Física del Estado Sólido

Guía 2 - 22 de marzo de 2023

Problema 1. Existen cinco tipos de redes de Bravais bidimensionales que solo difieren en las condiciones para los módulos de los vectores primitivos $\boldsymbol{a}_1$ y $\boldsymbol{a}_2$ y el ángulo entre ellos α. Los nombres convencionales son: oblicua, rectangular, oblicua centrada, triangular (o hexagonal) y cuadrada. Encuentre los módulos de los vectores primitivos, el ángulo α y el número de coordinación; dibuje vectores primitivos y la celda de Wigner-Seitz para cada una de ellas. Para la oblicua centrada, dé además la condición que deben cumplir los vectores primitivos.

Problema 2. En cada uno de los siguientes casos indique si la estructura es una red de Bravais. Si lo es, dé los vectores primitivos. En caso de que no lo sea, descríbala como una red de Bravais con la base más pequeña posible.

a) Red cúbica centrada en la base.

b) Red cúbica centrada en las caras laterales.

c) Red cúbica centrada en las aristas.

Problema 3. ¿Cuál es la red de Bravais generada por todos los puntos con coordenadas cartesianas $a(n_1, n_2, n_3)$, con $a > 0$ y $\{n_j\} \in \mathbb{Z}$, si

a) los n_i son todos pares o todos impares,

b) la suma $n_1 + n_2 + n_3$ es par?

Problema 4. El aluminio cristaliza en la estructura FCC cúbica. Encuentre la densidad de sitios de la red FCC (sitios por unidad de volumen). Luego calcule, para el aluminio, la longitud del lado de la celda unidad cúbica, la distancia entre átomos y el radio atómico en angstrom (Å). (1 Dalton es una unidad de masa equivalente a un doceavo de la masa del carbono 12 (^{12}C) y vale 1,66$\times$ 10^{-27} kg).

Problema 5. Considere vectores primitivos de la red recíproca definidos por:

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \,, \qquad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \,, \qquad \boldsymbol{b}_3 = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \,,$$

donde los $\boldsymbol{a}_i$ son los vectores primitivos de la red directa.

a) Muestre que los vectores primitivos de la red recíproca satisfacen:

$$\boldsymbol{b}_1 \cdot (\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \,.$$

b) Suponga que se construyen vectores primitivos a partir de los vectores $\boldsymbol{b}_i$ de la misma manera en que estos últimos fueron construidos a partir de los vectores $\boldsymbol{a}_i$. Muestre que los vectores primitivos obtenidos son los vectores primitivos de la red directa original ($\boldsymbol{a}_i$).

Problema 6.

a) Muestre que el volumen de la celda primitiva de una red de Bravais es

$$v = |\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)| \,,$$

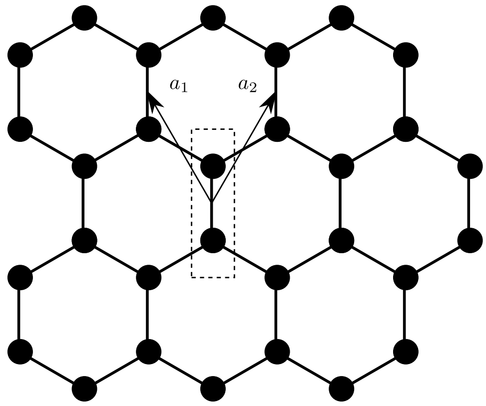
donde los $\boldsymbol{a}_i$ son los vectores primitivos.

b) Calcule el volumen de la celda primitiva de las redes SC, BCC, FCC y hexagonal simple.

c) Muestre que el volumen de la celda primitiva de una red recíproca es $(2\pi)^3/v$, donde v es el volumen de la celda primitiva de la red directa.

d) Calcule el volumen de la primera zona de Brillouin de las redes SC, BCC, FCC y hexagonal simple.

