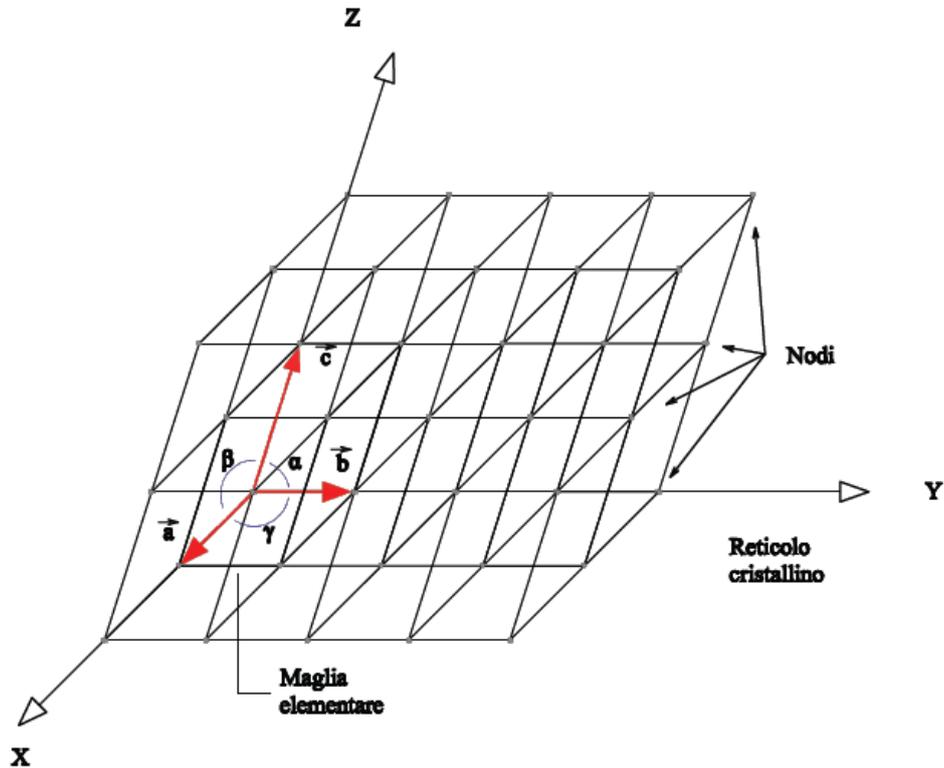


Figura 1.8: cella unitaria (sinistra) maglie e nodi reticolari (destra).

La cella unitaria è la più piccola unità strutturale che può descrivere la struttura cristallina (ordine di grandezza dell'angstrom); la ripetizione di celle unitarie nelle tre direzioni dello spazio genera l'intero cristallo. L'intero cristallo può quindi essere generato traslando nelle tre dimensioni le celle unitarie.

In generale le celle unitarie sono prismi o parallelepipedi, nel caso più semplice cubi, con tre serie di facce parallele.

La cella unitaria è scelta in modo da rappresentare nel modo migliore la simmetria del cristallo, mentre le posizioni degli atomi all'interno del reticolo possono essere ben descritte semplicemente traslando la cella unitaria lungo ciascuno dei suoi spigoli.

Di solito si cerca di fare in modo che gli spigoli siano occupati dai centri degli atomi del reticolo; nei casi in cui più di una cella sia in grado di descrivere il reticolo, si sceglie quella con maggiore simmetria.

Reticolo di Bravais e celle elementari

La cristallografia descrive le leggi geometriche che determinano la posizione degli atomi o degli ioni all'interno del reticolo cristallino.

Da un punto di vista generale, si possono avere molte diverse strutture cristallografiche; per questo motivo è spesso conveniente raggruppare le diverse strutture basandosi sulla geometria della cella unitaria, senza peraltro tenere in conto della posizione dei singoli atomi nella cella. Per fare questo si parte da un sistema di assi x , y e z , che corrispondono agli spigoli della cella, e sono fra loro inclinati degli angoli α , β e γ . I sei parametri, corrispondenti alla lunghezza dei tre spigoli della cella (a , b e c), ed ai tre angoli α , β e γ , costituiscono i *parametri reticolari*.

La cella elementare viene così descritta fornendo i 6 parametri reticolari:

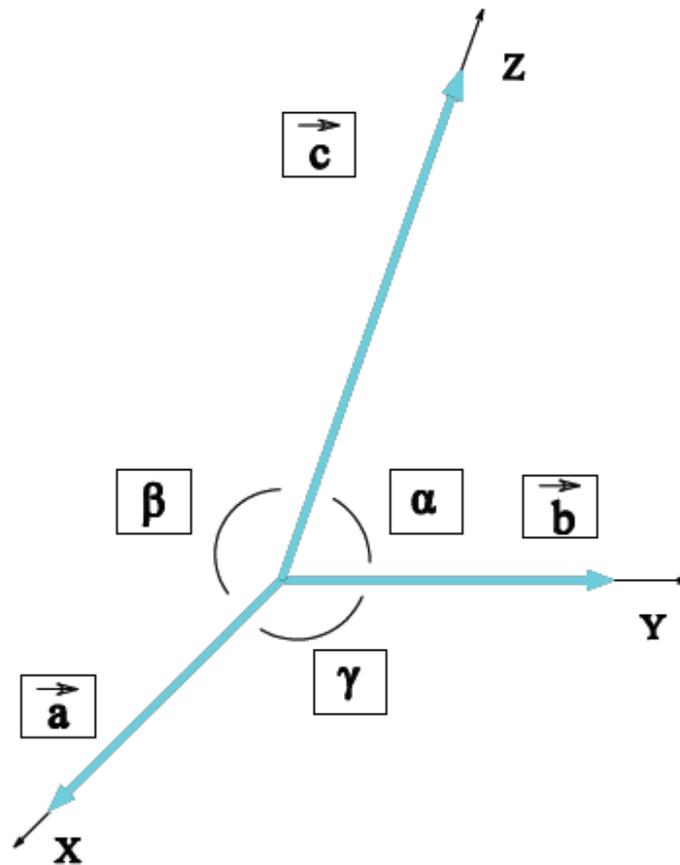


Figura 1.9: generica rappresentazione dei parametri reticolari.

-le dimensioni lungo tre assi, ossia i vettori a , b , c ,

-gli angoli formati dagli assi stessi (α , β , γ).

Nel caso generale si possono avere 6 parametri tutti differenti tra di loro:

sistema triclino: $a \neq b \neq c$ e $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

naturalmente e' possibile considerare casi particolari in cui i parametri reticolari non siano cosi' differenti gli uni rispetto agli'altri e che generino quindi celle unitarie di geometria piu' semplice. Il primo caso da considerare e' quello in cui gli assi coordinati siano mutualmente ortogonali:

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \quad (1.2)$$

Sotto tale condizione abbiamo 3 tipi di geometrie reticolari possibili:

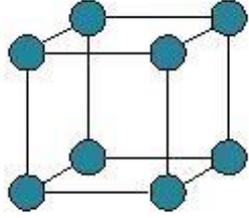
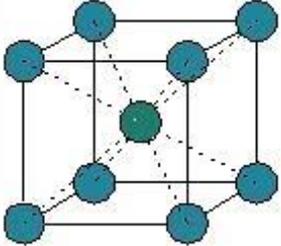
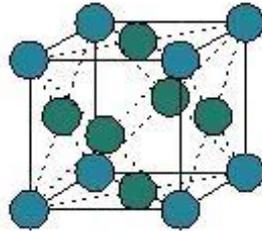
orto rombico: $a \neq b \neq c$

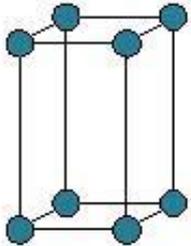
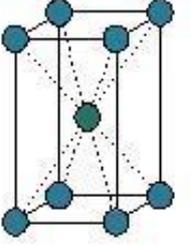
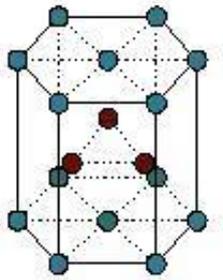
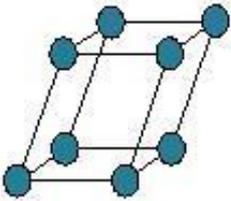
tetragonale: $a = b \neq c$

cubico: $a = b = c$

Il numero di modi in cui i punti reticolari possono trovare il giusto arrangiamento nello spazio non e' infinito; il limite e' rappresentato da sette sistemi cristallografici fondamentali e quattordici reticoli (Figura 1.10) detti reticoli di Bravais.

I modi in cui gli atomi sono impacchettati per formare le strutture cristalline dipende dalle forze elettrostatiche di attrazione o repulsione che esistono tra di loro. Le forze repulsive sono molto forti ma hanno un corto raggio in tal modo e' possibile immaginare gl'atomi come sfere di dimensioni fisse e posizionate stabilmente nello spazio in condizioni di equilibrio; tale modello e' detto modello a sfere rigide.

Reticolo di Bravais	Sistema cristallino	Cella convenzionale
Monometrico		
Cubico (semplice)	Cubico $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Cubico (a corpo centrato)		
Cubico (a facce centrate)		

Dimetrico		
Tetragonale (semplice)	Tetragonale $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Tetragonale (a corpo centrato)		
Esagonale compatto	Esagonale $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Romboedrico (o trigonale)	Romboedrico (o trigonale) $a = b = c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

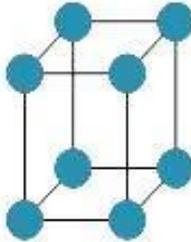
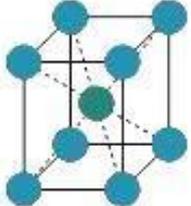
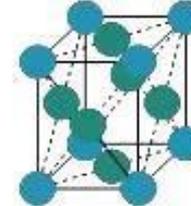
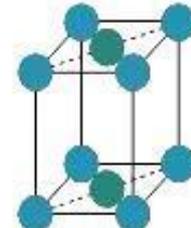
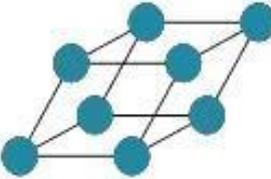
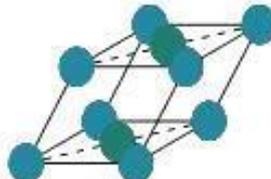
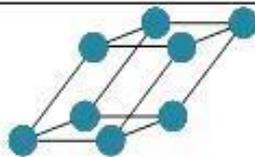
Trimetrico		
Ortorombico (semplice)	Ortorombico $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Ortorombico (a corpo centrato)		
Ortorombico (a facce centrate)		
Ortorombico (a base centrata)		
Monoclino (semplice)	Monoclino $a \neq b \neq c$ $\beta = \gamma = 90^\circ$; $\alpha \neq 90^\circ$	
Monoclino (a base centrata)		
Triclino	Triclino $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

Figura 1.10: rappresentazione geometrica della disposizione atomica e dei relativi parametri reticolari per i 7 sistemi cristallografici fondamentali.

I metalli cristallizzano tutti nel sistema cubico o esagonale, alcune forme cristalline metastabili possono presentare reticolo tetragonale. Per cio' che riguarda il reticolo cubico gli atomi possono trovare posizionamento ai vertici (cubico semplice), ai vertici e sulle facce (cubico a facce centrate) oppure ai vertici e al centro del cubo (cubico a corpo centrato). Oltre il 90 % dei metalli utilizzati industrialmente cristallizzano nel sistema cubico.

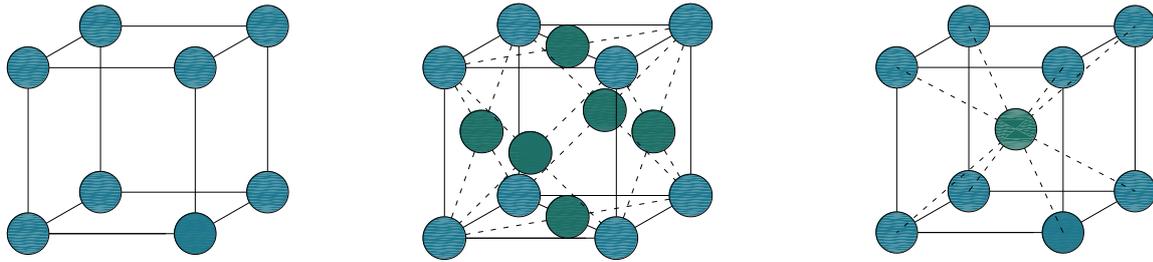


Figura 1.11: possibili arrangiamenti atomici in una cella cubica, semplice (sinistra), a facce centrate (centro), a corpo centrato (destra).

Per cio' che riguarda il sistema tetragonale, gli atomi possono posizionarsi sugli spigoli e al centro o al centro e sulle facce del tetragono, in tal caso i reticoli prendono rispettivamente il nome di reticolo tetragonale a corpo centrato e reticolo tetragonale a facce centrate.

Definiamo ora come numero di coordinazione il numero di atomi che si incontrano partendo da un punto del reticolo e spostandosi di una distanza interatomica nelle tre direzioni dello spazio.

La struttura cubica semplice. L'impacchettamento piu' semplice (solo il polonio cristallizza in tale forma) e' quello cubico semplice, in tal caso la cella contiene un atomo ($4/4$ su ogni spigolo per 4 spigoli) e ha numero di coordinazione 6 come visualizzabile in Figura 1.12.

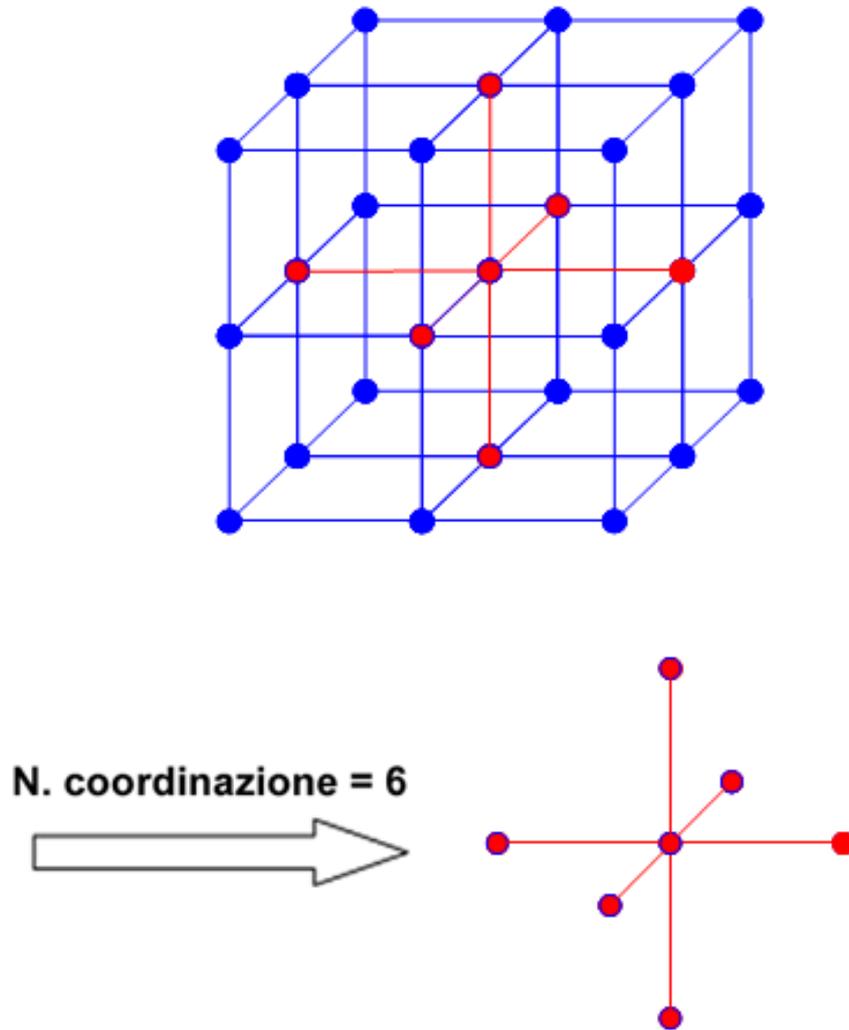


Figura 1.12: visualizzazione della procedura necessaria per il calcolo del numero di coordinazione.

