

Prof. **PIETRO PATIMISCO**

**Dipartimento INTERATENO di Fisica**

**II PIANO – Stanza 233**

**pietro.patimisco@uniba.it**

**ORARIO DI RICEVIMENTO:**

**LUNEDI 09:00 – 11:00**

**GIOVEDI 10:30 – 12:30**

**PROGRAMMA DEL CORSO**

**SLIDE DELLE LEZIONI**

<http://polysense.poliba.it/index.php/solid-state-physics/>

**TESTI CONSIGLIATI**

N. W. Ashcroft and N. D. Mermin – **Solid State Physics**, Cengage.

C. Kittel – **Introduction To Solid State Physics**, John Wiley & Sons Inc.

S. M. Sze – **Physics of Semiconductor Devices**, Wiley-Interscience.

# SYLLABUS

## 1. Crystal Structure

**1.1** Periodic Array of Atoms. 1.1.1 Lattice Translation Vectors. 1.1.2 Primitive Lattice Cell. **1.2** Fundamental Types of Lattices. 1.2.1 Two-Dimensional Lattice Types. 1.2.2 Three-Dimensional Lattice Types. 1.2.3 Index Systems for Crystal Planes and Directions. **1.3** Simple Crystal Structures. 1.3.1 Sodium Chloride Structures. 1.3.2 Cesium Chloride Structures. 1.3.3 Diamond Structure. 1.3.4 Zinc Blende Structure. **1.4** Problems.

## 2. Reciprocal Lattice

**2.1** The Bragg Diffraction Law. **2.2** Reciprocal Lattice. 2.2.1 Fourier Analysis of Scattered Wave. 2.2.2 Reciprocal Lattice Vectors. 2.2.3 Diffraction Conditions. 2.2.4 Laue Equations. **2.3** Brillouin Zones. 2.3.1 Reciprocal Lattice to Cubic Lattice. 2.3.2 Reciprocal Lattice to Face-Centered Cubic Lattice. 2.3.3 Reciprocal Lattice to Body-Centered Cubic Lattice. **2.4** Fourier Analysis of the Basis. 2.4.1 Structure Factor of Body-Centered Cubic Lattice. 2.4.2 Structure Factor of Face-Centered Cubic Lattice. 2.4.3 Atomic Form Factor. **2.5** Problems.

## 3. Band Structures

**3.1** Introduction. **3.2** Free Electron Fermi Gas. 3.2.1 Single Electron Model. 3.2.2 Fermi Sphere. 3.2.3 Density of States. 3.2.4 Fermi Distribution **3.3** Non-Interacting Electrons in a Periodic Potential. 3.3.1 Definition of Periodic Potential. 3.3.2 Bloch Theorem. 3.3.3 Band Index. 3.3.4 Fermi Surface. 3.3.5 Kronig-Penney Model. 3.3.6 Energy Bands in 1D lattice. **3.4** Nearly Free Electrons in a Weak Periodic Potential. 3.4.1 General Approach to Schrodinger Equation. 3.4.2 Energy Levels near a single Bragg Plane. 3.4.3 Energy Bands in a 1D lattice. **3.5** Tight-Binding Model. 3.5.1 General Approach. 3.5.2 Energy Bands in a 1D Lattice. **3.6** Energy Bands in Three Dimensions. 3.6.1 Introduction. 3.6.2 High Symmetry Points. 3.6.3 Energy Bands in a Cubic Lattice. 3.6.4 Energy Bands in a Body-Centered Cubic Lattice. 3.6.5 Energy Bands in a Face-Centered Cubic Lattice. **3.7** Orthogonalized Plane-Wave. **3.8** Pseudopotential.

# SYLLABUS

## 4. Semiconductor Structures

**4.1** Introduction. **4.2** Silicon, Germanium and Gallium Arsenide. 4.2.1 Covalent Bonding. 4.2.2 Crystal Structure. 4.2.3 Energy Bands. 4.2.4 Band Gap. **4.3** Motion of Electron Wave in an Energy band. 4.3.1 Semiclassical Equations of Motion. 4.3.2 Dynamical Effective Mass. 4.3.3 Parabolic Approximation. **4.4** Carrier Concentration at Thermal Equilibrium. 4.4.1 Intrinsic Semiconductor. 4.4.2 Donors and Acceptors. 4.4.3 Extrinsic Carriers Concentration. **4.5** Problems.

## 5. Boltzmann's Transport Equation

**5.1** Introduction. **5.2** The Electron Distribution Function. 5.2.1 Equation of Motion. 5.2.2 Steady-state Transport. 5.2.3 Relaxation Time Approximation. **5.3** Electrical and Thermal Transport. 5.3.1 Isothermal Electrical Conductivity. 5.3.2 Thermo-electric Transport. 5.3.3 Thermal Conductivity. **5.4** Drift-Diffusion Model. 5.4.1. Diffusion Equation. 5.4.2. Continuity Equation. 5.4.3. Poisson Equation. **5.5** Solution of Finite Element Equations. 5.5.1 Introduction to Finite Element Method. 5.5.2 Discretization of the Domain. 5.5.3 Application of Finite Element Method: a Simple Example. 5.5.4 Physical Limitations on Numerical Drift-Diffusion Schemes.

## 6. Low Dimensional Systems

**6.1** Introduction. **6.2** 2D Quantum Heterostructures. 6.2.1 Finite Quantum Well. 6.2.2 Quantized Energy Levels. 6.2.3 Density of States. 6.2.4 Influence of Effective Mass. **6.3** 2D Graphene . 6.3.1 Crystal Structure. 6.3.2 Brillouin Zones. 6.3.3 Energy Bands. 6.3.4 Density of States. **6.4** Quantum Wire. 6.4.1 Energy Bands. 6.4.2. Density of States. 6.4.3. GaAs Nanowire: Subbands and Probability Density **6.5** Quantum dot. 6.5.1 Density of States. 6.5.2 Energy Levels in Spherical Potential Well. 6.5.3 Thermal vs Nonthermal Distribution. 6.5.4 Population Statistics: Rate Equations vs Random Population. **6.6.** Phosphorene and Black Phosphorus. 6.6.1. Crystal Structure. 6.6.2 Primitive Cell and Brillouin Zone. 6.6.3 Energy Bands and Density of States. 6.6.4 Field-Effect Transistors. 6.6.5 Photodetectors.

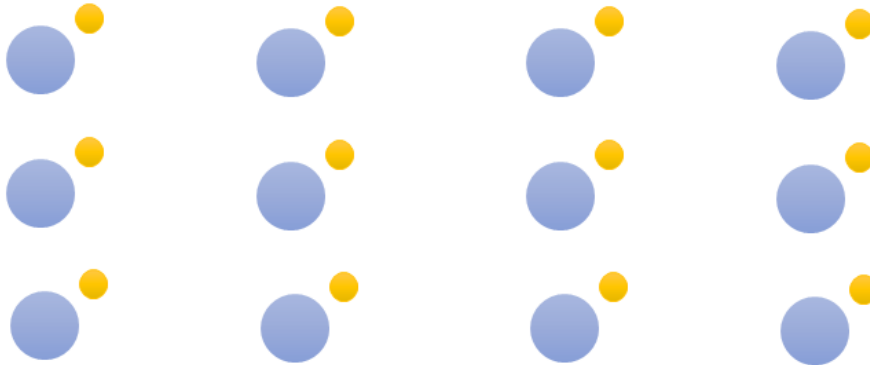
# **CAPITOLO 1**

## LA STRUTTURA CRISTALLINA

# 1.1 ORDINAMENTI PERIODICI DEGLI ATOMI

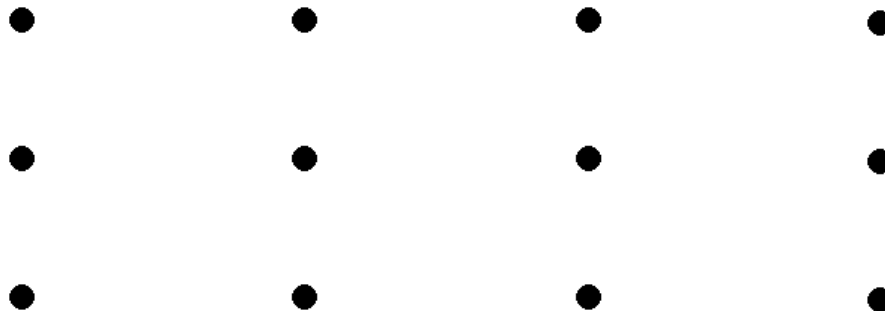
## 1.1.1 Vettori traslazionali reticolari

Un **crystallo ideale** è costituito dalla ripetizione infinita di gruppi identici di atomi.



Ogni gruppo viene chiamato **base** 

L'insieme di punti matematici ai quali viene associata la base è chiamato **reticolo**.



# 1.1 ORDINAMENTI PERIODICI DEGLI ATOMI

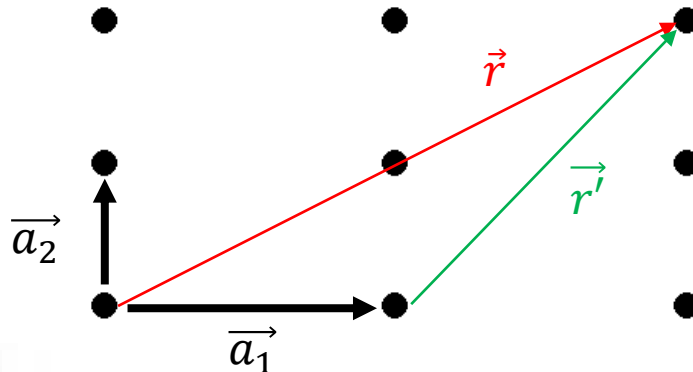
## 1.1.1 Vettori traslazionali reticolari

Il reticolo nello spazio tridimensionale può essere definito per mezzo di tre vettori di traslazione  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$ ,  $\vec{a}_3$ , così che la disposizione degli atomi nel cristallo appare la stessa quando è osservata dal punto  $\vec{r}$ , come da qualsiasi altro punto  $\vec{r}'$  traslato di un multiplo intero dei vettori  $\vec{a}_i$ :

$$\vec{r}' = \vec{r} + u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$

dove  $u_1$ ,  $u_2$ , e  $u_3$  sono interi arbitrari.

L'insieme dei punti  $\vec{r}'$  definiti da questa equazione per tutti i valori di  $u_1$ ,  $u_2$ , e  $u_3$  definisce il reticolo.



$$\vec{r} = 2\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2$$

$$\vec{r}' = \vec{a}_1 + 2\vec{a}_2$$



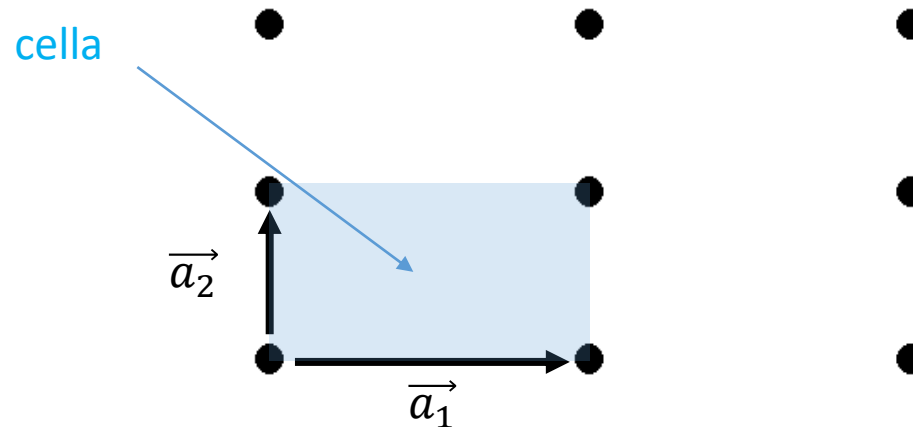
$$\vec{r}' - \vec{r} = -\vec{a}_1$$

# 1.1 ORDINAMENTI PERIODICI DEGLI ATOMI

## 1.1.1 Vettori traslazionali reticolari

Un reticolo così definito è detto **reticolo primitivo**. In un reticolo primitivo qualunque coppia di punti dai quali la disposizione degli atomi appare la stessa soddisfa sempre l'equazione precedente, con una scelta opportuna degli interi  $u_i$ .

Questa affermazione definisce i **vettori reticolari (o assi)  $\vec{a}_i$** . Questi vettori definiscono la cella di volume  $\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$  che possa essere utilizzata come mattone per costruire la struttura cristallina.



In genere i vettori traslazionali primitivi sono utilizzati per definire gli **assi cristallografici**.

# 1.1 ORDINAMENTI PERIODICI DEGLI ATOMI

## 1.1.2 Cella reticolare primitiva

Un cristallo può essere costruito aggiungendo a ciascun punto del reticolo una base (i punti del reticolo sono ovviamente costruzioni matematiche).

Ogni base in un cristallo assegnato è identica a qualunque altra per composizione, struttura e orientazione.

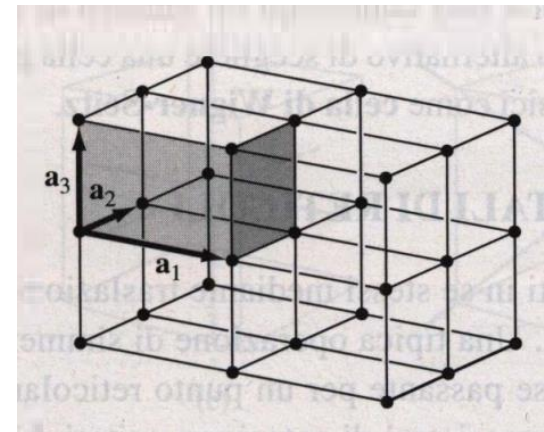
Il numero di atomi nella base può essere uno o più di uno.

