ESERCIZI PDF

ES. 1

Struttura BCC e distanza tra i centri dei primi vicini R_0.

La densità atomica è # atomi per cella / volume cella

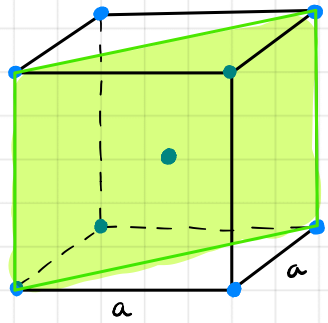
atomi: $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot 1 = 2$ $\qquad R_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} a$

Volume: $a^3 = \left(\frac{2}{\sqrt{3}} R_0\right)^3 = \frac{8}{3\sqrt{3}} R_0^3$

$$\rho = \frac{2}{\frac{8}{3\sqrt{3}} R_0^3} = \frac{3\sqrt{3}}{4 R_0^3}$$

ES. 2

Struttura BCC e piano (110), parametro di cella a



atomi sul piano

$1 \cdot \frac{1}{2} + 4 \cdot \frac{1}{8} = 1$

Area del piano $\sqrt{2}\, a \cdot a = a^2\sqrt{2}$

La densità superficiale $\sigma = \frac{1}{a^2\sqrt{2}}$

ES. 3

Struttura FCC e distanza tra i centri dei primi vicini R_0.

La densità atomica è # atomi per cella / volume cella

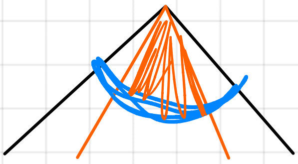
atomi: $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ $\qquad R_0 = \frac{\sqrt{2}}{2} a$

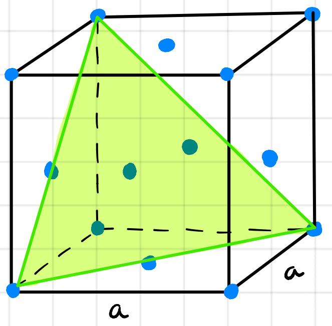
Volume: $a^3 = \left(\frac{2}{\sqrt{2}} R_0\right)^3 = \frac{8}{2\sqrt{2}} R_0^3 = \frac{4}{\sqrt{2}} R_0^3 = 2\sqrt{2}\, R_0^3$

$$\rho = \frac{4}{a} = \frac{2}{\sqrt{2}\, R_0^3} = \frac{\sqrt{2}}{R_0^3}$$

ES. 4

Struttura FCC e piano (111)





\# atomi sul piano

3 atomi sulle facce (che sono già mezzo)

$3 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = 3/4$

3 atomi sui vertici (che sono già 1/4)

$3 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{2}{3} = \frac{1}{2}$

2/3 perché il triangolo equilatero ha angoli di 60°

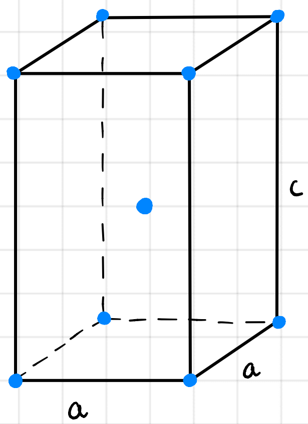
$\Rightarrow \frac{60°}{90°} \rightarrow \frac{2}{3}$

Area del piano $\frac{1}{2} \sqrt{2}\, a \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{2}\, a$

$= \frac{\sqrt{3}\, a^2}{2}$

La densità superficiale $\sigma = \frac{1/2 + 3/4}{\sqrt{3}/2 \; a^2} = \frac{5/4}{\frac{\sqrt{3}}{2} a^2}$

ES. 5



\# atomi per cella : $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot 1 = 2$

$\rho = \frac{2}{a^2 c} \cdot 118.7\, g$

Forse il peso atomico è 118.7 g/mol

$\Rightarrow \rho = \frac{2}{a^2 c} \cdot \frac{118.7\, g/mol}{N_A \; mol^{-1}}$

ES. 6

Il reticolo diretto è un FCC: dati $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vettori della cella a facce centrate (cella unitaria ma non primitiva)

Per trovare la cella primitiva

$\vec{a}_1' = \frac{1}{2}(\vec{a}_2 + \vec{a}_3) \qquad \vec{a}_2' = \frac{1}{2}(\vec{a}_3 + \vec{a}_1) \qquad \vec{a}_3' = \frac{1}{2}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$

Il volume della cella primitiva è

$V = \vec{a}_1' \cdot (\vec{a}_2' \wedge \vec{a}_3') = \frac{1}{2}(\vec{a}_2 + \vec{a}_3) \cdot \left[\frac{1}{2}(\vec{a}_3 + \vec{a}_1) \wedge \frac{1}{2}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \right]$

$= \frac{1}{8}(\vec{a}_2 + \vec{a}_3) \cdot (\vec{a}_2 - \vec{a}_1 + \vec{a}_3)\, a = \frac{1}{8}\left(|\vec{a}_2|^2 + |\vec{a}_3|^2 \right) a$

Per passare al reticolo reciproco scriviamo i vettori di base

$$\vec{b}_1' = \frac{2\pi}{V}\, \vec{a}_2' \wedge \vec{a}_3' \qquad \vec{b}_2' = \frac{2\pi}{V}\, \vec{a}_3' \wedge \vec{a}_1' \qquad \vec{b}_3' = \frac{2\pi}{V}\, \vec{a}_1' \wedge \vec{a}_2'$$

$$= \frac{8\pi}{a^3} \frac{1}{2}(\vec{a}_3 + \vec{a}_1) \wedge \frac{1}{2}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$$

$$= \frac{8\pi}{a^3} \frac{a^2}{4} (\hat{z} + \hat{x}) \wedge (\hat{x} + \hat{y}) \quad = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} - \hat{x} + \hat{z})$$

In definitiva allora

$$\vec{b}_1' = \frac{2\pi}{a} (-\hat{u}_x + \hat{u}_y + \hat{u}_z)$$
$$\vec{b}_2' = \frac{2\pi}{a} (\hat{u}_x - \hat{u}_y + \hat{u}_z)$$
$$\vec{b}_3' = \frac{2\pi}{a} (\hat{u}_x + \hat{u}_y - \hat{u}_z)$$