Definendo il fattore di impacchettamento atomico (FIA) come il volume degli atomi contenuti nella cella rispetto al volume totale della cella, nel caso del reticolo cubico semplice si ha:

$$FIA = \frac{(\text{numero di atomi per cella}) * (\text{volume di ogni atomo})}{(\text{volume della cella})} = \frac{1 \left[\frac{4}{3} \pi R^3 \right]}{a^3} = \frac{1 \left[\frac{4}{3} \pi (0.5a)^3 \right]}{a^3} = 0.52 \quad (1.3)$$

Tale valore risulta relativamente basso, infatti solo poco più della metà della cella è occupato effettivamente da atomi del metallo, i metalli tendono a cristallizzare in strutture che massimizzano il fattore di impacchettamento atomico, è per tale ragione che solo un metallo conosciuto cristallizza nel sistema cubico semplice.

La relazione tra il raggio atomico e il parametro reticolare è dato da:

$$a = 2R \quad (1.4)$$

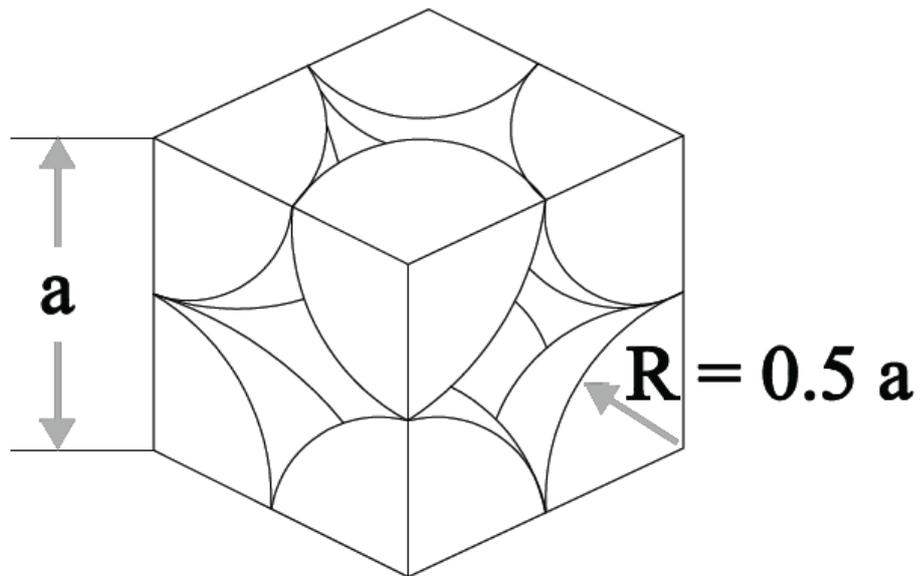


Figura 1.13: rapporto tra il lato della cella (a) e il raggio atomico (R) nel sistema cubico semplice.

La struttura cubica a corpo centrato (ccc). E' una delle strutture più comuni; la cella unitaria è cubica, con atomi sugli 8 angoli ed un singolo atomo al centro del cubo.

Gli atomi sugli angoli e quello centrale si toccano lungo le diagonali del cubo; ne deriva che il raggio atomico R è correlato direttamente alla lunghezza dello spigolo del cubetto a secondo la relazione:

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (1.5)$$

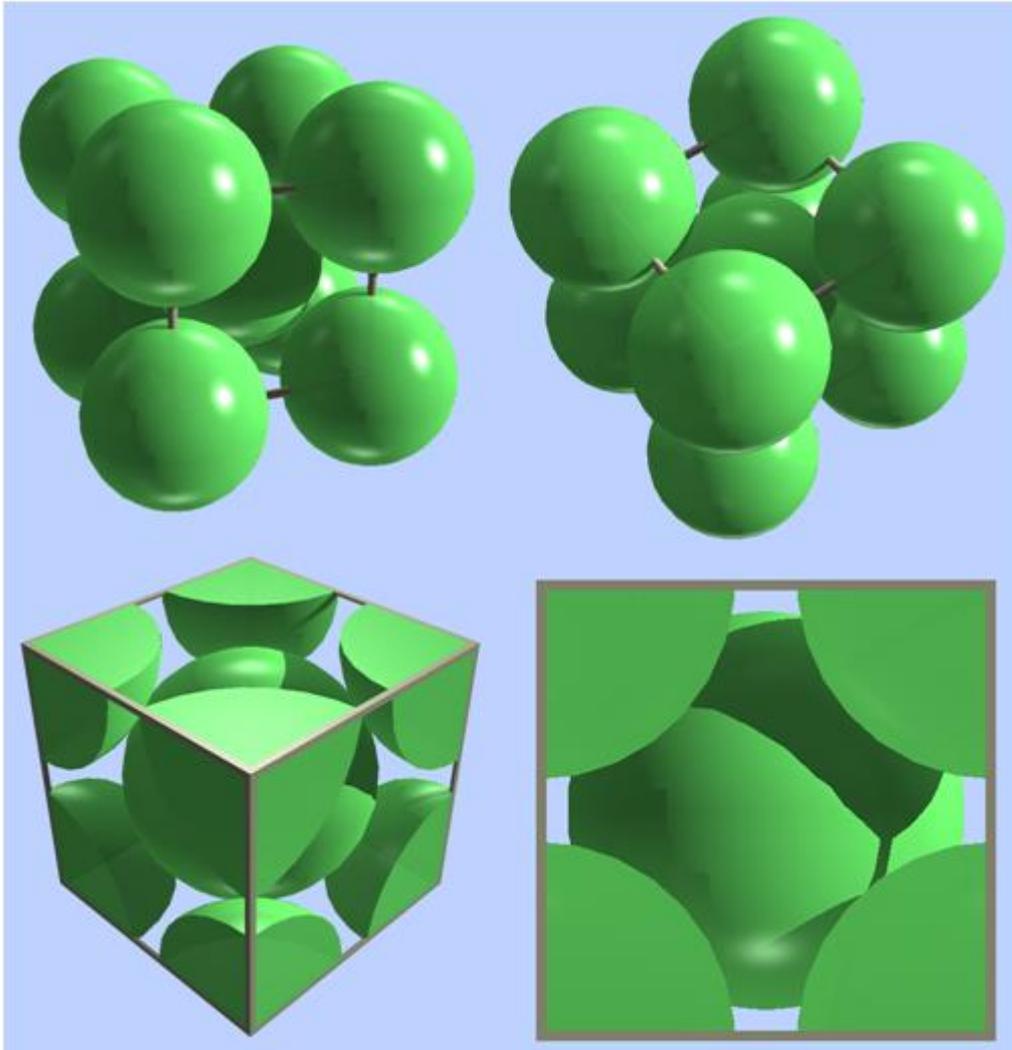


Figura 1.14: visualizzazione tridimensionale del reticolo cubico a corpo centrato.

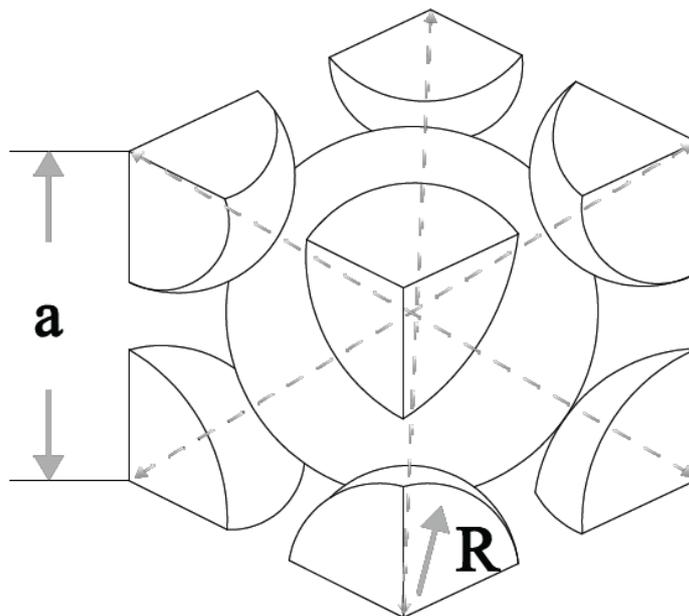


Figura 1.15: rapporto tra il lato della cella (a) e il raggio atomico (R) nel sistema cubico a corpo centrato.

Ciascuna cella unitaria, nel caso del sistema ccc, contiene l'equivalente di due atomi; ciascuno degli atomi sugli angoli, infatti, è contenuto in un singola cella per 1/8 (8 angoli x 1/8 di atomo = 1 atomo per cella); a questo va aggiunto l'atomo centrale. Il numero di coordinazione e' 8 e il fattore di impacchettamento atomico risulta essere:

$$FIA = \frac{2 \left[\frac{4}{3} \pi R^3 \right]}{a^3} = \frac{1 \left[\frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}a}{4} \right)^3 \right]}{a^3} = 0.68 \quad (1.6)$$

La densità di tale sistema cristallino è notevolmente superiore rispetto a quella del sistema cubico semplice, i metalli più comuni che cristallizzano in tale struttura sono: Cr, Fe- α , Mo, K, Na, W, V, Ti- β .

La struttura cubica a facce centrate (cfc). Anche questa struttura è caratterizzata da atomi sugli angoli della cella, ai quali però si aggiungono altri atomi al centro delle 6 facce del cubo.

Le sfere si toccano lungo la diagonale di ciascuna faccia; ne deriva che la relazione fra la dimensione della cella ed il diametro atomico diventa:

$$a = 2R\sqrt{2} \quad (1.7)$$

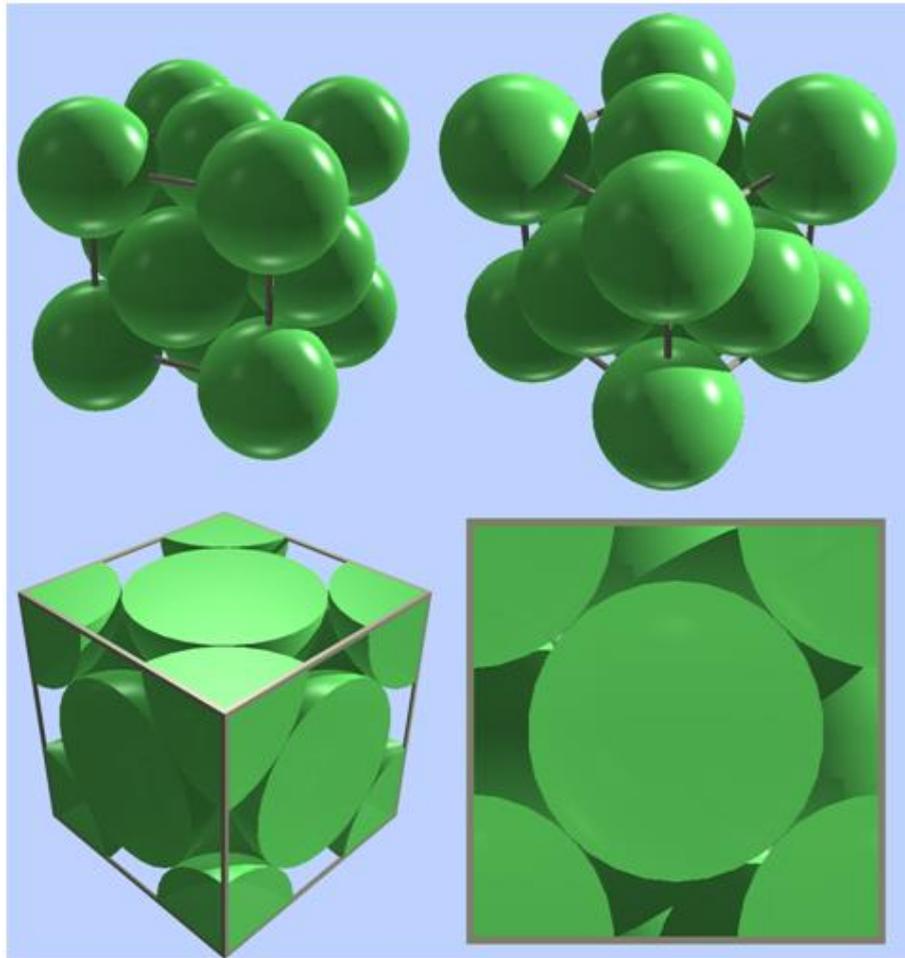


Figura 1.16: visualizzazione tridimensionale del reticolo cubico a facce centrate.

Ciascuna cella unitaria, nel caso del sistema cfc, contiene l'equivalente di quattro atomi; ciascuno degli atomi sugli angoli, infatti, è contenuto in un singola cella per 1/8 (8 angoli x 1/8 di atomo = 1 atomo per cella); a questo vanno aggiunti sei mezzi atomi disposti sulle facce. Il numero di coordinazione e' 12 e il fattore di impacchettamento atomico risulta essere:

$$FIA = \frac{4 \left[\frac{4}{3} \pi R^3 \right]}{a^3} = \frac{1 \left[\frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}a}{4} \right)^3 \right]}{a^3} = 0.74 \quad (1.8)$$

I metalli piu' comuni che cristallizzano in tale struttura sono: Ag, Au, Al, Cu, Pb, Ni, Fe- γ .

La struttura tetragonale: La geometria dei cristalli tetragonali è un tetraedro regolare che è caratterizzato da due parametri reticolari:

$$a = b \neq c \quad (1.9)$$

e

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

La struttura può essere tetragonale semplice, tetragonale a corpo centrato (sistema in cui cristallizza lo Sn- β) o a facce centrate (sistema in cui cristallizza l'In).

La struttura esagonale compatta (ec). La terza struttura più comune nei metalli non ha simmetria cubica, ma piuttosto esagonale. La cella è delimitata da due facce, ciascuna delle quali ospita sei atomi sugli angoli, ed un atomo al centro.

In un piano intermedio, del tutto equivalente a quelli basali ma traslato rispetto ad essi, ospita altri tre atomi.

La cella contiene in tutto 6 atomi ($1/6$ per ciascuno dei 12 atomi sugli angoli dei piani superiori ed inferiori, $1/2$ per ciascuno dei due atomi al centro delle stesse facce, ed i 3 atomi nel piano intermedio).

