

DOMENICA MARABELLO

Basi di cristallografia

UNIVERSITÀ

Indice

- p. 7 Premessa
9 Introduzione
- 13 Capitolo 1
La simmetria nei cristalli
1.1. Elementi di simmetria, 13
1.2. Gruppi puntuali o classi cristalline, 20
1.3. L'unità asimmetrica, 21
1.4. La simmetria nello spazio, 23
- 31 Capitolo 2
Descrizione di un cristallo
2.1. Il reticolo cristallino, 31
2.2. I gruppi spaziali, 44
2.3. Il cristallo, 56
- 63 Capitolo 3
Piani cristallografici e indici di Miller
3.1. Famiglia di piani cristallografici, 63
3.2. Equazione di una famiglia di piani, 69

p.	73	Capitolo 4
		<i>Il reticolo reciproco</i>
		4.1. Il reticolo reciproco, 73
		4.2. Relazione tra reticolo reciproco e reticolo diretto, 78
	83	Bibliografia

Premessa

La cristallografia è la materia che serve per descrivere lo stato solido cristallino, ma aiuta anche a comprendere lo stato semicristallino o quasi-cristallino. Essa è una materia di interesse trasversale per tutti gli ambiti scientifici (chimica, fisica, biologia, geologia, ingegneria...), ma spesso risulta molto ostica agli studenti, poiché necessita di trattazioni matematiche molto complesse. Inoltre per uno studente che intraprenda per la prima volta questa materia spesso è difficile visualizzare in tre dimensioni i concetti fondamentali.

Questo testo si rivolge a studenti “alle prime armi”, che vogliono comprendere in modo molto semplice e intuitivo i concetti fondamentali della cristallografia, per poterli applicare nei vari ambiti scientifici. Questo testo serve proprio per “rompere il ghiaccio” nei confronti di una materia che viene spesso etichettata come “difficile” dagli studenti. Si rimanda a testi più specialistici, già presenti in commercio, per approfondire e affrontare in modo scientificamente più rigoroso questa materia.

Per comprendere appieno tutti i concetti presentati, si consiglia di leggere più volte il testo ricominciando dall’ini-

zio, perché spesso alcuni argomenti devono essere accennati prima che possano essere spiegati appieno successivamente.

La notazione cristallografica utilizzata in questo testo è quella che si trova nelle pubblicazioni scientifiche internazionali. Inoltre in questo testo vengono indicati i vettori in grassetto e i moduli degli stessi senza grassetto.

La naturale applicazione della cristallografia riguarda in particolare le tecniche di diffrazione dei raggi X e pertanto questo testo è in particolare rivolto agli studenti che vogliono poi proseguire gli studi in questo ambito, per fornire loro gli strumenti necessari per risolvere una struttura cristallina o interpretare correttamente un diffrattogramma da polveri cristalline.

Con la speranza che questo testo possa essere utile a semplificare la comprensione della cristallografia, auguro al lettore... buono studio!

Introduzione

In generale si considera che i materiali solidi sono suddivisi in due principali categorie: quelli amorfi e quelli cristallini. Nella materia allo stato amorfo gli atomi sono disposti in modo più o meno disordinato. Sono completamente amorfi i gas, buona parte dei liquidi. Alcuni solidi sono amorfi come ad esempio i vetri, ma la maggior parte dei solidi sono cristallini o semicristallini. Nella materia allo stato cristallino la disposizione degli atomi (*struttura*) presenta ordine a corto e a lungo raggio, ovvero esiste un'unità di base che si ripete ordinatamente nello spazio costruendo una *struttura cristallina*. Per rispettare l'ordine gli atomi devono mantenere una determinata posizione fissa nello spazio e quindi è ovvio che lo stato cristallino sia associato esclusivamente ai materiali allo stato solido.

Allo stato solido gli atomi sono molto vicini tra loro e dunque la forza di repulsione fra di essi è sicuramente significativa nel determinare la disposizione degli stessi: solo una disposizione ordinata permette di bilanciare al meglio le forze attrattive e repulsive in modo tale che siano le prime a prevalere; da un punto di vista energetico quindi lo stato cristallino è più vantaggioso, anche se l'entropia del sistema

è sfavorevole. Per questo motivo la maggior parte dei materiali allo stato solido sono cristallini o spesso lo diventano nel momento in cui si permette agli atomi di risistemarsi (ad esempio aumentando la temperatura e quindi la loro mobilità).

Prima di approfondire nel dettaglio il significato della definizione di stato cristallino è bene puntualizzare che questa classificazione non è rigida, cioè non è detto che i materiali possano essere definiti nettamente amorfi o cristallini, ma vi sono molti materiali che presentano caratteristiche intermedie tra lo stato amorfo e quello cristallino; si pensi ad esempio ai cristalli liquidi, composti molecolari le cui molecole sono disposte in modo periodico ordinato (caratteristica dello stato cristallino) e sono tra loro debolmente legate, potendo così facilmente cambiare di posizione (caratteristica dei liquidi). Oppure spesso i materiali non presentano ordine a lungo raggio ma solo a corto raggio, come ad esempio alcuni materiali plastici in cui le molecole molto allungate si orientano localmente nella direzione di stiramento della plastica. Quindi in realtà tra lo stato totalmente amorfo e quello totalmente cristallino esistono una varietà di materiali poco amorfi o poco cristallini, detti comunemente materiali *semi-cristallini*. A questi si aggiungono altri materiali semi-ordinati come ad esempio i *quasi-cristalli*. Per comprendere però i materiali semi-cristallini o semi-ordinati è indispensabile prima comprendere lo stato cristallino e le regole di simmetria che lo caratterizzano.

Nell'ambito scientifico la parola *cristallo* è sinonimo di *materiale omogeneo e ordinato* e le sue proprietà chimiche e fisiche sono determinate dalle forze di impaccamento

e dalla simmetria cristallina. La risposta di qualsiasi tecnica di analisi chimica e fisica che venga applicata a un materiale cristallino è irrimediabilmente influenzata dalla simmetria cristallina; pertanto per comprenderne il significato non è possibile prescindere da una conoscenza più approfondita delle leggi che regolano la simmetria nello stato cristallino, trattate da quella materia che si chiama *cristallografia*.

L'organismo internazionale che si occupa della simmetria cristallina e delle tecniche di analisi dei materiali cristallini è l'International Union of Crystallography (IUCr, www.iucr.org), che si è preoccupato di mettere a punto una simbologia unificata per tutti i cristallografi del mondo, in modo tale che non possano esserci incomprensioni tra loro. Tale simbologia è stata riportata nelle International Tables for Crystallography, distribuite dalla stessa IUCr. La comprensione di tale simbologia è indispensabile per chiunque voglia avvicinarsi allo studio del comportamento dei materiali solidi, cristallini o semicristallini.

In questa prima parte della trattazione cerchiamo dunque di rispondere a una domanda molto semplice: che cos'è un cristallo e come si descrive? Si consideri ad esempio l'insieme bidimensionale di oggetti costituiti da tre pallini di colore diverso, sistemati in modo ordinato nello spazio, riportato in figura 1. Sicuramente nei primi corsi di chimica generale lo studente avrà sentito parlare di *reticolo cristallino*, di *cella elementare* e di *assi di cella*, ovvero di concetti astratti che servono a descrivere l'ordine di un cristallo. Questi tre concetti però non sono sufficienti a descrivere lo stato cristallino, come sarà possibile constatare nei prossimi paragrafi.