Calcoliamo adesso il volume:

$$V' = \vec{b}_1' \cdot (\vec{b}_2' \wedge \vec{b}_3') = \frac{8\pi^3}{a^3}(-\hat{u}_x + \hat{u}_y + \hat{u}_z) \cdot \left[(\hat{u}_x - \hat{u}_y + \hat{u}_z) \wedge (\hat{u}_x + \hat{u}_y - \hat{u}_z) \right]$$

$$= \frac{8\pi^3}{a^3}(-\hat{u}_x + \hat{u}_y + \hat{u}_z) \cdot (\hat{u}_z + \hat{u}_y + \hat{u}_z + \hat{u}_x + \hat{u}_y - \hat{u}_x)$$

$$= \frac{8\pi^3}{a^3}\, 2\, (-\hat{u}_x + \hat{u}_y + \hat{u}_z) \cdot (\hat{u}_y + \hat{u}_z)$$

$$= \frac{16\pi^3}{a^3} \cdot 2 = \frac{32\pi^3}{a^3}$$

ES. 7 Uguale, fatto a lezione (cambio FCC $\rightarrow$ BCC)

ES. 8 Reticolo ESAGONALE COMPATTO HCP

↳ reticolo esagonale semplice

$$a_1 = a\,\hat{u}_x$$
$$a_2 = \frac{a}{2}\hat{u}_x + \frac{\sqrt{3}}{2} a\,\hat{u}_y$$
$$a_3 = c\,\hat{u}_z \qquad \text{con} \qquad \left(\frac{c}{a}\right)^2 = \frac{8}{3} \qquad a_3 = \sqrt{\frac{8}{3}}\, a\,\hat{u}_z$$

↳ una base di atomi uguali posti in $(0,0,0)$ e $\vec{a}_1/3 + \vec{a}_2/3 + \vec{a}_3/2$

Il volume del reticolo diretto è

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) = \vec{a}_1 \cdot \left[\frac{a^2}{2}\sqrt{\frac{8}{3}} (\sqrt{3}\,\hat{u}_x - \hat{u}_y) \right] = \sqrt{2}\, a^3$$

Calcoliamo adesso i vettori del reticolo reciproco

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1 \qquad b_3 = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{2}a^3} \frac{a^2}{2} \sqrt{\frac{8}{3}} (\sqrt{3}\,\hat{x} - \hat{y}) = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}\right)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}} \hat{y}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{3}{8}}\, \hat{z}$$

Il volume della cella primitiva del reticolo reciproco è

$$V' = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3) = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}\right) \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\frac{2}{\sqrt{3}}\hat{y} \wedge \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{3}{8}}\,\hat{z} \right)$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}\right) \cdot \left(\frac{4\pi^2}{a^2}\frac{1}{\sqrt{2}} \right)\hat{x}$$

$$= \frac{8\pi^3}{a^3}\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{2^{5/2}\,\pi^3}{a^3}$$

ES. 9 $\quad \mathcal{E}_X = 10$ keV incidono sul piano (111) di un CS

La formula di Bragg è $\quad 2 d_{hkl} \sin\theta = m\lambda$

- $\mathcal{E} = \dfrac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \dfrac{hc}{\mathcal{E}}$
- $d_{hkl}\,(CS) = \dfrac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \dfrac{a}{\sqrt{3}}$
- pongo $m = 1$ e $m = 2$

$$\theta_1 = \sin^{-1}\left[\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\lambda}{a} \right]$$

$$\theta_2 = \sin^{-1}\left[\sqrt{3} \frac{\lambda}{a} \right]$$

ES. 10

$d = \frac{a}{2} \Rightarrow m\lambda = 2\frac{a}{2}\sin\theta$ con $\theta = 12.97°$

$\vec{G}_{200} = \frac{2\pi}{a} \cdot 2\,\hat{u}_x = \frac{4\pi}{a}\hat{u}_x$

Interferenza costruttiva: $\vec{R} \cdot \Delta\vec{k} = 2m\pi$

$\vec{R} \cdot \vec{G}_{200} = 2m\pi$

$a(\hat{u}_x + \hat{u}_y + \hat{u}_z) \cdot \frac{4\pi}{a}\hat{u}_x = 2m\pi$

$4\pi = 2m\pi \Rightarrow m = 2$

Otteniamo allora

$a = \frac{m\lambda}{\sin\theta}$ dove $m = 2$, $\theta = 12.97°$ e λ è assunta nota

Calcoliamo il volume $V = a^3 = \left(\frac{m\lambda}{\sin\theta}\right)^3$

Troviamo ora la massa degli atomi coinvolti nella cella

↳ fattore di occupazione $1/8$

Gallio $4 \cdot 1/8 = 1/2$ Fosforo $4 \cdot 1/8 = 1/2$

Ora cerchiamo la massa

$m_{Ga} = M_{Ga}/N_A$ $m_P = M_P/N_A$

Quindi la massa del GaP $m_{GaP} = \frac{1}{2}m_{Ga} + \frac{1}{2}m_P$

Infine $\rho_{GaP} = \frac{m_{GaP}}{V} = \frac{\frac{1}{2}m_{Ga} + \frac{1}{2}m_P}{\left(\frac{m\lambda}{\sin\theta}\right)^3}$

ES. 11

$\mathcal{E}_x = 12$ KeV , piano $(1,0,1)$ di un FCC

- $\lambda = \dfrac{hc}{\mathcal{E}}$

- $d_{hkl} = \dfrac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \dfrac{2\pi}{\sqrt{(h\vec{b}_1)^2 + (k\vec{b}_2)^2 + (\ell\vec{b}_3)^2}}$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2' \wedge \vec{a}_3'}{\vec{a}_1' \cdot (\vec{a}_2' \wedge \vec{a}_3')} = \frac{2\pi}{a}(-\hat{u}_x + \hat{u}_y + \hat{u}_z)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{u}_x - \hat{u}_y + \hat{u}_z)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{u}_x + \hat{u}_y - \hat{u}_z)$$

$$\vec{G}_{101} = \frac{2\pi}{a}(-\hat{u}_x + \hat{u}_y + \hat{u}_z) + \frac{2\pi}{a}(\hat{u}_x + \hat{u}_y - \hat{u}_z)$$

$$= \frac{2\pi}{a} \cdot 2\hat{u}_y = \frac{4\pi}{a}\hat{u}_y$$

$$\Rightarrow \quad d_{101} = \frac{2\pi}{\left|\frac{4\pi}{a}\hat{u}_y\right|} = \frac{a}{2}$$

La formula di Bragg è $\quad 2 d_{hkl} \sin\theta = m\lambda$

pongo $m=1$ e $m=2$

$$\theta_1 = \sin^{-1}\left[\frac{\lambda}{a}\right]$$

$$\theta_2 = \sin^{-1}\left[2\frac{\lambda}{a}\right]$$

ES. 12

Uguale ma con il BCC

ES. 13

$\mathcal{E}_x = 20$ keV , $\quad m=1 \Rightarrow \theta = 70°$

$$\lambda = \frac{hc}{\mathcal{E}} \quad \Rightarrow \quad d = \frac{m\lambda}{2\sin\theta} = \frac{hc}{2\mathcal{E}_x \sin\theta}$$

