ESERCITAZIONE 1

- RETICOLI 1D, 2D, 3D
  - tipo di reticolo
  - cella unitaria
  - PF (packing factor)

I solidi possono essere di 3 tipi:

- cristallini
- policristallini
- amorfi

divisi in:

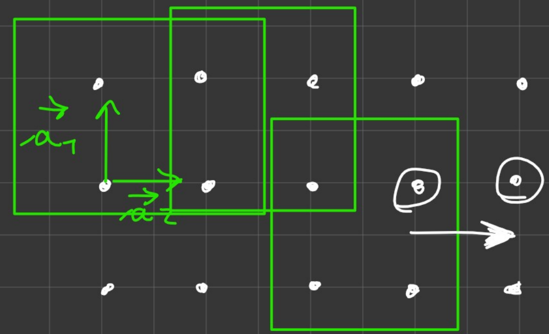
- Reticoli di Bravais
- Reticoli non di Bravais

RETICOLI DI BRAVAIS:

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^{N} n_i \vec{a}_i$$

1D

2D



$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$$
$$\theta = 90°$$

- cella unitaria "primitiva" = è la più piccola cella unitaria che possiamo prendere

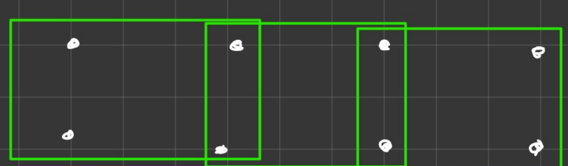
quanti atomi sono presenti per ogni cella unitaria?

In media abbiamo un atomo per cella sopra (reticolo quadrato)

IL RETICOLO RETTANGOLARE

a differenza del reticolo quadrato, non ho uguaglianza fra i moduli

$$|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$$
$$\theta = 90°$$



$$N_{\frac{\text{atomi}}{\text{cella}}} = \frac{4}{4} = 1$$

$$\rho = \frac{N_{at}}{A}$$

densità atomica

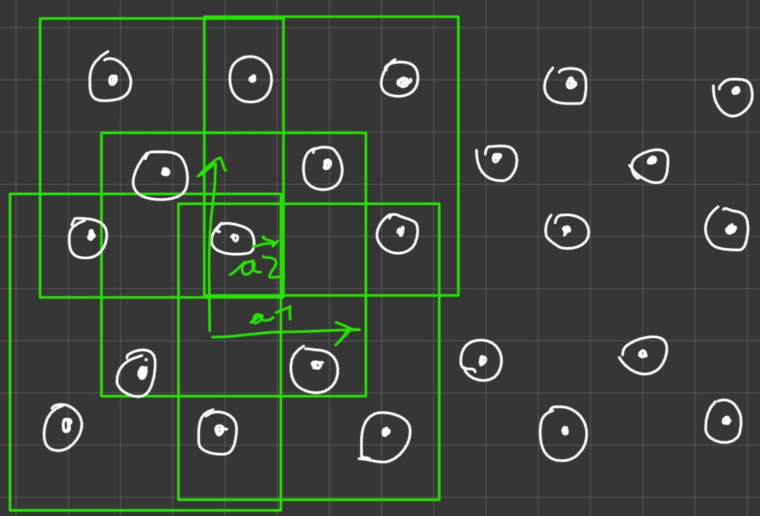
area

nel nostro caso $\rho = \dfrac{1}{|a_1||a_2|}$

se ad esempio $a = 5\,\mathring{A}$

$$\rho = \frac{1}{25 \cdot 10^{-20}\, m^2} = \frac{1}{25} \cdot 10^{20}\, m^{-2}$$

RETICOLO RETTANGOLARE A CORPO CENTRATO:



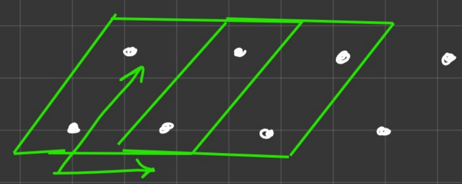
$|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$

$\theta = 90°$

$N_{at} = \frac{4}{4} + 1 = 2$

$$\rho = \frac{2}{|a_1||a_2|}$$

RETICOLO OBLIQUO:

