

Reticoli e diffrazione - Testi degli esercizi

Fisica della Materia Condensata

Dipartimento di Matematica e Fisica

Università degli Studi Roma Tre

Reticoli e Diffrazione

Esercizio 1	2
Esercizio 2	2
Esercizio 3	2
Esercizio 4	2
Esercizio 5	2
Esercizio 6	3
Esercizio 7	3
Esercizio 8	3
Esercizio 9	3
Esercizio 10	3
Esercizio 11	3
Esercizio 12	4
Esercizio 13	4
Esercizio 14	4
Esercizio 15	4
Esercizio 16	5
Esercizio 17 - Es. 1 Esonero I AA 2014/2015	5
Esercizio 18 - Es. 1 Appello I AA 2014/2015	5
Esercizio 19 - Es. 1 Appello II AA 2014/2015	6
Esercizio 20 - Es. 1 Esonero I AA 2015/2016	6
Esercizio 21 - Es. 1 Appello I AA 2015/2016	7
Esercizio 22 - Es. 1 Appello II AA 2015/2016	7

Esercizio 1

Calcolare il fattore di struttura cristallino $F(\vec{G})$ del reticolo cubico semplice e studiare le riflessioni permesse.

Esercizio 2

Calcolare il fattore di struttura cristallino $F(\vec{G})$ del reticolo cubico a facce centrate (*fcc*) e studiare le riflessioni permesse.

Esercizio 3

Calcolare il fattore di struttura cristallino $F(\vec{G})$ per il reticolo cubico a corpo centrato (*bcc*) e studiare le riflessioni permesse. Per scrivere il generico $\vec{G}$ si usi la base vettoriale che definisce la cella primitiva.

Esercizio 4

Si considerino i reticoli cubico semplice (*sc*), *fcc* e *bcc*.

1. Si determinino i quattro vettori di reticolo reciproco più corti. Esprimere le coordinate dei vettori trovati rispetto alla base costituita dai vettori primitivi del corrispondente reticolo.
2. Si individuino le famiglie di piani del reticolo diretto associate ai vettori trovati nel punto precedente.

Esercizio 5

Siano due campioni di cui uno con reticolo cubico a facce centrate (*fcc*) e l'altro con reticolo cubico a corpo centrato (*bcc*). Le posizioni approssimate dei primi quattro anelli di diffrazione per i due campioni A e B sono scritte nella tabella:

A	B
42.2°	28.8°
49.2°	41.0°
72.0°	50.8°
87.3°	59.6°

1. Determinare quale campione ha reticolo *fcc* e quale *bcc*.
2. Data una radiazione X con $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$, trovare il lato della cella cubica dei due campioni.

Esercizio 6

Determinare i possibili angoli di diffrazione per raggi X di 10 KeV dal piano (111) di un reticolo cubico semplice con costante reticolare $a = 5.3 \text{ \AA}$.

Esercizio 7

Calcolare il fattore di struttura cristallino $F(\vec{G})$ del reticolo del diamante e studiare le riflessioni permesse.

Esercizio 8

Due cristalli sono studiati col metodo delle polveri. Un campione cristallizza nel diamante e l'altro nella zincoblenda. Il lato della cella cubica di entrambi i reticoli è $a = 4.5 \text{ \AA}$. Calcolare gli angoli ai quali vengono osservati i primi quattro anelli di diffrazione sapendo che $\lambda = 2 \text{ \AA}$.

Esercizio 9

Effettuando un esperimento di diffrazione su un cristallo con raggi X di energia 20 KeV, si osserva il primo massimo di interferenza costruttiva in corrispondenza di un angolo di 70° . Qual è il valore della distanza tra i piani del reticolo cristallino?

Esercizio 10

Si scriva il fattore di struttura cristallino $F(\vec{G})$ per il reticolo del grafene.

Esercizio 11

Un cristallo ha reticolo *fcc* (lato della cella cubica a) con base biatomica $d_1 = (0, 0, 0)$ e $d_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 0)$ e viene studiato col metodo delle polveri. Se il fattore di forma

atomico del secondo atomo di base è pari al doppio di quello del primo, quanto vale il rapporto fra le intensità del primo ordine con il secondo?