ES. 14

Lunghezza d'onda $\lambda = 1.6\ \mathring{A}$

Cristallo biatomico AB

Osserviamo i primi massimi a $\theta(m=1) = 40.35°$ e

$\theta(m=2) = 47.15°$

Per condizioni di Laue vale $|\Delta\vec{u}| = |\vec{G}| = 2k\sin\theta$

↳ $\sin\theta$ è monotona crescente in $[0, \pi/2]$ $\Rightarrow$ il primo ordine corrisponde al $|\vec{G}|$ più piccolo

CS $\Rightarrow$ $\vec{R} = a\hat{x} + a\hat{y} + a\hat{z}$ $\Rightarrow$ $\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y} \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{z} \end{cases}$ $\Rightarrow$ $\vec{G}_{hkl} = h\frac{2\pi}{a}\hat{x} + k\frac{2\pi}{a}\hat{y} + l\frac{2\pi}{a}\hat{z}$

Il $\vec{G}$ più corto è $G_{100} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$ mentre il secondo è

$\vec{G}_{110} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$

$\Rightarrow$ $|\vec{G}_{100}| = \frac{2\pi}{a}$; $|\vec{G}_{110}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}$

Siccome $|\vec{G}| = 2k\sin\theta$ allora $\frac{|\vec{G}_{100}|}{|\vec{G}_{110}|} = \frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2}$

Per il cubico semplice troviamo che il rapporto vale $\frac{2\pi}{a} / \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sim 0.7$

Usando invece gli angoli misurati si trova

$$\frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2} = 0.88$$

Essendo i due risultati diversi NON può essere il cubico semplice!

ES. 15

Reticolo CS , vettore d'onda della radiazione $\vec{k} = (1, 0, 0)$

↳ viaggia lungo x

Assumo λ tra $1.4\ \mathring{A}$ e $4\ \mathring{A}$.

Cerco gli indici hkl di $\vec{G}_{hkl}$ di lunghezza minima.

La condizione di Laue impone $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}_{hkl} \Rightarrow \vec{k}' = \vec{G}_{hkl} + \vec{k}$

Scattering elastico $\Rightarrow |\vec{k}| = |\vec{k}'|$

Elevando al quadrato $|\vec{k}'|^2 = |\vec{G}_{hkl} + \vec{k}|^2$

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 = |\vec{G}_{hkl}|^2 + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 + 2\,\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k}$$

Ricordando che $\vec{k} = (1,0,0)$ e $G_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3 = h\frac{2\pi}{a}\hat{u}_x + k\frac{2\pi}{a}\hat{u}_y + \ell\frac{2\pi}{a}\hat{u}_z$

cerchiamo di ricavare λ:

$$\cancel{\frac{4\pi^2}{\lambda^2}} = \frac{4\pi^2}{a^2}(h^2+k^2+\ell^2) + \cancel{\frac{4\pi^2}{\lambda^2}} + 2\frac{2\pi}{a}h\frac{2\pi}{\lambda}$$

Quindi $\frac{\cancel{4\pi^2}}{a^{\cancel{2}}}(h^2+k^2+\ell^2) + 2\frac{\cancel{4\pi^2}}{\cancel{a}}h\frac{1}{\lambda} = 0$

$$\frac{h^2+k^2+\ell^2}{a} + \frac{2h}{\lambda} = 0$$

$$\frac{2h}{\lambda} = -\frac{h^2+k^2+\ell^2}{a} \Rightarrow \lambda = \frac{-2ha}{h^2+k^2+\ell^2}$$

Deve essere $\lambda > 0 \Rightarrow h < 0$

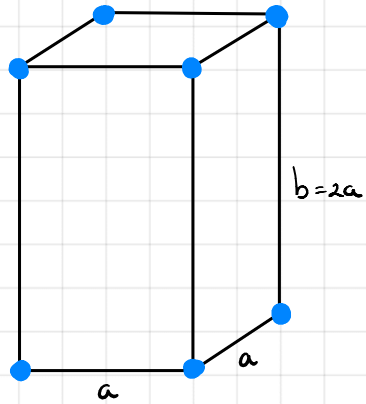
Cerchiamo le combinazioni possibili che rendono $\vec{G}$ più corto

h	k	ℓ	λ	
-1	0	0	5.6 Å	fuori range per λ
-1	± 1	0	2.8 Å	ok
-1	0	± 1	2.8 Å	ok
-1	± 1	± 1	1.9 Å	ok ma $\vec{G}$ è più lungo dei precedenti

In definitiva allora gli indici possibili sono $\vec{G}_{-1\pm10}$ e $\vec{G}_{-10\pm1}$

ES. 16

Struttura tetragonale



$\vec{a}_1 = a\,\hat{u}_x$
$\vec{a}_2 = a\,\hat{u}_y$
$\vec{a}_3 = 2a\,\hat{u}_z$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{2a^3}\,\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 = \frac{2\pi}{a}\,\hat{u}_x$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{2a^3}\,\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{a}\,\hat{u}_y$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{2a^3}\,\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2 = \frac{\pi}{a}\,\hat{u}_z$$

La distanza $\quad d_{hkl} = \dfrac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$

$$\vec{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{u}_x + \hat{u}_y + \frac{1}{2}\hat{u}_z\right)$$
$$|\vec{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{a}\,\frac{3}{2} = \frac{3\pi}{a} \qquad \Rightarrow \qquad d = \frac{2}{3}a$$

Dalla relazione $2d\sin\theta = m\lambda$ troviamo

$$\theta(m=1) = \sin^{-1}\left[\frac{\lambda}{2d}\right] = \sin^{-1}\left[\frac{3\lambda}{4a}\right]$$
$$\theta(m=2) = \sin^{-1}\left[\frac{\lambda}{d}\right] = \sin^{-1}\left[\frac{3\lambda}{2a}\right]$$

ES. 17

Struttura FCC con base atomica costituita di calcio bivalente in $(0,0,0)$ e due atomi di fluoro a $d_1 = a/4\,(1,1,1)$ e $d_2 = \frac{3}{4}a(1,1,1)$ dove a è il lato della cella cubica.

Assumiamo che la riflessione per $m=1$ della famiglia $\{111\}$ di X con $\lambda = 0.1542$ nm si osservi a $\theta = 28.36°$.

