

Sistemi cristallini – Esercizi con soluzioni

Fisica della Materia Condensata

Dipartimento di Matematica e Fisica

Università degli Studi Roma Tre

Sistemi cristallini

Esercizio 1	2
Esercizio 2	3
Esercizio 3	4
Esercizio 4	7
Esercizio 5	9
Esercizio 6	10
Esercizio 7	12
Esercizio 8	14
Esercizio 9	15
Esercizio 10	16

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).

Soluzione

Definiamo la densità atomica: $\rho = \frac{N}{V}$

1) Nel sistema *bcc* (litio) la distanza tra due primi vicini è pari a metà diagonale del cubo. Quest'ultima, indicando con a il lato del cubo, vale $\sqrt{3}a$. Per cui:

$$a = \frac{2}{\sqrt{3}}R_0 \quad (1)$$

Contiamo il numero di atomi di litio nella cella cubica:

- 8 atomi sono su un vertice, ognuno di esso è condiviso da 8 celle
- 1 atomo è al centro della cella

Quindi il numero totale di atomi di litio nella cella è: $N_{Li} = 8\frac{1}{8} + 1 = 2$
da cui la densità atomica del litio risulta:

$$\rho_{Li} = \frac{2}{\left(\frac{2}{\sqrt{3}}R_0\right)^3} = 4.67 \cdot 10^{22} \text{ Atomi/cm}^3 \quad (2)$$

2) Nel sistema *fcc* (oro) la distanza tra due primi vicini è pari a metà diagonale della faccia del cubo. Quest'ultima, indicando con a il lato del cubo, vale $\sqrt{2}a$. Per cui:

$$a = \sqrt{2}R_0 \quad (3)$$

Contiamo il numero di atomi di oro nella cella cubica:

- 8 atomi sono su un vertice, ognuno di esso è condiviso da 8 celle
- 6 atomi sono su una faccia, ognuno di esso è condiviso da 2 celle

Quindi il numero totale di atomi di oro nella cella è: $N_{Au} = 8\frac{1}{8} + 6\frac{1}{2} = 4$
da cui la densità atomica del litio risulta:

$$\rho_{Au} = \frac{4}{(\sqrt{2}R_0)^3} = 5.92 \cdot 10^{22} \text{ Atomi/cm}^3 \quad (4)$$

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 .

Soluzione

La struttura del cloruro di sodio si ottiene associando ad un reticolo *fcc* (di passo reticolare a) un atomo di Cl in $\vec{d}_1 = (000)$ e uno di Na in $\vec{d}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$. Il reticolo si può vedere sul libro. Nell'esercizio si chiede la spaziatura interatomica d che è quindi pari a metà costante reticolare: $d = \frac{a}{2}$.

Se indichiamo con V ed M rispettivamente il volume e la massa della cella cubica, la sua densità si scrive come: $\rho = \frac{M}{V}$. In questo caso si ha: $V = (2d)^3$ e $M = n_{Na}p_{Na} + n_{Cl}p_{Cl}$, dove n indica il numero di moli e dove ci ricordiamo che il peso atomico p indica il peso in *grammi* di una mole. Per conoscere il numero di moli dobbiamo calcolare il numero di atomi di Na e Cl nella cella: $n = \frac{N}{N_A}$ dove $N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$ è il numero di Avogadro.

Per il Sodio si ha che:

- 12 atomi sono su uno spigolo del cubo, ognuno di esso è condiviso da 4 celle
- 1 atomo è al centro del cubo

Il numero di atomi di Sodio è pertanto: $N_{Na} = 12 \cdot \frac{1}{4} + 1 = 4$

Per il Cloro si ha che:

- 8 atomi sono su un vertice, ognuno di esso è condiviso da 8 celle
- 6 atomi sono una faccia del cubo, ognuno di esse è condiviso da 4 celle cubiche

Il numero di atomi di Cloro è pertanto: $N_{Cl} = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$