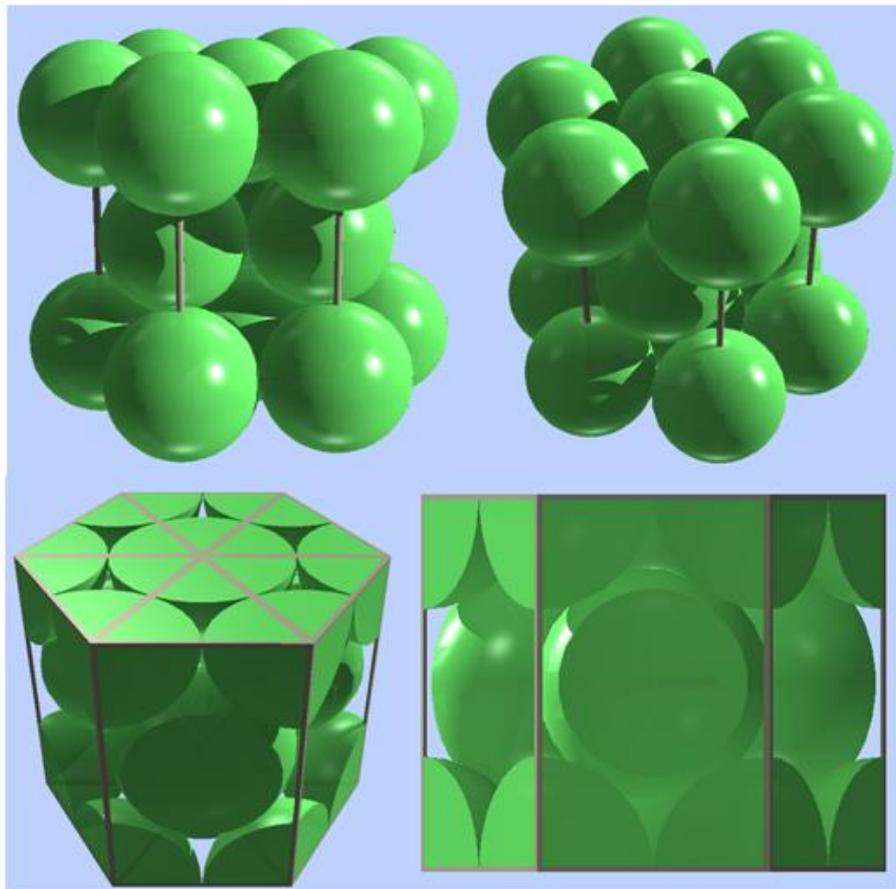


Figura 1.17: visualizzazione tridimensionale del reticolo esagonale compatto.

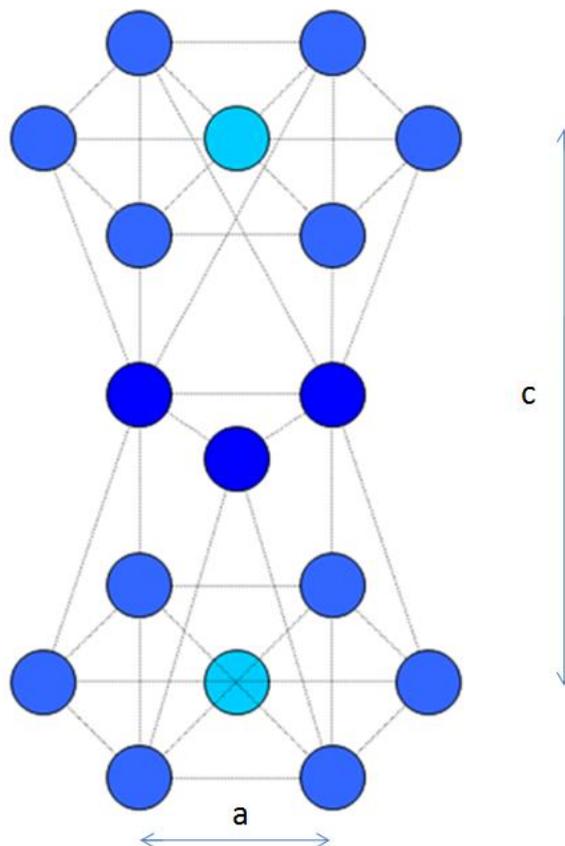


Figura 1.18: rapporto tra i parametri reticolari della cella esagonale compatta.

Tenendo conto che gli atomi del piano intermedio toccano quelli sui piani più esterni, si ha da semplici considerazioni geometriche si ricava che: che il legame teorico fra lato dell'esagono (a) ed altezza della cella (c) dovrebbe essere:

$$c = \frac{2\sqrt{6}}{3} a \Rightarrow \frac{c}{a} = 1.633$$

Ciascuna cella unitaria contiene l'equivalente di sei atomi, il numero di coordinazione è 12 e il fattore di impacchettamento 0.74.

I metalli più comuni che cristallizzano in tale struttura sono: Zn, Mg, Co, Cd, Zr, Ti- α , Be.

Le strutture e i parametri cristallografici dei principali sistemi metallici sono riportati in Tabella I.

Metallo	Struttura cristallografica	Parametro reticolare (Å)	
		a	c
Alluminio	<i>cfc</i>	4.0490	
Argento	<i>cfc</i>	4.0856	
Berillio	<i>ec</i>	2.2854	3.5841
Cadmio	<i>ec</i>	2.9787	5.6170
Cromo	<i>ccc</i>	2.8845	
Cobalto α	<i>ec</i>	2.5070	4.0690
Cobalto β	<i>cfc</i>	3.5520	
Iridio	<i>cfc</i>	3.8389	
Ferro α	<i>ccc</i>	2.8664	
Ferro γ	<i>cfc</i>	3.5710	
Litio	<i>ccc</i>	3.5089	

Magnesio	<i>ec</i>	3.2092	5.2103
Molibdeno	<i>ccc</i>	3.1466	
Nichel	<i>cfc</i>	3.5238	
Rame	<i>cfc</i>	3.6153	
Oro	<i>cfc</i>	4.0783	
Piombo	<i>cfc</i>	4.9495	
Platino	<i>cfc</i>	3.9237	
Titanio α	<i>ec</i>	2.9504	4.6833
Tungsteno	<i>ccc</i>	3.1648	
Zinco	<i>ec</i>	2.6640	4.9450

Tabella I: Strutture e parametri reticolari dei principali sistemi metallici.

Calcolo della densità

Conoscendo la struttura cristallografica è possibile calcolare la **densità teorica** di un metallo. La relazione utilizzata è la seguente:

$$\rho = \frac{nA}{V_c N_A} \quad (1.10)$$

nella quale N_A è il numero di Avogadro, n il numero di atomi contenuti nella cella, V_c il volume della cella, A è il peso atomico.

Indici di Miller

A questo punto, al fine di descrivere un materiale cristallino, è necessario fare riferimento ad un sistema che permetta di riconoscere diversi piani e diverse direzioni.

Convenzionalmente questo si effettua tramite tre indici, ricavati in un sistema di coordinate a tre assi che coincidono con gli spigoli della cella unitaria.

Un piano reticolare è un piano che interseca tre punti reticolari che non si trovano sulla stessa linea.

-Le posizioni reticolari vengono indicate come frazioni o come multipli delle dimensioni della cella elementare.

-Le direzioni reticolari $[xyz]$ sono rappresentate da vettori che partono dall'origine del sistema di coordinate.

Gli indici di una direzione sono le componenti del vettore di direzione lungo i tre assi di riferimento, ridotte agli interi più piccoli.

Le direzioni cristallograficamente equivalenti (la distanza fra gli atomi è la stessa) si indicano $\langle xyz \rangle$

La direzione, in un sistema cristallografico, è definita tramite un vettore.

Gli indici di una direzione si determinano seguendo questa procedura:

-un vettore della direzione desiderata e di una lunghezza appropriata si posiziona in modo che passi attraverso l'origine del sistema di coordinate; la traslazione necessaria a portare un vettore qualunque sull'origine non altera il processo, purché il parallelismo sia mantenuto;

-si determinano le proiezioni del vettore sugli assi, in termini di multipli delle dimensioni della cella (a , b e c);

-i tre numeri così ottenuti vengono moltiplicati o divisi per uno stesso numero, in modo da ricavare i tre valori interi più piccoli.

Il sistema di riferimento utilizzato per definire i piani è lo stesso di quello precedentemente utilizzato per ricavare gli indici delle direzioni. In tutti i sistemi, ad eccezione dell'esagonale, i piani vengono definiti dagli *indici di Miller* (hkl) i quali caratterizzano una sequenza di piani paralleli all'interno di un reticolo.

Piani paralleli hanno indici equivalenti. Gli indici si calcolano nel seguente modo:

- se il piano passa per l'origine, lo si deve traslare (mantenendo ovviamente il parallelismo)
- il piano così disegnato interseca gli assi (o al massimo ne è parallelo); l'intercetta viene quantificata in termini di parametri reticolari a , b e c ;
- vengono calcolati i reciproci di questi numeri; se il piano è parallelo ad uno degli assi, l'intercetta è all'infinito, e quindi il reciproco è 0;
- i numeri così ottenuti debbono essere trasformati nei più piccoli interi (naturalmente utilizzando un fattore comune);
- i tre indici così ottenuti vengono racchiusi fra parentesi tonde.

Direzioni e coordinate: Si da il caso che talvolta le proprietà fisiche lungo due o più direzioni differenti sono identiche; tali direzioni si dicono equivalenti e in tal caso si afferma che l'intero cristallo possiede simmetria. Le posizioni in una cella unitaria sono espresse in termini di frazioni x , y e z rispetto ai vettori di base della cella \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} . La direzione di ogni linea si descrive disegnando una linea dall'origine parallela a una data direzione e assegnando le coordinate di ogni punto della linea

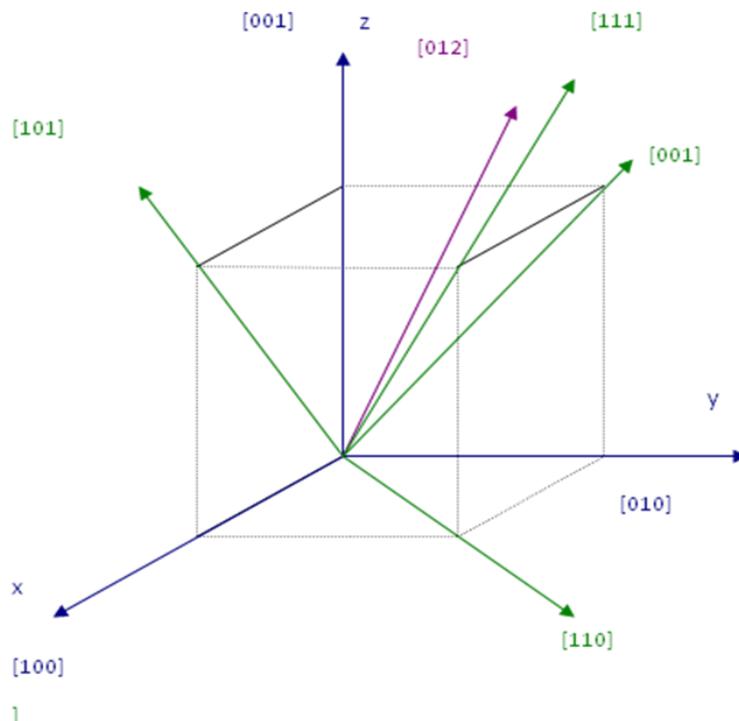


Figura 1.19: esempi di diverse direzioni cristallografiche nel reticolo cubico.

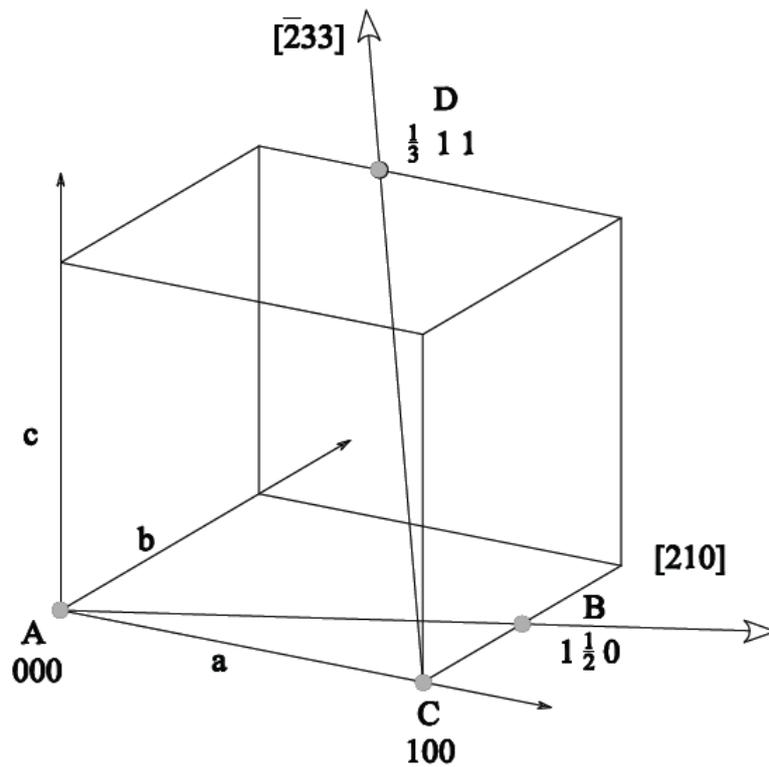


Figura 1.20: esempio di calcolo delle direzioni cristallografiche per il reticolo cubico.

Punto A: coordinate 0 0 0

Punto B: coordinate $1 \frac{1}{2} 0$

Linea AB: direzione $[1\frac{1}{2}0]$, minimo intero: [210]

Punto C: coordinate 1 0 0

Punto D: coordinate $\frac{1}{3} 1 1$, ($0 -\frac{2}{3} 1 1$ w/ origine in C)

Linea CD: direzione $[-\frac{2}{3} 1 1]$, minimo intero: [233]

Piani cristallografici. I piani in un cristallo si indicano con gli **indici di Miller** che sono i reciproci delle intercette che i piani individuano con gli assi cristallografici. Se il piano è parallelo ad un asse, l'intercetta è (∞); ed il reciproco è $1/\infty = 0$.

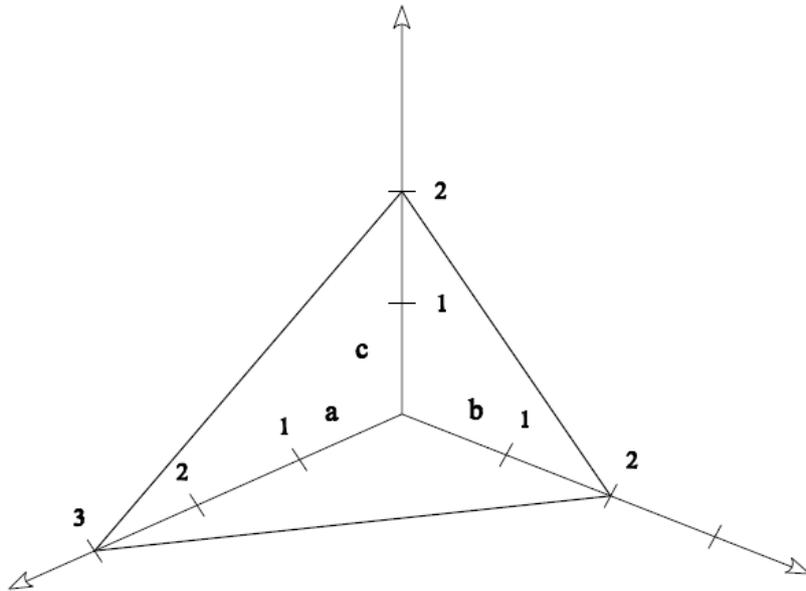


Figura 1.21: esempio di calcolo di un piano cristallografico.

	a	b	c
Intercette	3	2	2
Reciproci	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Indici di Miller	$(\frac{1}{3} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2})$		
Moltiplicando per 6	(2	3	3)

Dal momento che si possono avere anche intercette sugli assi negative, gli indici possono assumere anche valori negativi (indicati da una barretta sopra l'indice). Con questa costruzione, gli indici $[\bar{1} \ 1 \ 1]$, indicano una direzione opposta alla $[\bar{1} \ \bar{1} \ 1]$. Nel sistema cubico, le direzioni più comunemente trattate, per la loro importanza, sono le $[100]$, $[110]$ e $[111]$.

Due direzioni si considerano equivalenti quando, lungo tali direzioni, la spaziatura degli atomi è la stessa; in alcune strutture cristallografiche di alta simmetria, direzioni con indici differenti possono essere equivalenti.

