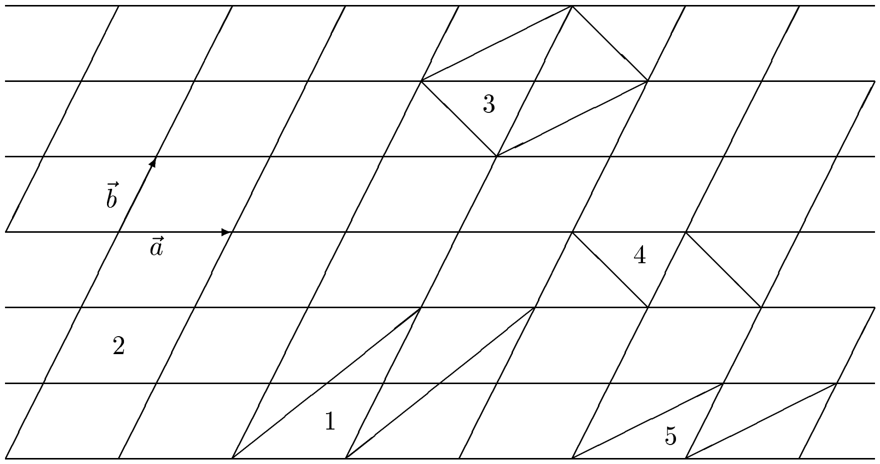
Física Moderna II

Guía N°6: Estructura Cristalina

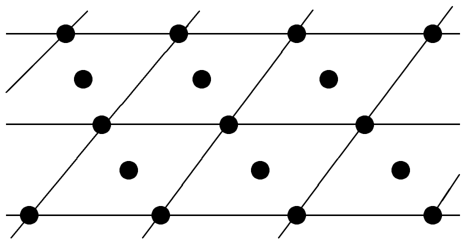
Problema 1:

a) ¿Cuáles de las siguientes celdas unitarias correspondientes a la red de Bravais bidimensional de la figura son primitivas?



b) ¿Cuántos átomos se asocian por celda en cada caso?

Problema 2: Muestre que la red de Bravais bidimensional con motivo que se muestra en la siguiente figura (oblicua *centrada*), es simplemente una red de Bravais oblicua simple.



Problema 3:

a) Muestre que la red "panal de abeja" (honeycomb lattice) no es una red de Bravais.

b) Describa esta red como una red de Bravais con base. Especifique un conjunto de vectores primitivos y determine las posiciones relativas de los átomos del motivo en esta base de vectores.

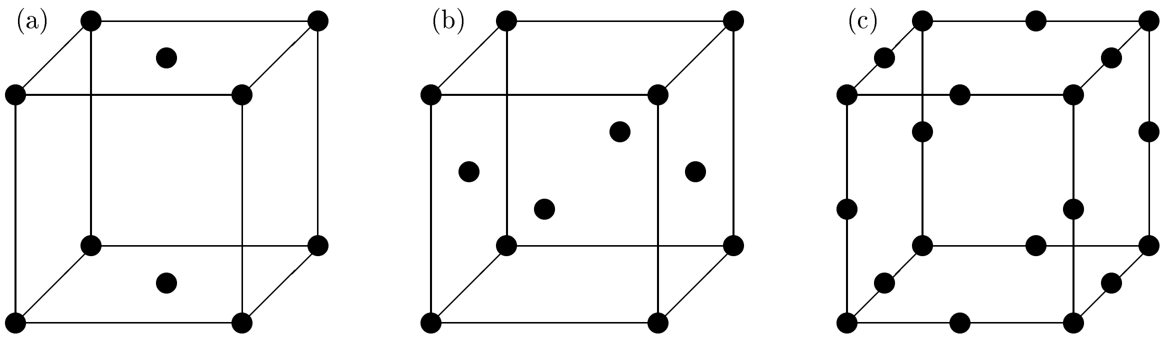
c) Dibuje una posible celda primitiva. ¿Cuántos átomos se asocian con cada celda primitiva?

Problema 4: En cada uno de los siguientes casos indicar si la estructura descripta es una red de Bravais. Si lo es, dar los vectores primitivos; si no lo es, describirla como una red de Bravais con una base tan pequeña como sea posible.

a) Red cúbica centrada en la base (sc con puntos adicionales en las caras horizontales de la celda cúbica, ver figura (a).

b) Red cúbica centrada en el lado (sc con puntos adicionales en las caras verticales de la celda cúbica, ver figura (b).

c) Red cúbica centrada en la arista (sc con puntos adicionales en el punto medio de las líneas que unen primeros vecinos, ver figura (c).



Problema 5: La fcc y la sc son respectivamente la más densa y la menos densa de las tres redes de Bravais cúbicas. La estructura del diamante es menos densa que cualquiera de éstas. Una medida de esto es que los números de coordinación son: fcc, 12; bcc, 8; sc, 6; diamante, 4. Otra es la siguiente: Suponiendo esferas sólidas idénticas distribuídas en el espacio de modo que sus centros se encuentren en los puntos de red, y las esferas centradas en primeros vecinos sólo se toquen sin superponerse. Asumiendo que las esferas tienen densidad unitaria, mostrar que la densidad por celda de este *empaquetamiento compacto* (*close packing*) para cada una de las cuatro estructuras, o *fracción de empaquetamiento* (*packing fraction*), resulta:

$$\begin{array}{lrcl} \text{fcc:} & \dfrac{\sqrt{2}}{6}\pi & \simeq & 0.74 \\ \text{bcc:} & \dfrac{\sqrt{3}}{8}\pi & \simeq & 0.68 \\ \text{sc:} & \dfrac{\pi}{6} & \simeq & 0.52 \\ \text{diamante:} & \dfrac{\sqrt{3}}{16}\pi & \simeq & 0.34 \end{array}$$

Problema 6: Muestre que en la estructura hcp (hexagonal close packed) la razón "ideal" c/a, es decir, la razón para el empaquetamiento compacto de esferas, es $\sqrt{8/3} = 1.633$.