Determinare a.

$$2d\sin\theta = m\lambda \Rightarrow \quad d = \frac{m\lambda}{2\sin\theta} = \frac{\lambda}{2\sin\theta} = 0.16 \text{ nm}$$

$$d_{111} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{111}|} \qquad \text{dove } \vec{G}_{111} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3$$

Calcoliamo il reticolo reciproco:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V}\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 = \frac{2\pi a\,\hat{u}_x}{a^3} = \frac{2\pi}{a}\hat{u}_x$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{u}_y$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{u}_z$$

$$|\vec{G}_{111}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3} \implies d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}} \implies a = \sqrt{3}\,d_{111} = 0.28\ nm$$

ES. 18

Stimare il fattore di struttura

$$A \propto \sum_{\mu}\sum_{i_\mu} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{d}_{i\mu}}\cdot\rho_\mu = e^{-i\vec{G}_{hkl}\cdot\vec{d}_{Ca}}\rho_{Ca} + e^{-i\vec{G}_{hkl}\cdot\vec{d}_{F1}}\rho_F + e^{-i\vec{G}_{hkl}\cdot\vec{d}_{F2}}\rho_F$$

Calcoliamo i prodotti scalari: $\vec{G}_{hkl} = h\frac{2\pi}{a}\hat{x} + k\frac{2\pi}{a}\hat{y} + l\frac{2\pi}{a}\hat{z}$

1) $\vec{G}_{hkl}\cdot\vec{d}_{Ca} = 0$ (0,0,0)

2) $\vec{G}_{hkl}\cdot\vec{d}_{F1} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z})\cdot\frac{a}{4}(\hat{x},\hat{y},\hat{z}) = \frac{\pi}{2}(h+k+l)$

3) $\vec{G}_{hkl}\cdot\vec{d}_{F2} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z})\cdot\frac{3a}{4}(\hat{x},\hat{y},\hat{z}) = \frac{3\pi}{2}(h+k+l)$

$$A \propto \rho_{Ca} + \rho_F\left(e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + e^{-i\frac{3}{2}\pi(h+k+l)}\right)$$

$$= \rho_{Ca} + \rho_F\left[e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + e^{i\pi/2(h+k+l)}\right]$$

$$= \rho_{Ca} + 2\rho_F\cos\left[\pi/2\,(h+k+l)\right]$$

Se $h+k+l$ è dispari $A \sim \rho_{Ca}$

Se $h+k+l$ è pari $A \propto \rho_{Ca} \pm 2\rho_F$

ES. 19

Conducibilità elettrica $\sigma = 5.9 \cdot 10^{7}\ \Omega^{-1} m^{-1}$

Densità $\rho = 8.92\ g/cm^3$ e Peso atomico $P_{Cu} = 63.55\ g/mol$

Stimare energia di Fermi E_F e l'energia media di N elettroni di cond.

assumendo una descrizione del Cu a $T = 0k$

Ricaviamo $n = \frac{N}{V} = \frac{\rho N_A}{P_{Cu}} = 8.45 \cdot 10^{22}\ cm^{-3}$

A $T=0k$ $\frac{N}{V} = \frac{2}{3} B E_F^{3/2}$ dove $B = 2 \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}$

$\Rightarrow$ $E_F = \left(\frac{n}{B}\frac{3}{2}\right)^{2/3} = 19\ eV$

L'energia media è $E_0 = \frac{2}{5} BV E_F^{5/2}$

"energia media di N elettroni"

L'energia media per elettrone è $\varepsilon_0 = \frac{E_0}{N} = \frac{3}{5} E_F = 11.4\ eV$

ES. 20

Uguale al 19 cambiano i numeri

ES. 21

Cristallo di Ag : densità $\rho = 10.5\ g/cm^3$ e peso atomico $P_{Ag} = 107.87\ g/mol$

Calcolare la mobilità μ sapendo che la velocità di Fermi è $v_F = 1.39 \cdot 10^6\ m/s$

Ricordiamo $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = ne\mu$

Inoltre $E_F = \frac{1}{2} m v_F^2 = 5.5\ eV$ $\Rightarrow$ $n = \frac{2}{3} B E_F^{3/2}$ con $B = \frac{2}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}$

$= 5.85 \cdot 10^{28}\ 1/m^3$

Assumendo $\sigma = 6.3 \cdot 10^{7}\ \Omega^{-1} m^{-1}$

$\Rightarrow \mu = \frac{\sigma}{ne} = 6.7 \cdot 10^{-3}$ $\frac{m^3}{m\Omega C}$ $\frac{m^2}{\Omega C}$ $\frac{m^2}{\frac{V}{A} AS} = \frac{m^2}{V \cdot s}$

ES. 22

Uguale al 21, cambiano i numeri

ES. 23

Cubo di Ag ($V = 1\,cm^3$)

Stimare il contributo reticolare alla capacità termica a V costante per unità di massa in una struttura FCC di parametro reticolare $a = 4.07\,Å$ a $T = 10\,K$.

Assumiamo massa atomica $M_{Ag} = 107$ uma.

Calcolare tale valore in caso in cui la max freq. è $\nu_m = 0.5 \cdot 10^{13}\,Hz$

Troviamo il n° di atomi nel volume: FCC $\to$ 4 atomi/cella

$$n° \text{ celle} = \frac{V}{V_{cella}} = \frac{1\,cm^3}{(4.07\,Å)^3} = 1.5 \cdot 10^{22}$$

$\downarrow$

$N = 6 \cdot 10^{22}$ atomi

Sappiamo che $C_V = \left(\frac{\partial U_{ret}}{\partial T}\right)_V = \frac{12}{5}\frac{N k_B}{\Theta_D^3}\pi^4 T^3$

Per trovare Θ_D usiamo $\Theta_D = \frac{h\nu_m}{k_B} = 240\,K$

$\downarrow$

$C_V = 807\,J/K$

Ora, per unità di massa, è sufficiente dividere per

$$m = N \cdot 1.6 \cdot 10^{-27}\,kg \cdot M_{Ag} = 6 \cdot 10^{22} \cdot 1.6 \cdot 10^{-27} \cdot 107 = 0.01\,kg = 10\,g$$

$$c_V = \frac{807\,J/K}{10\,g} = 80.7\,J/gK$$

ES. 24

GaP con struttura zincoblenda: Ga in $(0,0,0)$ e P in $(1/4, 1/4, 1/4)$.