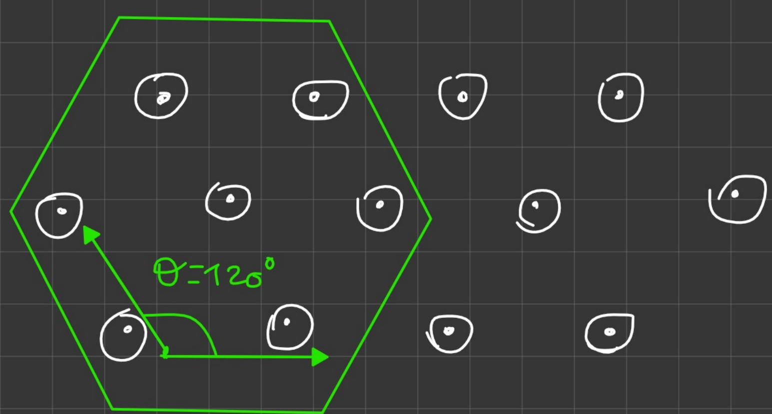


$|\vec{a_1}| \neq |\vec{a_2}|$

$\theta \neq 90°$

$N_{at} = 1$

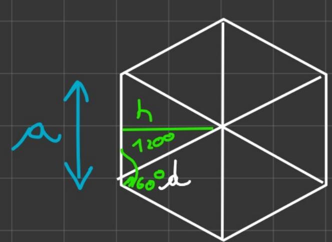
RETICOLO ESAGONALE:



$N_{at/cella} = 1 + \frac{6}{3} = \underline{3}$

$\rho = \frac{N_{at/cella}}{A} =$

$|\vec{a_1}| = |\vec{a_2}|$



$d\cos(60)° = \frac{a}{2}$

$d\sin(60)° = h$

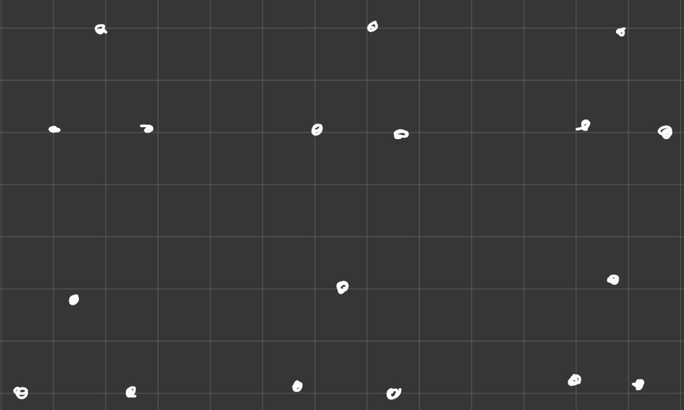
$$A = a\, h\, \frac{1}{2} \cdot 6 = \frac{6}{2} a h = \frac{3}{2} \frac{\sin(60°)}{\cos(60°)} a^2$$

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

quindi:

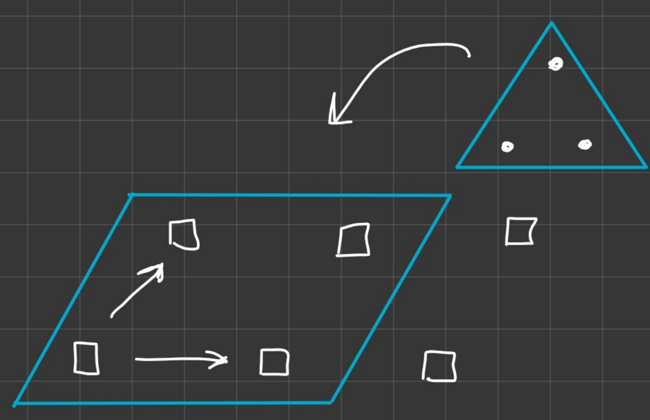
$$\rho = \frac{\cancel{3}}{\frac{\cancel{3}\sqrt{3}\,a^2}{2}} = \frac{2}{\sqrt{3}\,a^2}$$

IDENTIFICAZIONE DI BASE



In questo caso non posso facilmente trovare una cella unitaria

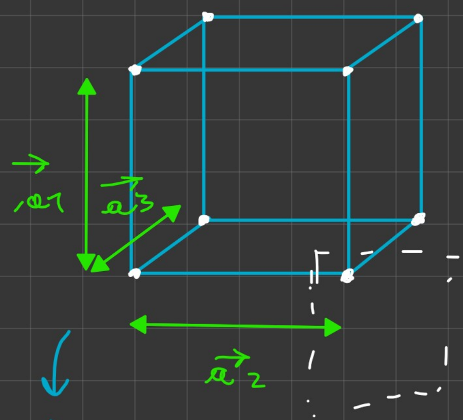
devo "identificare una base"



$$N_{\frac{at}{cella}} = 4 \cdot \frac{1}{4} \cdot 3 = 3 \frac{atomi}{cella}$$

3D

RETICOLO CUBICO:



$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3|$$

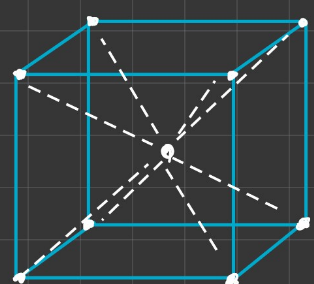
$$\theta(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = 90^\circ$$

$$\theta(\vec{a}_1, \vec{a}_3) = 90^\circ$$

reticolo del polonio

$$\frac{N_{at}}{cella} = \frac{8}{8} = 1$$

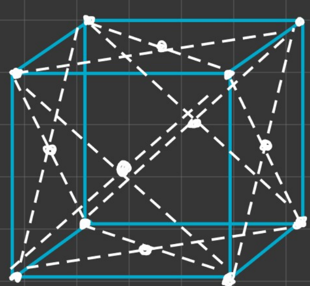
RETICOLO CUBICO A CORPO CENTRATO (BCC)



$$\frac{N_{at}}{cella} = \frac{8}{8} + 1 = 2$$

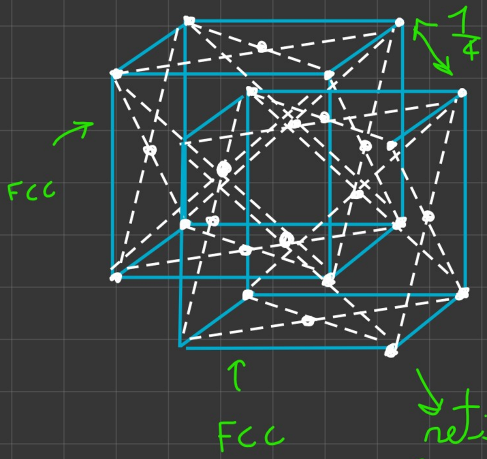
reticolo del ferro

RETICOLO CUBICO A FACCE CENTRATE (FCC)



$$\frac{N_{at}}{cella} = \frac{8}{8} + \frac{6}{2} = 4$$

RETICOLO A DIAMANTE:



reticolo che si ritrova nella zincoblenda e nel silicio

$$\frac{N_{atomi}}{cella} = 4 \cdot 2 = 8$$

due celle per base

numero di atomi per cella di ogni base

IL PACKING FACTOR:

$$PF = \frac{N_{atomi}}{cella} \cdot \frac{V_{atomo}}{V_{cella}}$$

considero gli atomi come sfere di raggio $\frac{a}{2}$

per il cubico semplice: $PF = \frac{1 \cdot \frac{4}{3}\pi (r)^3}{a^3}$

$$= \frac{\cancel{\frac{4}{3}}\pi \cancel{a^3}}{\cancel{8 a^3}} = \frac{1}{6}\pi \simeq 53\%$$

e nel BCC?

$$4r = a\sqrt{3} \longrightarrow r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

quanti raggi ci sono nella diagonale maggiore del cubo

$$PF = 2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi a^3 \left(\sqrt{3}/4\right)^3}{a^3} = 68\%$$

e nell' FCC?

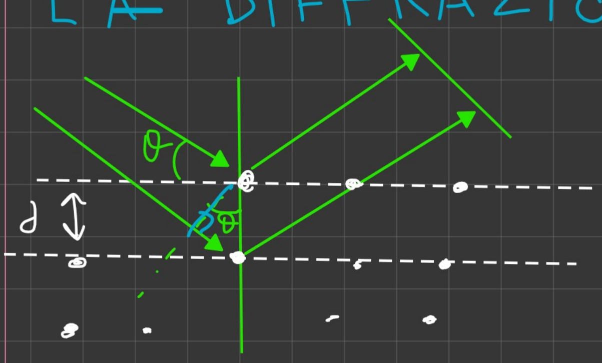
$$4r = a\sqrt{2} \rightarrow r = a\frac{\sqrt{2}}{4}$$

quanti raggi ci sono nella diagonale della faccia

$$PF = 4 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi \cancel{a^3}\left(\frac{\sqrt{2}}{4}\right)^3}{\cancel{a^3}} = \frac{\sqrt{2}}{3}\pi = 74\%$$

(il PF del silicio è del 34%)

LA DIFFRAZIONE DI BRAHG:



INTERFERENZA

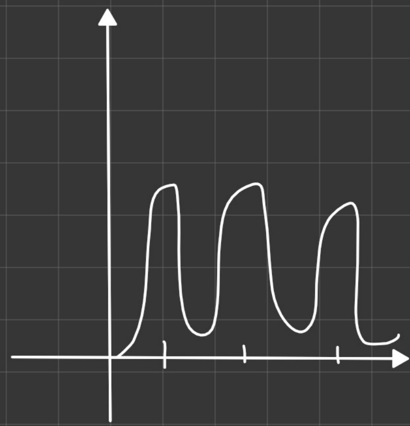
l'interferenza varia in base alla differenza di fase, che a sua volta varia in base alla differenza di cammino

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \Delta x$$

$$\frac{\Delta x}{2} = d \sin\theta \rightarrow \Delta x = 2 d \sin\theta$$

$$\Delta \varphi = n \cdot \cancel{2\pi} = \frac{\cancel{2\pi}}{\lambda} \cdot 2 d \sin\theta$$

$$\boxed{n\lambda = 2 d \sin\theta}$$



$$\frac{n\lambda}{2d} < 1$$

$d \simeq 100$ pm

$\lambda \cong 1$ pm $\cong 1$ nm

es.