Il numero di moli è quindi lo stesso per i due ioni, per cui la massa della cella è data da:

$$M = n_{Na}p_{Na} + n_{Cl}p_{Cl} = \frac{4}{N_A}(p_{Na} + p_{Cl})$$

A questo punto possiamo calcolare la densità:

$$\rho = \frac{\frac{4}{N_A}(p_{Na} + p_{Cl})}{8d^3} = \frac{(p_{Na} + p_{Cl})}{2N_Ad^3} \quad (5)$$

da cui:

$$d = \left[\frac{(p_{Na} + p_{Cl})}{2\rho N_A} \right]^{\frac{1}{3}} = \left[\frac{58.46 \cdot 10^{-3} \text{ Kg}}{2 \cdot 2.16 \cdot 10^3 \text{ Kg/m}^3 \cdot 6.022 \cdot 10^{23}} \right]^{\frac{1}{3}} = 2.82 \text{ \AA} \quad (6)$$

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 $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$:

$$\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{x}}$$

$$\mathbf{b} = -\frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{\mathbf{y}}$$

$$\mathbf{c} = c\hat{\mathbf{z}}$$

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 $\mathbf{C}$.
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 $\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{y}}$ 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 $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ e $\mathbf{C}$ 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 $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ una quantità tre volte più grande di quella del modulo di $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$.

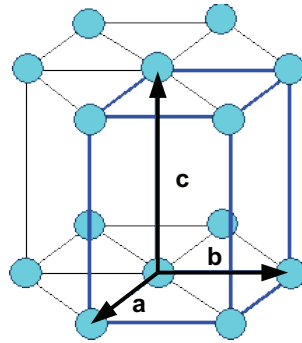


Figura 1: Reticolo esagonale semplice (cella convenzionale). In blu è evidenziata la cella primitiva.

Soluzione

1) Calcoliamo i prodotti:

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \frac{ac}{2} (\sqrt{3}, 1, 0) \quad \mathbf{c} \times \mathbf{a} = ac (0, 1, 0) \quad (7)$$

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \frac{a^2}{2} (0, 0, \sqrt{3}) \quad V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c \quad (8)$$

Da cui:

$$\mathbf{A} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(\sqrt{3}, 1, 0) \quad \mathbf{B} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}(0, 1, 0) \quad \mathbf{C} = \frac{2\pi}{c}(0, 0, 1) \quad (9)$$

2) Indichiamo con α l'angolo tra il vettore $\mathbf{A}$ e $\mathbf{a}$. Possiamo scrivere:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{a} = |\mathbf{A}||\mathbf{a}|\cos\alpha \quad (10)$$

$$2\pi = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}2\right)(a)\cos\alpha \quad (11)$$

$$\alpha = \arccos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = 30^\circ \quad (12)$$

Poichè $\mathbf{A} \cdot \mathbf{b} = 0$ e $\mathbf{A} \cdot \mathbf{c} = 0$, risulta $\mathbf{A} \perp \mathbf{b}$ e $\mathbf{A} \perp \mathbf{c}$.

Quindi il vettore $\mathbf{A}$ forma un angolo di 30° con il vettore $\mathbf{a}$ e un angolo di 90° con gli altri due vettori della base diretta $\mathbf{b}$ e $\mathbf{c}$.

Procediamo nello stesso modo per gli altri due vettori $\mathbf{B}$ e $\mathbf{C}$:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{B}||\mathbf{b}|\cos\beta \quad (13)$$

$$2\pi = \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)\left(\frac{a}{2}2\right)\cos\beta \quad (14)$$

$$\beta = \arccos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = 30^\circ \quad (15)$$

Poichè $\mathbf{B} \cdot \mathbf{a} = 0$ e $\mathbf{B} \cdot \mathbf{c} = 0$, risulta $\mathbf{B} \perp \mathbf{a}$ e $\mathbf{B} \perp \mathbf{c}$.