Problema 7. *Red del grafeno.* El grafeno (carbono bidimensional) tiene una estructura tipo panal de abeja que puede ser descripta como una red triangular con base. Encuentre vectores primitivos y la celda de Wigner-Seitz para esta red. Determine además la red recíproca, sus vectores primitivos y la primera zona de Brillouin.



Problema 8. *Factor de estructura.*

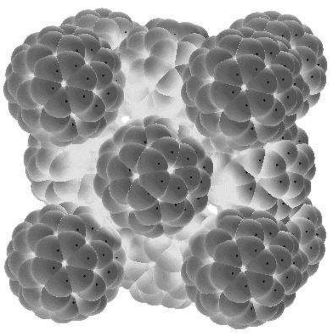
a) Considere la red de Bravais cúbica centrada en el cuerpo (BCC) como una red cúbica con motivo y calcule el factor de estructura $S_{\boldsymbol{K}} = \sum_{j=1}^{n_{\text{motivo}}} e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{d}_j}$. Sabiendo que la red recíproca de la BCC es una FCC, muestre que los picos de Bragg de un análisis de difracción de la red tienen intensidad nula ($S_{\boldsymbol{K}} = 0$) si no caen sobre los puntos de la red FCC (que es la recíproca de la BCC).

b) Una red cristalina bidimensional se define mediante los vectores primitivos $\boldsymbol{a}_1 = \frac{3}{2}a\hat{\boldsymbol{x}} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{\boldsymbol{y}}$ y $\boldsymbol{a}_2 = \sqrt{3}a\hat{\boldsymbol{y}}$, y contiene <u>dos</u> átomos iguales por celda que pueden representarse con los vectores $\boldsymbol{d}_1 = a\hat{\boldsymbol{x}}$ y $\boldsymbol{d}_2 = \boldsymbol{0}$.

b$_1$) Realice un gráfico esquemático y explique de qué tipo de red se trata.

b$_2$) Si ahora se cuenta con un tercer átomo del <u>mismo tipo</u> en $\boldsymbol{d}_3 = \frac{1}{2}a\hat{\boldsymbol{x}} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{\boldsymbol{y}}$, calcule el factor de estructura y los valores que puede tomar el mismo. Argumente por qué es correcto el resultado que encontró.

Problema 9. *Factor de forma.* Un fullereno (C_{60}) es una molécula formada por 60 átomos de carbono en una estructura tipo pelota de fútbol (ver figura) de radio $R = 3{,}5$ Å. Estas moléculas forman un sólido cristalino con estructura FCC (ver figura).



`http://es.wikipedia.org/wiki/Buckminsterfullereno`

Calcule el factor de forma de la molécula de C_{60} asumiendo que se tiene una distribución tipo cascarón esférico de los electrones en la molécula. Analice su dependencia con el módulo vector de onda $\boldsymbol{K}$.

Problema 10.

a) Considere al NaCl como una red FCC con parámetro a con motivo. Los vectores del motivo son las posiciones de los iones positivos(Na^+) $\boldsymbol{0}$ y las de los iones negativos (Cl^-) $a/2\boldsymbol{x}$. Suponiendo que los factores de forma para los diferentes iones son f_+ y f_-, muestre que el factor de estructura toma los valores $f_+ + f_-$ y $f_+ - f_-$. ¿Por qué se anula el $S_{\boldsymbol{K}}$ para este último caso si $f_+ = f_-$? (analice a qué puntos de la red recíproca corresponden)

b) Realice el mismo procedimiento para la red del diamante (blenda de Zn), en donde se tienen iones positivos para la red FCC y iones negativos en el vector $(a/4)(\hat{\boldsymbol{x}} + \hat{\boldsymbol{y}} + \hat{\boldsymbol{z}})$ del motivo. En este caso los valores posibles son $f_+ + f_-$, $f_+ - f_-$, $f_+ \pm if_-$.

c) Suponga que se tiene ahora un cristal que muestra picos de Bragg correspondientes a una estructura FCC. Describa cómo utilizar el factor de forma para distinguir si la red es tipo el NaCl o tipo blenda de zinc.