La posizione del centro dell'atomo  $j$  della base relativamente al punto reticolare associato è:

$$\vec{r}_j = x_j \vec{a}_1 + y_j \vec{a}_2 + z_j \vec{a}_3$$

**ESEMPIO:** Il parallelepipedo definito dagli assi  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$ ,  $\vec{a}_3$  viene chiamato **cella primitiva**.

La cella primitiva riempirà l'intero spazio a seguito della ripetizione di opportune operazioni di traslazione del cristallo.





# 1.1 ORDINAMENTI PERIODICI DEGLI ATOMI

## 1.1.2 Cella reticolare primitiva

Vi è sempre almeno un punto reticolare per cella primitiva.

Se la cella primitiva contiene un solo punto reticolare, la si identifica con **cella unitaria**. I vettori reticolari che individuano una cella unitaria sono vettori reticolari primitivi.

Se la cella primitiva contiene più punti reticolari, la si identifica con **cella convenzionale**. I vettori reticolari che individuano una cella convenzionale non sono vettori primitivi.

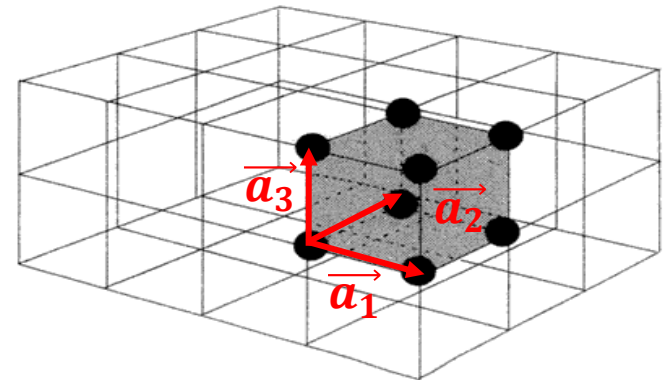
Per qualunque reticolo, una cella unitaria ha sempre il volume più piccolo di tutte le celle convenzionali.

Esempio di cella unitaria: cella primitiva parallelepipedica con punti reticolari in ciascuno degli otto vertici. Ogni punto reticolare è condiviso da otto celle, pertanto il numero totale di punti reticolari nella cella è pari a:

$$N = 8 \times \frac{1}{8} = 1$$

Il volume del parallelepipedo con assi reticolari primitivi  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$ ,  $\vec{a}_3$  è:

$$V_c = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$



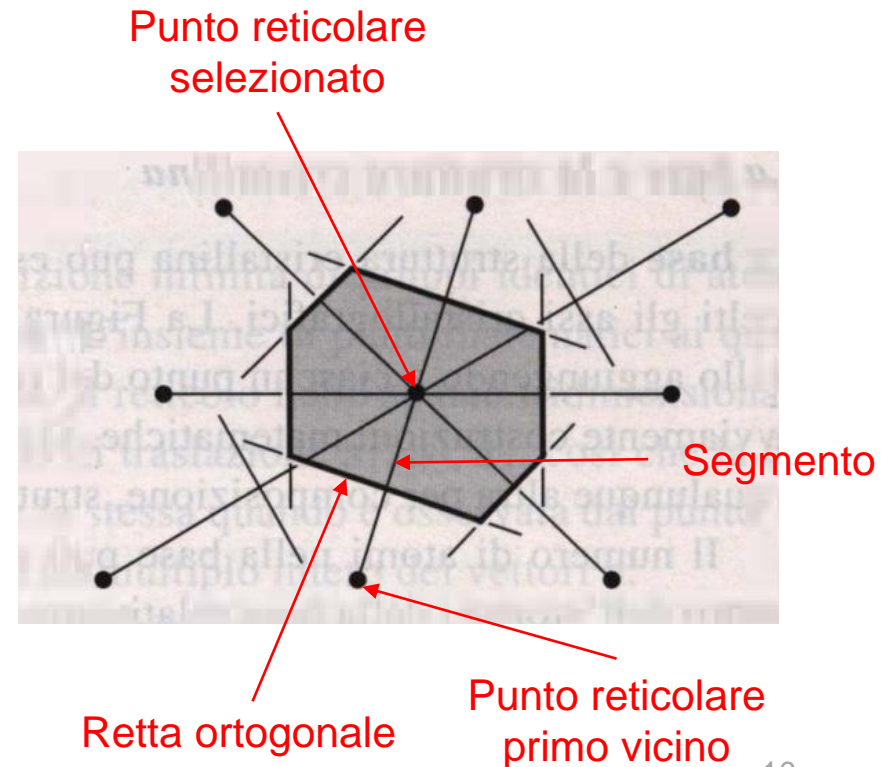
# 1.1 ORDINAMENTI PERIODICI DEGLI ATOMI

## 1.1.2 Cella reticolare primitiva

Un modo alternativo per scegliere una cella unitaria è data dalla cella di **Wigner-Seitz**. La cella di Wigner-Seitz è definita come la regione di spazio, costruita intorno ad un punto reticolare a partire da quei punti che sono più vicini a quel punto rispetto a qualunque altro punto reticolare.

Come si costruisce la cella di Wigner-Seitz?

- Consideriamo un reticolo e prendiamo un generico punto reticolare.
- Uniamo il punto reticolare selezionato con tutti i punti reticolari primi vicini. Per ogni segmento tracciamo una retta ortogonale che divide a metà il segmento.
- L'area individuata dall'intersezione delle rette rappresenta la cella di Wigner Seitz.



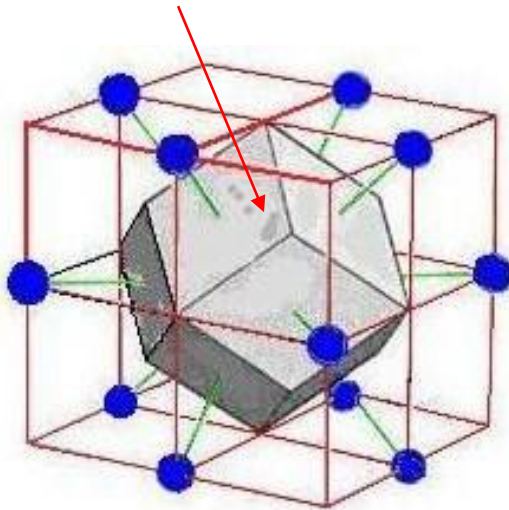
# 1.1 ORDINAMENTI PERIODICI DEGLI ATOMI

## 1.1.2 Cella reticolare primitiva

Nel caso di un reticolo 3D, il concetto resta identico.

Costruiti i segmenti che uniscono i primi vicini di un punto reticolare selezionato, la cella di Wigner-Seitz è individuata dall'intersezione tra i piani che bisecano ortogonalmente i segmenti.

Piano ortogonale al segmento



Cella di Wigner-Seitz



Reticolo cristallino costruito dalla ripetizione periodica della cella di Wigner-Seitz

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

Abbiamo visto che i reticoli cristallini possono essere trasformati in se stessi mediante traslazioni reticolari. Le traslazioni non sono le uniche operazioni di simmetria.

Un'altra operazione di simmetria per ricostruire un reticolo è rappresentata dalla rotazione attorno a un asse passante per un punto reticolare.

Si definisce **ordine dell'asse** il numero  $n$  di volte in cui una configurazione indistinguibile da quella di partenza viene riprodotta durante una rotazione di  $2\pi$ .

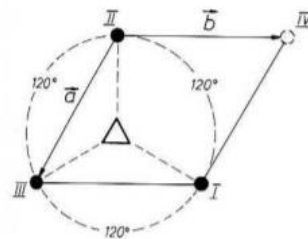
$n = 1$  (**asse unitario**) trasformano il reticolo in se stesso con rotazioni di  $2\pi$

$n = 2$  (**asse binario**), trasformano il reticolo in se stesso con rotazioni di  $\pi$

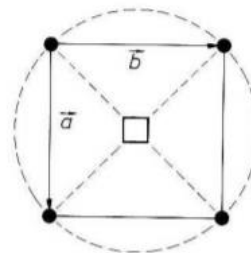
$n = 3$  (**asse ternario**), trasformano il reticolo in se stesso con rotazioni di  $2\pi/3$

$n = 4$  (**asse quaternario**), trasformano il reticolo in se stesso con rotazioni di  $\pi/2$

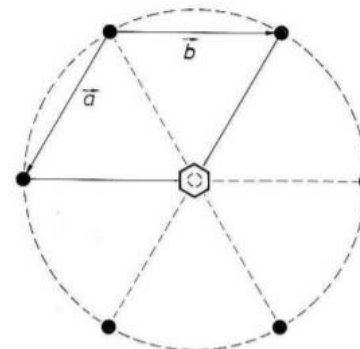
$n = 6$  (**asse senario**), trasformano il reticolo in se stesso con rotazioni di  $\pi/3$



asse ternario



asse quaternario



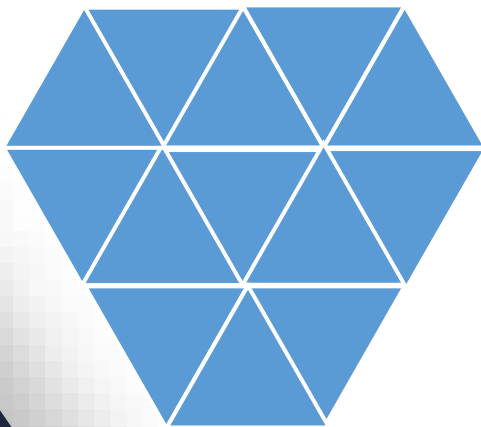
asse senario

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

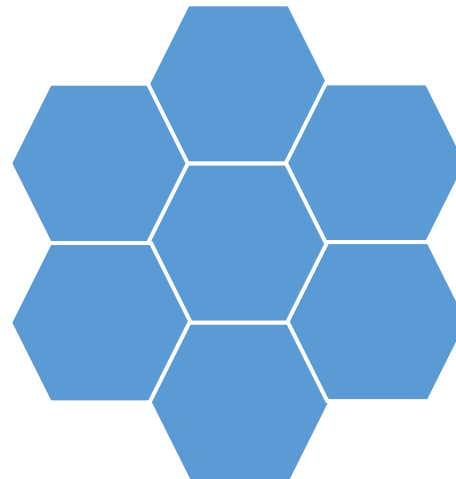
Dato che questi elementi devono essere compatibili con la simmetria di traslazione, le possibili rotazioni possono essere solo quelle elencate.

Ciò risulta chiaro se si considera che può ricoprire un pavimento con piastrelle tutte uguali a forma di parallelogramma, di rombo o di rettangolo (asse binario), di triangolo equilatero (asse ternario), di quadrato (asse quaternario) e di esagono (asse senario).

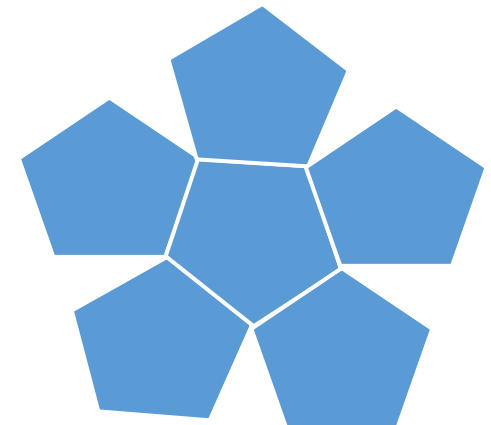
Non si può ricoprire un pavimento con piastrelle pentagonali o a forma di poligono regolare a più di sei lati, e questo significa che non possono esistere in un cristallo assi di rotazione quinari o di ordine superiore a 6.



Triangoli



Esagoni

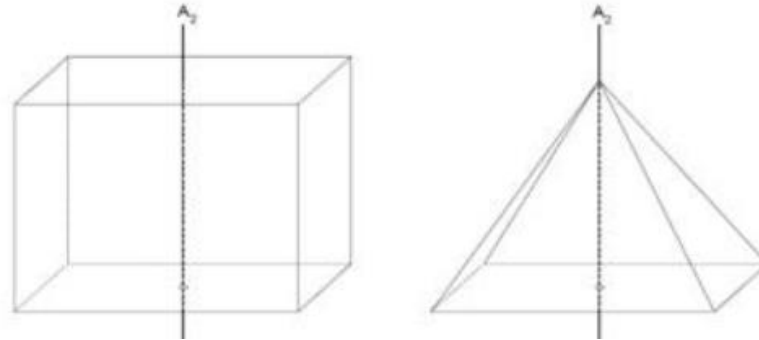


Pentagoni

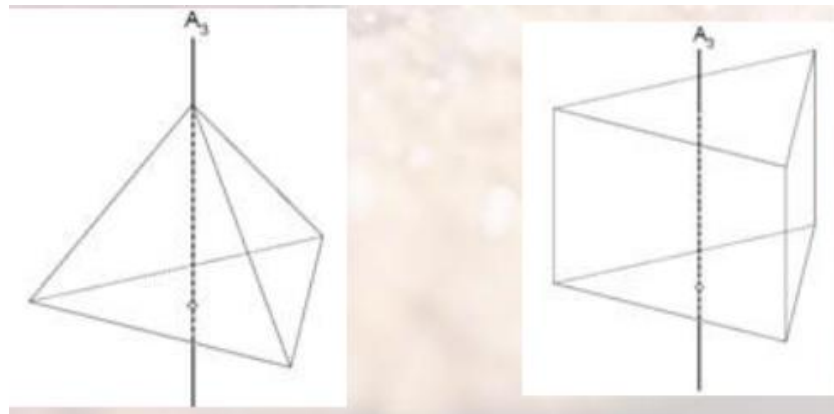
# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

Nello spazio tridimensionale, la definizione degli assi di rotazione rimane la stessa.