Distanza tra piani cristallografici

E' possibile calcolare la distanza tra due piani contigui definita dalla equazione seguente:

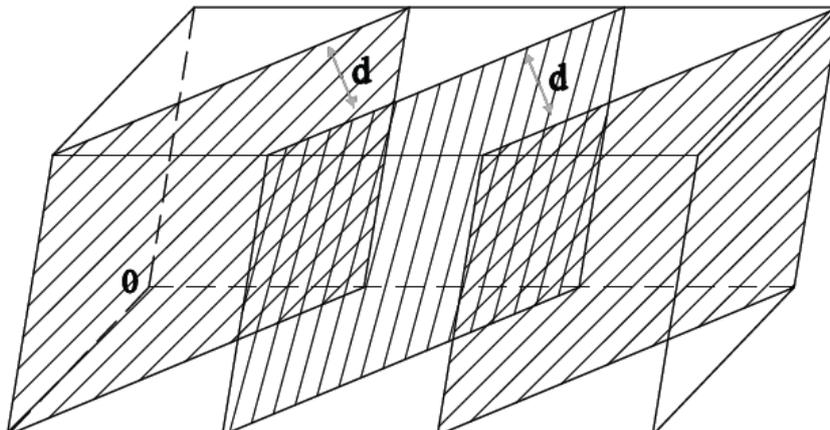


Figura 1.22: piani cristallografici paralleli (stessi indici di Miller).

$$d_{hkl} = \frac{a_o}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1.11)$$

che per i diversi sistemi cristallografici assume le seguenti espressioni:

$$\text{cubico: } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \quad (1.12)$$

$$\text{esagonale: } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + l^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (1.13)$$

Famiglie di piani. Tutti i piani, riferiti ad un sistema di assi cristallografici che possiedono gli stessi indici, e' come se avessero come sistema di riferimento le stesse orientazioni degl'assi.

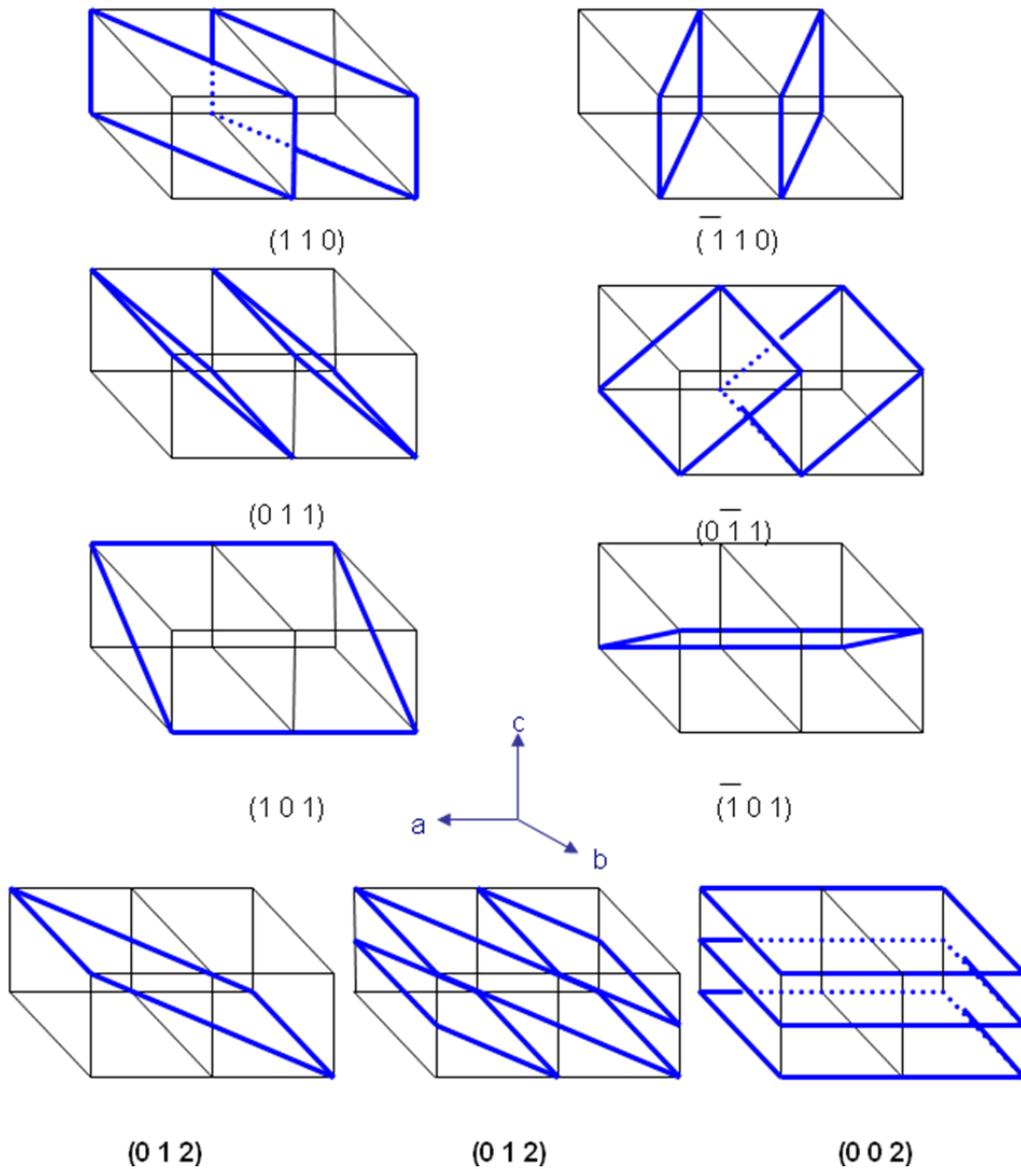


Figura 1.23: differenti sistemi di piani cristallografici paralleli (stessi indici di Miller).

Altri sistemi, come quelli tetragonali, non hanno le stesse proprietà; per esempio, nei tetragonali, le direzioni $[100]$ e $[010]$ sono equivalenti, ma non le $[100]$ e $[001]$.

Cristalli esagonali. Nei cristalli a simmetria esagonale, alcune direzioni equivalenti possono avere indici diversi; questo problema viene risolto facendo ricorso un sistema di coordinate a quattro assi (definito di *Miller-Bravais*). I tre assi a_1 , a_2 ed a_3 sono contenuti nello stesso piano, con angoli di 120° fra loro. L'asse z è perpendicolare al piano degli altri tre.

Le direzioni, in questo sistema, sono identificate dagli indici $[uvtw]$, essendo i primi tre indici le proiezioni del vettore considerato sui tre assi del piano di base.

La conversione fra gli indici del sistema a tre assi $[u'v'w']$ e quello a quattro assi $[uvtw]$ avviene secondo le relazioni:

$$u = \frac{n}{3}(2u' - v') \quad \text{e} \quad v = \frac{n}{3}(2v' - u') \quad (1.14)$$

$$t = -(u + v) \quad \text{e} \quad w = nw' \quad (1.15)$$

essendo n un fattore necessario a portare tutti gli indici al più piccolo valore intero.

Definiti gl'indici di Miller si possono introdurre i concetti di densità lineare (frazione di una linea che passa fra due centri di atomi che è effettivamente occupata dagli atomi) e densità planare (frazione dell'area di un piano che è effettivamente occupata dagli atomi, rappresentati come sfere). Questi concetti sono della massima importanza, in quanto si vedrà che la deformazione avviene per scorrimento l'uno sull'altro dei piani di un cristallo aventi la massima densità planare (*piani a massimo impacchettamento*), e che tale scorrimento avviene nelle direzioni di massima densità lineare (*direzioni di massimo impacchettamento*).

Strutture ad elevato impacchettamento. Si è visto che le strutture cfc e ec hanno il massimo fattore di impacchettamento (0.74) possibile quando si vogliono costruire strutture con delle sfere.

Queste strutture possono anche essere descritte, oltre che come celle unitarie, anche come impilaggi di piani ad elevata densità atomica.

Si supponga di disporre, sopra questo piano, un piano equivalente in modo che le sfere del piano sovrastante si sistemino nelle "vallette" fra atomi adiacenti del primo piano; è inoltre possibile impilare sopra i due piani così sistemati un terzo piano, ancora uguale agli altri, in modo tale che le sfere di questo piano si sistemino ancora una volta nelle "vallette" fra gli atomi del piano intermedio, ma senza che gli atomi del terzo piano siano esattamente sopra quelli del primo.

Si ottiene così una struttura di piani di massimo impacchettamento, equivalenti l'uno all'altro, ma sfalsati.

La struttura cfc può essere considerata idealmente come un insieme di sfere rigide compattate in un piano, dove i piani sono impacchettati l'uno sull'altro con le sfere dell'uno giacenti negli interstizi dell'altro. Le strutture cfc e ec presentano però delle proprietà di simmetria totalmente differenti.

Nella struttura ec il terzo strato di atomi è impilato al di sopra dei siti del primo strato (A), mentre il secondo strato (B) è impilato in relazione ai due A tra gli spazi interstiziali disponibili, risultando quindi in un ordine di impilamento ...ABAB.... In confronto l'impilamento dei piani nel cfc prevede che il terzo strato (C) sia disposto sui siti interstiziali del secondo (A) risultando un ordine di impilamento ...ABCABC..., che dà luogo a tre file addizionali di atomi che si aggiungono ai tre strati A. Pertanto il reticolo cfc possiede sei file di atomi nello spazio delineato da un tetraedro a differenza della struttura ec che ne presenta solo tre. Tali differenze hanno importanti conseguenze sulla plasticità delle strutture. Si possono indicare i tre piani con le lettere A, B e C. Si può vedere facilmente che i piani (111) nel sistema cfc si impilano seguendo proprio questo schema.

Se sopra i due piani A e B si sovrappone un terzo strato di atomi, in modo che l'ultimo sia esattamente sovrastante il primo, si ha un impilaggio ABABAB, tipico dei piani basali ed intermedi (0001) nel sistema ec.

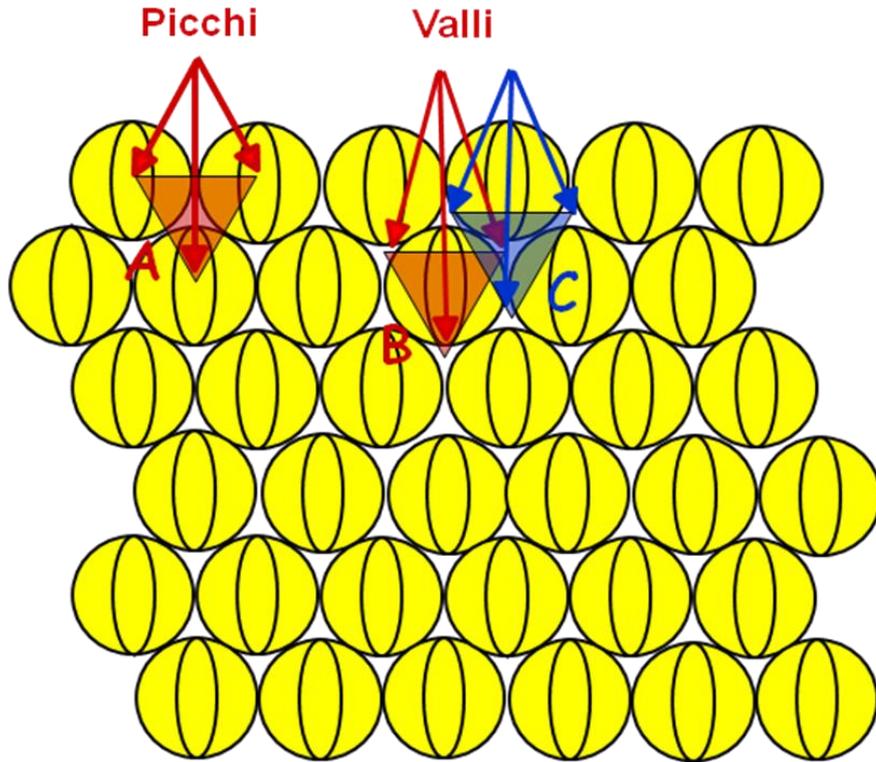


Figura 1.24: possibile arrangemento degl'atomi su piani paralleli.

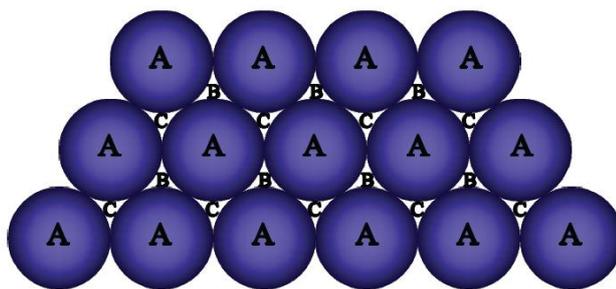
Impilaggio dei piani. Posizione del secondo piano: ogni sfera a contatto con tre sfere del piano base (punti B). Solo il 50% delle cavità del primo strato sono occupate dagli atomi del secondo strato. Terzo strato due diverse collocazioni: -sovrapponendo le sfere sopra i vuoti del primo strato non occupati dal secondo (punti C);

-direttamente in corrispondenza delle sfere del primo piano (punti A).

Due differenti distribuzioni spaziali:

-sequenza ABCABCABC... (reticolo cfc)

-sequenza ABABAB....(reticolo ec)



strato A

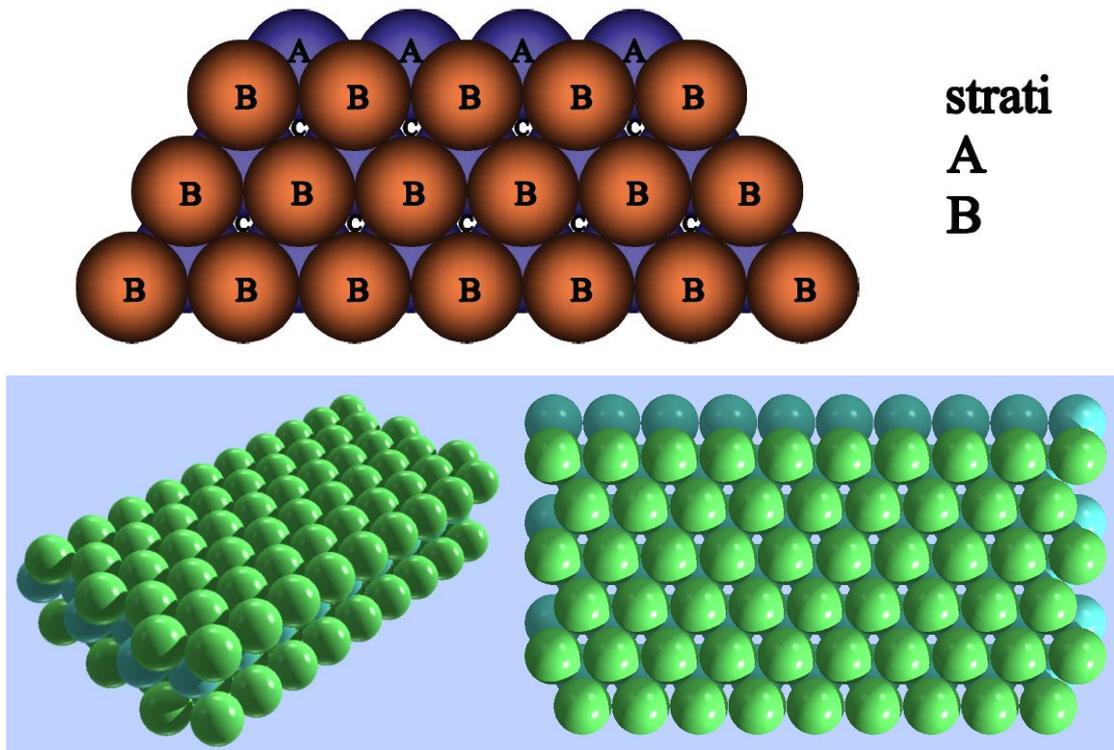


Figura 1.25: possibile impilaggio di piani paralleli.