Contributo reticolare

$$C_{V,ret} = \underbrace{\frac{12}{5}\frac{\pi^4}{\Theta_D^3}R}_{\gamma} T^3 \quad \text{con} \quad \gamma = 2.2059 \cdot 10^{-5}\,J/Kmol$$

Calcolare Θ_D:

Invertendo la formula $\gamma = \frac{12}{5}\frac{\pi^4}{\Theta_D^3}R \implies \Theta_D = \left(\frac{12}{5}\frac{\pi^4}{\gamma}R\right)^{1/3}$

ES. 25

Fatto a lezione

$$b = \frac{12}{5}\frac{\pi^4}{\Theta_D^3}R \implies$$ inverto la formula per trovare Θ_D

ES. 26

Supponendo $T = 300K$

?

$$C_{V,ret} \simeq \frac{12}{5}\frac{\pi^4}{\Theta_D^3}RT^3$$

ESERCIZI SVOLTI

ES. 1

Reticolo ESAGONALE COMPATTO HCP

→ reticolo esagonale semplice

$$a_1 = a\,\hat{u}_x$$
$$a_2 = \frac{a}{2}\hat{u}_x + \frac{\sqrt{3}}{2}a\,\hat{u}_y$$
$$a_3 = c\,\hat{u}_z \qquad \text{con} \qquad \left(\frac{c}{a}\right)^2 = \frac{8}{3} \qquad a_3 = \sqrt{\frac{8}{3}}\,a\,\hat{u}_z$$

→ una base di atomi uguali posti in $(0,0,0)$ e $\vec{a}_1/3 + \vec{a}_2/3 + \vec{a}_3/2$

1) Calcolare i vettori primitivi del reticolo reciproco in unità di $\frac{2\pi}{a}$

Detti $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ vettori del reticolo reciproco,

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1 \qquad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2$$

Calcoliamo il volume della cella unitaria nel reticolo diretto:

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$$

$$\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 = \begin{vmatrix} \hat{u}_x & \hat{u}_y & \hat{u}_z \\ \frac{a}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2}ac\,\hat{u}_x - \frac{a}{2}c\,\hat{u}_y = \frac{a}{2}a\sqrt{\frac{8}{3}}\left[\sqrt{3}\,\hat{u}_x - 1\,\hat{u}_y\right] =$$

$$= \frac{a^2}{2}\sqrt{\frac{8}{3}}\left(\sqrt{3}\,\hat{u}_x - \hat{u}_y\right)$$

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) = a\,\hat{u}_x \cdot \frac{a^2}{2}\sqrt{\frac{8}{3}}\left(\sqrt{3}\,\hat{u}_x - \hat{u}_y\right) = \sqrt{2}\,a^3$$

Allora

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{2}\,a^3}\,\frac{a^2}{2}\sqrt{\frac{8}{3}}\left(\sqrt{3}\,\hat{u}_x - \hat{u}_y\right) = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{u}_x - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{u}_y\right)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\,\frac{2}{\sqrt{3}}\,\hat{u}_y$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{3}{8}}\,\hat{u}_z$$

2) Calcolare l'angolo θ tra i piani (001) e (112)

Ricordiamo $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ con hkl indici di Miller

$\vec{G}_{hkl}$ è normale al piano hkl

$\Rightarrow \quad \vec{G}_{001} \cdot \vec{G}_{112} = |\vec{G}_{001}| \cdot |\vec{G}_{112}| \cdot \cos\theta$

Scriviamo : $\vec{G}_{001} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{3}{8}}\,\hat{u}_z$ e

$$\vec{G}_{112} = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{u}_x - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{u}_y\right) + \frac{2\pi}{a}\frac{2}{\sqrt{3}}\hat{u}_y + 2 \cdot \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{3}{8}}\,\hat{u}_z$$
$$= \frac{2\pi}{a}\left[\hat{u}_x + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{u}_y + 2\sqrt{\frac{3}{8}}\,\hat{u}_z\right]$$

Calcoliamo $\vec{G}_{001} \cdot \vec{G}_{112} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{3}{8}}\,\hat{u}_z \cdot \frac{4\pi}{a}\sqrt{\frac{3}{8}}\,\hat{u}_z = \frac{8\pi^2}{a^2}\,\frac{3}{8} = \frac{3\pi^2}{a^2}$

$|\vec{G}_{001}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{3}{8}}$

$|\vec{G}_{112}| = \frac{2\pi}{a}\left[1 + \frac{1}{3} + \frac{12}{8}\right]^{1/2} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{1 + 1/3 + 3/2} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{17}{6}}$

$\Rightarrow \quad |\vec{G}_{001}| \cdot |\vec{G}_{112}| = \frac{4\pi^2}{a^2}\sqrt{\frac{17}{16}}$

Quindi : $$\cos\theta = \frac{\vec{G}_{001} \cdot \vec{G}_{112}}{|\vec{G}_{001}|\,|\vec{G}_{112}|} = \frac{\frac{3\pi^2}{a^2}}{\frac{4\pi^2}{a^2}\sqrt{\frac{17}{16}}} = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{16}{17}} = \frac{3}{\sqrt{17}}$$

$\Rightarrow \quad \theta = \cos^{-1}\left(\frac{3}{\sqrt{17}}\right) = 0.756 = 43.3°$

3) Calcolare la distanza minima tra i piani (111)

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} \Rightarrow d_{111} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{111}|}$$

Scriviamo $\vec{G}_{111} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{u}_x + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{u}_y + \sqrt{\frac{3}{8}}\,\hat{u}_z\right)$

$|\vec{G}_{111}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{1 + \frac{1}{3} + \frac{3}{8}} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{41}{24}} \Rightarrow d_{111} = a\sqrt{\frac{24}{41}}$

4) L'intensità di un'onda diffratta da un piano di indici di Miller hkl è proporzionale al modulo quadro del fattore di struttura

$$I_{hkl} = |S_{hkl}|^2 = \left| \sum_{j=1}^{m} f_j \, e^{i \vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_j} \right|^2$$

dove f_j è il fattore di forma atomico degli atomi costituenti la base

Calcolare in unità di $|f|^2$ le intensità I quando si verificano

→ $h+k = 3m$ $\quad \ell = 2m$

→ $h+k = 3m$ $\quad \ell = 2m+1$

→ $h+k \neq 3m$ $\quad \ell = 2m$

→ $h+k \neq 3m$ $\quad \ell = 2m+1$

$\vec{r}_1 = (0,0,0)$

$\vec{r}_2 = \frac{1}{3}\vec{a}_1 + \frac{1}{3}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3$

Calcoliamo $\quad S_{hkl} = f\left[e^{i \vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_1} + e^{i \vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_2} \right] =$

$$= f\left[1 + e^{i(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3) \cdot \left(\frac{1}{3}\vec{a}_1 + \frac{1}{3}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3\right)} \right]$$

svolgiamo il prodotto scalare:

$$\vec{G}_{hkl} = \left(h \frac{2\pi}{a}\left(\hat{u}_x - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{u}_y\right) + k \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}} \hat{u}_y + \ell \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{3}{8}} \hat{u}_z \right)$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[h\left(\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y}\right) + k \frac{2}{\sqrt{3}}\hat{y} + \ell \sqrt{\frac{3}{8}}\hat{z} \right] =$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[h\hat{x} + \left(\frac{2k-h}{\sqrt{3}}\right)\hat{y} + \ell\sqrt{\frac{3}{8}}\hat{z} \right]$$

$$\vec{r} = \frac{1}{3}\vec{a}_1 + \frac{1}{3}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3 = \frac{1}{3}a\hat{x} + \frac{1}{3}\frac{a}{2}\hat{x} + \frac{1}{3}\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8}{3}}a\hat{z}$$

$$= \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{6}\hat{y} + \sqrt{\frac{2}{3}}a\hat{z} = a\left[\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{6}\hat{y} + \sqrt{\frac{2}{3}}\hat{z} \right]$$

$$\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r} = 2\pi\left[\frac{h}{2} + \frac{2k-h}{6} + \frac{\ell}{2} \right] = h\pi + (2k-h)\frac{\pi}{3} + \ell\pi =$$

$$= \frac{2}{3}\pi h + \frac{2}{3}\pi k + \pi\ell = \frac{\pi}{3}\left[2(h+k) + 3\ell \right]$$