**Asse binario.** Il solido si ricopre due volte in  $360^\circ$  di rotazione sull'asse (una ogni  $180^\circ$ ). Esempi: piramide a base rettangolare o a base rombica, e prisma retto a basi opposte rettangolari o rombiche

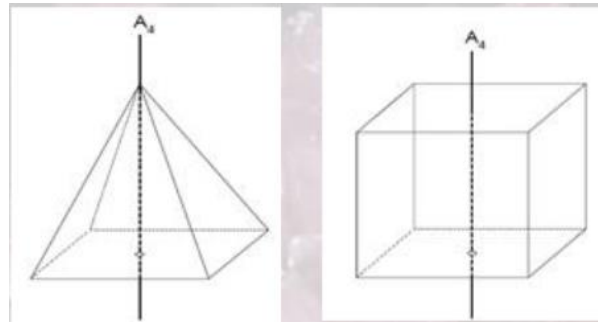


**Asse ternario.** Il solido si ricopre tre volte in  $360^\circ$  di rotazione sull'asse (una ogni  $120^\circ$ ). Esempi: piramide a base triangolare equilatera, e prisma retto a basi opposte triangolari equilateri.

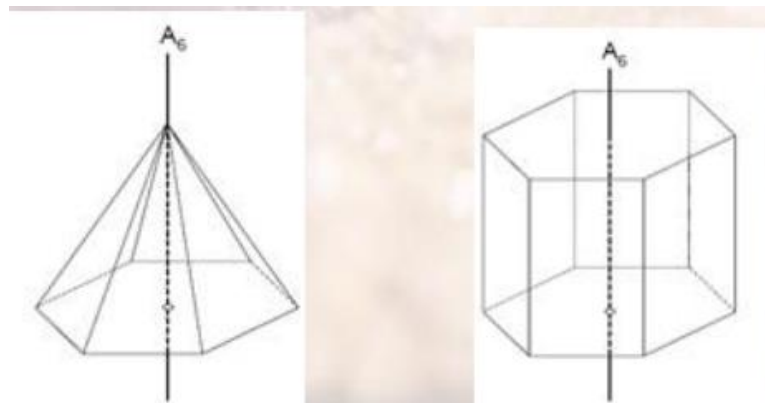


# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

**Asse quaternario.** Il solido si ricopre quattro volte in  $360^\circ$  di rotazione sull'asse (una ogni  $90^\circ$ ). Esempi: piramide a base quadrata o prisma retto a basi opposte quadrate



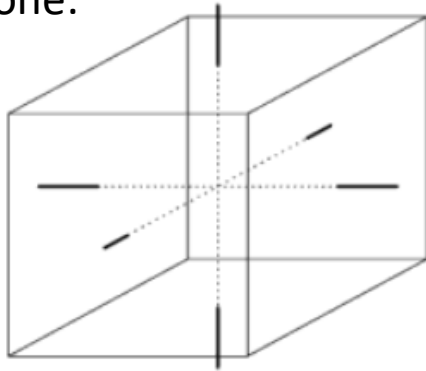
**Asse senario.** Il solido si ricopre sei volte in  $360^\circ$  di rotazione sull'asse (una ogni  $60^\circ$ ). Esempi: piramide a base esagonale regolare, e prisma retto a basi opposte esagonali regolari.



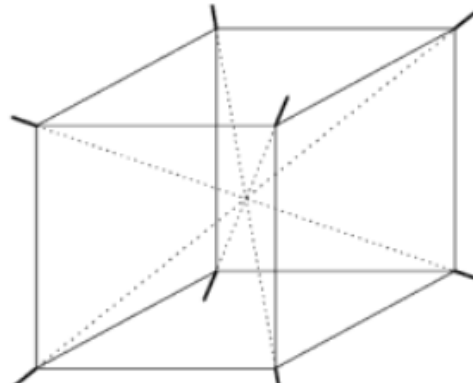
# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

Una cella primitiva può avere più assi di rotazione.

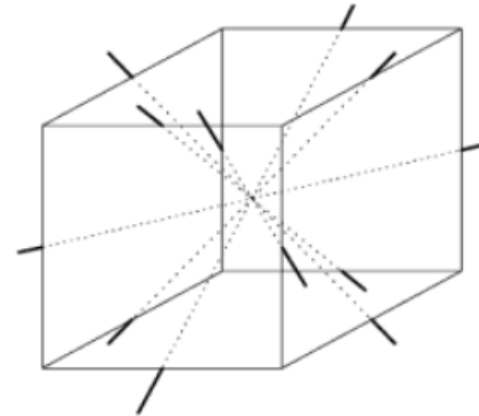
Se consideriamo una **cella primitiva cubica**, è facile individuare i seguenti assi di rotazione:



tre assi quaternari



quattro assi ternari



sei assi binari

Assieme alle rotazioni e alle traslazioni, ci sono altre operazioni di simmetria:

- **Riflessioni speculari** su un piano passante per un punto reticolare.
- **Inversione** è costituita da una rotazione di  $\pi$  seguita dalla riflessione in un piano normale all'asse di rotazione

Per **gruppo puntuale** di un reticolo si intende l'insieme delle operazioni di simmetria che, se applicate attorno a un punto reticolare, trasformano il reticolo in se stesso.



# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

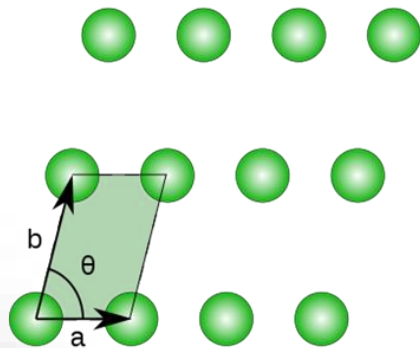
## 1.2.1 Modelli di reticoli bidimensionali

Un reticolo bidimensionale che ha una cella unitaria individuata da due vettori traslazionali primitivi  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  prende il nome di **Reticolo di Bravais**.

Alcuni reticoli possono essere descritti come sovrapposizione di due o più reticoli di Bravais.

In due dimensioni esistono cinque reticoli di Bravais:

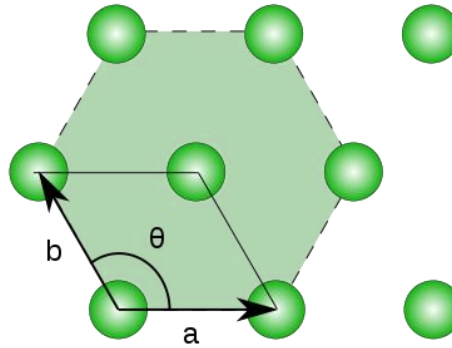
### Reticolo Obliquo



$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$$

$$\theta \neq 90^\circ$$

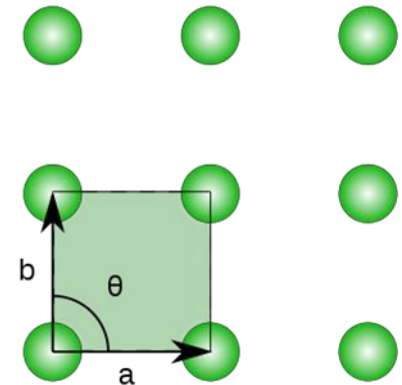
### Reticolo Esagonale



$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$$

$$\theta = 120^\circ$$

### Reticolo Quadrato



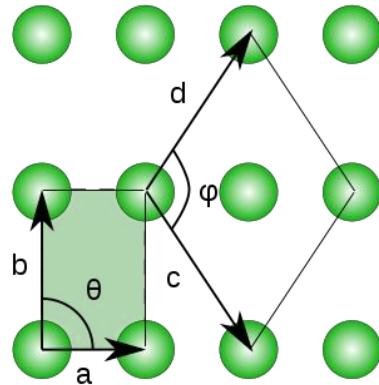
$$|\vec{a}| = |\vec{b}|$$

$$\theta = 90^\circ$$

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

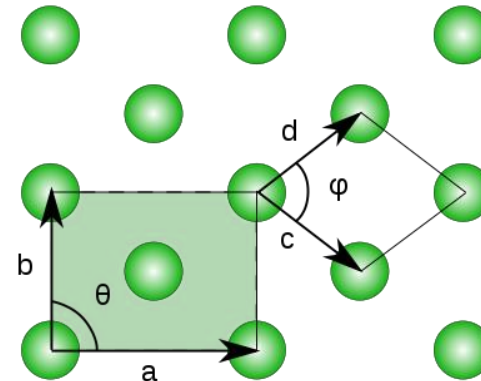
## 1.2.1 Modelli di reticoli bidimensionali

Reticolo Rettangolare



$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \quad \text{oppure} \quad |\vec{c}| = |\vec{d}|$$
$$\theta = 90^\circ \quad \varphi \neq 90^\circ$$

Reticolo Rettangolare centrato



$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \quad \text{oppure} \quad |\vec{c}| = |\vec{d}|$$
$$\theta = 90^\circ \quad \varphi \neq 90^\circ$$

Entrambi questi reticoli di Bravais possono essere individuati da due coppie distinte di vettori reticolari ( $\vec{a}$  e  $\vec{b}$ ) e ( $\vec{c}$  e  $\vec{d}$ ).

Per il **Reticolo Rettangolare**, la cella primitiva individuata dai vettori  $\vec{c}$  e  $\vec{d}$  contiene due atomi, quindi non è una cella unitaria, ma una cella convenzionale.

Stesso discorso per la cella primitiva individuata dai vettori  $\vec{a}$  e  $\vec{b}$  per il **Reticolo Rettangolare centrato**.

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

In tre dimensioni, i reticoli vengono raggruppati in **sistemi cristallini**.

Ogni sistema cristallino accomuna le strutture cristalline che presentano **una cella convenzionale** (quindi non unitaria) **della stessa forma** (ad esempio cubica, tetragonale o esagonale).

Si hanno in totale 7 sistemi cristallini.

Sistema cristallino	Numero di reticoli
Cubico	3
Ortorombico	4
Tetragonale	2
Monoclino	2
Triclino	1
Trigonale	1
Esagonale	1

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

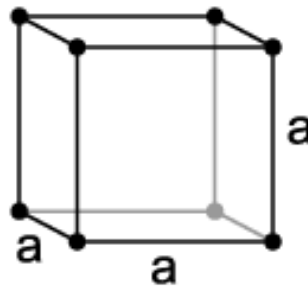
## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Nel sistema cristallino cubico vi sono tre reticoli di Bravais:

- Reticolo cubico semplice (sc)
- Reticolo cubico a corpo centrato (bcc)
- Reticolo cubico a facce centrate (fcc)

Il **Reticolo Cubico Semplice** consiste in un punto del reticolo per ogni vertice del cubo.



I vettori primitivi sono:

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

Volume della cella cubica

$$V_c = \vec{a} \cdot (\vec{a} \times \vec{a}) = a^3$$

La cella individuata da questi tre vettori costituisce la cella unitaria

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

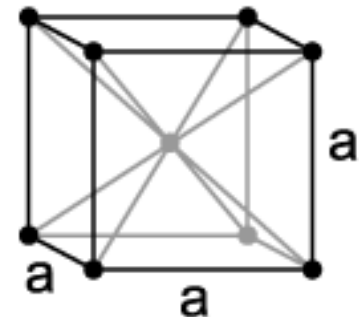
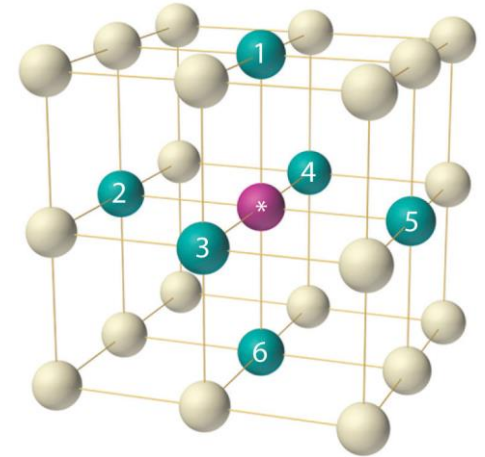
Infatti, ogni atomo posto su un punto del reticolo è condiviso equamente tra otto cubi adiacenti per cui la cella unitaria contiene in totale un atomo

$$N = 8 \times \frac{1}{8} = 1$$

Il numero di primi vicini per ogni atomo è pari a 6

Il **Reticolo cubico a corpo centrato** (bcc) consiste in un atomo per ogni vertice del cubo più un atomo al centro del cubo.

Qualunque atomo si prenda, il numero di primi vicini è 8. Se si prende l'atomo centrale, gli otto primi vicini sono gli atomi ai vertici; se si prende l'atomo al vertice, gli otto primi vicini sono gli atomi centrali delle otto celle che contengono l'atomo al vertice scelto.



# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

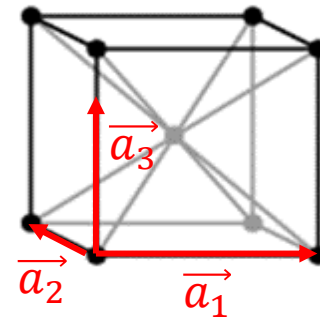
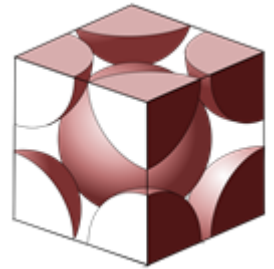
La cella possiede un atomo al centro più otto ottavi di atomo in corrispondenza degli spigoli, quindi in totale due atomi per cella.

$$N = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$$

Quali sono i vettori primitivi? Trattandosi di una cella a geometria cubica, si è portati a pensare che siano coincidenti con tre spigoli ortogonali, come nel reticolo cubico semplice.

In realtà non è così. Per definizione, una cella unitaria deve contenere un solo punto reticolare: se definiamo la cella primitiva con i vettori  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$  come in figura, tale cella avrà due punti reticolari. Quindi non può essere una cella unitaria, ma identificherà una **cella convenzionale**.

Per un reticolo cubico semplice, la cella convenzionale coincide con la cella unitaria. In genere una cella convenzionale ha delle relazioni più ovvie con le operazioni di simmetria puntuale rispetto a quelle di una cella unitaria.



# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

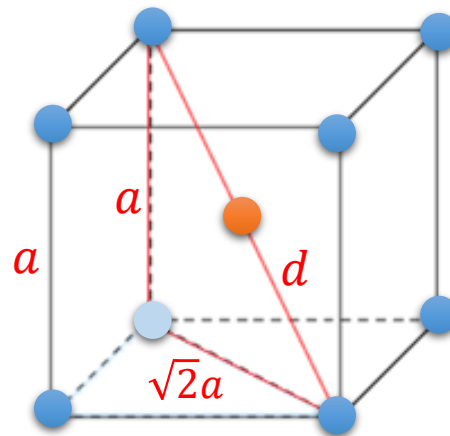
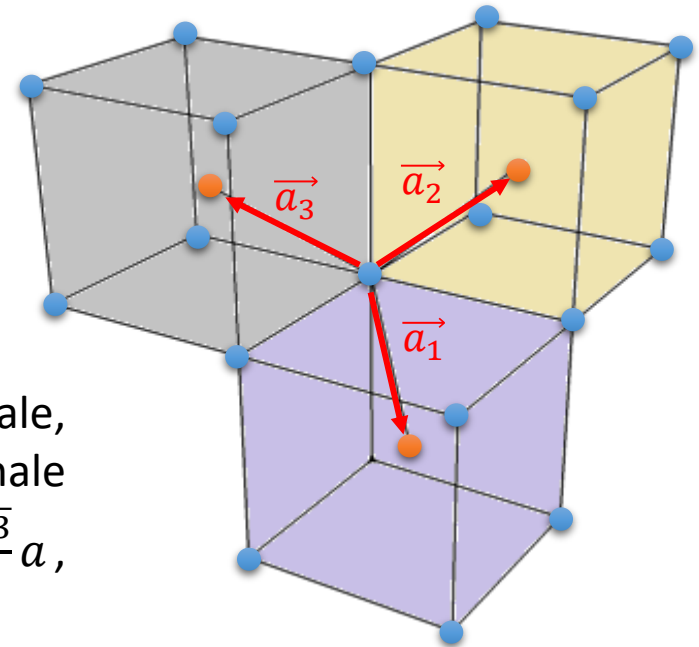
## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Come costruiamo la cella unitaria?

Se prendiamo un atomo ad uno qualunque dei vertici, i suoi primi vicini sono gli atomi al centro della cella convenzionale.

Detta  $a$  la lunghezza del lato della cella convenzionale, la distanza dai primi vicini sarà pari a metà diagonale della cella convenzionale cubica, ovvero  $d = \frac{\sqrt{3}}{2} a$ , minore di  $a$ .



I vettori  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$  che connettono il punto reticolare all'origine ai punti reticolari corpo centrati costituiscono i vettori primitivi della cella cubica corpo centrato.

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

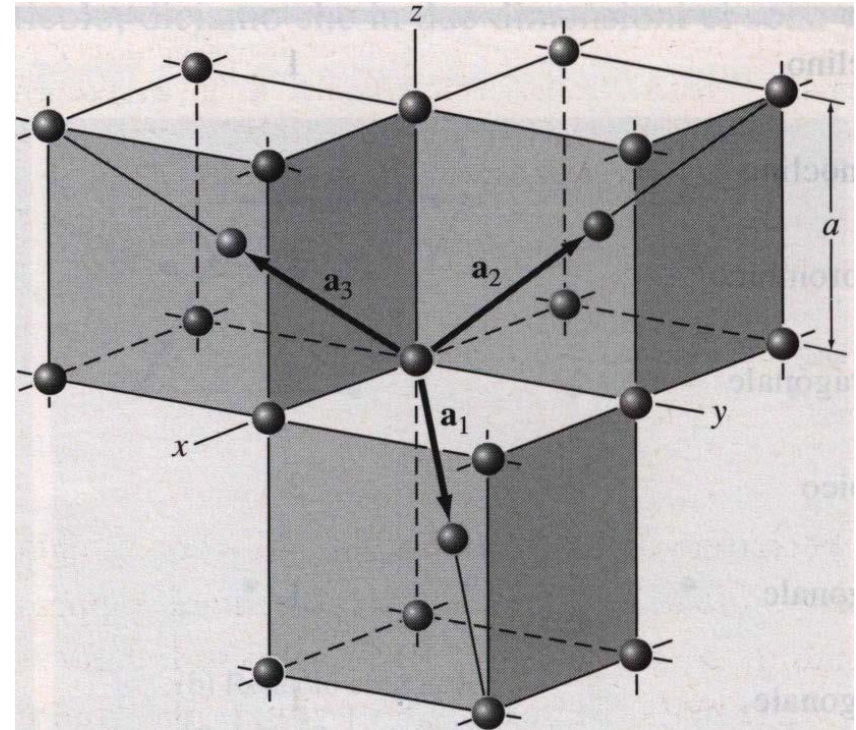
### Sistema cristallino cubico

I vettori primitivi  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$  possono essere espressi in termini dello spigolo  $a$  della cella convenzionale, fissando un opportuno sistema di riferimento cartesiano  $xyz$  centrato sul punto reticolare considerato.

Detti  $\hat{u}_x$ ,  $\hat{u}_y$  e  $\hat{u}_z$  i versori degli assi cartesiani, e considerato che la proiezione della diagonale di un cubo su una faccia coincide con la diagonale della faccia stessa, è facile verificare che:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\hat{u}_x + \frac{a}{2}\hat{u}_y - \frac{a}{2}\hat{u}_z \quad \vec{a}_2 = -\frac{a}{2}\hat{u}_x + \frac{a}{2}\hat{u}_y + \frac{a}{2}\hat{u}_z$$

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





# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Determiniamo il volume della cella primitiva unitaria:

$$V_c = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

Eseguiamo il prodotto vettoriale:

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} \widehat{u}_x & \widehat{u}_y & \widehat{u}_z \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{pmatrix} = \frac{a^2}{2} \widehat{u}_x - \left( -\frac{a^2}{2} \widehat{u}_y \right) = \frac{a^2}{2} \widehat{u}_x + \frac{a^2}{2} \widehat{u}_y$$

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \widehat{u}_x + \frac{a}{2} \widehat{u}_y - \frac{a}{2} \widehat{u}_z$$

$$\vec{a}_2 = -\frac{a}{2} \widehat{u}_x + \frac{a}{2} \widehat{u}_y + \frac{a}{2} \widehat{u}_z$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2} \widehat{u}_x - \frac{a}{2} \widehat{u}_y + \frac{a}{2} \widehat{u}_z$$

E poi il prodotto scalare:

$$V_c = \left( \frac{a}{2} \widehat{u}_x + \frac{a}{2} \widehat{u}_y - \frac{a}{2} \widehat{u}_z \right) \cdot \left( \frac{a^2}{2} \widehat{u}_x + \frac{a^2}{2} \widehat{u}_y \right) = \frac{a^3}{4} + \frac{a^3}{4} = \frac{a^3}{2}$$

Essendo  $a^3$  il volume della cella convenzionale, il volume della cella primitiva unitaria è la metà del volume della convenzionale.

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

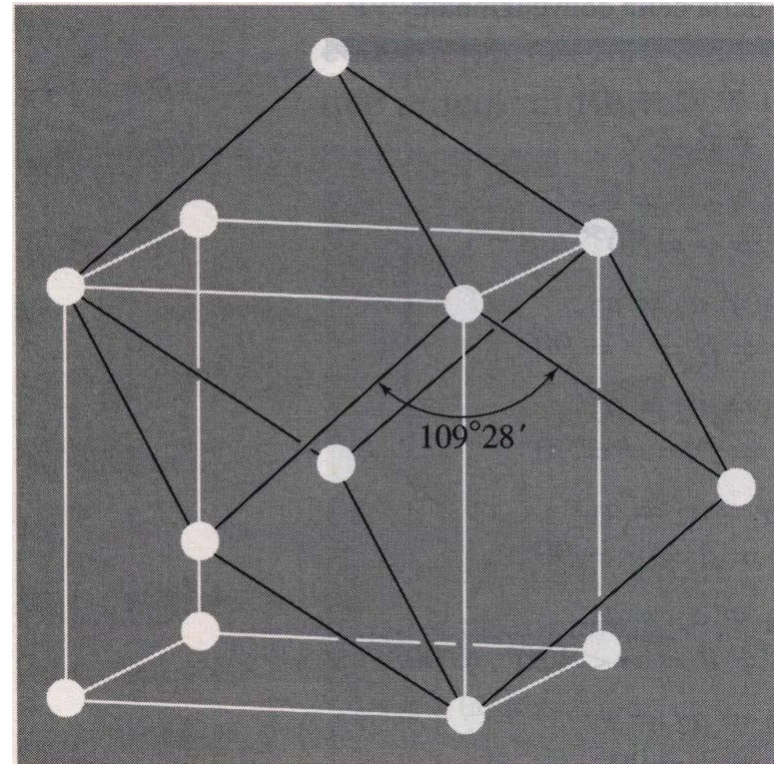
## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Affinché si tratti di una cella unitaria, occorre verificare che essa contenga un solo punto reticolare. Per far ciò, occorre costruire il romboedro generato dai vettori primitivi, ovvero il parallelepipedo avente come facce sei rombi uguali:

In Figura sono raffigurati sia la cella convenzionale di un reticolo cubico a corpo centrato (segmenti chiari) che la cella unitaria (segmenti scuri). La cella unitaria è un romboedro di spigolo  $d = \frac{\sqrt{3}}{2} a$

Nella cella primitiva unitaria, ogni atomo posto su un punto del reticolo è condiviso equamente tra otto romboedri adiacenti, per cui la cella unitaria contiene in totale un solo atomo.

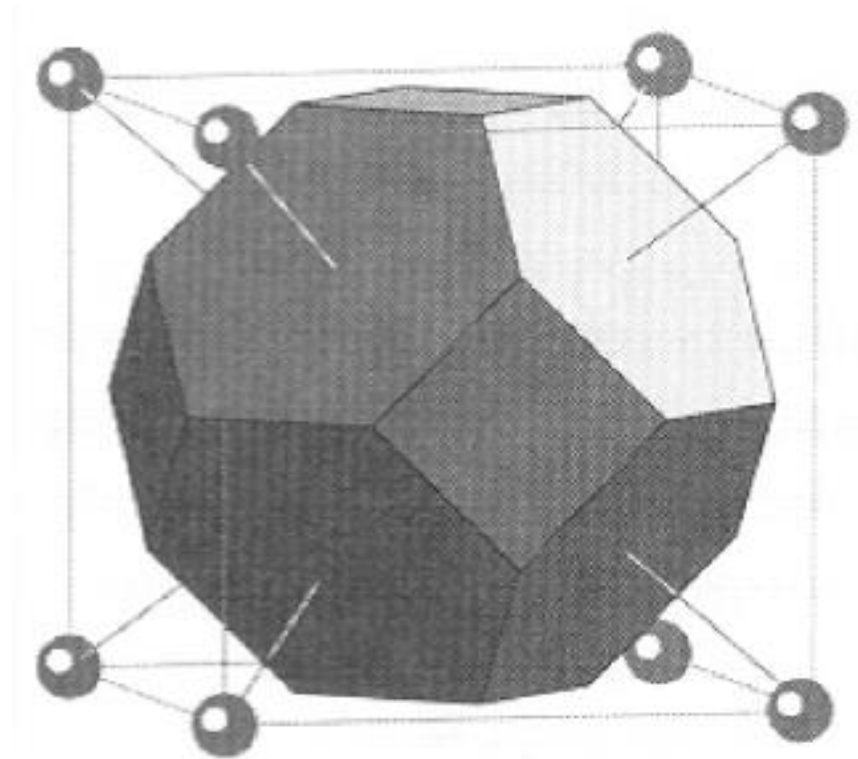


# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Questa è la cella di Wigner-Seitz, costruita prendendo come punto reticolare il punto corpo centrale della cella convenzionale e considerando quelli ai vertici come primi vicini del punto corpo centrale.