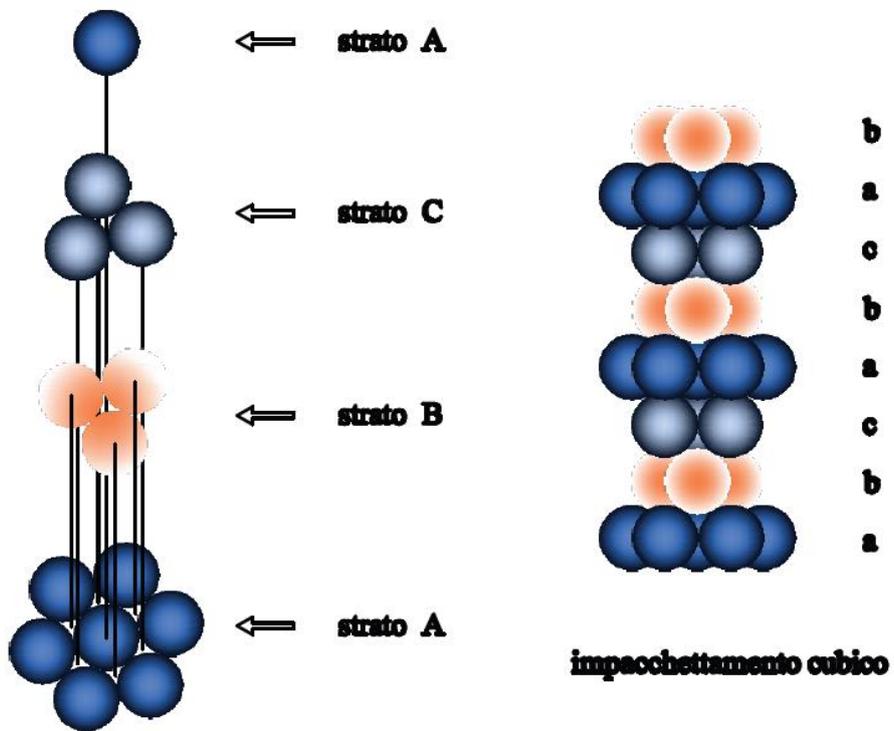


Figura 1.26: tipico impilaggio dei reticoli cubici.

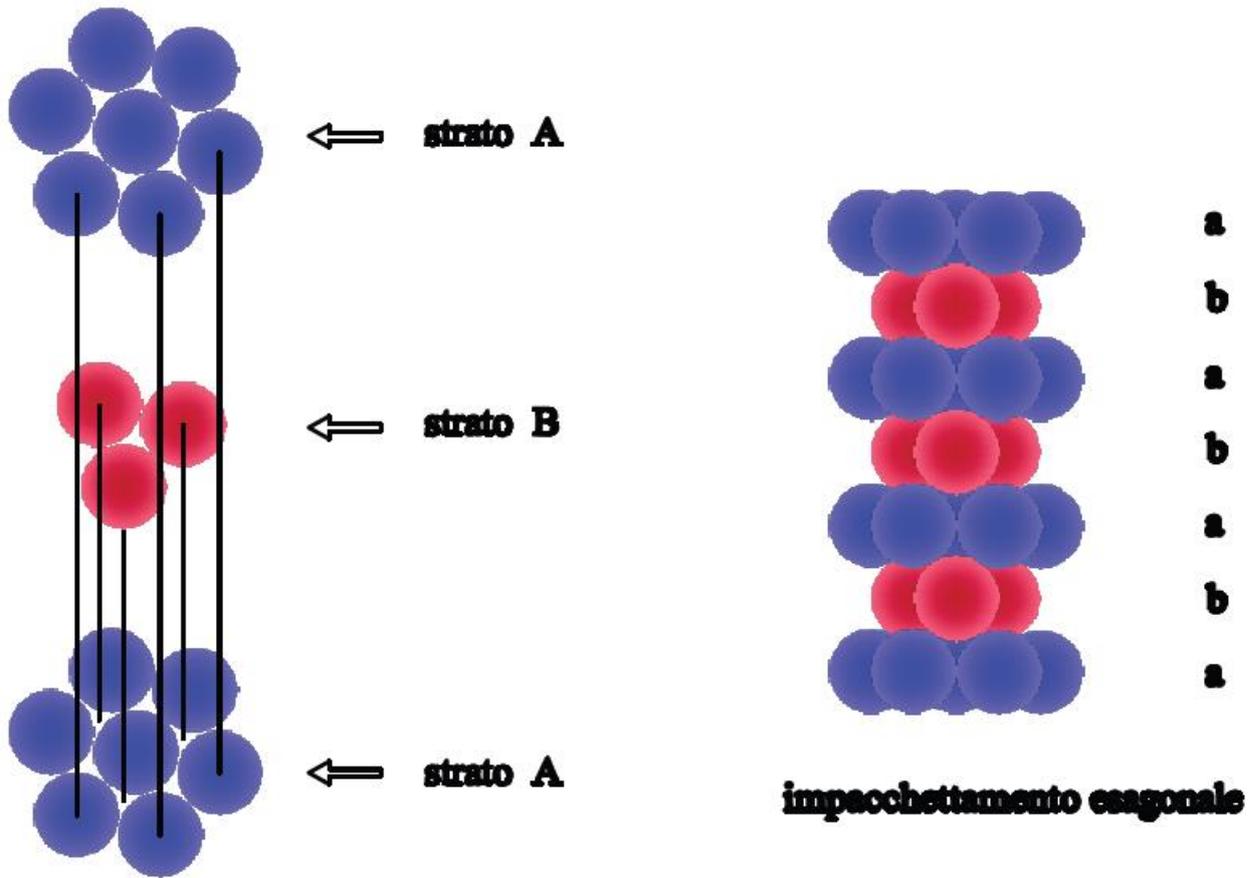


Figura 1.27: tipico impilaggio dei reticoli esagonali.

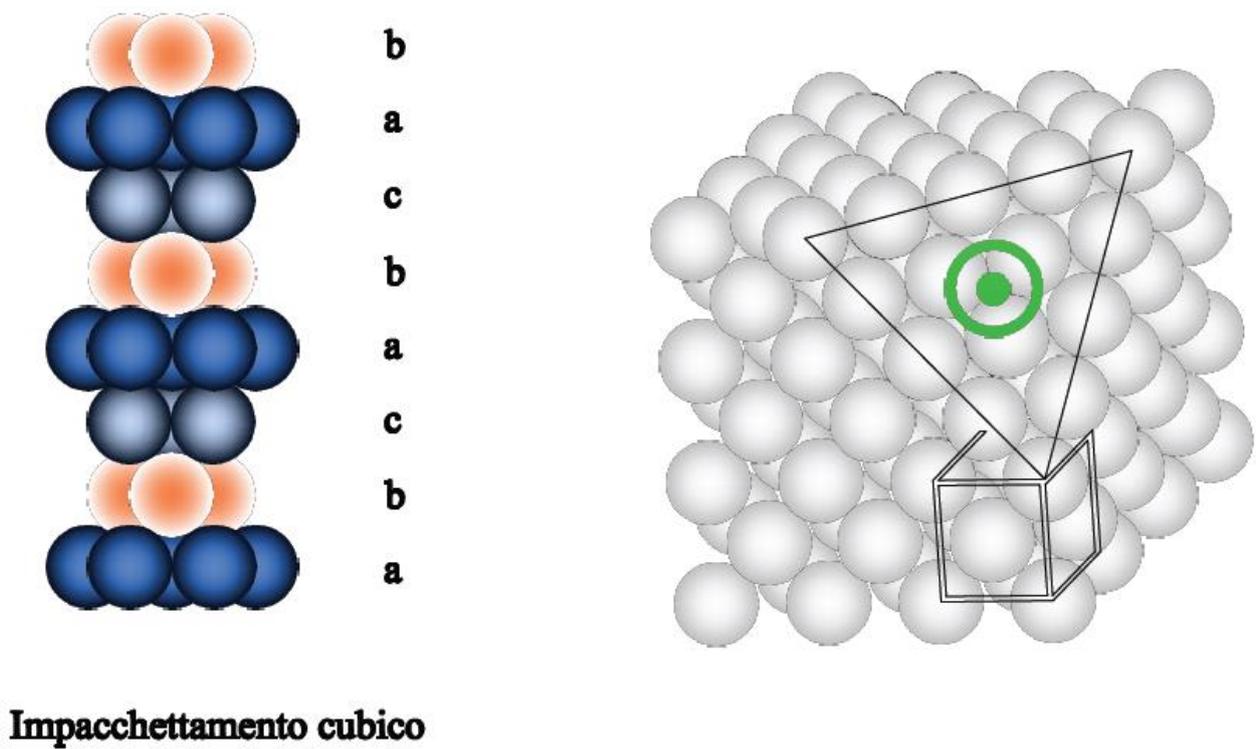


Figura 1.28: punto di osservazione per l'individuazione degli impacchettamenti del sistema cubico.

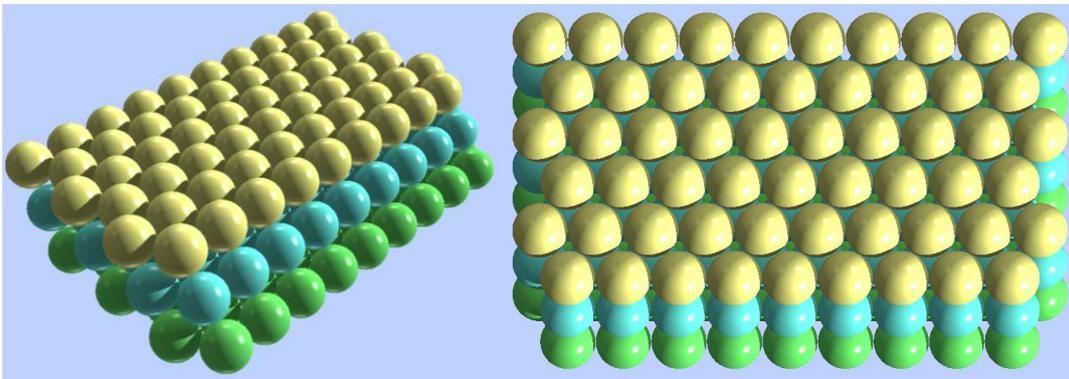


Figura 1.29: visualizzazione tridimensionale dell'impacchettamento cubico.

Le strutture cristallografiche lungo le diverse interfacce sono responsabili della deformazione degli aggregati policristallini e possono anche influenzare la resistenza tramite l'effetto che hanno sul livello di segregazione di impurezze attraverso tali interfacce.

Una famiglia di piani equivalenti per simmetria è rappresentata con le parentesi graffe. Così, le sei facce di un cubo possono essere indicate con $\{100\}$. Questa simbologia è molto utilizzata nello studio delle superfici e dei fenomeni connessi.

Elasticità

Legge di Hooke

Nel 1676 Robert Hooke osservò che metalli sottili sottoposti a sollecitazioni esterne manifestano una riduzione dello spessore, dove l'allungamento risultante risulta proporzionale al carico applicato e si notò che applicando un carico di piccola intensità non si registrano deformazioni permanenti nel provino. Questa relazione lineare, nota come legge di Hooke, può essere generalizzata ad una relazione lineare tra i nove elementi del tensore delle tensioni e i nove elementi del tensore delle deformazioni, implicando quindi la presenza di 81 costanti di proporzionalità elastiche s_{ijkl} , che relazionano le componenti ε_{ij} del tensore di deformazione alle componenti σ_{kl} del tensore delle tensioni, in un'espressione del tipo

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{l=1}^3 \sum_{k=1}^3 s_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (1.16)$$

o in modo alternativo

$$\sigma_{ij} = \sum_{l=1}^3 \sum_{k=1}^3 c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (1.17)$$

Dove la costante di proporzionalità c è nota come costante elastica.

Dal momento che nelle nostre considerazioni i due tensori sono simmetrici rispetto alla diagonale vi sono solo sei elementi di tensione e di deformazione indipendenti. Questo rende possibile la semplificazione dell'espressione di Hooke che risulta così caratterizzata da trentasei termini, ma richiede l'utilizzo della notazione di Voigt per unificare la rappresentazione dei termini di tensione e di deformazione, come segue:

$$\sigma_{11} = \sigma_1 \quad \varepsilon_{11} = \varepsilon_1 \quad (1.18)$$

$$\sigma_{22} = \sigma_2 \quad \varepsilon_{22} = \varepsilon_2 \quad (1.19)$$

$$\sigma_{33} = \sigma_3 \quad \varepsilon_{33} = \varepsilon_3 \quad (1.20)$$

$$\sigma_{23} = \sigma_{32} = \sigma_4 \quad \varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} = \frac{\gamma_4}{2} \quad (1.21)$$

$$\sigma_{13} = \sigma_{31} = \sigma_5 \quad \varepsilon_{13} = \varepsilon_{31} = \frac{\gamma_5}{2} \quad (1.22)$$

$$\sigma_{12} = \sigma_{21} = \sigma_6 \quad \varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = \frac{\gamma_6}{2} \quad (1.23)$$

Nelle equazioni precedenti l'elemento di deformazione γ_i è inteso come componente della deformazione tangenziale; l'uso di esse è conveniente in termini di rappresentazione.

Sulla base della notazione di Voigt, la legge di Hooke generalizzata può essere espressa con un set di relazioni lineari :

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{13}\sigma_3 + s_{14}\sigma_4 + s_{15}\sigma_5 + s_{16}\sigma_6 \\ \varepsilon_2 &= s_{21}\sigma_1 + s_{22}\sigma_2 + s_{23}\sigma_3 + s_{24}\sigma_4 + s_{25}\sigma_5 + s_{26}\sigma_6 \\ &\vdots \\ \gamma_6 &= s_{61}\sigma_1 + s_{62}\sigma_2 + s_{63}\sigma_3 + s_{64}\sigma_4 + s_{65}\sigma_5 + s_{66}\sigma_6 \end{aligned} \quad (1.24)$$

Queste possono essere abbreviate nell'espressione matriciale

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s}\boldsymbol{\sigma} \quad (1.25)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (1.26)$$

Dove

$$\mathbf{c} = \mathbf{s}^{-1} \quad (1.27)$$

In un solido elastico l'incremento di lavoro esterno dW per unità di volume, deve essere uguale all'incremento di energia elastica di deformazione dU per unità di volume:

$$dW = dU = \sigma_1 d\varepsilon_1 + \sigma_2 d\varepsilon_2 + \sigma_3 d\varepsilon_3 + \sigma_4 d\gamma_4 + \sigma_5 d\gamma_5 + \sigma_6 d\gamma_6 \quad (1.28)$$

Dal momento che l'energia elastica di deformazione è rappresentabile da un'unica funzione di stato, sarà pertanto indipendente dalla modalità con cui è stato raggiunto lo stato finale, è possibile dimostrare che le costanti elastiche delle matrici, definite precedentemente, devono essere simmetriche. Questo deriva direttamente dalla seguente relazione

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \gamma_6 \partial \varepsilon_1} = \frac{\partial \sigma_1}{\partial \gamma_6} = c_{16} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_1 \partial \gamma_6} = \frac{\partial \sigma_6}{\partial \varepsilon_1} = c_{61} \quad (1.29)$$

La quale, certamente è anche valida per la matrice inversa. Queste considerazioni indicano che, anche nel caso di minima simmetria, possono esservi solo ventuno costanti che descrivono le relazioni sforzo-deformazione.

Per un sistema con gli assi principali paralleli agli assi principali di simmetria del materiale, si può dimostrare che saranno presenti molti meno coefficienti elastici per molti dei sistemi cristallini di interesse e per molti materiali di importante interesse tecnologico.