Quindi $\quad S_{hkl} = f\left\{1 + e^{i\frac{\pi}{3}[2(h+k)+3l]}\right\}$

$$\Rightarrow \quad \frac{I_{hkl}}{|f|^2} = \left|1 + e^{i\frac{\pi}{3}[2(h+k)+3l]}\right|^2$$

- $h+k = 3m \;,\; l = 2n \quad \Rightarrow \quad I_{hkl} = \left|1 + e^{i\frac{\pi}{3}(6m+6n)}\right|^2$
$$= \left|1 + e^{i2\pi(m+n)}\right|^2$$

facciamo il conto: $\quad e^{i2\pi(m+n)} = \cos[2\pi(m+n)] + i\sin[2\pi(m+n)] = +1$

$\Rightarrow \quad I_{hkl} = |1+1|^2 = 4$

- $h+k = 3m \;,\; l = 2n+1 \quad \Rightarrow \quad I_{hkl} = \left|1 + e^{i\frac{\pi}{3}(6m+6n+3)}\right|^2$
$$= \left|1 + e^{i2\pi(m+n+1/2)}\right|^2$$

facciamo il conto

$$e^{i2\pi(m+n+1/2)} = \cos[2\pi(m+n+\tfrac{1}{2})] + i\sin[2\pi(m+n+\tfrac{1}{2})] =$$

$$= \cos[2\pi(m+n)+\pi] + i\sin[2\pi(m+n)+\pi] =$$

$$= \cos[2\pi(m+n)]\cos(\pi) - \sin[2\pi(m+n)]\sin(\pi) + i\sin[2\pi(m+n)]\cos(\pi) + i\sin(\pi)\cos[2\pi(m+n)]$$

$$= -1 + 0 + i(0+0) = -1$$

$\Rightarrow \quad I_{hkl} = |1-1|^2 = 0$

- $h+k \neq 3m \;,\; l = 2n \quad \Rightarrow \quad I_{hkl} = \left|1 + e^{i\frac{\pi}{3}[2(h+k)+6n]}\right|^2$
$$= \left|1 + e^{i2\pi[\frac{h+k}{3}+n]}\right|^2$$

facciamo il conto:

$$e^{i2\pi[\frac{h+k}{3}+n]} = \cos[\tfrac{2}{3}\pi(h+k)]\cos(2\pi n) + i\sin[\tfrac{2}{3}\pi(h+k)]\cos(2\pi n)$$

$$= \cos[\tfrac{2}{3}\pi(h+k)] + i\sin[\tfrac{2}{3}\pi(h+k)]$$

ES. 2

Calcolare il numero di stati occupati in un volume V di rame alla temperatura $T = 0K$. Stimare il valore per $V = 1 cm^3$

Il rame è un metallo $\Rightarrow$ $g(E)$ = densità di stati in funzione dell'energia

$$g(E) = BV\sqrt{E}$$

Distribuzione FD: $$f_{FD} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT}+1} \overset{T=0K}{=} \frac{1}{\exp[(E-E_F)/k_BT]+1}$$

$$n = \int_0^\infty f_{FD}(E)\, g(E)\, dE \cong \int_0^{E_F} g(E)\, dE = \int_0^{E_F} BV\sqrt{E}\, dE$$

$$f_{FD} = \begin{cases} 1 & E < E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases} \quad \text{a} \quad T = 0K$$

Ricordo $B = 2\left(\frac{1}{2\pi}\right)^2\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}$ $\Rightarrow$ $n = \frac{2}{3} BV E_F^{3/2} \simeq 8.4 \cdot 10^{28}\, m^{-3} \cdot V$

$E_F \sim 7eV$

Se $V = 1\, cm^3 \Rightarrow n = 8.4 \cdot 10^{22}$

ES. 3

Calcolare l'energia media per gli elettroni di conduzione nel rame a $T = 0K$

Ricordiamo

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty E \cdot g(E) f_{FD}(E)\, dE}{\int_0^\infty g(E) f_{FD}(E)\, dE} \simeq \frac{\int_0^{E_F} E\, BV\sqrt{E}\, dE}{\int_0^{E_F} BV\sqrt{E}\, dE} =$$

$$= \frac{\int_0^{E_F} E\sqrt{E}\, dE}{\int_0^{E_F} \sqrt{E}\, dE} = \frac{\int_0^{E_F} E^{3/2}\, dE}{\int_0^{E_F} E^{1/2}\, dE} = \frac{\frac{2}{5}E^{5/2}\Big|_0^{E_F}}{\frac{2}{3}E^{3/2}\Big|_0^{E_F}} = \frac{3}{5} E_F$$

Nel rame $E_F \sim 7eV \Rightarrow \langle E \rangle \sim \frac{3}{5} \cdot 7eV = 4.2\, eV$

ES. 4

Calcolare l'energia di Fermi per il rame ed il ferro sapendo che la densità di elettroni di conduzione per il rame è $8.5 \cdot 10^{28}\ m^{-3}$ e per il ferro $17 \cdot 10^{28}\ m^{-3}$

Sia il rame che il ferro sono metalli: $n = \frac{2}{3} BV E_F^{3/2}$

$$\Rightarrow E_F^{3/2} = \frac{3}{2} \frac{n}{B}$$

$$E_F = \left(\frac{3}{2}\frac{n}{B}\right)^{2/3} \sim 1.12 \cdot 10^{-18} J \quad Cu \Rightarrow 6.99\ eV$$

$$\sim 1.80 \cdot 10^{-18} J \quad Fe \Rightarrow 11.23\ eV$$

ES. 5

Stimare per il Si e per il Ge la probabilità che sia occupato il livello di energia pari al minimo della banda di conduzione a T ambiente assumendo che il livello di Fermi possa essere ben approssimato come giacente a metà energy gap ($E_g = 0.57$ eV Si, $E_g = 0.33$ eV Ge)

approx perché $T \neq 0K$

La probabilità cercata è $f_{FD}(E) = \dfrac{1}{\exp[(E-\mu)/k_BT]+1} \sim \dfrac{1}{\exp[(E-E_F)/k_BT]+1}$

Assumiamo $E - E_F = \dfrac{E_g}{2}$

A temperatura ambiente $k_BT \sim 0.026$ eV $\Rightarrow E - E_F \gg k_BT$

Allora $f_{FD} = \dfrac{1}{\exp[(E-E_F)/k_BT]+1} \sim \dfrac{1}{\exp[(E-E_F)/k_BT]} = \exp[-(E-E_F)/k_BT]$

$= \exp[-E_g/(2k_BT)] =$ faccio il conto

ES. 6

Stimare l'aumento di elettroni eccitati in banda di conduzione se si riscalda il Si da 300K a 400K.