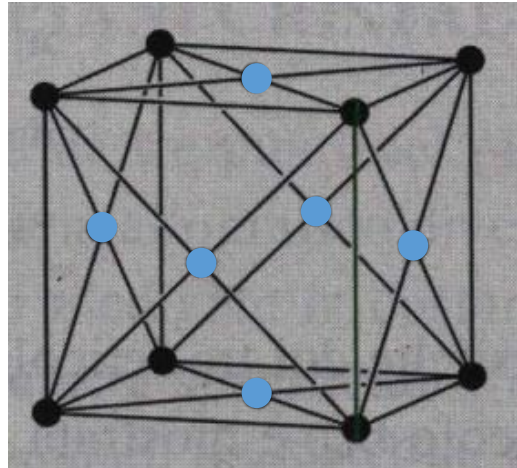


# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Il **Reticolo cubico a facce centrato** (fcc) consiste in un atomo per ogni vertice del cubo più un atomo al centro di ogni faccia del cubo.



Prendendo in considerazione la cella convenzionale cubica come rappresentata in Figura, si osserva che la cella possiede otto ottavi di atomo in corrispondenza degli spigoli, più 6 mezzi atomi in corrispondenza delle facce, quindi in totale sono 4 atomi per cella convenzionale.

$$N = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

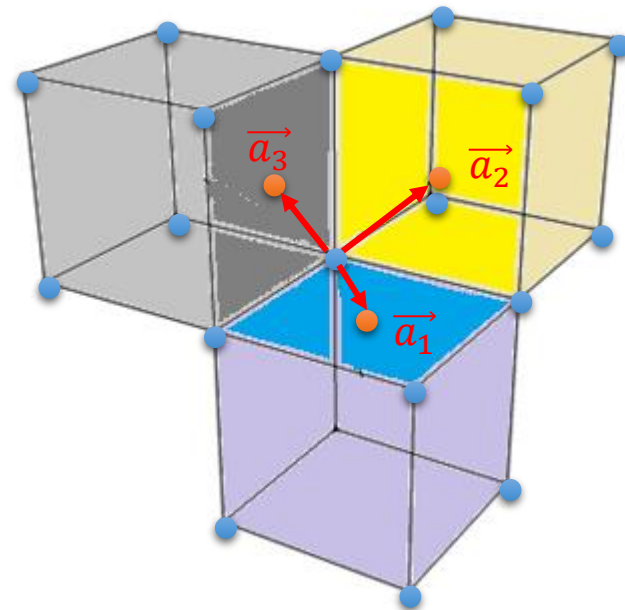
## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Il numero di primi vicini di ciascun atomo è 12. Se si prende un atomo al vertice, i 12 primi vicini sono gli atomi sulle facce delle celle convenzionali che lo contengono; se si prende un atomo sulla faccia, i 12 primi vicini sono i 4 al vertice che distano  $\frac{\sqrt{2}}{2}a$  e gli otto atomi centrali delle due celle convenzionali che lo contengono, che distano sempre  $\frac{\sqrt{2}}{2}a$

Come per il reticolo bcc, la cella convenzionale non è una cella unitaria.

La cella unitaria è individuata dai vettori primitivi  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$  che connettono il punto reticolare all'origine con i punti reticolari al centro delle facce.



# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

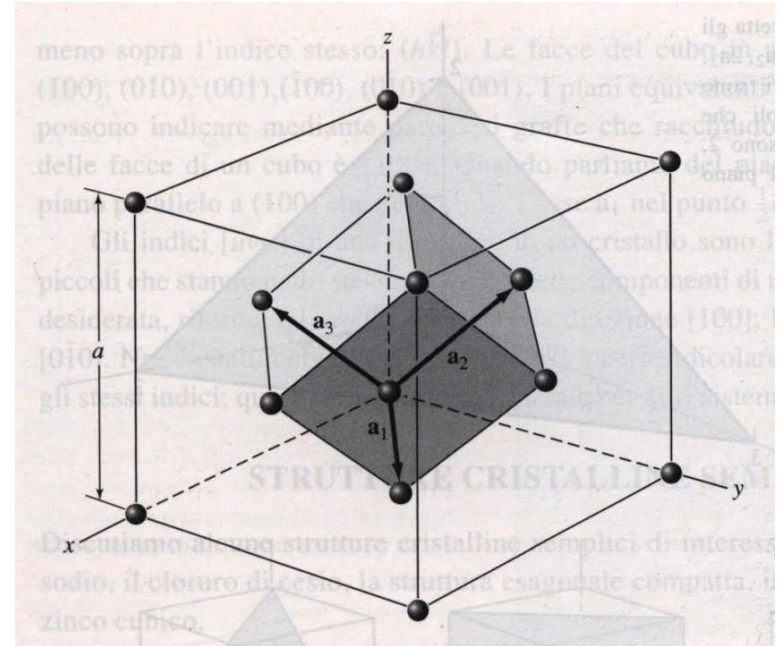
## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

I vettori primitivi  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$  possono essere espressi in termini dello spigolo  $a$  della cella convenzionale, fissando un opportuno sistema di riferimento cartesiano  $xyz$  centrato sul punto reticolare considerato, come nel caso del reticolo bcc

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\hat{u}_x + \frac{a}{2}\hat{u}_y \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{u}_y + \frac{a}{2}\hat{u}_z$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}\hat{u}_x + \frac{a}{2}\hat{u}_z$$



E' facile vedere subito che la cella unitaria è un romboedro di spigolo di lunghezza pari a  $d = \frac{\sqrt{2}}{2}a$

Nella cella primitiva unitaria, ogni atomo posto su un punto del reticolo è condiviso equamente tra otto romboedri adiacenti, per cui la cella unitaria contiene in totale un solo atomo.

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Determiniamo il volume della unitaria:

$$V_c = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

Eseguiamo il prodotto vettoriale:

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} \widehat{u}_x & \widehat{u}_y & \widehat{u}_z \\ 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{a^2}{4} \widehat{u}_x - \left( -\frac{a^2}{4} \widehat{u}_y \right) + \left( -\frac{a^2}{4} \widehat{u}_z \right) = \frac{a^2}{4} \widehat{u}_x + \frac{a^2}{4} \widehat{u}_y - \frac{a^2}{4} \widehat{u}_z$$

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2} \widehat{u}_x + \frac{a}{2} \widehat{u}_y \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2} \widehat{u}_y + \frac{a}{2} \widehat{u}_z \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2} \widehat{u}_x + \frac{a}{2} \widehat{u}_z \end{aligned}$$

E poi il prodotto scalare:

$$V_c = \left( \frac{a}{2} \widehat{u}_x + \frac{a}{2} \widehat{u}_y \right) \cdot \left( \frac{a^2}{4} \widehat{u}_x + \frac{a^2}{4} \widehat{u}_y - \frac{a^2}{4} \widehat{u}_z \right) = \frac{a^3}{8} + \frac{a^3}{8} = \frac{a^3}{4}$$

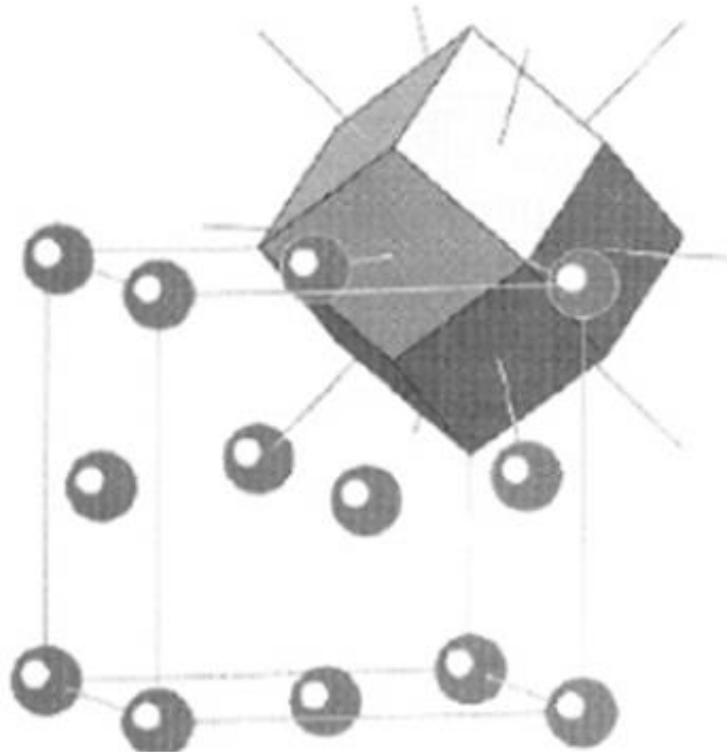
Essendo  $a^3$  il volume della cella convenzionale, il volume della cella primitiva unitaria è un quarto del volume della convenzionale.

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

### Sistema cristallino cubico

Questa è la cella di Wigner-Seitz, costruita prendendo come punto reticolare lo spigolo della cella convenzionale e considerando i primi vicini del punto corpo centrale.





# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.2 Modelli di reticoli tridimensionali

Tabella riassuntiva dei tre reticoli del sistema cristallino cubico

	Semplice	A corpo centrato	A facce centrate
<b>Numero primi vicini</b>	6	8	12
<b>Distanza tra primi vicini</b>	$a$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$
<b>Cella convenzionale</b>			
<b>Volume</b>	$a^3$	$a^3$	$a^3$
<b>Punti reticolari per cella</b>	1	2	4
<b>Cella unitaria</b>			
<b>Forma</b>	Cubo di lato $a$	Romboedro di spigolo $\frac{\sqrt{3}}{2}a$	Romboedro di spigolo $\frac{\sqrt{2}}{2}a$
<b>Volume</b>	$a^3$	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.3 Sistema di indicizzazione dei piani cristallini

Un piano cristallino è individuato all'interno di un reticolo a partire da una terna di numeri interi (**indici di Miller**) individuati a partire dalle loro intersezioni con i vettori reticolari  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$ .

I vettori reticolari  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$  possono essere quelli di una cella primitiva unitaria o no.

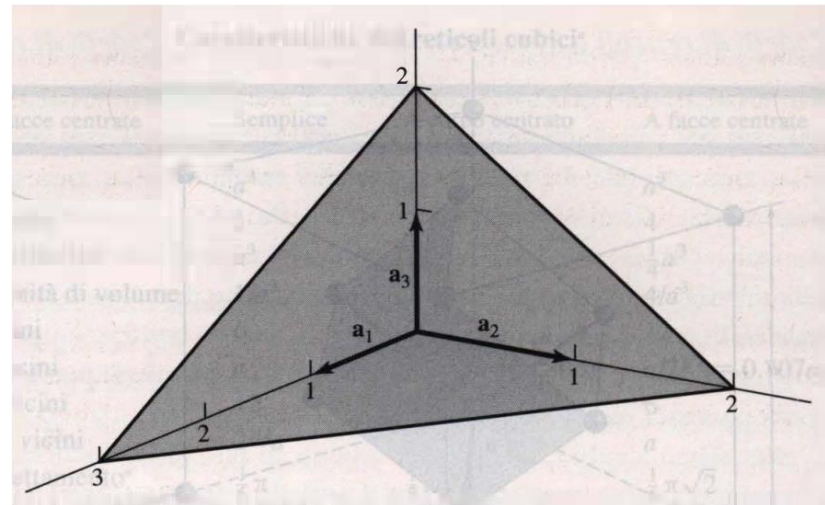
Il criterio che si utilizza è il seguente:

Consideriamo tra vettori reticolari e supponiamo di voler individuare gli indici di Miller del piano individuato in figura:

1. Trovare le intercette sugli assi reticolari e riportarli come terna. Se l'intercetta è nulla, riportare  $\infty$

Nel nostro caso

(3 2 2)



# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.3 Sistema di indicizzazione dei piani cristallini

2. Fare i reciproci di questi numeri. Assumere che il reciproco di  $\infty$  sia zero.

Nel nostro caso

$$\left( \frac{1}{3} \quad \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right)$$

(3 2 2)

3. Fare il minimo comune multiplo tra i reciproci e prendere i numeratori:

Nel nostro caso

$$(2 \ 3 \ 3)$$

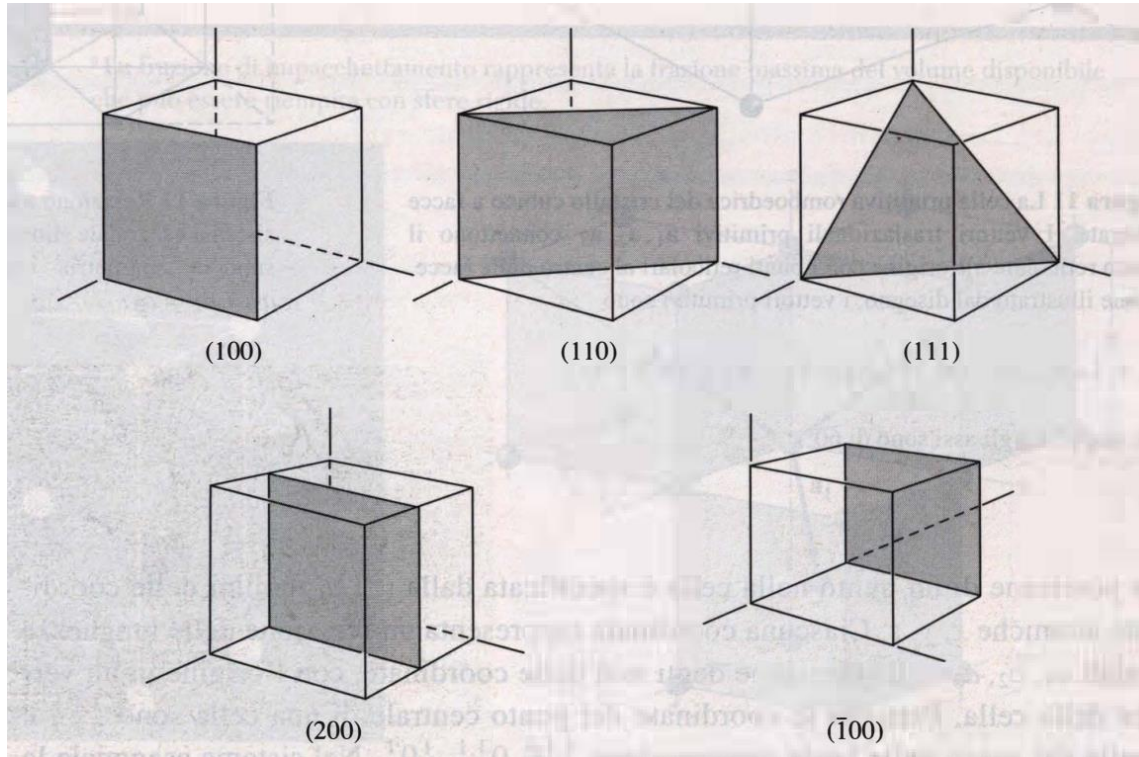
Il risultato ottenuto costituiscono gli indici di Miller ( $hkl$ ) del piano.