Cristalli Esagonali

Cristalli con simmetria esagonale possiedono solo cinque costanti elastiche in virtù del fatto di manifestare proprietà isotropiche sui piani basali, che risultano essere s_{11} ($=s_{22}$), s_{33} , s_{12} , s_{13} ($=s_{23}$) e s_{44} ($=s_{55}$), con s_{66} uguale a $2(s_{11}-s_{12})$. Notiamo così che molti materiali importanti da un punto di vista tecnologico, come fibre tratte o prodotti estrusi presentano una simmetria esagonale e sono pertanto caratterizzati da proprietà isotrope sul piano principale di processo.

Cristalli cubici

Molti cristalli di materiali puri presentano simmetria cubica con tre assi principali identici e mutuamente ortogonali. Per questi materiali non si annulleranno solo tre costanti elastiche che sono s_{11} ($=s_{22}=s_{33}$) s_{12} ($=s_{13}=s_{23}$) e s_{44} ($=s_{55}=s_{66}$).

Monocristalli e policristalli

Se un campione (o, in linea di principio, un componente) è costituito interamente da atomi che si dispongono all'interno dello stesso reticolo, che si estende all'interno del campione nelle tre direzioni, si ha a che fare con un *monocristallo*. Strutture di questo tipo, nel caso dei metalli, in genere si ottengono soltanto esercitando uno stretto controllo sulle condizioni di solidificazione.

In realtà, i metalli sono costituiti da piccole porzioni di cristallo, definite grani, che però hanno orientamento diverso l'uno dall'altro. Quando la velocità di raffreddamento è sufficientemente lenta, in genere si formano molti nuclei di solidificazione nel fuso, che crescono indipendentemente l'uno dall'altro, mantenendo ovviamente orientazioni diverse. A solidificazione completata si ha una struttura a grani equiassici. I diversi grani sono divisi l'uno dall'altro dai bordi di grano. Se la velocità di raffreddamento è più elevata, si ha una solidificazione di tipo *dendritico*. Le dendriti sono costituite da strutture ramificate, sviluppatasi a partire dai nuclei di solidificazione, che nei casi reali sono per lo più le pareti fredde del contenitore (lingottiera, forma o conchiglia) all'interno del quale si trova il fuso. In molti casi reali, "dita" si protendono dal "braccio" centrale di un cristallo solido, e quindi si ramificano ulteriormente a 90° ; le *dendriti* così formatesi crescono fino a venire a contatto le une con le altre. L'accrescimento avviene per ingrossamento delle dendriti, ma cavità interdendritiche possono comunque rimanere alla fine della solidificazione. Inoltre, impurezze ed elementi in lega sono spesso espulsi dal reticolo dendritico, e vanno ad arricchire il rimanente liquido, e solidificano per ultimi. Di conseguenza, la distribuzione finale delle impurezze o delle fasi secondarie permette in molti casi di identificare a colpo d'occhio la geometria delle dendriti.

Anisotropia. Nel caso di un monocristallo, ovviamente, le proprietà dipendono dalla direzione rispetto alla quale vengono misurate (tabella I). La differenza di proprietà fra una direzione e l'altra di un reticolo (anisotropia) dipende dalla variazione di grandezze come la distanza interatomica lungo la direzione considerata. L'anisotropia diventa sempre più notevole man mano che il grado di simmetria della struttura si abbassa (un cubico è molto più isotropo di un triclinico). Nel caso di un materiale policristallino, nella maggior parte dei casi, i grani sono orientati in maniera statisticamente casuale; di conseguenza, anche se il comportamento di ogni singolo grano dovrebbe essere di per sé anisotropo, nell'insieme il materiale si comporta in maniera isotropa.

Per comprendere il fenomeno partiamo dalla considerazione che tensione e deformazione sono legate dalla matrice delle rigidità:

$$\sigma_i = \varepsilon_j C_{ij} \quad (1.30)$$

Oppure

$$\varepsilon_i = \sigma_j S_{ij} \quad (1.31)$$

In forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

Entrambe le matrici dei coefficienti sono simmetriche rispetto alla diagonale principale quindi il numero delle costanti elastiche si riduce a 21.

Nella figura 1.30 sono schematizzate le costanti elastiche per i sistemi cristallini cubico ed esagonale.

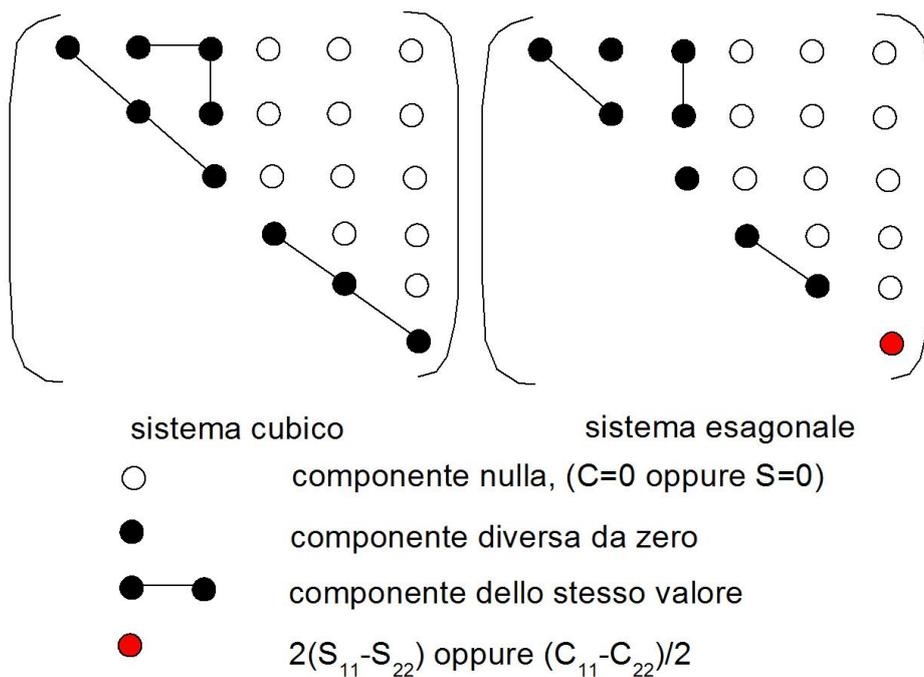


Figura 1.30: schema delle costanti elastiche per i sistemi cubici ed esagonale.

Se ad esempio consideriamo un reticolo cubico, se applichiamo uno sforzo nella direzione [100] si genererà nel cristallo una risposta elastica equivalente a quella relativa allo stesso sforzo applicato nella direzione [010] o [001], si può quindi scrivere:

$$C_{11} = C_{22} = C_{33} \quad (1.34)$$

lo stesso accade per le direzioni per cui:

$$C_{44} = C_{55} = C_{66}; C_{12} = C_{13} = C_{23} \quad (1.35)$$

Per cui il numero di costanti elastiche indipendenti per i sistemi cubici si riduce a tre. I reticoli cubici non sono necessariamente isotropi, per tali sistemi si definisce il rapporto di Zener:

$$A = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} = 2 \frac{S_{11} - S_{12}}{S_{44}} \quad (1.36)$$

quando tale rapporto è uguale ad uno il materiale è isotropo. Quindi per i solidi isotropi:

$$C_{44} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (1.37)$$

e

$$S_{44} = 2(S_{11} - S_{12}) \quad (1.38)$$

In generale si può calcolare il modulo elastico dei reticoli cubici dalla seguente equazione:

$$\frac{1}{E_{ijk}} = S_{11} - 2 \left(S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2} S_{44} \right) (l_{i1}^2 l_{j2}^2 + l_{j2}^2 l_{k3}^2 + l_{i1}^2 l_{k3}^2) \quad (1.39)$$

Dove l_{i1} , l_{j2} e l_{k3} sono i coseni direttori tra [ijk] e le direzioni [100], [010] e [001]. In tabella I sono riassunti i valori delle costanti elastiche per i singoli materiali metallici.

Materiale	10^{10} Pa			10^{-11} Pa ⁻¹		
	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	S ₁₁	S ₁₂	S ₁₃
Sistema cubico	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	S ₁₁	S ₁₂	S ₁₃
Alluminio	10.82	6.13	2.85	1.57	-0.57	3.51
Rame	16.84	12.14	7.54	1.5	-0.63	1.33
Oro	18.60	15.70	4.20	2.33	-1.07	2.38
Ferro	23.70	14.10	11.60	0.80	-0.28	0.86
Nichel	24.65	14.73	12.47	0.73	-0.27	0.8
Tungsteno	50.1	19.8	15.14	0.26	-0.07	0.66

Materiale	10^{10} Pa					10^{-11} Pa ⁻¹				
	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₃₃	C ₄₄	S ₁₁	S ₁₂	S ₁₃	S ₃₃	S ₄₄
Sistema esagonale	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₃₃	C ₄₄	S ₁₁	S ₁₂	S ₁₃	S ₃₃	S ₄₄

Cadmio	12.10	4.81	4.42	5.13	1.85	1.23	-0.15	-0.93	3.55	5.40
Cobalto	30.70	16.50	10.30	35.81	7.53	0.47	-0.23	-0.07	0.32	1.32
Magnesio	5.97	2.62	2.17	6.17	1.64	2.20	-0.79	-0.50	1.97	6.10
Titanio	16.0	9.0	6.6	18.1	4.65	0.97	-0.47	-0.18	0.69	2.15
Zinco	16.10	3.42	5.01	6.10	3.83	0.84	0.05	-0.73	2.84	2.61

Tabella II: costanti elastiche per alcuni metalli puri.

Per i cristalli a struttura esagonale il modulo elastico si calcola con:

$$\frac{1}{E_{ijk}} = S_{11}(1-l_3^2)^2 + S_{33}l_3^4 + 2(S_{13} + S_{44})l_3^2(1-l_3^2) \quad (1.40)$$

l'unico coseno direttore che interviene nel calcolo è quello ortogonale ai piani basali; da ciò deriva che, nei cristalli esagonali, il modulo elastico è isotropo ovunque nel piano basale.

Metallo	Modulo elastico [GPa]		
	[100]	[110]	[111]
Ferro	125	210.5	272.7
Alluminio	63.7	72.6	76.1
Rame	66.7	130.3	191.1

Tabella III: modulo di elasticità per diversi materiali monocristallini

La deformazione dei reticoli cristallini

E' ben noto che la deformazione di un metallo può essere elastica o plastica. Nel caso della deformazione elastica, la deformazione viene recuperata all'atto della rimozione del carico. La deformazione ha invece caratteristiche plastiche quando è di tipo permanente, e non viene recuperata rimuovendo il carico (viene comunque sempre recuperata la componente elastica).

Dal punto di vista atomico, la deformazione elastica consiste in un modesto scorrimento di atomi dalla loro posizione di equilibrio, a causa di una forza esterna di taglio (Figura 1.31). Rimovendo la sollecitazione esterna, gli atomi tornano spontaneamente alla loro posizione iniziale di equilibrio.

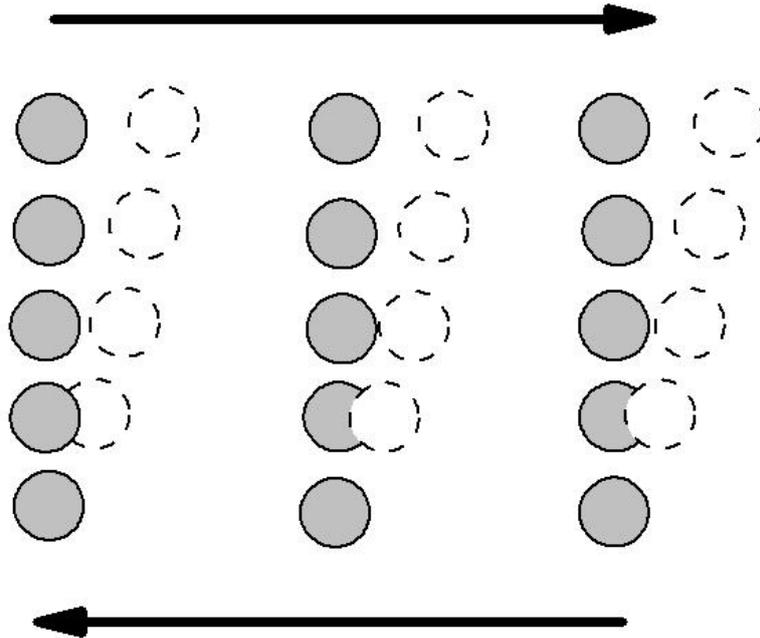


Figura 1.31: spostamento atomico generato da una sollecitazione di taglio; se sufficientemente piccolo, lo scorrimento ha carattere reversibile, e viene recuperato alla rimozione del carico (deformazione elastica).

Se la sollecitazione è sufficientemente elevata, gli atomi si spostano troppo dalla posizione di equilibrio, e si ha uno scorrimento di tutti gli atomi al di sopra di un piano rispetto a quelli al disotto. Durante tale spostamento ciascun atomo si sposta sufficientemente da occupare il sito reticolare più prossimo. A livello macroscopico questo corrisponde alla formazione di un gradino, cioè ad una deformazione di tipo plastico.

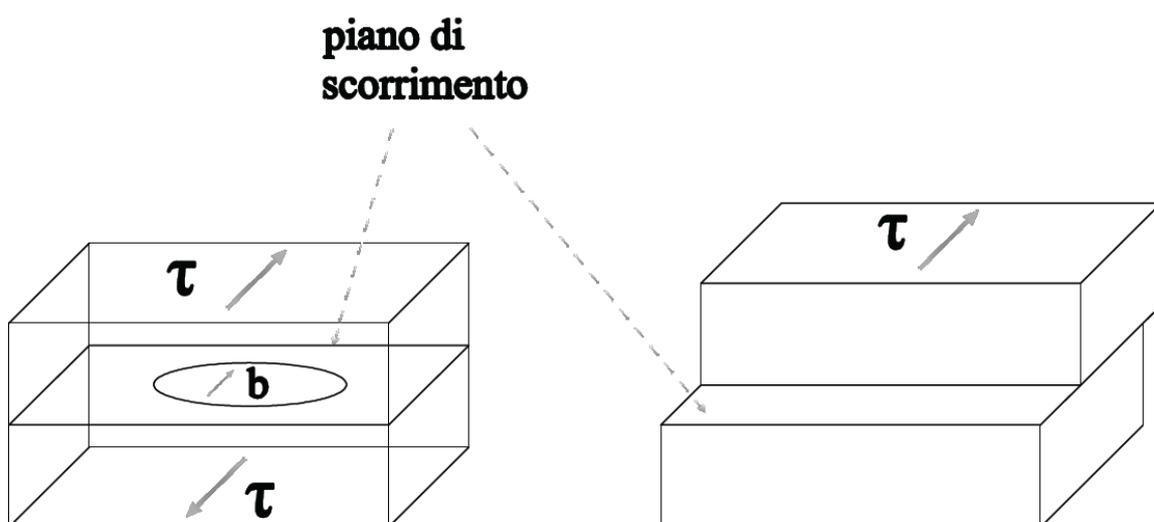


Figura 1.32: deformazione macroscopica dovuta ad una sollecitazione di taglio.

E' bene precisare che sono le sollecitazioni di taglio a causare la deformazione, e non quelle normali; infatti, la deformazione non è altro che il prodotto di scorrimenti di piani di atomi l'uno sull'altro, fenomeno reso possibile da sollecitazioni di taglio (quelle normali piuttosto tenderebbero ad "aprire" i piani, o al limite a comprimerli).

Vediamo a questo punto quale potrebbe essere il valore della sollecitazione di taglio necessaria per causare una deformazione plastica. Si abbiano due piani atomici come quelli riportati in figura 1.33. La distanza interplanare sia a , la distanza interatomica su ogni piano sia b .

