FI4101- Introducción a la Física del sólido
Profesor: Rodrigo Arias | Auxiliar: Alejandro Jara.

Guía #1, 26/08/09

Problemas Propuestos:

Problema 1: Considere el siguiente patrón infinito 2-D.

$$\begin{array}{cccccccc} \dots & \mathbf{qp} & \mathbf{db} & \mathbf{qp} & \mathbf{db} & \mathbf{qp} & \mathbf{db} & \dots \\ \dots & \mathbf{db} & \mathbf{qp} & \mathbf{db} & \mathbf{qp} & \mathbf{db} & \mathbf{qp} & \dots \\ \dots & \mathbf{qp} & \mathbf{db} & \mathbf{qp} & \mathbf{db} & \mathbf{qp} & \mathbf{db} & \dots \end{array}$$

Indique

1. La red de Bravais con la base más pequeña,
2. Celda unitaria primitiva
3. Vectores primitivos

Problema 2: Muestre que la razón c/a para una estructura *hcp* ideal es $\sqrt{8}/\sqrt{3} = 1{,}633$. Si la razón c/a es significativamente más grande que este valor, el cristal será compuesto de planos de átomos empaquetados cercanamente, donde los planos serán montados "holgadamente".

Problema 3: Muestre que la razón del volumen de las esferas y el cristal (llamado factor de empaquetamiento) es 0,74, 0,74, 0,68, 0,52 y 0,34 para fcc, *hcp*, *bcc*, *sc* y diamante, respectivamente.

Problema 4: El borde de una celda unitaria en un cristal cúbico es 2,62 $\mathring{A}$. Encuentre el ángulo de Bragg correspondiente a reflexiones desde los planos (100), (110) y (111), donde la longitud de onda del haz monocromático de rayos es 1,54 $\mathring{A}$.

Problema 5: Considere el plano (hkl) en una red cristalina. Muestre para una red cúbica simple que $d^2 = a^2/(h^2 + k^2 + l^2)$

Problema 6: Un cristal cúbico es montado con una dirección [100] paralela al haz incidente de rayos X ¿Cuales serían las longitudes de onda para que ocurra difracción desde los planos (110) y (111)?

Problemas Resueltos:

Problema 7: Mostrar que la relación entre el radio atómico r y la constante de red a esta dada como sigue, asumiendo un átomo de esfera dura por cada puto de la red. sc: $r = a/2$, fcc: $r = a/(2\sqrt{2})$, bcc: $r = \sqrt{3}a/4$, Diamante: $r = \sqrt{3}a/8$.

Solución: En todos estos casos el cristal esta compuesto por átomos que están ligados directa o indirectamente. Cada una de las redes anteriores (sc,fcc,bcc,...) puede ser estudiada en un cubo de lado a, Veamos cada caso:

- **SC:** En este caso hay un átomo en cada esquina del cubo (la esquina son los centros de los átomos). Estos están en contacto con sus vecinos como muestra la Fig. 1 (izquierda) por lo que cada arista del cubo mide exactamente dos veces su radio, por lo tanto $r = a/2$.
- **FCC:** En este caso hay un octavo de átomo en cada esquina del cubo y una mitad en las caras de este, se puede apreciar de la Fig. 1 (2^{da} figura) que el largo de la diagonal de una de sus caras es igual a la suma de los largos de 2 radios ($2r$) (átomos morados) y el diámetro ($2r$) del átomo del centro (amarillo). Es decir si el lado del cubo es a entonces se tiene que $\sqrt{2}a = 4r$, por lo tanto $r = a/(2\sqrt{2})$.