Esercizio 12

Il ferro viene studiato col metodo delle polveri. I primi due angoli ai quali si osserva un massimo di diffrazione valgono 28.53° e 40.78° .

- Determinare se il ferro cristallizza *bcc* o *fcc* (sia a il lato della cella cubica di entrambi i reticoli).
- Determinare la costante reticolare a sapendo che $\lambda = 1 \text{ \AA}$.
- Determinare gli angoli ai quali appaiono i due successivi massimi di diffrazione.

Esercizio 13

Col metodo delle polveri ($\lambda=1.6 \text{ \AA}$) viene studiato un cristallo biatomico AB. I primi due angoli ai quali si osserva un massimo di diffrazione valgono 40.35° e 47.15° .

- Dire se la struttura cristallina è cubica semplice con base atomica $d_A = (0, 0, 0)$ e $d_B = \frac{a}{2}(1, 1, 1)$, oppure *fcc* con base atomica $d_A = (0, 0, 0)$ e $d_B = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$.
- Se il rapporto tra i fattori di forma atomici dei due atomi di base è $f_B/f_A = 1.8$, quanto vale il rapporto tra le intensità dei primi due massimi osservati I_2/I_1 ?

Esercizio 14

Si consideri il cloruro di sodio (NaCl). La costante reticolare vale $a = 5.64 \text{ \AA}$. Calcolare gli angoli e le intensità dei primi tre anelli ottenuti con il metodo delle polveri sapendo che $\lambda = 2 \text{ \AA}$.

Esercizio 15

Col metodo delle polveri ($\lambda = 2 \text{ \AA}$) viene studiato un cristallo AB_2 che ha struttura *fcc* con parametro reticolare $a = 4.5 \text{ \AA}$. I tre atomi sono individuati dai vettori $d_A = (0, 0, 0)$, $d_{B_1} = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$ e $d_{B_2} = -\frac{a}{4}(1, 1, 1)$. Determinare gli angoli ai quali si osservano i primi tre anelli di diffrazione e la loro intensità relativa.

Esercizio 16

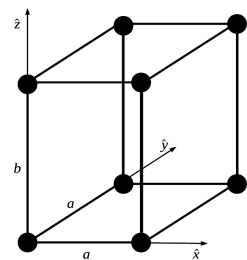
Un cristallo monoatomico con reticolo *sc* di costante reticolare $a = 2.88 \text{ \AA}$, viene studiato col metodo di Laue. Sia $\hat{k} = (1, 0, 0)$ il versore del vettore d'onda dei raggi X con cui si sonda il sistema. Se λ può variare nell'intervallo $(1.4 - 4) \text{ \AA}$, trovare gli indici l, m, n del più corto vettore di reticolo reciproco $\vec{G}_{lmn}$ tra quelli che soddisfano la condizione di Laue.

Esercizio 17 - Es. 1 Esonero I AA 2014/2015

Un cristallo ha una struttura descritta dal reticolo tetragonale con base monoatomica mostrato in figura.

Sia a il lato del quadrato di base e b l'altezza del parallelepipedo.

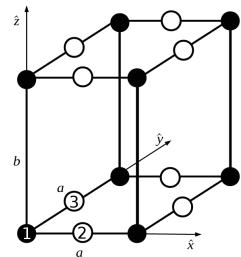
I parametri reticolari valgono $a=1 \text{ \AA}$ e $b = 2a$.



1. Determinare i vettori primitivi di traslazione del reticolo diretto e reciproco.
2. Se il cristallo viene studiato con il metodo delle polveri e viene utilizzata una lunghezza d'onda $\lambda=1.1 \text{ \AA}$, determinare gli angoli ai quali si osservano i primi due anelli di diffrazione.

3. Si associa ora al reticolo una base di tre atomi. Questi tre atomi sono individuati dai vettori: $\vec{d}_1 = 0$, $\vec{d}_2 = \frac{a}{2}\hat{x}$ e $\vec{d}_3 = \frac{a}{2}\hat{y}$. Gli atomi 2 e 3 sono uguali tra loro e diversi dall'atomo 1. L'atomo 1 ha fattore di forma pari al doppio di quello dell'atomo 2.

Calcolare il rapporto fra le intensità del secondo picco di diffrazione sul primo.