$$\mathbf{C} \cdot \mathbf{c} = |\mathbf{C}||\mathbf{c}|\cos\gamma \quad (16)$$

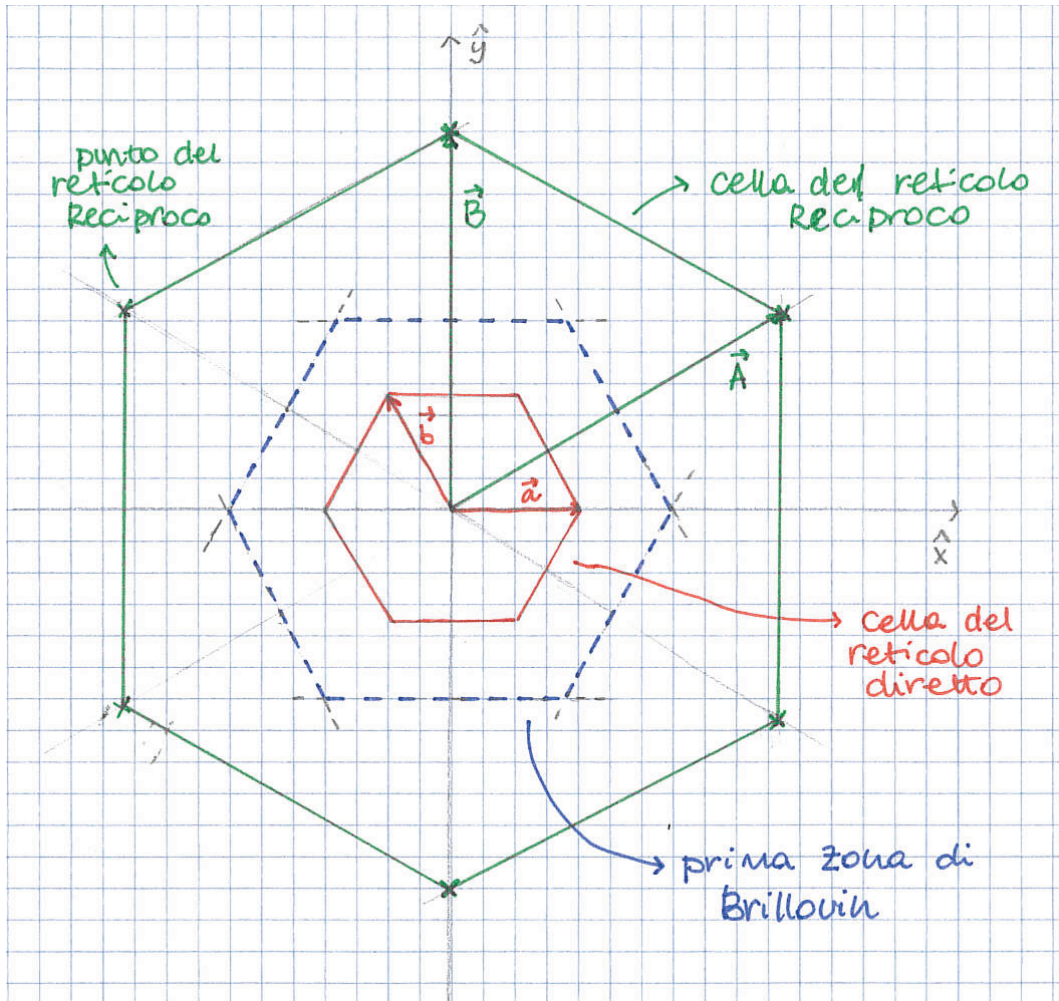
$$2\pi = \left(\frac{2\pi}{c}\right)(c)\cos\gamma \quad (17)$$

$$\gamma = \arccos(1) = 0^\circ \quad (18)$$

$\mathbf{C}$ e $\mathbf{c}$ sono paralleli: $\mathbf{C} \parallel \mathbf{c}$.

Poichè $\mathbf{C} \cdot \mathbf{a} = 0$ e $\mathbf{C} \cdot \mathbf{b} = 0$, risulta $\mathbf{C} \perp \mathbf{a}$ e $\mathbf{C} \perp \mathbf{b}$.

3) La cella convenzionale del reticolo diretto e reciproco (le celle esagonali) si disegnano facilmente con i vettori che abbiamo trovato. La prima zona di Brillouin è la cella di Wigner-Seitz del reticolo reciproco. Quindi si prende un qualsiasi punto del reticolo reciproco e si tracciano le linee congiungenti i primi vicini del punto considerato. Si tracciano poi le rette perpendicolari passanti per il punto medio di ogni segmento che congiunge il punto centrale con i primi vicini (rette tratteggiate). Come si vede dal disegno, per il reticolo in esame queste rette definiscono una regione di spazio chiusa, questa è la prima zona di Brillouin, che risulta esagonale.



Esercizio 4

Si consideri una struttura *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).