Se un piano taglia un asse lungo il lato negativo rispetto all'origine, l'indice corrispondente è negativo e viene indicato ponendo un segno meno sopra l'indice stesso ( $h\bar{k}l$ ).

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.3 Sistema di indicizzazione dei piani cristallini

Indici di alcuni piani importanti in un cristallo cubico



Il piano  $(2\ 0\ 0)$  è parallelo ai piani  $(1\ 0\ 0)$  e  $(\bar{1}\ 0\ 0)$ .

I piani equivalenti per simmetria si possono indicare mediante parentesi graffe che racchiudono gli indici; il gruppo delle facce di un cubo è  $\{1\ 0\ 0\}$

# 1.2 MODELLI FONDAMENTALI DI RETICOLI

## 1.2.3 Sistema di indicizzazione dei piani cristallini

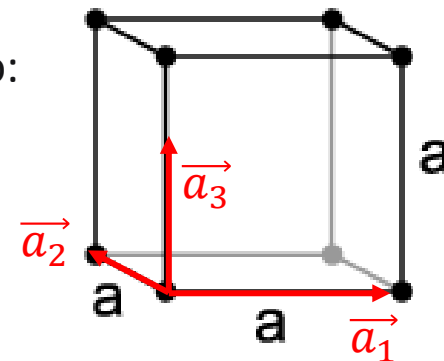
Con lo stesso criterio è possibile definire gli indici di Miller delle direzioni.

1. Individuati i vettori reticolari, trovare le intercette sugli assi reticolari e riportarli come terna.
2. Fare i reciproci dei numeri in terna.
3. Trovare l'insieme degli interi più piccoli che stanno nello stesso rapporto

Il risultato ottenuto costituiscono gli indici di Miller  $[hkl]$  della direzione, indicati con la parentesi quadra.

Nel reticolo cubico semplice, a titolo di esempio:

- l'asse  $\vec{a}_1$  è la direzione  $[100]$
- l'asse  $-\vec{a}_2$  è la direzione  $[0\bar{1}0]$ .



Nei cristalli cubici la direzione  $[hkl]$  è perpendicolare a un piano  $(hkl)$  che ha gli stessi indici; questo non è vero in generale per altri sistemi cristallografici.

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

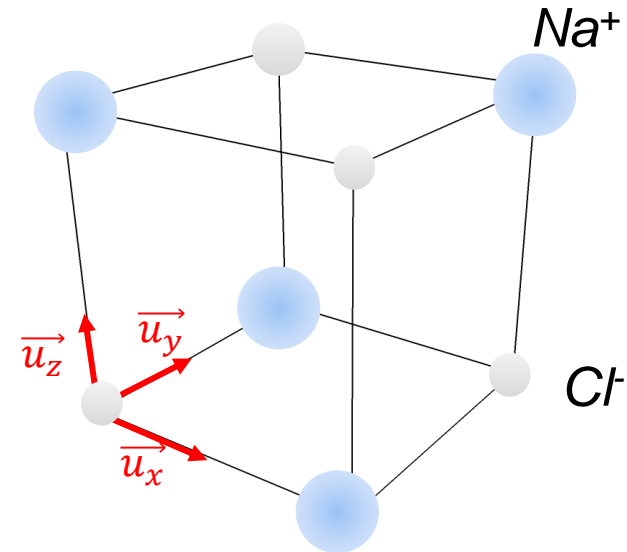
## 1.3.1 Cloruro di sodio

Discutiamo alcune strutture cristalline semplici di interesse generale: il cloruro di sodio, il cloruro di cesio, il diamante e il solfuro di zinco cubico.

### Cloruro di sodio

Possiamo costruire la struttura cristallina del  $NaCl$  disponendo gli ioni  $Na^+$  e  $Cl^-$  alternativamente nei punti reticolari di un reticolo cubico semplice.

Nel reticolo cubico semplice, detta  $\frac{1}{2}$  la lunghezza dello spigolo e considerato il sistema di riferimento preso come in Figura, le posizioni degli atomi sono:



$Cl^-$	000	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$	$\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$	$0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
$Na^+$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	$00 \frac{1}{2}$	$0 \frac{1}{2} 0$	$\frac{1}{2} 00$

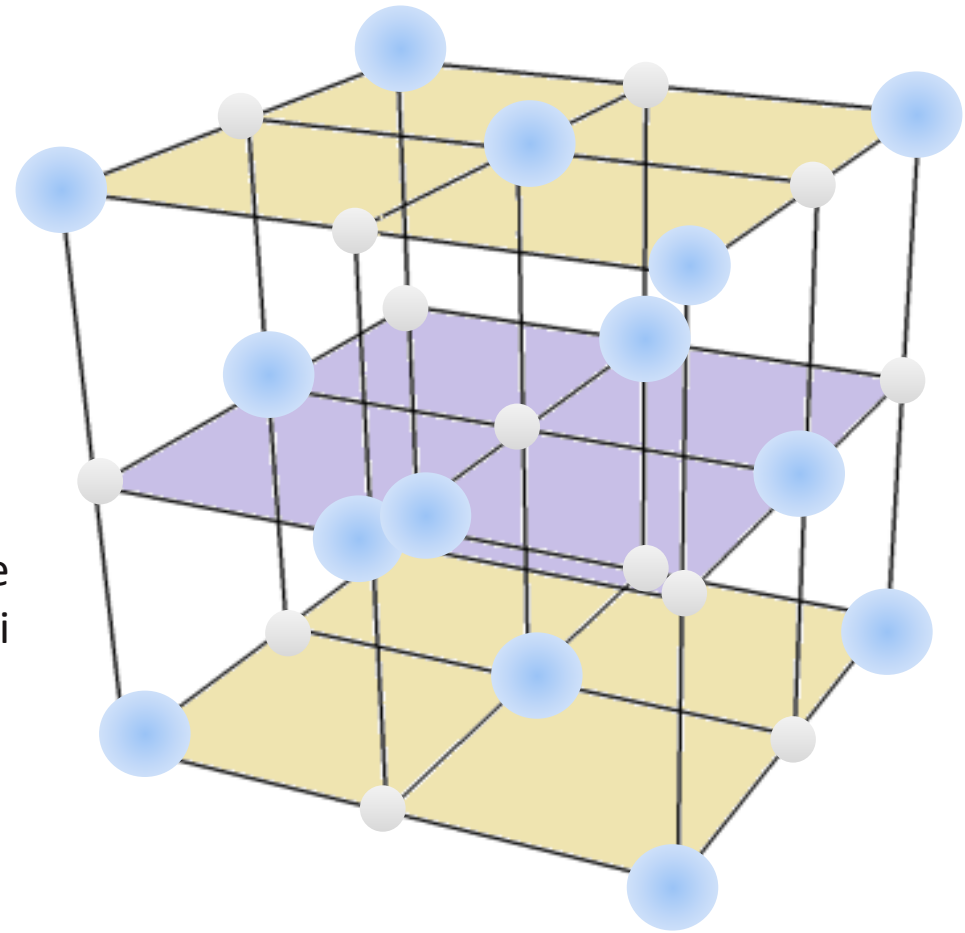
Nel cristallo ciascuno ione è circondato da ioni primi vicini con carica opposta.

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

## 1.3.1 Cloruro di sodio

La struttura cristallina del  $NaCl$  è ottenuta costruendo un cubo di lato 1 a partire dal reticolo cubico semplice di spigolo pari a  $\frac{1}{2}$ , facendo in modo che in ogni direzione si alternino atomi diversi.

E' un reticolo è cubico a facce centrate con la base consiste di uno ione  $Na^+$  e uno ione  $Cl^-$ .



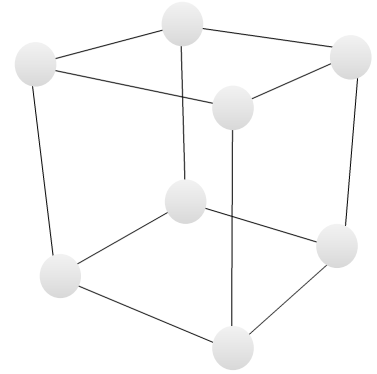
Nel cristallo ciascuno ione è circondato da sei ioni primi vicini con carica opposta.

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

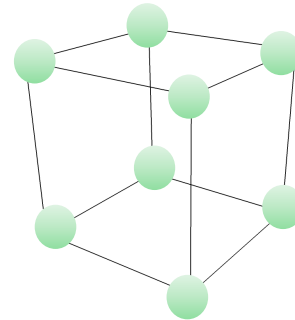
## 1.3.2 Cloruro di cesio

Costruiamo la struttura cristallina del *Cloruro di Cesio (CsCl)*

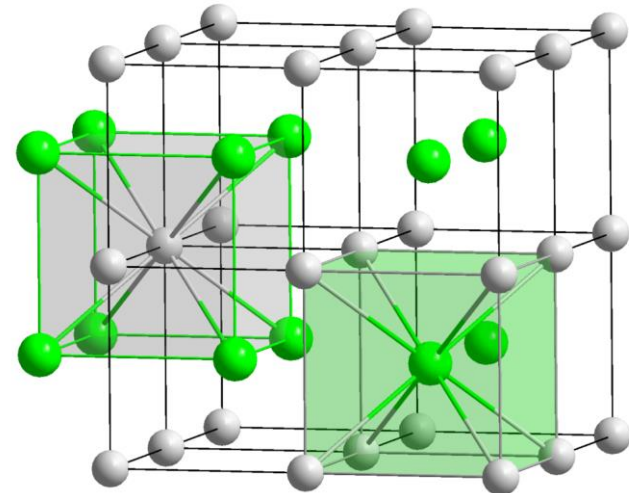
1. Poniamo gli anioni  $Cl^-$  in modo da formare un reticolo cubico semplice:



2. Posizioniamo i cationi di  $Cs^+$  in modo da formare un reticolo cubico semplice, ma con uno spigolo di lunghezza inferiore:



3. La struttura cristallina del Cloruro di Cesio (CsCl) si costruisce interpenetrando i due reticoli in modo che ogni atomo di  $Cl^-$  sia al centro di una cella unitaria del reticolo cubico semplice di  $Cs^+$ .



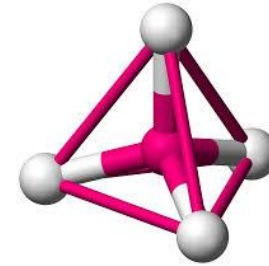
In questo modo ogni ione è circondato da otto ioni di carica opposta con simmetria cubica.



# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

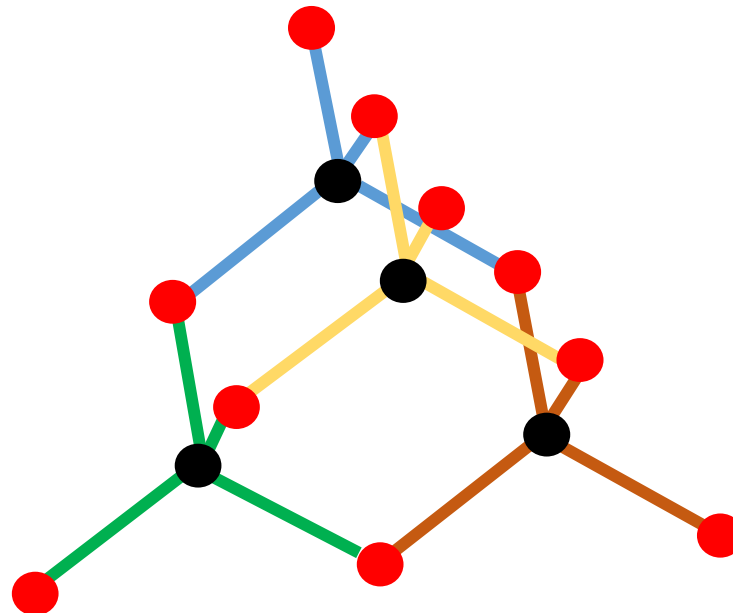
## 1.3.3 Struttura del diamante

Nella struttura del diamante, ciascun atomo di carbonio è legato covalentemente ad altri quattro atomi di carbonio disposti ai vertici di un tetraedro



La costruzione della struttura del diamante segue un percorso diverso da quello visto per le altre due strutture.