Assumiamo $E_g = 0.57\, eV$ e che $E - E_F = \frac{E_g}{2}$

Approssimando troviamo $f_{FD} \sim e^{-\frac{E_g}{2k_BT}}$

Calcoliamo allora $\frac{f_{FD}^{400k}}{f_{FD}^{300k}} = e^{-\frac{E_g}{2k_B}\left(\frac{1}{400} - \frac{1}{300}\right)} \sim 280$

Dato che il no di elettroni che passa da BV a BC è proporzionale a f_{FD} allora il no di elettroni di conduzione aumenta di ~ 280

ES. 7

Supponiamo un cristallo conduttore CS con parametro di cella $a = 0.55\, nm$

Supponiamo di misurare il calore specifico molare e di trovare

$C = \gamma T + \alpha T^3$ con $\gamma = 2.151 \cdot 10^{-4}\, cal/mol\,k^2$ e $\alpha = 6.989 \cdot 10^{-2}\, cal/mol\,k^4$

Stimare la densità numerica degli elettroni di conduzione e la temp di Debye.

Il solido è conduttore $\Rightarrow$ descrizione come metallo CS monovalente

$$c_{V,molare} = \gamma T + \alpha T^3$$

Ricordando $c_{V,el} = \frac{\pi^2 R}{2 T_F} \cdot T$ con T_F temperatura di Fermi

$c_{V,ret} = \frac{12}{5} \frac{\pi^4}{\Theta_D^3} R T^3$ con Θ_D temperatura di Debye e R la costante dei gas

[$J_c = 4.186\, cal/J$] conversione cal $\rightarrow$ J

$\gamma = \frac{\pi^2 R}{2 T_F}$ e $\alpha = \frac{12}{5} \frac{\pi^4}{\Theta_D^3} R$

$$\Rightarrow \quad T_F = \frac{\pi^2 R}{2\gamma J_c} = 45570\ K$$

$$\Theta_D = \left(\frac{12}{\pi}\frac{\pi^4}{\gamma J_c} R\right)^{1/3} = 18.8\ K$$

Dobbiamo calcolare la densità elettronica: la densità di elettroni è $n(T) = B\int_0^\infty \frac{\sqrt{E}}{\exp[(e-\mu)/k_BT]+1}\,dE$ con $T_F = \frac{E_F}{k_B}$ e $B = 2\left(\frac{1}{2\pi}\right)^2\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}$

A $T = 0K$ $\quad n(0) = \frac{2}{3}BE_F^{3/2} = \frac{2}{3}B\,(k_BT_F)^{3/2} = \frac{2}{3}\,2\cdot\left(\frac{1}{2\pi}\right)^2\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}(k_BT_F)^{3/2}$

$= 3.534\cdot 10^{28}\ m^{-3}$

ES. 8

Il potassio $P_K = 39.0983\ g/mol$ ha una struttura BCC con densità $\rho_m = 856\ kg/m^3$ e calore specifico $C_V = (2.08T + 2.57\,T^3)\ m\,J/molK$

Stimare T_F, Θ_D ed il parametro di cella.

Sappiamo che $\quad C_V = \alpha T + \beta T^3$ con $\alpha = \frac{\pi^2 R}{2T_F}$ e $\beta = \frac{12}{5}\frac{\pi^4}{\Theta^3}R$

considerando il potassio come metallo conduttore

Quindi $\quad T_F = \frac{\pi^2 R}{2\alpha}$ e $\Theta = \left(\frac{12}{5}\frac{\pi^4}{\beta}R\right)^{1/3}$ con α, β dati dal testo.

$T_F \sim 19727\ K \qquad \Theta \sim 91.1\ K$

Cerchiamo ora il parametro di cella a del BCC.

La cella primitiva di un BCC ha volume

$$V = \frac{a^3}{2} \quad \Longrightarrow \quad V_m = V \text{ occupato da una mole} = N_A\cdot V$$

Abbiamo $\quad \rho = \frac{P_K}{V_m} = \frac{P_K}{N_A V} \Rightarrow V = \frac{P_K}{N_A\rho} = \sim 7.584\cdot 10^{-2}\ nm^3$

$$\Rightarrow \quad a = (2V_c)^{1/3} = 0.533\ nm$$

ES. 9

Un metallo ha $E_F = 7.97$ eV. Stimare la densità elettronica ed il contributo elettronico al calore specifico sapendo $P = 26.98$ g/mol e $\rho = 2.7$ g/cm³

Metallo $\Rightarrow$ descrizione in termini di gas di Fermi

$$\hookrightarrow \quad n = \frac{2}{3} B E_F^{3/2} = \frac{2}{3}\, 2\left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2} = 10.22 \cdot 10^{28}\ m^{-3}$$

Assumiamo $\quad C_V = \gamma T + \alpha T^3 \quad$ e $\quad C_{V,el} = \underbrace{\frac{\pi^2 R}{2 T_F}}_{\gamma} \cdot T$

Sappiamo che $\quad T_F = \frac{E_F}{k_B} \quad \Rightarrow \quad \gamma = \frac{\pi^2 R\, k_B}{2 E_F} \sim 4.4 \cdot 10^{-4}$ J/molK

ES. 10

Reticolo cristallino descritto da una base ortorombica con base.
I vettori primitivi del reticolo sono

$$\vec{a}_1 = a\,\hat{x} \quad \text{con} \quad a = 1\,\text{Å}$$
$$\vec{a}_2 = b\,\hat{y} \quad \text{con} \quad b = 1.5\,a = 1.5\,\text{Å}$$
$$\vec{a}_3 = c\,\hat{z} \quad \text{con} \quad c = 1.75\,a = 1.75\,\text{Å}$$

La base è formata da due atomi situati in $(0,0,0)$ e $(1/2, 1/2, 1/2)$.
Determinare i vettori del reticolo reciproco e l'angolo formato tra $\vec{G}_{100}$ e $\vec{G}_{114}$.