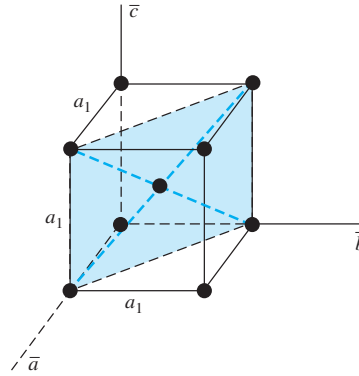


Figura 2: Piano cristallino (110).

Soluzione

Cinque sfere sono tagliate a metà dal piano (110). La sezione è mostrata in figura 3. Gli

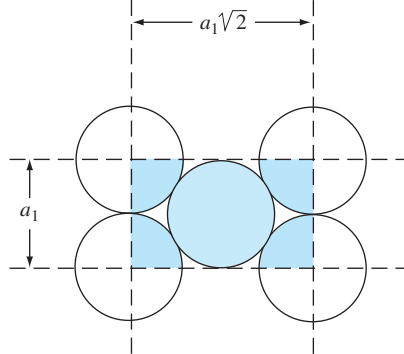


Figura 3: Sezione del piano cristallino (110) per un *bcc*.

atomi (cerchi) sui vertici sono condivisi da quattro piani cristallini equivalenti, per cui ognuno di essi contribuisce con un $1/4$ della loro area al piano. L'atomo centrale invece appartiene solamente al piano cristallino considerato, per cui contribuirà con tutta la sua area. Pertanto:

- Il numero di atomi sul piano è $\frac{1}{4} \cdot 4 + 1 = 2$
- La densità superficiale σ degli atomi è data da:

$$\sigma = \frac{\# \text{ di atomi sul piano}}{\text{area del piano}} \quad (19)$$

Quindi:

$$\sigma = \frac{2}{(a)(\sqrt{2}a)} = \frac{2}{(5 \cdot 10^{-8})^2 \sqrt{2}} = 5.66 \cdot 10^{14} \text{ atomi/cm}^2 \quad (20)$$

La densità superficiale di atomi è funzione del particolare piano cristallino nel reticolo e in generale varia da un piano cristallino ad un altro.

Esercizio 5

In figura (4) 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 $5.43 \text{ \AA}$, calcola la densità degli atomi di silicio.

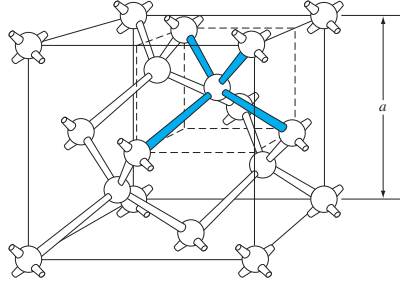


Figura 4: Cella unitaria convenzionale del diamante.

Soluzione

Il reticolo del diamante consiste in due reticoli *fcc* compenetranti, traslati lungo la direzione della diagonale del cubo di un quarto della sua lunghezza. Questa struttura può essere anche vista come un reticolo *fcc* con base formata da due atomi uguali in $\mathbf{0}$ e in $\frac{a}{4}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$ (a è il lato del cubo).

La cella unitaria convenzionale (quella mostrata in figura) contiene:

- atomi ai vertici: 8
- atomi al centro di una faccia: 6
- atomi interni: 4

Se si considera che un atomo al vertice contribuisce per $\frac{1}{8}$ e uno sulla superficie per $\frac{1}{2}$, la cella unitaria del diamante contiene un totale di $8\frac{1}{8} + 6\frac{1}{2} + 4 = 8$ atomi. La densità sarà:

$$\rho = \frac{8}{a^3} = \frac{8}{(5.43 \text{ \AA})^3} = 5 \cdot 10^{22} \text{ Atomi/cm}^3 \quad (21)$$

Esercizio 6

Il GaAs ha struttura zincoblenda con costante reticolare uguale a 5.65 Å (fig. 5). 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 cm³; 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.

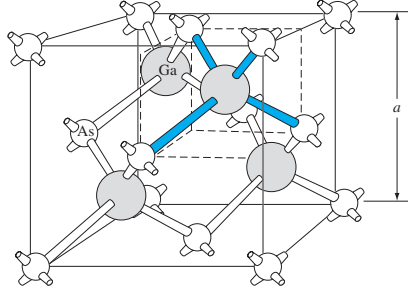


Figura 5: Cella unitaria convenzionale della struttura zincoblenda.

