

Test strutture e reticoli cristallini

ottobre 2024

CON SOLUZIONI

domanda 1

La distanza interplanare in una famiglia di piani di un reticolo cubico con passo reticolare a e indici di Miller (h, k, ℓ) è:

Scegli un'alternativa:

- a. $\frac{a}{(h^2 + k^2 + \ell^2)}$
- b. $\frac{2\pi}{a}(h^2 + k^2 + \ell^2)^{1/2}$
- c. $\frac{2\pi}{a} \frac{1}{(h^2 + k^2 + \ell^2)}$
- d. $\frac{a}{(h^2 + k^2 + \ell^2)^{1/2}}$

domanda 2

Il molibdeno (Mo) cristallizza in una struttura BCC con parametro reticolare 3.147 Å. Se il raggio di un atomo di Mo è la metà della spaziatura tra atomi primi vicini, la percentuale di volume occupato dagli atomi di Mo è:

Scegli un'alternativa:

- a. 78%
- b. 68%
- c. 50%
- d. 32%

domanda 3

Qual è il reticolo di Bravais formato da tutti i punti (n_1, n_2, n_3) (tutti interi) tali che gli n_j sono tutti pari o tutti dispari?

Scegli un'alternativa:

- a. FCC con passo reticolare $a=2$
- b. SC con passo reticolare $a=2$
- c. SC con passo reticolare $a=1$
- d. BCC con passo reticolare $a=2$

domanda 4

Se una cella cubica convenzionale viene utilizzata per descrivere un reticolo BCC, e quindi i vettori del reticolo diretto si scrivono come

$\mathbf{R} = a(\dots, \dots, \dots)$ sulla base $\mathbf{a}_1 = a(1, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = a(0, 1, 0)$, $\mathbf{a}_3 = a(0, 0, 1)$, quali sono gli indici permessi, indicando con n_i un generico numero intero?

Scegli un'alternativa:

- a. (n_1, n_2, n_3)
- b. $(n_1 + n_2 - n_3, n_1 - n_2 + n_3, -n_1 + n_2 + n_3)$
- c. $((n_1 + n_2 - n_3)/2, (n_1 - n_2 + n_3)/2, (-n_1 + n_2 + n_3)/2)$
- d. $(n_1 + n_2, n_1 + n_3, n_2 + n_3)$

domanda 5

Cos'è una zona di Brillouin?

Scegli un'alternativa:

- a. Una regione nello spazio diretto in cui possono risiedere gli elettroni
- b. Una regione in energia che contiene tutti i livelli di energia consentiti
- c. Una cella unitaria del cristallo che ne rispecchia le simmetrie
- d. Una regione nello spazio k che contiene tutti i vettori d'onda permessi

domanda 6

I metalli formano strutture cristalline che hanno un numero relativamente elevato N_{nn} di primi vicini (*nearest neighbor*): quale dei seguenti è ERRATO?

Scegli un'alternativa:

- a. FCC = 12
- b. DIA = 12
- c. BCC = 8
- d. HCP = 12

domanda 7

Usando la cella cubica convenzionale per descrivere il reticolo FCC, si indichi con b, f, c i siti reticolari rispettivamente all'interno (*bulk*), sulle facce (*face*) e sui vertici (*corner*) nella cella cubica, e con N_b, N_f, N_c il numero *totale* di siti in tali posizioni nella cella cubica. Il numero di siti reticolari *non equivalenti* appartenenti alla cella cubica allora si calcola come:

Scegli un'alternativa:

a. $N_b + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8}$

b. $N_b + \frac{N_c}{8}$

c. $N_b + \frac{N_f}{4} + \frac{N_c}{8}$

d. $N_b + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{4}$

domanda 8

Se una cella cubica convenzionale viene utilizzata per descrivere un reticolo BCC, e quindi i vettori di reticolo reciproco si scrivono come $\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(\dots, \dots, \dots)$ sulla base $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$, $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0)$, $\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1)$, quali sono gli indici permessi, indicando con ν_i un generico numero intero?

Scegli un'alternativa:

- a. $(\nu_1 + \nu_2 - \nu_3, \nu_1 - \nu_2 + \nu_3, -\nu_1 + \nu_2 + \nu_3)$
- b. $(\nu_1 + \nu_2, \nu_1 + \nu_3, \nu_2 + \nu_3)$
- c. $(\nu_1 - \nu_2, \nu_1 - \nu_3, \nu_2 - \nu_3)$
- d. (ν_1, ν_2, ν_3)

domanda 9

Qual è il reticolo di Bravais formato da tutti i punti (n_1, n_2, n_3) (tutti interi) tali che gli n_j sono tutti pari?

Scegli un'alternativa:

- a. FCC con passo reticolare $a=2$
- b. BCC con passo reticolare $a=2$
- c. SC con passo reticolare $a=2$
- d. SC con passo reticolare $a=1$

domanda 10

Raggi X di lunghezza d'onda 0.5 \AA subiscono una riflessione del secondo ordine in corrispondenza di un angolo di 10° da un cristallo. Qual è la spaziatura (in \AA) dei piani atomici nel cristallo?

Scegli un'alternativa:

- a. 2.88
- b. 1.44
- c. 0.96
- d. 164.1

domanda 11

Qual è il piano reticolare (famiglia dei piani equivalenti) più denso nel reticolo FCC?

Scegli un'alternativa:

a. $\{111\}$

b. $\{100\}$

c. $[111]$

d. $\{110\}$

domanda 12

Qual è il più denso piano reticolare nel reticolo BCC?

Scegli un'alternativa:

a. $[111]$

b. $\{110\}$

c. $\{100\}$

d. $\{111\}$

domanda 13

Considerare la forma allotropica di diamante (struttura composta da un reticolo FCC con 2 atomi di base) del carbonio. L'espressione del fattore di struttura dipende dalla scelta specifica della terna di vettori primitivi che descrivono il cristallo e dalla loro origine. Come deve essere presa l'origine affinché il fattore di struttura geometrico del diamante sia reale?

Scegli un'alternativa:

- a. su un atomo di carbonio, è indifferente quale
- b. al centro della cella convenzionale cubica che si può usare per descrivere il reticolo FCC, dove i vertici siano occupati da atomi
- c. su uno specifico atomo di carbonio
- d. a metà del segmento che congiunge due atomi primi vicini

domanda 14

La struttura NaCl si può considerare come composta da due sottoreticoli FCC interpenetranti, legati da con una determinata traslazione. Selezionare la traslazione errata.

Scegli un'alternativa:

a. $a(1/2, 0, 0)$

b. $a(1/2, 1/2, 0)$

c. $a(1/2, 1, 0)$

d. $a(0, 1, 1/2)$

domanda 15

Considerare il composto ZnSe in struttura zincoblenda. Fare riferimento alla cella cubica convenzionale, e considerare uno degli atomi all'origine (un vertice della cella cubica). Indicando con f_1 e f_2 i fattori di forma atomici (diversi) dei due atomi, calcolare il fattore di struttura geometrico $S(\mathbf{K})$ su un vettore \mathbf{K} del reticolo reciproco della cella cubica. Selezionare quale dei seguenti valori NON può essere assunto da $S(\mathbf{K})$.

Scegli un'alternativa:

- a. $4(f_1 - f_2)$
- b. $4(f_1 \pm if_2)$
- c. $4(f_1 + f_2)$
- d. 0