Esercizio 18 - Es. 1 Appello I AA 2014/2015

Si abbiano due campioni A e B. Sappiamo che uno dei due ha un reticolo quadrato con parametro reticolare a , l'altro ha un reticolo rettangolare con parametri reticolari b e c ($b < c$) e la sua frazione di impacchettamento è pari al 51%. Entrambi i reticoli hanno una base monoatomica. Le posizioni approssimate dei primi tre anelli di diffrazione per i due campioni sono riportate nella seguente tabella:

A	B
24.2°	30.0°
34.5°	46.9°
49.57°	56.7°

1. Calcolare esplicitamente i vettori di reticolo reciproco che corrispondono ai primi tre picchi diffrattivi per entrambi i reticoli e identificare il tipo di reticolo di A e di B.
2. Data una radiazione X, con $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$, trovare il valore delle costanti reticolari a, b e c .

Esercizio 19 - Es. 1 Appello II AA 2014/2015

La fluorite (CaF_2) ha una struttura fcc con una base atomica costituita da un atomo di calcio bivalente nell'origine e due atomi di fluoro a $\vec{d}_1 = \frac{a}{4}(111)$ e $\vec{d}_2 = \frac{3a}{4}(111)$, dove a è il lato del cubo. La riflessione al primo ordine della famiglia $\{111\}$ con raggi X di lunghezza d'onda $\lambda = 0.1542 \text{ nm}$ ha luogo ad un angolo $\theta = 28.36^\circ$. Determinare:

1. il fattore di struttura del cristallo studiandone le riflessioni;
2. il parametro reticolare a della cella unitaria cubica;
3. la densità del cristallo, sapendo che la massa di una molecola di CaF_2 è $m = 13 \cdot 10^{-23} \text{ g}$.

Si ricorda che le coordinate dei vettori e la famiglia di piani sono fornite nel sistema cubico, ovvero nella terna cartesiana xyz .

Esercizio 20 - Es. 1 Esonero I AA 2015/2016

Un cristallo AB_2 ha una struttura cubica semplice con una base atomica costituita da un atomo di tipo A nell'origine e due atomi di tipo B posti in $\vec{d}_1 = \frac{a}{4}(111)$ e in $\vec{d}_2 = -\frac{a}{4}(111)$, dove a è il lato del cubo. La riflessione al primo ordine con raggi X di lunghezza d'onda $\lambda = 0.15 \text{ nm}$ ha luogo ad un angolo $\theta^{(1)} = 30.0^\circ$. Sia il fattore di forma dell'atomo A pari al doppio di quello dell'atomo B ($f_A = 2f_B$).

1. Studiare il fattore di struttura;
2. Determinare il parametro reticolare a ;

3. Trovare l'angolo $\theta^{(2)}$ al quale si osserva la seconda diffrazione specificando a quale vettore del reticolo reciproco è associata.
4. Determinare la densità di massa del cristallo, sapendo che la massa di AB_2 è 100 uma .

Esercizio 21 - Es. 1 Appello I AA 2015/2016

Si abbia un campione con reticolo rettangolare di parametri reticolari b e c ($b < c$) e base monoatomica. La frazione di impacchettamento del reticolo è pari al 51%. È noto inoltre che per una radiazione X di lunghezza d'onda $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$ la posizione approssimata del primo anello di diffrazione del campione è $\Theta^{(1)} = 30.0^\circ$.

1. Calcolare i moduli dei tre vettori $\vec{G}_1, \vec{G}_2, \vec{G}_3$ di reticolo reciproco più corti.
2. Trovare la posizione del secondo e del terzo anello di diffrazione nell'esperimento con $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$.
3. Trovare il valore delle costanti reticolari b e c .

Esercizio 22 - Es. 1 Appello II AA 2015/2016

Un cristallo AB ha reticolo cubico semplice con costante reticolare $a = 1.8 \text{ \AA}$. La base del reticolo è biatomica, l'atomo A è indicato dal vettore $\vec{d}_A = 0$ e l'atomo B dal vettore $\vec{d}_B = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$.

1. Scrivere il fattore di struttura del cristallo.
2. Trovare gli angoli ai quali si osservano i primi 4 picchi di diffrazione se la lunghezza d'onda della radiazione incidente è $\lambda = 1.2 \text{ \AA}$.
3. Calcolare l'intensità dei primi 4 picchi di diffrazione.