1) Supponiamo di irradiare con una radiazione luminosa di energia $E = 3,5$ KeV
qual'è la minima distanza d che riusciamo a risolvere?

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} = 3,55 \text{ Å} = 0,355 \text{ nm}$$

$$d = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta)} \overset{n=1}{=} \frac{\lambda}{2} = 1,78 \text{ Å}$$

$\sin\theta = 1$

volendo la distanza minima vogliamo minimizzare

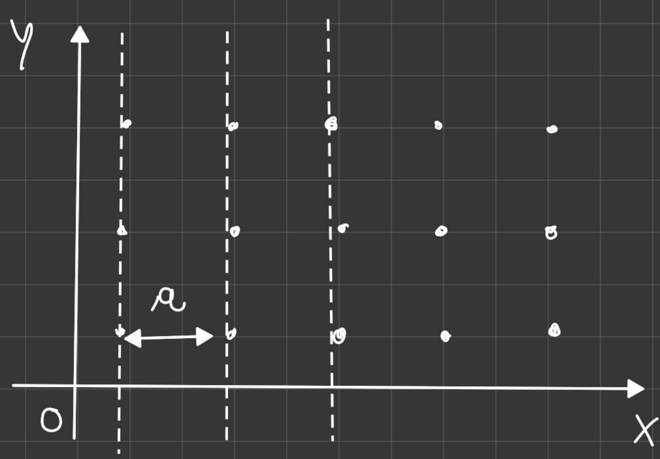
i piani con distanza maggiore di $\frac{\lambda}{2}$ danno il numeratore e massimizzare il denominatore

origine ad effetti

2) Per le famiglie di piani $\{1,0,0\}$, $\{1,1,0\}$, $\{1,2,0\}$ $\rightarrow$ quali sono i corrispondenti angoli θ per cui ci aspettiamo dei picchi di diffrazione?

$(a = 0{,}5\ nm) \rightarrow a =$ passo reticolare

$(E = 3{,}55\ KeV)$



$$\{1,0,0\} \rightarrow \{\underset{x}{1}, \underset{y}{\infty}, \underset{z}{\infty}\}$$

$$n\lambda = 2d \sin\theta \longrightarrow \sin\theta = \frac{n\lambda}{2d}$$

$$\boxed{\theta = \arcsin\left(\frac{2\lambda}{2d}\right)}$$

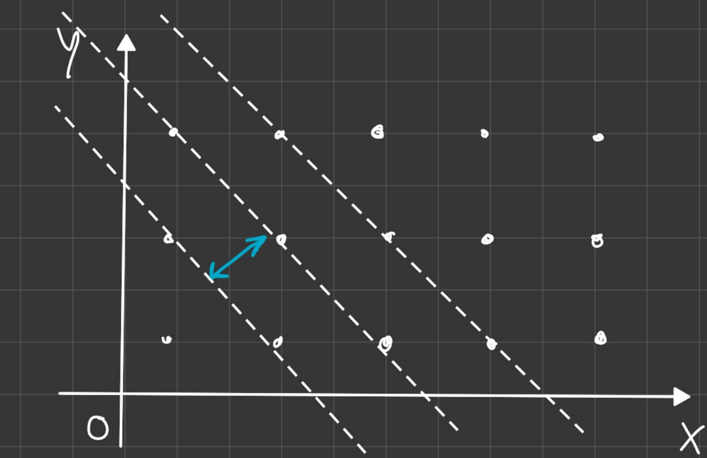
$n = 1 \rightarrow \theta = 20{,}79°$

$n = 2 \rightarrow \theta = 45{,}23°$

$$\{1,1,0\} \rightarrow \left(\underset{x}{1}, \underset{y}{1}, \underset{z}{\infty}\right) \rightarrow d_{110} = \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

$$\theta = \arcsin\left(\frac{n\lambda}{2d}\right)$$

$$n = 1 \rightarrow \theta = 30{,}13^\circ$$



$$\{1,2,0\} \rightarrow \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \infty\right) \qquad (2, 1, \infty)$$

$$d_{120} = a\sqrt{5}$$

$$n = 1 \rightarrow \theta = 52{,}53^\circ$$