

Sistemi cristallini - Testi degli esercizi

Fisica della Materia Condensata

Dipartimento di Matematica e Fisica
Università degli Studi Roma Tre

A.A. 2016/2017

Sistemi cristallini

Esercizio 1

Calcolare la densità atomica definita come il rapporto tra il numero di atomi e il volume unitario per (1) il litio sapendo che la distanza tra i centri dei primi vicini è $R_0 = 3.03 \text{ \AA}$ e che cristallizza nel reticolo *bcc* (corpo centrato) e per (2) l'oro sapendo che $R_0 = 2.88 \text{ \AA}$ e che cristallizza nel reticolo *fcc* (facce centrate).

Esercizio 2

Determinare la spaziatura interatomica di un cristallo di cloruro di sodio (NaCl), sapendo che la densità di NaCl è $2.16 \cdot 10^3 \text{ Kg/m}^3$ ed i pesi atomici di Na e Cl sono rispettivamente 23 e 35.46 .

Esercizio 3

La figura 1 mostra un reticolo esagonale semplice ($|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| \neq |\mathbf{c}|$, $\angle(\mathbf{ab}) = 120^\circ$) e la cella primitiva definita dai vettori \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} :

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= a\hat{\mathbf{x}} \\ \mathbf{b} &= -\frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{\mathbf{y}} \\ \mathbf{c} &= c\hat{\mathbf{z}}\end{aligned}$$

con $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$ e $\hat{\mathbf{z}}$ vettori unitari perpendicolari tra loro.

1. Determinare i vettori di traslazione primitivi del reticolo reciproco \mathbf{A} , \mathbf{B} e \mathbf{C} .

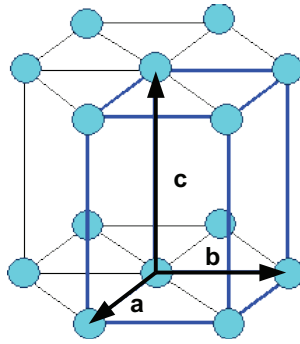


Figura 1: Reticolo esagonale semplice (cella convenzionale). In blu è evidenziata la cella primitiva.

2. Determinare gli angoli compresi tra i vettori del reticolo diretto e quelli del reticolo reciproco.
3. Disegnare la cella primitiva del reticolo reciproco nel piano $\hat{x}\hat{y}$ e costruire la prima zona di Brillouin.

Si consiglia di disegnare la cella del reticolo reciproco facendo uso soprattutto della voce **2)** che permette di definire la direzione dei vettori **A**, **B** e **C** rispetto a quelli del reticolo diretto. Se si usano attentamente i risultati della voce **2)** si vede che non c'è bisogno di goniometro. Si consiglia di prendere come modulo dei vettori **A** e **B** una quantità tre volte più grande di quella del modulo di **a** e **b**.

Esercizio 4

Si consideri un reticolo *bcc* ed il piano cristallino (110) mostrato in figura 2. Si assuma che gli atomi siano rappresentabili come sfere dure di massimo raggio possibile affinché si tocchino ma non si compenetrino. Se la costante reticolare vale $a = 5 \text{ \AA}$, calcolare la densità superficiale di atomi sul piano (110).

Esercizio 5

In figura 3 è mostrata la cella unitaria convenzionale del diamante. Determina (a) il numero di atomi ai vertici, (b) il numero di atomi al centro di una faccia, (c) il numero di atomi interni alla cella unitaria. Se la costante reticolare del silicio è 5.43 \AA , calcola la densità degli atomi di silicio.

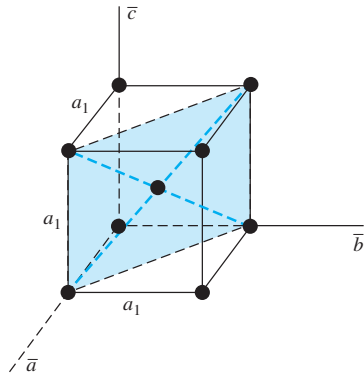


Figura 2: Piano cristallino (110).

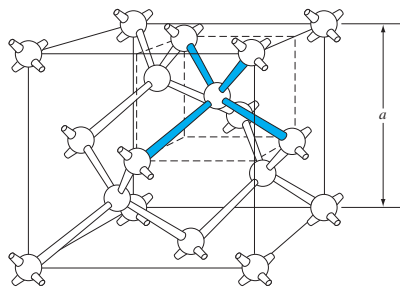


Figura 3: Cella unitaria convenzionale del diamante.

Esercizio 6

Il GaAs ha struttura zincoblenda con costante reticolare uguale a 5.65 \AA (fig. 4). Scrivere le coordinate degli atomi di Ga e As all'interno della cella unitaria ponendo il cubo nella porzione di piano a coordinate positive con un vertice sull'origine degli assi. Determinare poi a) il numero di atomi di Ga e di As per cm^3 ; b) la distanza minima tra un atomo di Ga e uno di As; c) la distanza minima tra due atomi di As e tra due atomi di Ga.

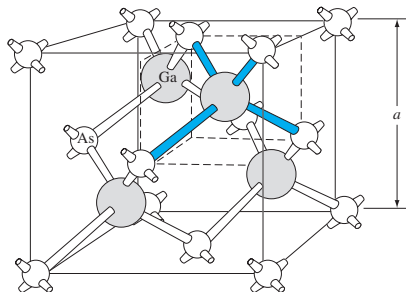


Figura 4: Cella unitaria convenzionale della struttura zincoblenda.

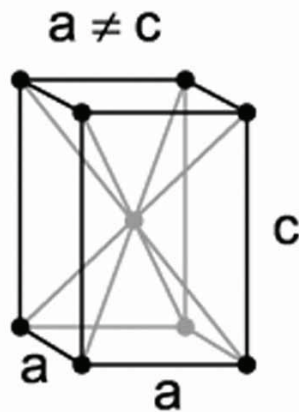


Figura 5: Cella unitaria del reticolo *bct*.

Esercizio 7

Una certa sostanza ha due strutture cristalline stabili separate da una transizione di fase cristallina. La fase α ha la struttura del diamante con una cella unitaria cubica il cui lato misura 6.49 \AA . La fase β presenta una struttura tetragonale a corpo centrato (*bct*) mostrata in figura 5 e parametri di cella $a = 5.83 \text{ \AA}$ e $c = 3.18 \text{ \AA}$. Si calcoli la densità (g/cm^3) di ciascuna delle due fasi. Il peso atomico della sostanza è 118.7 .

Esercizio 8

Mostrare che la porzione massima di volume disponibile che può essere riempita da sfere rigide disposte sui nodi dei reticoli indicati è nel caso *sc* del 52%, nel caso *bcc* del 68% e nel caso *fcc* del 74%.

Esercizio 9

Determinare il reticolo reciproco del reticolo cubico a facce centrate *fcc*.

Esercizio 10

Assumendo che tutti gli atomi siano sfere dure la cui superficie sia in contatto con la superficie dell'atomo primo vicino, determinare il *packing factor* della cella unitaria del diamante.