Soluzione

Il reticolo della zincoblenda ha la stessa struttura del reticolo del diamante, cioè è un *fcc* a cui però si associa una base costituita da due atomi differenti: un atomo di As in $\mathbf{0}$ e uno di Ga in $\frac{a}{4}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$ (a è il lato del cubo).

Coordinate degli atomi di Gallio:

$$a \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} ; a \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} ; a \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} ; a \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \quad (22)$$

Coordinate degli atomi di Arsenio:

$$\text{base inferiore} \quad a(0\ 0\ 0) \quad a(1\ 0\ 0) \quad a(0\ 1\ 0) \quad a(1\ 1\ 0) \quad a\left(\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 0\right) \quad (23)$$

$$\text{piano intermedio} \quad a\left(\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2}\right) \quad a\left(1 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}\right) \quad a\left(\frac{1}{2} \ 1 \ \frac{1}{2}\right) \quad a\left(0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}\right) \quad (24)$$

$$\text{base superiore} \quad a(0\ 0\ 1) \quad a(1\ 0\ 1) \quad a(0\ 1\ 1) \quad a(1\ 1\ 1) \quad a\left(\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 1\right) \quad (25)$$

- Ga: 4 atomi (tutti interni alla cella)
- As: $8\frac{1}{8} + 6\frac{1}{2} = 6$ atomi (1 sui vertici, 3 sulle facce)

$$\rho_{Ga} = \rho_{As} = \frac{4}{(5.65 \text{ Å})^3} = 2.22 \cdot 10^{22} \text{ Atomi/cm}^3 \quad (26)$$

La distanza minima tra Ga e As è pari alla distanza tra primi vicini nel diamante.

$$d_{Ga-As} = \sqrt{\left(\frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2} = \frac{\sqrt{3}}{4} \quad (27)$$

$$d_{Ga-Ga} = \sqrt{\left(\frac{2}{4}\right)^2 + \left(\frac{2}{4}\right)^2} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (28)$$

$$d_{As-As} = \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (29)$$

dove ovviamente le distanze Ga-Ga e As-As sono uguali perchè la scelta di utilizzare come base un atomo di As in $\mathbf{0}$ e uno di Ga in $\frac{a}{4}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$ è del tutto analoga a quella di scegliere come base del reticolo un atomo di Ga in $\mathbf{0}$ e uno di As in $\frac{a}{4}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$.

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 $6.49 \text{ \AA}$. La fase β presenta una struttura tetragonale a corpo centrato (*bct*) mostrata in figura (6) 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 .

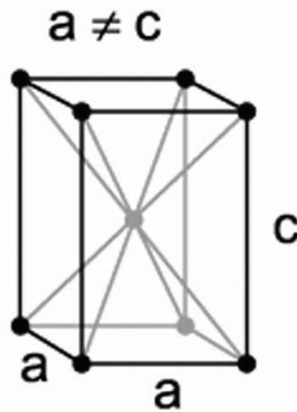


Figura 6: Cella unitaria del reticolo *bct*.

Soluzione

Per la fase α (diamante):

- numero di atomi sui vertici: $\frac{1}{8} \cdot 8 = 1$
- numero di atomi sulle facce: $\frac{1}{2} \cdot 6 = 3$
- numeri di atomi interni: 4

in totale ci sono quindi 8 atomi.

Calcoliamo il numero di moli e la massa per la cella unitaria:

$$n = \frac{8}{N_A} \quad m = np = \frac{8p}{N_A} \quad (30)$$

dove p è il peso atomico e N_A il numero di Avogadro.

La densità è quindi data da:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{8p}{N_A a^3} = \frac{8 \cdot 118.7 \text{ g}}{6.022 \cdot 10^{23} (6.49 \text{ \AA})^3} = 5.77 \text{ g/cm}^3 \quad (31)$$

Per la fase β (*bct*):

- numero di atomi sui vertici: $\frac{1}{8} \cdot 8 = 1$
- numeri di atomi interni: 1

in totale ci sono quindi 2 atomi. Per questa fase si trova quindi:

$$n = \frac{2}{N_A} \quad m = np = \frac{2p}{N_A} \quad (32)$$

da cui la densità risulta:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{2p}{N_A a^2 c} = \frac{2 \cdot 118.7 \text{ g}}{6.022 \cdot 10^{23} (5.84 \text{ \AA})^2 (3.18 \text{ \AA})} = 3.63 \text{ g/cm}^3 \quad (33)$$

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%.