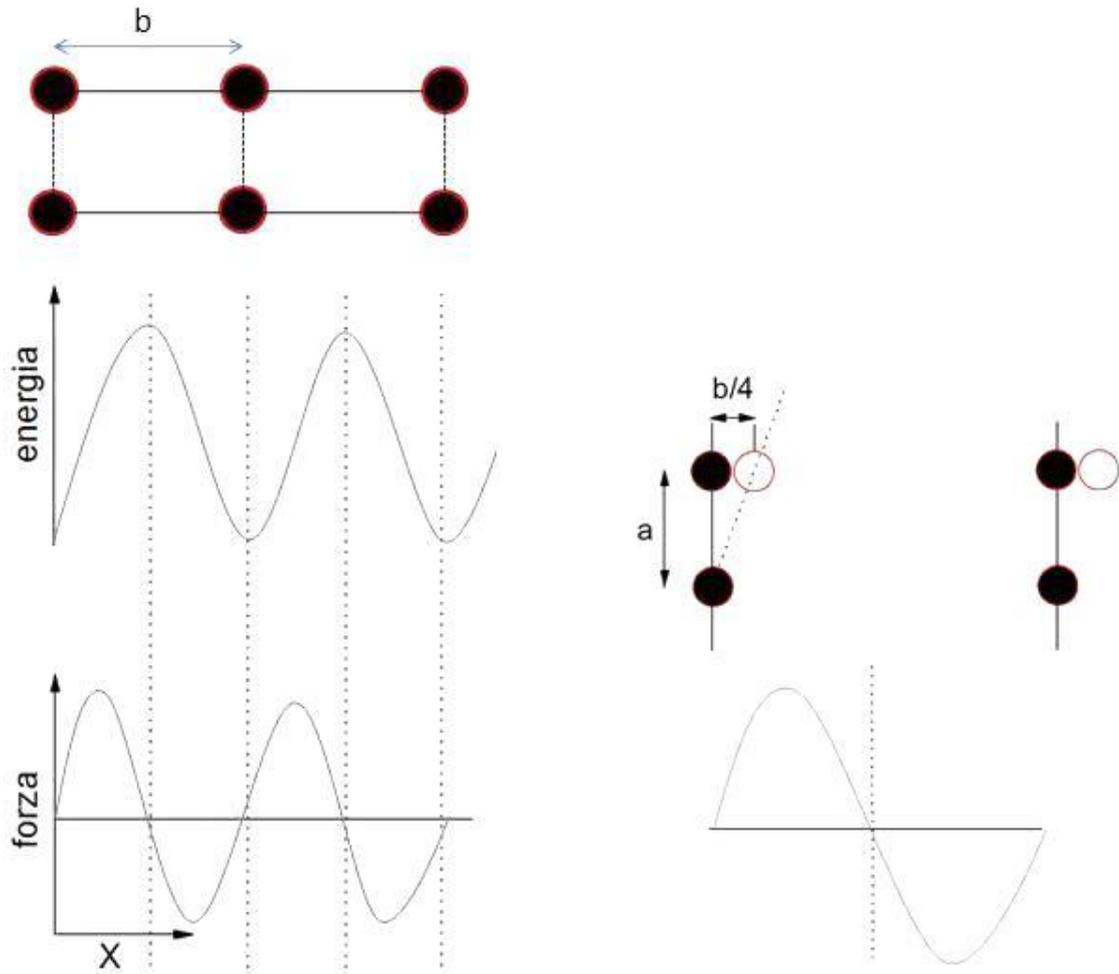


Figura 1.33: Variazione della forza in funzione dello spostamento dalla posizione di equilibrio di atomi su due piani paralleli.

Nella posizione di equilibrio, ciascun atomo è nella posizione di minima energia. Uno spostamento dalla posizione di equilibrio comporta un aumento di energia, descritto dalla legge periodica riportata in Figura 1.33. Tale spostamento, quindi, richiede che dall'esterno sia esercitata una forza, esprimibile come sollecitazione di taglio τ , che ha l'andamento sinusoidale riportato in basso in Figura 1.33. Il massimo valore della sollecitazione esterna è necessario quando lo spostamento di ciascun atomo è pari a $b/4$.

Prendendo, come valore massimo della tensione τ_m a $x=b/4$, si può scrivere:

$$\tau = \tau_m \sin\left(2\pi \frac{x}{b}\right) \quad (1.41)$$

dove x è lo spostamento dalla posizione di equilibrio. Per piccoli valori di x , la precedente può essere trasformata in:

$$\tau = \tau_m \left(2\pi \frac{x}{b} \right) \quad (1.42)$$

La deformazione di taglio γ , in accordo con il modello della Figura 1.33, è $\gamma = x/a$. Se lo spostamento è piccolo, vale la legge di Hooke, per cui:

$$\tau = G\gamma = G \frac{x}{a} \quad (1.43)$$

che sostituendo diventa:

$$\tau_m = \frac{Gb}{2\pi a} \quad (1.44)$$

Questa relazione ci permetterebbe di calcolare il valore teorico della sollecitazione di scorrimento; si vedrà in seguito come il valore reale della sollecitazione di taglio necessaria a deformare un metallo sia di diversi ordini di grandezza inferiore. Nonostante ciò, la relazione ottenuta ci dà alcune preziose informazioni. Infatti, si osserva che la resistenza teorica di un cristallo è minima quando a è elevato, e b è piccolo. Entrambe queste condizioni sono soddisfatte per i piani ad elevato impacchettamento, sui quali le distanze interatomiche sono minori; inoltre, la distanza fra questi piani è la massima che si ottiene fra piani della stessa famiglia. Sia ha così che lo scorrimento, responsabile della deformazione, nei cristalli avviene sui piani ad elevato impacchettamento, nelle direzioni in cui è minima la distanza interatomica. Quindi la deformazione avviene per scorrimenti che avvengono sui cosiddetti *sistemi di scorrimento* (insieme di piani e direzioni di scorrimento, tabella II).

Consideriamo, ad esempio, un reticolo cubico a facce centrate; la relazione tra il parametro reticolare e la distanza interplanare è data da:

$$b = a_0 \frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{a_0}{\sqrt{2}} \quad (1.45)$$

in un sistema cubica la distanza interplanare è data da:

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1.46)$$

per il sistema cfc il piano a maggior impacchettamento lungo il quale vi è scorrimento è (111):

$$d_{111} = \frac{a_0}{\sqrt{3}} \quad (1.47)$$

sostituendo nell'equazione per il calcolo della τ_{\max} :

$$\tau_{\max} = \frac{G}{2\pi} \frac{\sqrt{2}a_0}{2} \frac{\sqrt{3}}{a_0} \cong \frac{G}{5.13} \quad (1.48)$$

I valori tipici della τ_{max} teorica per i principali metalli è data in tabella.

Materiale	τ_{max} (GPa)
Rame (-263°C)	1.29
Rame	1.2
Oro	0.74
Argento	0.77
Cobalto	3.49
Alluminio (-263°C)	2.62
Alluminio	0.9
Nichel (-263°C)	7.1
Nichel	2.4
Ferro	6.6
Tungsteno	16.5

Tabella IV: valori della τ_{max} per alcuni metalli puri.

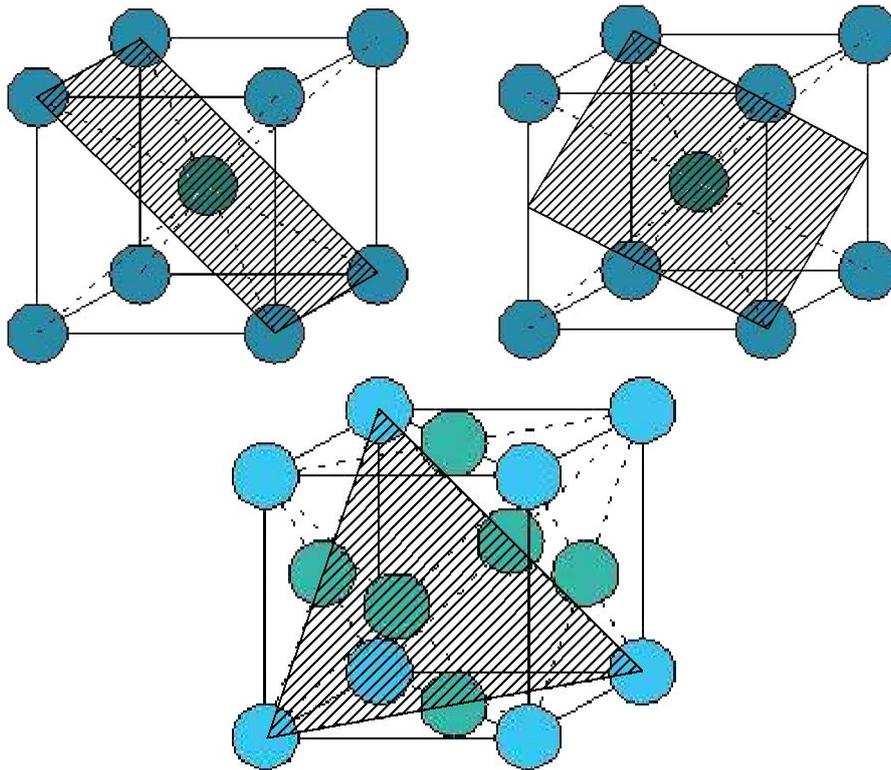


Figura 1.34: piani di scorrimento tipici dei reticoli cubici.

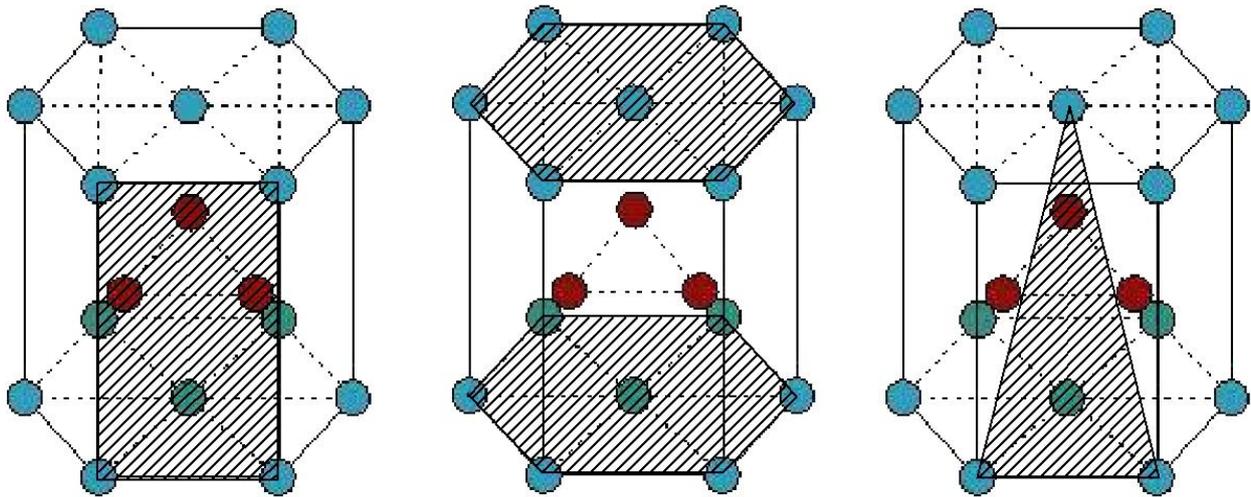


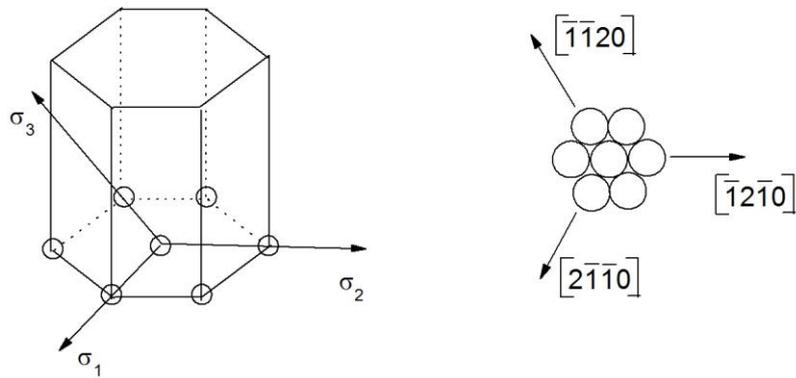
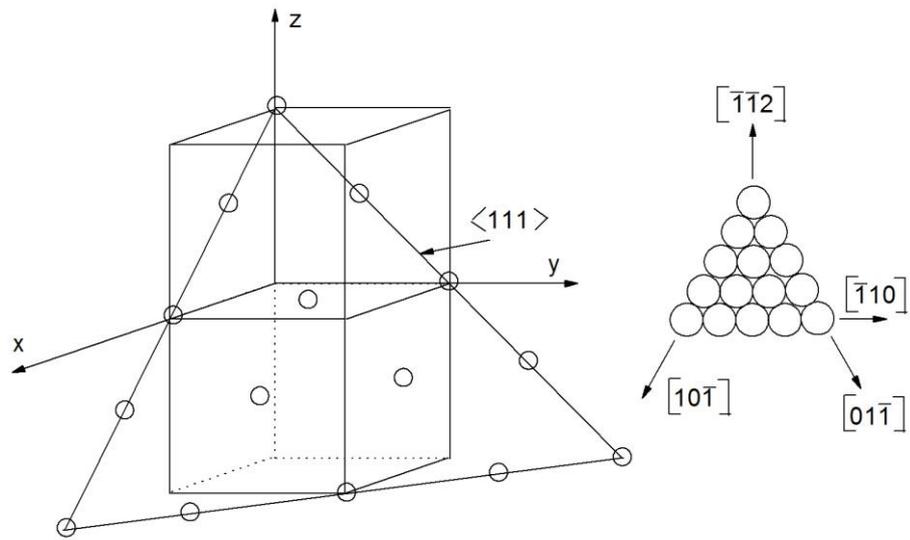
Figura 1.35: piani di scorrimento tipici del reticolo esagonale.