- **BCC:** En este caso el átomo que está en el centro tiene contacto con los octavos de átomos que hay en las esquinas. La única distancia con la que podemos calcular es con el largo de la diagonal del cubo (no de una cara). En terminos de radios atómicos sabemos que esta distancia (como se ve en la figura) esta comprendida por 2 octavos de átomos ($2r$) más el diámetro del átomo central ($2r$) y como además sabemos que el largo de la diagonal de un cubo de arista a es $\sqrt{3}a$, entonces se tiene que $\sqrt{3}a = 4r$, por lo tanto $r = \sqrt{3}a/4$.
- **Diamante:** Esta relación es más dificil de obtener, pero usando la información entregada por la Fig. 1 (imagen obtenida del libro "Solid State Physics - Ashcroft / Mermin" pag. 76) sabemos que la posición de un átomo al interior del cubo considerando como origen otro átomo en la esquina del cubo es $\vec{r} = \frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$. Luego la distancia entre estos átomos es $\sqrt{3}a/4$ (es la distancia entre los centros de estos átomos), es decir es igual a $2r \rightarrow \sqrt{3}a/4 = 2r$, por lo tanto $r = \sqrt{3}a/8$.

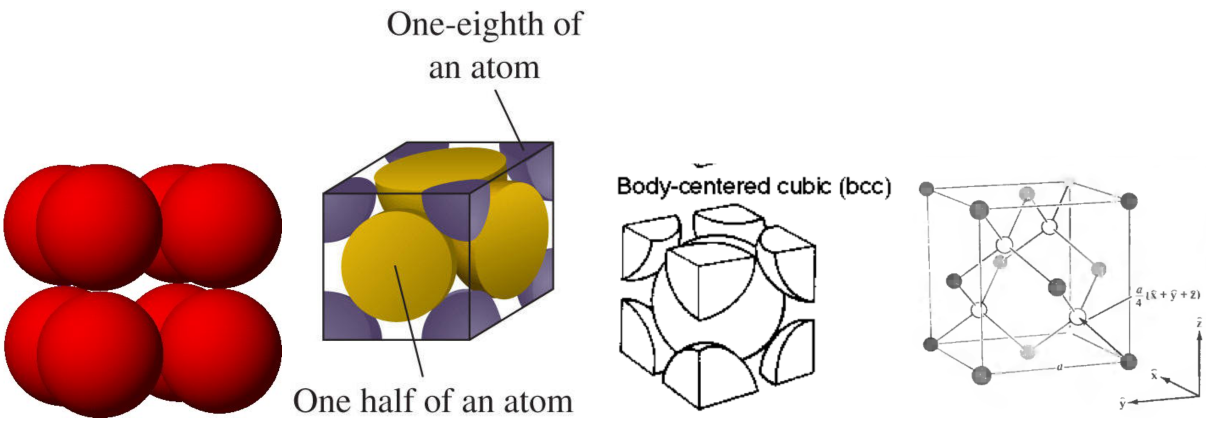

Figura 1: De izquierda a derecha: sc, fcc, bcc y diamante

Problema 8: Para un cristal cubico

1. Encontrar el ángulo entre las direcciones $[x_1y_1z_1]$ y $[x_2y_2z_2]$.
2. Mostrar que la dirección $[hkl]$ es perpendicular a los planos (hkl).
3. Mostrar que la dirección $[1\bar{1}0]$ esta en el plano (111).
4. Encontrar la direcciones que son perpendiculares a la dirección $[1\bar{1}0]$ y que también estén en el plano (111).

Solución: Primero es importante notar que se trata de un cristal cubico (una red cúbica) por lo que los vectores de la red coinciden con los vectores cartesianos. Además, hay que recordar que el ángulo entre dos vectores esta definido por:

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

Por otro lado la notación en este caso es: paréntesis cuadrados $[xyz]$ dirección en la red directa, paréntesis curvos indices de Miller que indica la dirección perpendicular a un plano a definir por esos números (hkl) y además es importante recordar que la barra sobre un número significa el negativo del mismo.

1. El ángulo entre las direcciones $[x_1y_1z_1]$ y $[x_2y_2z_2]$ es
$$\cos\theta = \frac{x_1x_2z_3 + y_1y_2z_3 + x_3y_3z_3}{\sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}\sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2}}$$
2. Por definición sabemos que un plano (hkl) esta definido por un vector perpendicular al plano en la dirección $[hkl]$ por lo que es directo que el plano es perpendicular a la dirección $[hkl]$.
3. Para que un vector este en un plano este debe ser perpendicular al vector que define el plano, por lo que hay que comprobar que efectivamente $[1\bar{1}0]$ es perpendicular a $[111]$. Al hacer el producto punto tenemos $1 \times 1 + (-1) \times 1 + 0 \times 1 = 0$ como el producto punto es 0, luego estos vectores efectivamente son perpendiculares.