Soluzione

La frazione massima del volume della cella cristallina che può essere occupata dagli atomi viene detta *packing factor* ed è una proprietà del reticolo.

1) Pensiamo di disporre una sfera rigida su ogni nodo reticolare della cella cubica semplice, otteniamo così 8 sfere, ma solo un ottavo del volume di ciascuna di queste sfere è effettivamente contenuto nella cella. Se indichiamo con R il raggio di queste sfere, il volume totale che occupano all'interno della cella cubica è dunque:

$$V_{occ} = 8 \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{4}{3} \pi R^3 \quad (34)$$

Affinchè due sfere prime vicine si tocchino ma non si compenetrino, il massimo raggio R_{max} deve essere pari a metà distanza tra primi vicini (che dipende dal reticolo). Nel caso del cubo semplice la distanza tra primi vicini è pari alla costante reticolare a (il lato del cubo) da cui otteniamo: $R_{max} = a/2$.

$$p.f.(sc) = \frac{V_{occ}}{V_{cella}} = \frac{\frac{4}{3} \pi R_{max}^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 52\% \quad (35)$$

2) Nella cella cubica a corpo centrato ci sono 2 atomi totali e il raggio massimo è uguale ad un quarto della diagonale del cubo: $R_{max} = \frac{\sqrt{3}}{4}a$.

$$p.f.(bcc) = \frac{2 \frac{4}{3} \pi R_{max}^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{8} \pi \approx 68\% \quad (36)$$

3) Nella cella cubica a facce centrate ci sono 4 atomi totali e il raggio massimo è uguale ad un quarto della diagonale di una faccia del cubo: $R_{max} = \frac{a}{2\sqrt{2}}$.

$$p.f.(fcc) = \frac{4 \frac{4}{3} \pi R_{max}^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2\sqrt{2}}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 74\% \quad (37)$$

Esercizio 9

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

Soluzione

Per un reticolo infinito tridimensionale definito dai suoi vettori primitivi ($\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$) esiste un algoritmo semplice che permette di ricavare i vettori primitivi ($\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$) dello spazio reciproco:

$$\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} \quad (38)$$

$$\mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} \quad (39)$$

$$\mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} \quad (40)$$

Per il reticolo cubico *fcc* prendiamo come base nello spazio diretto:

$$\mathbf{a} = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k}) = \frac{a}{2}(0, 1, 1) \quad (41)$$

$$\mathbf{b} = \frac{a}{2}(\mathbf{k} + \mathbf{i}) = \frac{a}{2}(1, 0, 1) \quad (42)$$

$$\mathbf{c} = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j}) = \frac{a}{2}(1, 1, 0) \quad (43)$$

Calcoliamo i prodotti:

$$\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \frac{a^2}{4}(-1, 1, 1) \quad (44)$$

$$\mathbf{c} \times \mathbf{a} = \frac{a^2}{4}(1, -1, 1) \quad (45)$$

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \frac{a^2}{4}(1, 1, -1) \quad (46)$$

$$V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \frac{a^3}{4} \quad (47)$$

Da cui:

$$\mathbf{A} = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1) \quad (48)$$

$$\mathbf{B} = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1) \quad (49)$$

$$\mathbf{C} = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1) \quad (50)$$

Notate che i vettori primitivi del reticolo reciproco di un *fcc* formano la base di un reticolo *bcc* di costante reticolare $\frac{4\pi}{a}$, cioè un reticolo *fcc* ha come reticolo reciproco un *bcc*. Calcolate il reciproco di un *bcc*...

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.

Soluzione

La distanza tra i primi vicini nel diamante è un quarto della diagonale del cubo (cella unitaria):

$$d_{nn} = \sqrt{\frac{1}{4^2} + \frac{1}{4^2} + \frac{1}{4^2}} = \frac{\sqrt{3}}{4}a \quad (51)$$

Il raggio massimo delle sfere dure sarà:

$$R_{max} = \frac{d_{nn}}{2} = \frac{\sqrt{3}}{8}a \quad (52)$$

Nella cella ci sono 8 atomi (vedi es. precedente), per cui si ha che il *packing factor* è:

$$p.f. = \frac{8 \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{8}a \right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{16} \pi \approx 34\% \quad (53)$$