Problema 7: Los vectores primitivos $\vec{b}_i$ de la red recíproca se generan a partir de los vectores primitivos $\vec{a}_i$ de la red directa según:

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

y se satisface: $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$.

a) Probar que los $\vec{b}_i$ satisfacen

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

b) Probar que la red recíproca de la red recíproca es la red original.

c) Probar que el volumen de la celda primitiva de la red de Bravais es $v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$.

Problema 8: Considerar la red de Bravais hexagonal simple con constantes de red a y c.

a) Determinar posibles vectores primitivos.

b) Calcular el volumen de la celda primitiva.

c) Mostrar que la red recíproca también es hexagonal simple con constantes de red $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$ y $\frac{2\pi}{c}$, pero rotada 30^o alrededor del eje c respecto de la red directa.

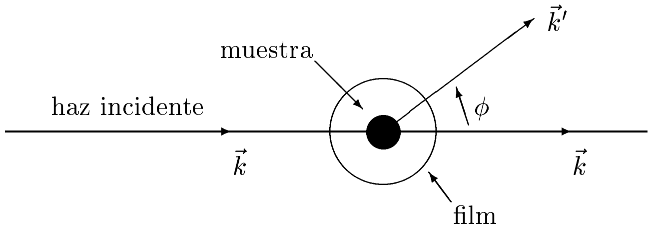
d) ¿Para que valor de la razón c/a en la red directa, resulta igual razón en la red recíproca? Si c/a es la razón "ideal" en la red directa, ¿Qué valor toma esta razón en la red recíproca?

e) Describir esquemáticamente la primera zona de Brillouin para la red hexagonal simple.

Problema 9: Especímenes en polvo de tres cristales cúbicos monoatómicos diferentes son analizados con una cámara Debye-Scherrer. Se sabe que una muestra es fcc, otra es bcc y la restante tiene la estructura del diamante. Las posiciones ϕ aproximadas de los primeros cuatro anillos de difracción en cada caso son los de la tabla.

ϕ medidos

A	B	C
42.2°	28.8°	42.8°
49.2°	41.0°	73.2°
72.0°	50.8°	89.0°
87.3°	59.6°	115.0°

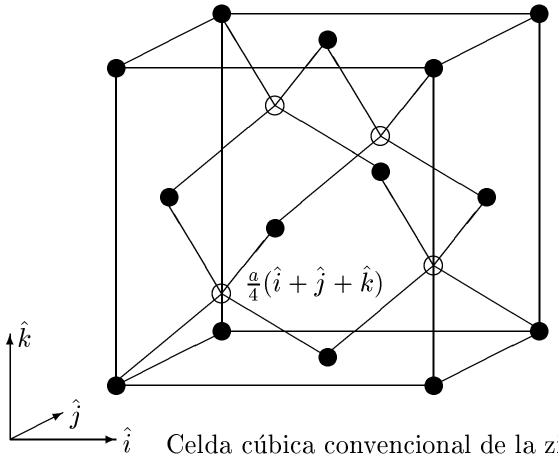


Vista esquemática de la cámara Debye-Scherrer

a) Identificar las estructuras cristalinas de las muestras A, B y C.

b) Si la longitud de onda de los rayos X incidentes es 1.5Å, ¿Cuál es la longitud del lado de la celda cúbica convencional en cada caso?

c) Si la estructura de diamante fuera reemplazada por la de zinc-blenda (ver figura) con una celda cúbica del mismo lado, ¿A qué ángulos aparecerían ahora los cuatro primeros anillos?



Celda cúbica convencional de la zinc-blenda

Problema 10: A menudo es conveniente representar una red de Bravais fcc como una sc con una celda primitiva de lado a y una base de cuatro puntos.

a) Mostrar que el factor de estructura

$$S_{\vec{K}} = \sum_{j=1}^{n} \exp\left(i\,\vec{K}\cdot\vec{d}_j\right)$$

donde ($\vec{d}_j$ son las posiciones relativas de los n átomos de una celda primitiva), es o bien 4 o bien cero para todos los puntos de la red recíproca sc.

b) Mostar que cuando los puntos con factor de estructura nulo son removidos, los restantes puntos de la red recíproca forman una red bcc con celda convencional de lado $\dfrac{4\pi}{a}$. ¿Porqué es plausible este resultado?

Problema 11: Factor de estructura geométrico en una red hcp.

a) Mostrar que el factor de estructura para una red cristalina hexagonal close-packed (hcp) monoatómica puede tomar sólo uno de los seis valores $1+\exp(in\pi/3)$, $n=1,\ldots,6$, cuando $\vec{K}$ corre sobre los puntos de la red recíproca hexagonal simple.

b) Mostrar que todos los puntos de la red recíproca tienen factor de estructura no nulo en el plano perpendicular al eje c que contiene al punto $\vec{K}=\vec{0}$.

c) Mostrar que los puntos de factor de estructura nulo se encuentran en planos alternados en la familia de planos de la red recíproca perpendiculares al eje c.

d) Mostrar que en tales planos los puntos desplazados de $\vec{K}=\vec{0}$ por un vector paralelo al eje c tienen factor de estructura nulo.

e) Mostrar que la remoción de todos los puntos de factor de estructura nulo en tales planos, reduce la red triangular de los puntos de red recíproca a una red hexagonal (arreglo de panal de abeja).