Sappiamo che i vettori del reticolo reciproco sono definiti come

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V}\, \vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V}\, \vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V}\, \vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2$$

dove il volume $V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$

Calcoliamo allora

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi \dfrac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)} = 2\pi \dfrac{(b\hat{y} \wedge c\hat{z})}{a\hat{x} \cdot (b\hat{y} \wedge c\hat{z})} = 2\pi \dfrac{bc}{abc} \dfrac{\hat{x}}{\hat{x} \cdot \hat{x}} = \dfrac{2\pi}{a} \hat{x} \\ \vec{b}_2 = 2\pi \dfrac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)} = 2\pi \dfrac{ac}{abc} \dfrac{\hat{y}}{\hat{x} \cdot \hat{x}} = \dfrac{2\pi}{b} \hat{y} \\ \vec{b}_3 = \dfrac{2\pi}{c} \hat{z} \end{cases}$$

L'angolo tra $\vec{G}_{100}$ e $\vec{G}_{114}$ si calcola con il prodotto scalare:

$$\vec{G}_{100} \cdot \vec{G}_{114} = |\vec{G}_{100}| |\vec{G}_{114}| \cos\theta$$

Calcoliamo allora $\vec{G}_{100} \cdot \vec{G}_{114} = \dfrac{2\pi}{a} \hat{x} \cdot \dfrac{2\pi}{a} \hat{x} = \dfrac{4\pi^2}{a^2}$

$$|\vec{G}_{100}| = \frac{2\pi}{a} \quad ; \quad |\vec{G}_{114}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{1^2 + \left(\frac{1}{1.5}\right)^2 + \left(\frac{4}{1.75}\right)^2} = 2.58 \frac{2\pi}{a}$$

$$\Rightarrow \quad \cos\theta = \frac{\frac{4\pi^2}{a^2}}{\frac{4\pi^2}{a^2} \cdot 2.58} = \frac{1}{2.58} = 0.387 \quad \Rightarrow \quad \theta = 67.2°$$

ES. 11

Consideriamo un reticolo 2D il cui reciproco è esagonale e i vettori primitivi del reciproco sono

$$\vec{b}_1 = a\hat{x} \quad ; \quad \vec{b}_2 = -a\sin\theta\,\hat{x} + a\cos\theta\,\hat{y} \quad \text{con } \theta = 30° \text{ e } a = 1 Å$$

Determinare i vettori del reticolo diretto (primitivo).

Vogliamo calcolare

$$\vec{a}_1 = \alpha_1 \hat{x} + \beta_1 \hat{y}$$

$$\vec{a}_2 = \alpha_2 \hat{x} + \beta_2 \hat{y}$$

Sappiamo che $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = \delta_{ij} 2\pi \Rightarrow$

$$\begin{cases} \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = 2\pi = \alpha_1 a \\ \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = 0 = -\alpha_1 \frac{a}{2} + \beta_1 \frac{\sqrt{3}}{2} a \end{cases}$$

$$\begin{cases} \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 = 0 = \alpha_2 a \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 = 2\pi = -\alpha_2 \frac{a}{2} + \beta_2 \frac{\sqrt{3}}{2} a \end{cases}$$

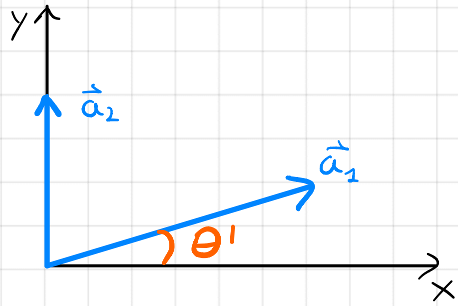
Dal sistema (4 eq. 4 incognite) troviamo

$$\alpha_1 = \frac{2\pi}{a} \qquad \beta_1 = \alpha_1 \cancel{\frac{a}{2}} \Big/ \frac{\sqrt{3}}{\cancel{2}}\cancel{a} = \frac{\alpha_1}{\sqrt{3}} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}$$

$$\alpha_2 = 0 \qquad \beta_2 = \frac{2\pi}{\frac{\sqrt{3}}{2}a} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$$

I vettori della base sono dunque

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \\ \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{a}\frac{2}{\sqrt{3}}\hat{y} \end{cases}$$



$$\theta' = \tan^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = 30°$$

ES. 12

Calcolare la densità atomica di una specie chimica con distanza tra i centri dei primi vicini pari a $R_0 = 3.03$ Å (struttura BCC).

Nel BCC ho $8 \cdot 1/8 + 1 \cdot 1 = 2$ atomi per cella

Inoltre, il volume della cella è $V = a^3$

Sappiamo che $R_0 = \frac{1}{2}\underbrace{\sqrt{3}a}_{\text{diagonalona}}$ quindi $a = \frac{2}{\sqrt{3}}R_0$

La densità atomica è $\rho = \frac{\#\text{ atomi}}{V} = \frac{2}{(2/\sqrt{3}\,R_0)^3} = \frac{2 \cdot 3\sqrt{3}}{8\,R_0^3} = \frac{3\sqrt{3}}{4}\frac{1}{R_0^3}$

ES. 13

Determinare la spaziatura interatomica di un cristallo di NaCl assumendo $\rho_{NaCl} = 2.16\ g/cm^3$ e pesi atomici $P_{Na} = 23\ g/mol$, $P_{Cl} = 35\ g/mol$

L'atomo di Na è posizionato a $\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$ rispetto al Cl

Sia allora V il volume della cella e M la sua massa

$$\rho_{NaCl} = \frac{M}{V} = \frac{n_{Na}P_{Na} + n_{Cl}P_{Cl}}{(2d)^3}$$ con n = n° moli e d = spaziatura atomica

Il n° moli è dato da $n = \frac{N}{N_A}$

- Sodio :

  sugli spigoli 12 e al centro 1 $\Rightarrow$ $12 \cdot \frac{1}{4} + 1 \cdot 1 = 4$

- Cloro :

  sui vertici 8 e sulle facce 6 $\Rightarrow$ $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$

Allora $M = m_{Na} P_{Na} + m_{Cl} P_{Cl} = \frac{4}{N_a} (23 + 35)\ g = 3.85 \cdot 10^{-22}\ g$

La densità $\rho = \frac{M}{V} = 2.16\ g/cm^3 \Rightarrow \frac{3.85 \cdot 10^{-22}\ g}{8d^3} = 2.16\ g/cm^3$

$$d^3 = \frac{3.85 \cdot 10^{-22}\ g}{8 \cdot 2.16\ g/cm^3} \Rightarrow d = 2.82 \cdot 10^{-8}\ cm$$

$$= 2.82 \cdot 10^{-10}\ m = 2.82\ \text{Å}$$