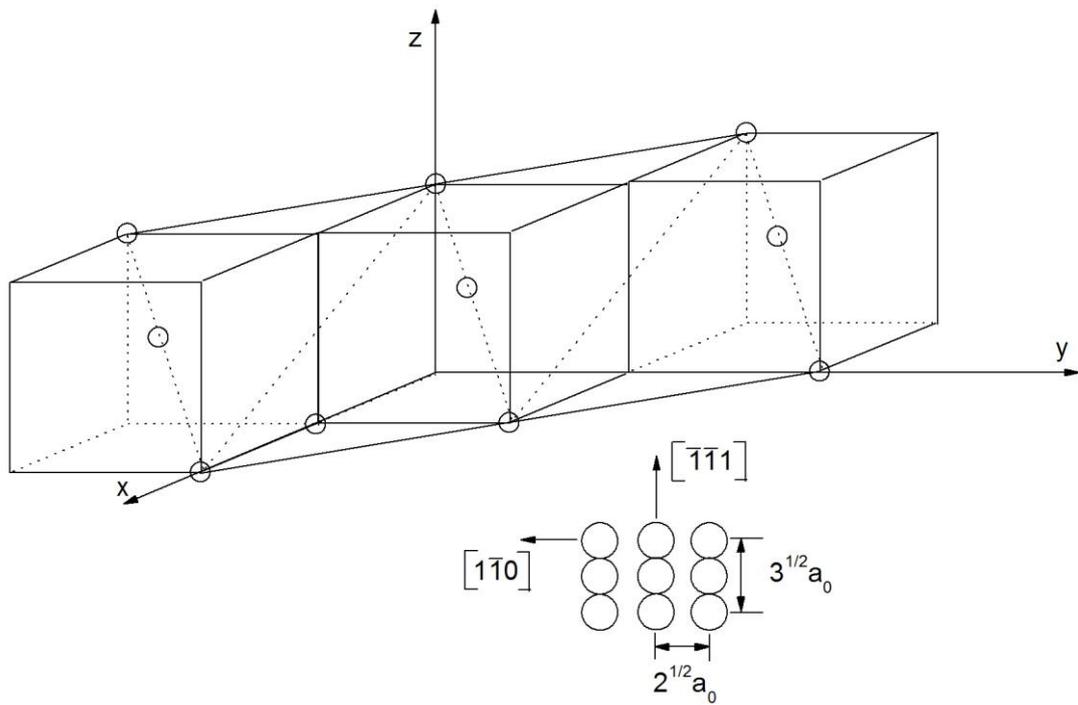
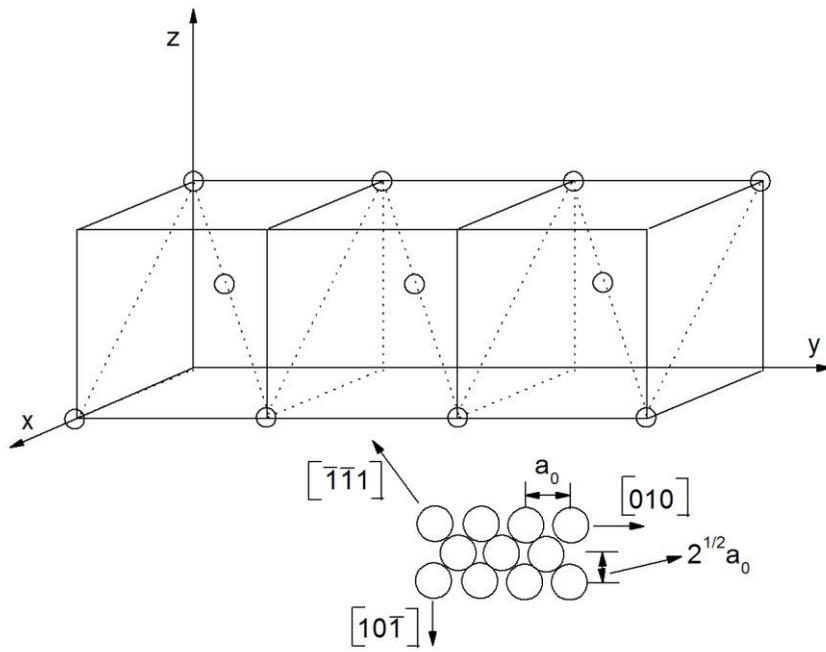
Sistema cristallografico	Piano di scorrimento	Direzione di scorrimento	di	Numero di sistemi di scorrimento
<i>cfc</i>	{111}	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$		12
<i>ccc</i>	{110}	$\langle \bar{1}11 \rangle$		12
<i>ccc</i>	{211}	$\langle \bar{1}11 \rangle$		12
<i>ccc</i>	{321}	$\langle \bar{1}11 \rangle$		24
<i>ec</i>	{0001}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$		3

Tabella V. Sistemi di scorrimento principali a temperatura ambiente.

Nel caso dei metalli a struttura esagonale compatta, altri sistemi di scorrimento possono attivarsi se la temperatura è sufficientemente alta; a temperatura ambiente, però, il sistema *ec* mantiene soltanto tre sistemi di scorrimento, mentre i sistemi cubici ne hanno almeno 12.

I sistemi principali di scorrimento sono mostrati in figura 1.36.





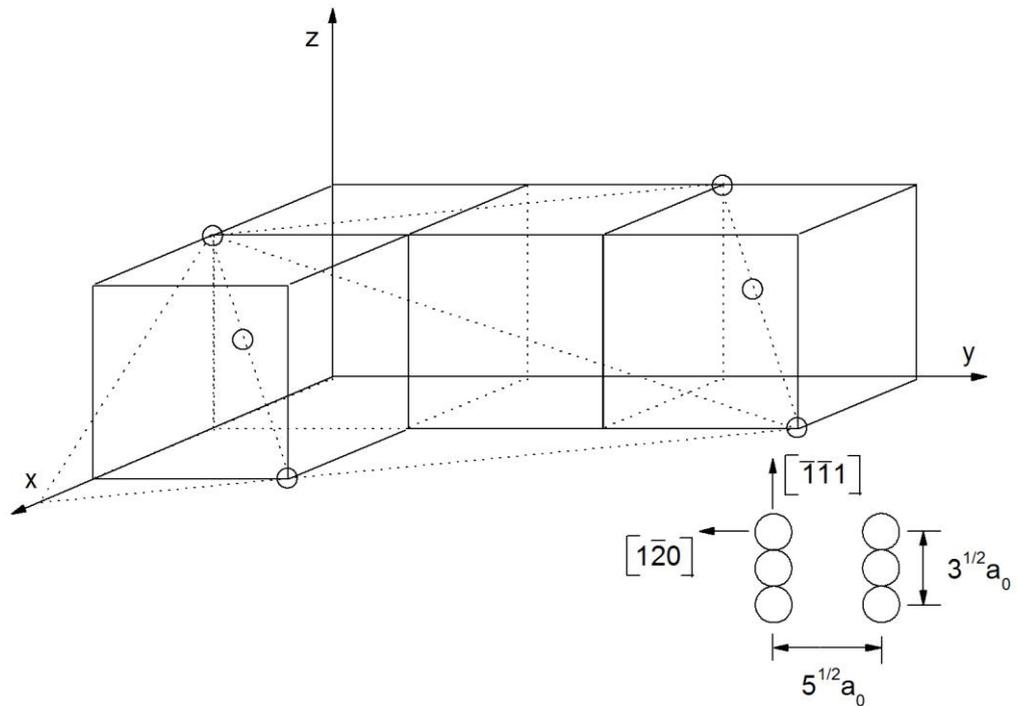


Figura 1.36: Sistemi di scorrimento, piano 111 per il reticolo cfc; piano 0001 per il reticolo ec; piani 101, 112 e 213 per il reticolo ccc.

Ne deriva che i metalli a struttura esagonale compatta sono molto più difficili da deformare rispetto a quelli cubici (in poche parole sono piuttosto fragili). A questo punto può essere interessante valutare come un campione monocristallino, sottoposto a trazione, tende a deformarsi. Per descrivere questo processo si fa riferimento allo schema rappresentato in Figura 1.37.

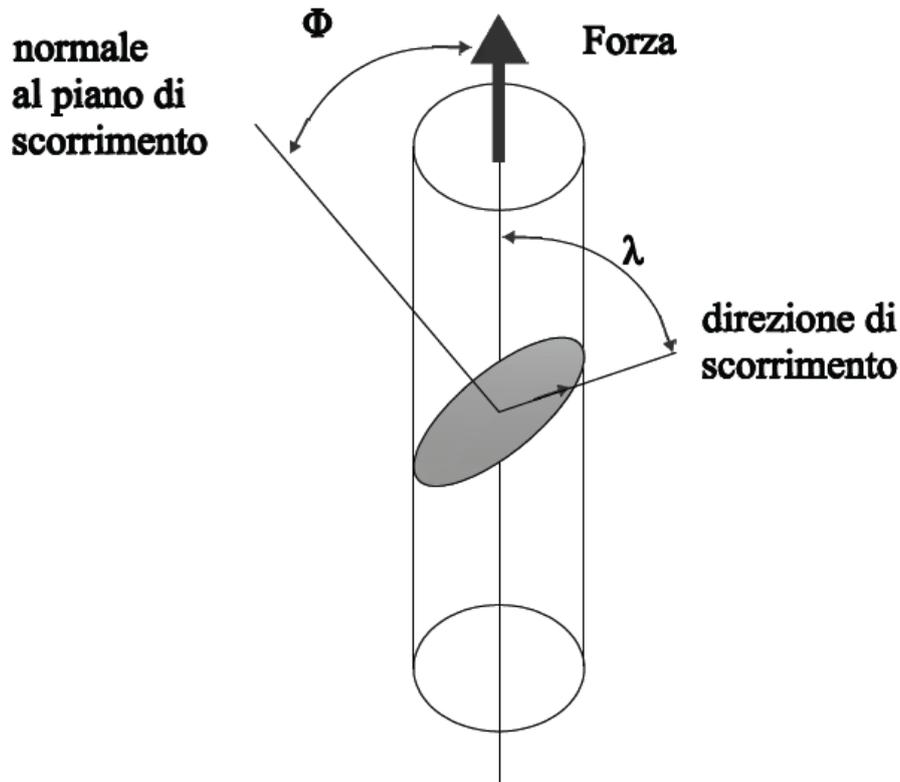


Figura 1.37: Relazioni geometriche fra l'asse della tensione di trazione, il piano di scorrimento e le direzioni di scorrimento.

Si è visto che la deformazione viene generata da sollecitazioni di taglio; si supponga quindi di voler calcolare la componente tangenziale (τ_r) della tensione di trazione su un piano la cui normale è inclinata dell'angolo ϕ rispetto all'asse della forza applicata. La forza assume, nella direzione indicata dal vettore, posta ad un angolo λ dalla normale, chiaramente, il valore $T = F \cos \lambda$, essendo $\tau_r = T / (\pi r b)$ (r e b sono i due assi dell'ellisse che costituisce la sezione considerata). Ora però, con la geometria considerata, si ha che $r = b \cos \phi$; combinando le due relazioni, e tenendo conto che $A = \pi r^2$, si ha che:

$$\tau_r = \left(\frac{F}{A} \right) (\cos \lambda \cos \phi) \quad (1.49)$$

Si può dimostrare che il valore massimo della τ_r si ottiene per $\phi = 45^\circ$; questo spiega perché il campione tenda a deformarsi come riportato in Figura 1.38.

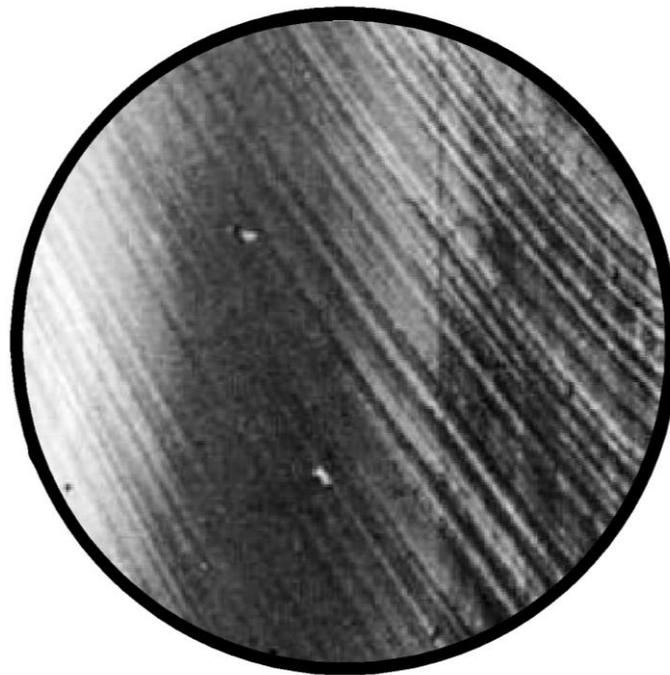
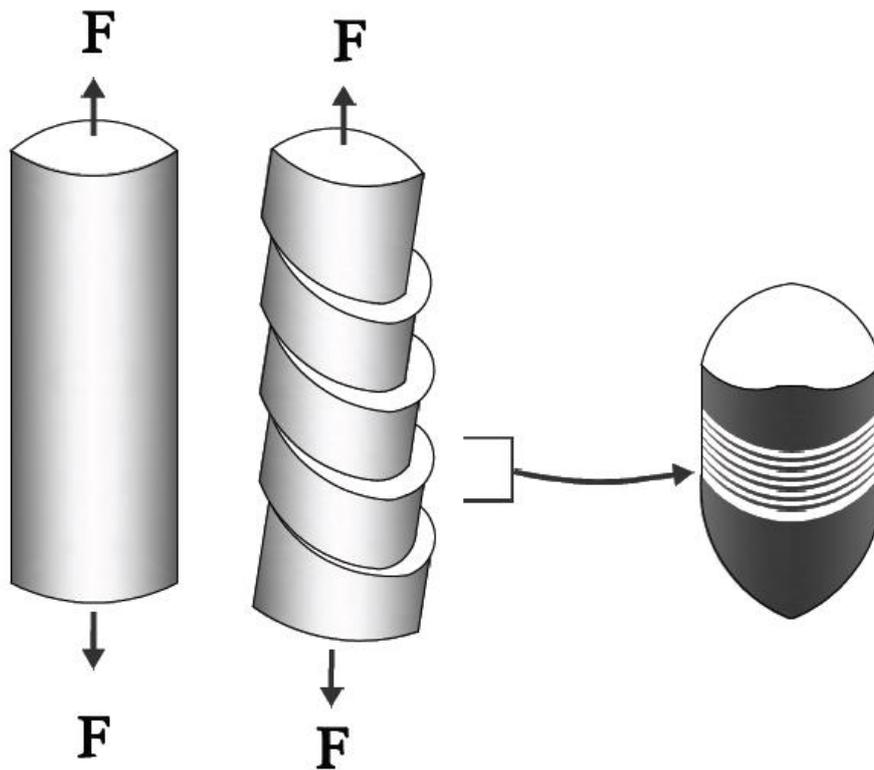


Figura 1.38: Variazione della geometria di un campione monocristallino; in a) sono rappresentati dei piani di scorrimento; in b) la variazione di geometria in un campione le cui teste siano libere di traslare; in c) esempio di deformazione in un monocristallo reale.

Nella figura 1.38 a) è rappresentato un campione monocristallino, su cui sono state riportate le tracce di diversi piani di scorrimento; se le estremità del campione sono libere di traslare, il

campione si deforma come riportato schematicamente in figura 1.38 b). Se lo scorrimento laterale delle teste viene impedito dagli afferraggi, la deformazione non è soltanto l'effetto di slittamenti dei piani cristallografici, ma anche di rotazioni (principalmente al centro) e persino di flessioni e rotazioni (accompagnate, per effetto delle flessioni, da distorsioni del reticolo) alle estremità. La precedente discussione mostra come la deformazione, in un monocristallo, sia dovuta sostanzialmente allo scorrimento di piani atomici l'uno sull'altro. Tale scorrimento, dal punto di vista teorico, dovrebbe avvenire quando:

$$\tau_m = \tau_R \quad (1.50)$$

Nonostante ciò, misure condotte su monocristalli hanno permesso di verificare come la sollecitazione necessaria a deformare un cristallo reale sia enormemente inferiore a quella teorica. La differenza tra i valori teorici e quelli sperimentali calcolata per diversi monocristalli è data in tabella.

Materiale	Valore teorico	Valore sperimentale	$\tau_{\max}/\tau_{\text{sper}}$
	G/2 π (Gpa)	MPa	
Argento	12.6	0.37	3*10 ⁴
Alluminio	11.3	0.78	1*10 ⁴
Rame	19.6	0.49	4*10 ⁴
Nichel	32	3.2-7.35	1*10 ⁴
Ferro	33.9	27.5	1*10 ³
Molibdeno	54.1	71.6	8*10 ²
Niobio	16.6	33.3	5*10 ²
Cadmio	9.9	0.57	2*10 ⁴
Magnesio (piani basali)	7	39.2	2*10 ⁴
Magnesio (piani prismatici)	7	39.2	2*10 ⁴
Titanio (piani prismatici)	16.9	13.7	1*10 ³
Berillio (piani basali)	49.3	1.37	4*10 ⁴
Berillio (piani prismatici)	49.3	52	1*10 ³

Questo comportamento è dovuto alla presenza di difetti.