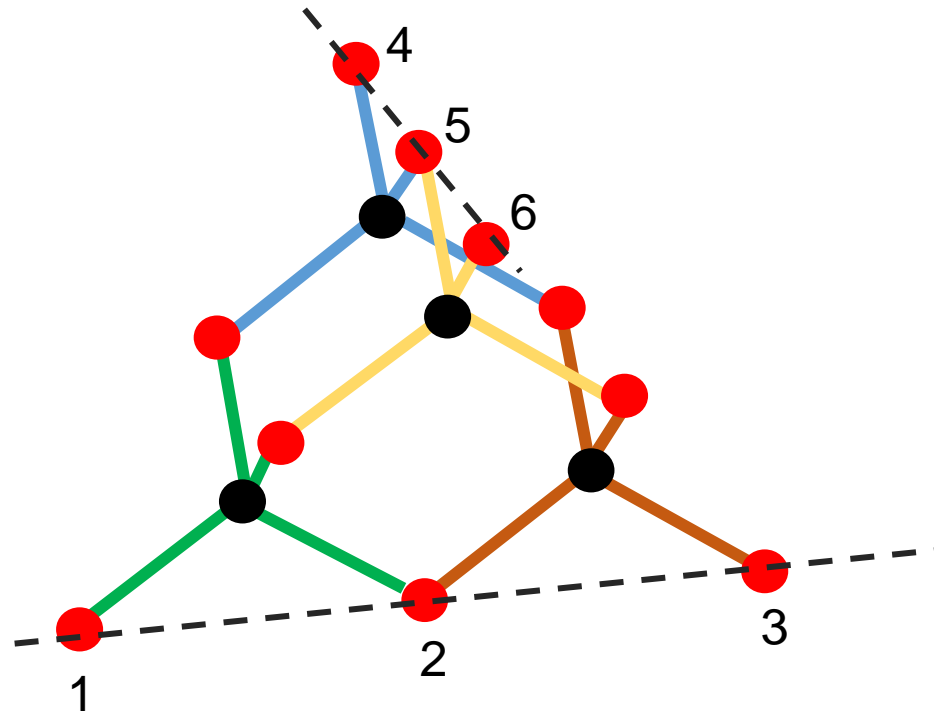
Uniamo 4 tetraedri nello spazio 3D in modo che ogni atomo possa essere considerato come vertice di un tetraedro. Rappresentiamo di colore nero gli atomi al centro della struttura tetraedrica, di rosso gli altri 4.



# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

## 1.3.3 Struttura del diamante

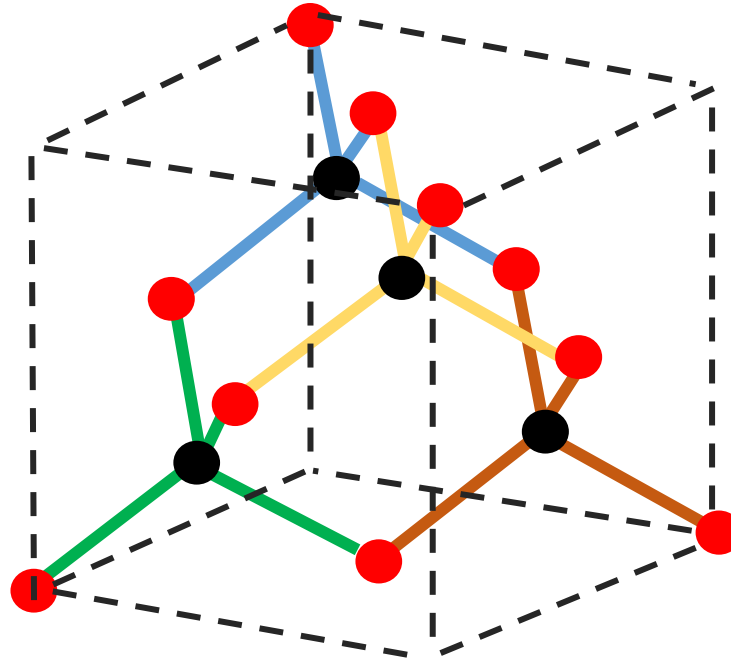
Si osserva facilmente che gli atomi 1,2 e 3 sono allineati lungo un asse, e gli atomi 4,5 e 6 sono anch'essi allineati su un asse, ma ortogonale al precedente:



Questo suggerisce che la struttura può essere richiusa all'interno di una cella convenzionale cubica, dove gli assi **1-2-3** e **4-5-6** sono diagonali di due facce opposte del cubo.

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

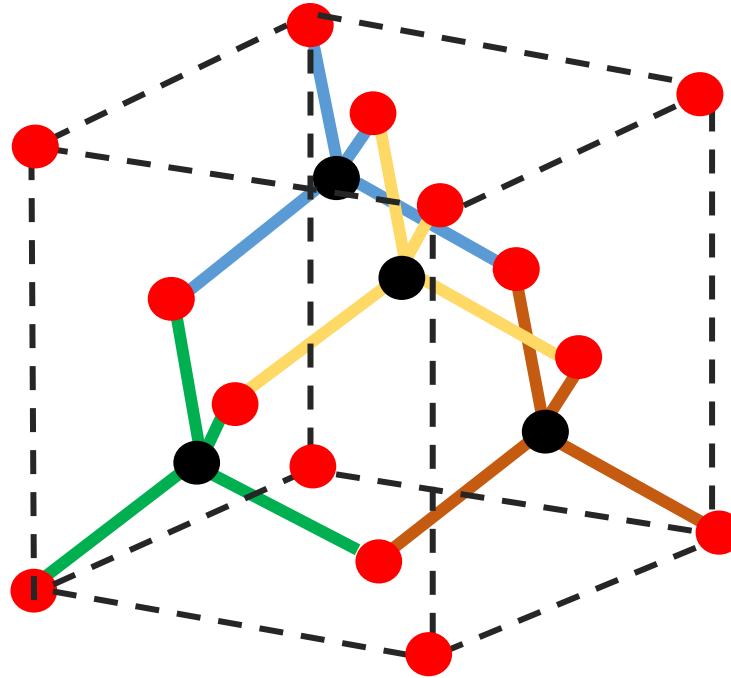
## 1.3.3 Struttura del diamante



Se ruotiamo la struttura di  $90^\circ$  rispetto all'asse centrale del cubo, è facile notare che anche sugli spigoli vuoti del cubo ci sono atomi che si trovano posizionati su strutture tetraedriche con atomi al di fuori della cella cubica.

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

## 1.3.3 Struttura del diamante



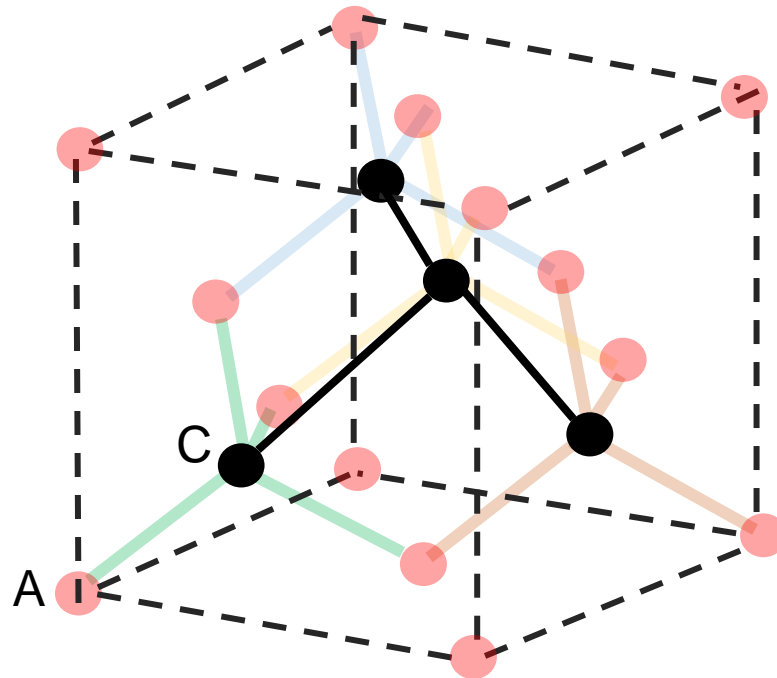
E' quindi chiaro che gli atomi rossi si trovano distribuiti su un reticolo cubico a facce centrate.

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

## 1.3.3 Struttura del diamante

Poniamo adesso l'attenzione sugli atomi neri.

Per ovvie ragioni di simmetria è facile dedurre che essi saranno distanziati tra di loro della stessa quantità, e quindi anche loro formano un tetraedro.



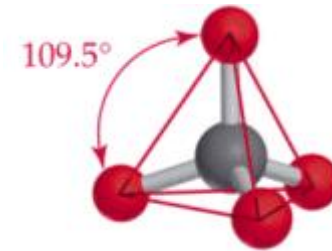
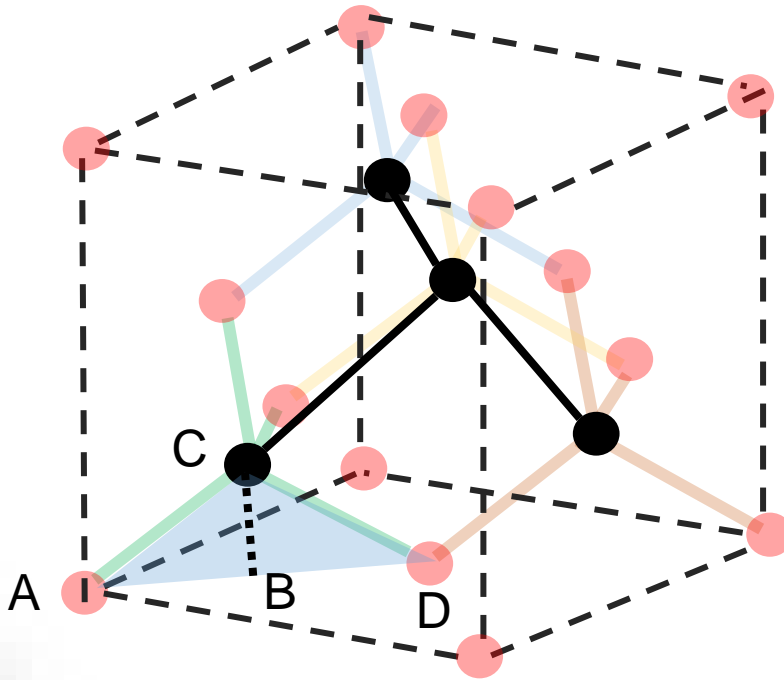
Con lo stesso procedimento fatto prima, è possibile racchiudere questa struttura tetraedrica. Ne segue che la struttura del diamante è costituita **da due reticoli cubici a facce centrate traslate una rispetto all'altra lungo  $\overline{AC}$** .

Quanto vale  $\overline{AC}$  ?

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

## 1.3.3 Struttura del diamante

Dove sono posizionati gli atomi neri? Consideriamo il triangolo evidenziato in Figura e, tracciata l'altezza, estrapoliamo il triangolo rettangolo ABC



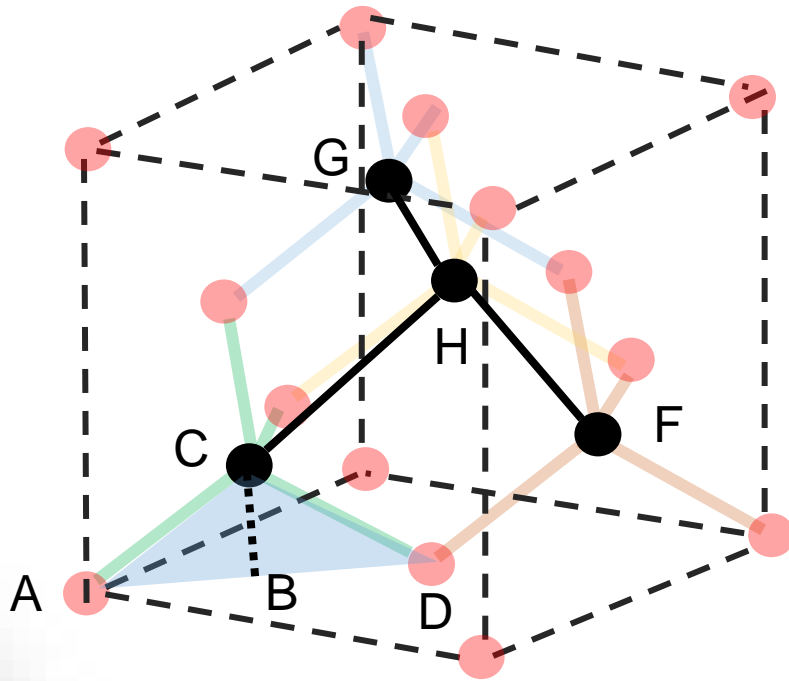
Sappiamo che nella struttura tetraedrica si formano angoli di  $109.5^\circ$ , quindi nel triangolo ACD, l'angolo al vertice C è pari a  $109.5^\circ$

Poiché il lato  $\overline{AB}$  è invece pari a un quarto della diagonale della faccia del cubo, detto  $a$  lo spigolo del cubo

$$\overline{AB} = \frac{\sqrt{2}}{4} a$$

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

## 1.3.3 Struttura del diamante



Usando la trigonometria:

$$\overline{AC} = \frac{\overline{AB}}{\text{sen}(54.75^\circ)} = \frac{\frac{\sqrt{2}}{4}a}{0.81} = 0.433a$$

da cui a ritroso è facile verificare che coincide con un quarto della diagonale del cubo. Quindi il lato  $\overline{AC}$  si dispone lungo la diagonale del cubo

$$\overline{AC} = \frac{\sqrt{3}}{4}a$$

Applicando il teorema di Pitagora, avremo che il lato  $\overline{BC}$  è pari a:

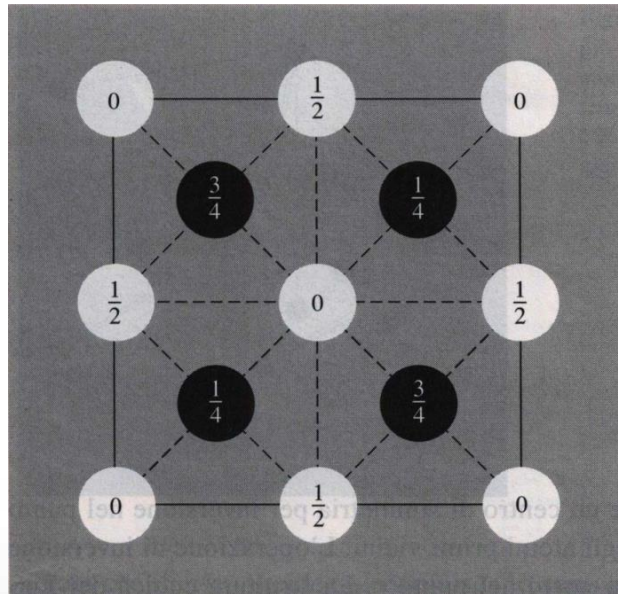
$$\overline{BC} = \sqrt{\frac{3}{16}a - \frac{2}{16}a} = \frac{1}{4}a$$

Quindi i due atomi  $C$  e  $F$  distano un quarto di spigolo di cubo dalla base del cubo. Analogamente, i due atomi  $G$  e  $H$  ci disteranno  $3/4$ .

# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

## 1.3.3 Struttura del diamante

Questo è ancora più chiaro se proiettiamo le posizioni degli atomi su una faccia del cubo.



Le frazioni indicano le altezze sopra la base espresse in unità dello spigolo del cubo.

I punti in 0 e  $\frac{1}{2}$  si trovano sul reticolo fcc; quelli in  $\frac{1}{4}$  e  $\frac{3}{4}$  si trovano su un reticolo simile spostato lungo la diagonale principale di un quarto della sua lunghezza.

Poiché il cubo unitario convenzionale del reticolo fcc contiene 4 punti reticolari, la cella cubica unitaria convenzionale della struttura del diamante contiene

$$N = 2 \times 4 = 8$$

Non vi è alcun modo di scegliere una cella primitiva tale che la base del diamante contenga solo un atomo

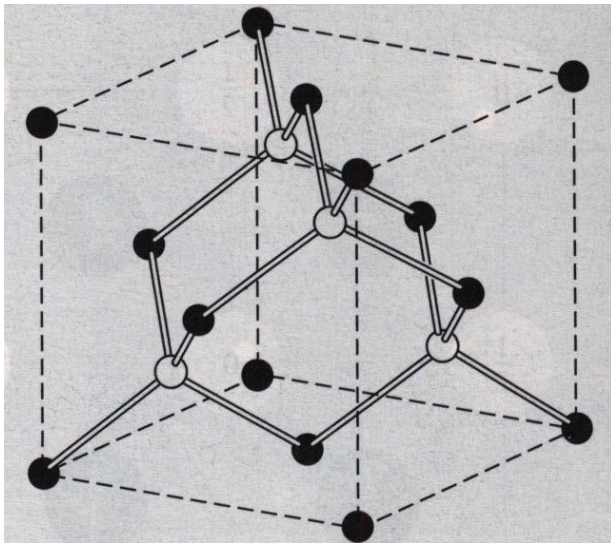


# 1.3 STRUTTURE CRISTALLINE SEMPLICI

## 1.3.4 Struttura della zincoblenda

La struttura del diamante può essere considerata come composta da due reticoli fcc spostati l'uno rispetto all'altro di un quarto di diagonale.

La struttura del solfuro di zinco cubico (zincoblenda) consegue da quella del diamante quando gli atomi di *Zn* siano disposti su uno dei reticoli fcc e quelli di *S* sull'altro reticolo fcc.



La cella convenzionale è un cubo.

Le coordinate degli atomi *Zn* sono:

$$000; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$$

le coordinate degli atomi *S* sono

$$\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}; \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}; \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}; \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$$

Ci sono quattro molecole di ZnS per cella convenzionale.

Intorno a ciascun atomo ci sono quattro atomi di specie diversa ugualmente distanti e disposti ai vertici di un tetraedro regolare.

# 1.4 PROBLEMI

## ESERCIZIO 1

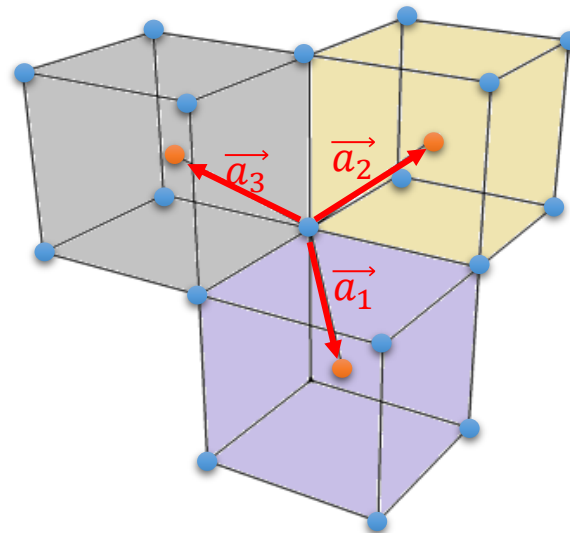
Gli angoli fra i legami tetraedrici del diamante sono come quelli fra le diagonali principali di un cubo. Si utilizzi l'analisi vettoriale elementare per determinare il valore dell'angolo.

Abbiamo visto che i legami di carbonio si dispongono lungo le diagonali di una cella cubica convenzionale. Nel reticolo cubico a corpo centrato, i vettori reticolari primitivi si dispongono lungo le diagonali di un cubo ed abbiamo espresso le coordinate rispetto ad un sistema di riferimento cartesiano riferito alla cella cubica convenzionale:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\hat{u}_x + \frac{a}{2}\hat{u}_y - \frac{a}{2}\hat{u}_z$$

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

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



# 1.4 PROBLEMI

Detto  $\theta$  l'angolo tra  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ , il prodotto scalare tra i due vettori è pari a:

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = |\vec{a}_1| |\vec{a}_2| \cos\theta$$

Determiniamo i moduli dei vettori:

$$|\vec{a}_1| = \sqrt{3 \cdot \frac{1}{4} a^2} = \frac{\sqrt{3}a}{2}$$

$$|\vec{a}_2| = \sqrt{3 \cdot \frac{1}{4} a^2} = \frac{\sqrt{3}a}{2}$$

da cui:  $|\vec{a}_1| |\vec{a}_2| = \frac{3}{4} a^2$

D'altronde il prodotto scalare è calcolabile usando le componenti dei vettori:

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 &= \left( \frac{a}{2} \hat{u}_x + \frac{a}{2} \hat{u}_y - \frac{a}{2} \hat{u}_z \right) \cdot \left( -\frac{a}{2} \hat{u}_x + \frac{a}{2} \hat{u}_y + \frac{a}{2} \hat{u}_z \right) = \\ &= -\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4} = -\frac{a^2}{4} \end{aligned}$$

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \hat{u}_x + \frac{a}{2} \hat{u}_y - \frac{a}{2} \hat{u}_z$$

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

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

# 1.4 PROBLEMI

Unendo le due espressioni:

$$-\frac{a^2}{4} = \frac{3}{4}a^2 \cos\theta$$

da cui è possibile esplicitare  $\cos\theta$  :

$$\cos\theta = -\frac{1}{3}$$

e quindi l'angolo  $\theta$  considerando che per ovvie ragioni geometriche deve essere compreso tra :  $90^\circ < \theta < 180^\circ$

$$\theta = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109^\circ 28'$$

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = |\vec{a}_1||\vec{a}_2|\cos\theta$$

$$|\vec{a}_1||\vec{a}_2| = \frac{3}{4}a^2$$

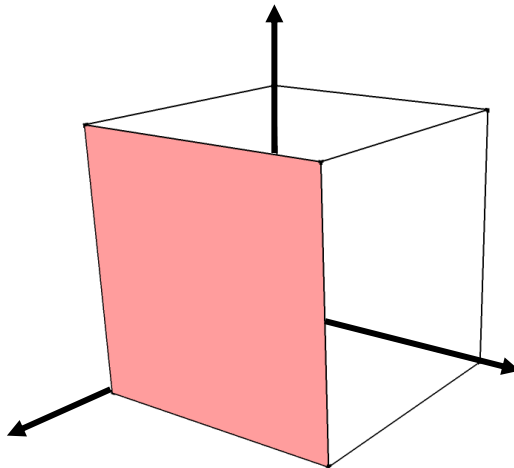
$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = -\frac{a^2}{4}$$

# 1.4 PROBLEMI

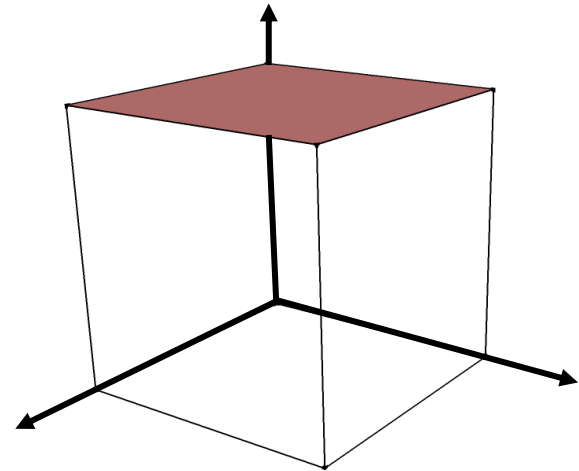
## ESERCIZIO 2

Si consideri un reticolo cubico a facce centrate e i piani di indici  $(100)$  e  $(001)$  riferiti alla cella cubica convenzionale. Quali sono gli indici di questi piani quando sono riferiti agli assi primitivi?

I piani di indici  $(100)$  e  $(001)$  riferiti alla cella cubica convenzionale sono:



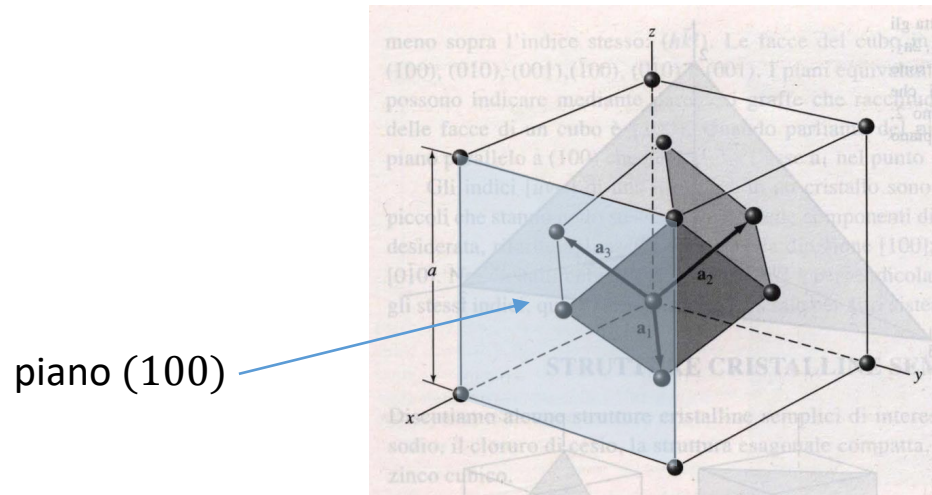
$(100)$



$(001)$

# 1.4 PROBLEMI

I vettori reticolari primitivi riferiti alla cella primitiva sono:



Detta  $a'$  la lunghezza di mezza diagonale della faccia del cubo convenzionale, il piano (100) intercetta:

l'asse  $\vec{a}_1$  nel punto  $2a'$ :

l'asse  $\vec{a}_3$  nel punto  $2a'$ :

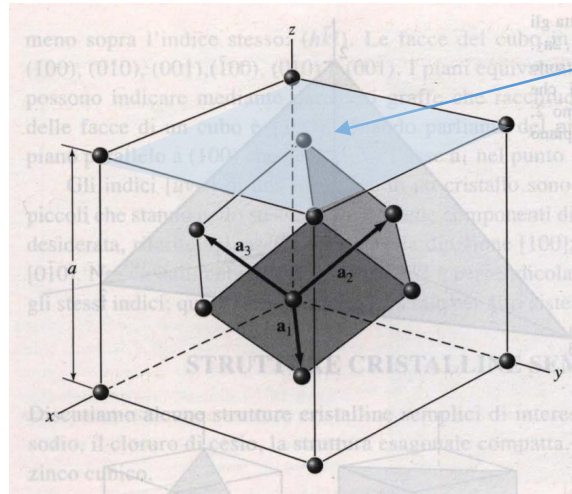
Costruiamo gli indici di Miller facendo i reciproci:  $\left(\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2}\right)$

e trovando l'insieme degli interi più piccoli che stanno nello stesso rapporto

(101)

# 1.4 PROBLEMI

Analogamente per il piano (001) :



piano (001)

Detta  $a'$  la lunghezza di mezza diagonale della faccia del cubo convenzionale, il piano (001) intercetta:

l'asse  $\vec{a}_2$  nel punto  $2a'$ :

l'asse  $\vec{a}_3$  nel punto  $2a'$ :

Costruiamo gli indici di Miller facendo i reciproci:  $\left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$

e trovando l'insieme degli interi più piccoli che stanno nello stesso rapporto  
(011)