4. Hay dos direcciones posibles que pertenecen al plano (111) y que son perpendiculares a $[1\bar{1}0]$. De forma general supongamos que la dirección a encontrar es $[xyz]$ luego esta dirección debe ser perpendicular a $[1\bar{1}0]$ y [111]. es decir el producto punto es cero. Con esto tenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} x - y =& 0 \\ x + y + z =& 0 \end{aligned}$$

Sisuponemos que x es un parámetro libre entonces las soluciones tiene la forma $[x\,x\,\overline{2x}] = x[1\,1\,\bar{2}]$ luego si x vale 1 tenemos la dirección: $[1\,1\,\bar{2}]$ y cuando este vale -1 tenemos $[\bar{1}\,\bar{1}\,2]$

Problema 9: Indique gráficamente los 10 valores más bajos de θ tomando $\lambda/a = 0{,}2$ en el cual la difracción de rayos x ocurre por una red cúbica simple cuyo parámetro de red (o constante de red) es a. ¿Cual de las 10 líneas serán permitidas para una red cúbica bcc y fcc con el mismo parámetro de red.

Solución: Nos piden los valores más bajos de θ. Sabemos que θ debe satisfacer la condición de Bragg la cual nos dice que $2d\sin\theta = n\lambda$, donde d es la distancia entre planos. Una forma fácil de resolver el problema es escribir d en función del vector que describe el plano, es decir el menor vector de la red reciproca perpendicular al plano:

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{K}_M|}$$

donde $\vec{K}$ en una red cúbica simple esta dado por $\vec{K} = \frac{2\pi}{a}(n_1\hat{x}+n_2\hat{y}+n_3\hat{z})$, luego $|\vec{K}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{n_1^2+n_2^2+n_3^2}$. Entonces los menores valores de θ, están dados por las combinaciones de n, n_1, n_2, n_3 que den como resultados los menores valores de:

$$\sin\theta = n\sqrt{n_1^2+n_2^2+n_3^2}\frac{\lambda}{2a} = 0,1 * n\sqrt{n_1^2+n_2^2+n_3^2}$$

donde n, n_1, n_2, n_3 son enteros positivos. Usamos ademas que $\lambda/a = 0{,}2$.

Partamos con $n = 1$

Para los planos del tipo $\{100\} = \{(100),(010),(001)\}$ $\sin\theta = 0{,}1$
Para los planos del tipo $\{110\} = \{(110),(011),(101)\}$ $\sin\theta = 0{,}1\sqrt{2} \approx 0{,}14$
Para los planos del tipo $\{111\}$ $\sin\theta = 0{,}1\sqrt{3} \approx 0{,}17$
Para los planos del tipo $\{210\} = \{(210),(120),(012),(021),(201),(102)\}$ $\sin\theta = 0{,}1\sqrt{5} \approx 0{,}22$
Para los planos del tipo $\{211\} = \{(211),(121),(112)\}$ $\sin\theta = 0{,}1\sqrt{6} \approx 0{,}24$
Para los planos del tipo $\{221\} = \{(221),(122),(212)\}$ $\sin\theta = 0{,}1\sqrt{9} \approx 0{,}3$
Para los planos del tipo $\{310\} = \ldots$ $\sin\theta = 0{,}1\sqrt{10} \approx 0{,}31$
Para los planos del tipo $\{311\} = \ldots$ $\sin\theta = 0{,}1\sqrt{11} \approx 0{,}33$

Para $n = 2$

Para los planos del tipo $\{100\} = \{(100),(010),(001)\}$ $\sin\theta = 2 * 0{,}1 = 0{,}2$
Para los planos del tipo $\{110\} = \{(110),(011),(101)\}$ $\sin\theta = 2 * 0{,}1\sqrt{2} \approx 0{,}28$

✍