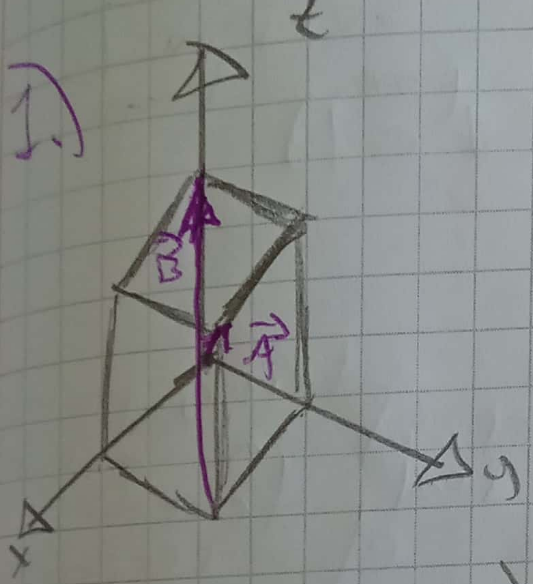
Taller #1: Estado Sólido

Juan Diego Figueroa

Capítulo 1:

1.)




$\vec{A} = (1,1,1)$

$B = (-1,-1,1)$

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{\vec{A}\cdot\vec{B}}{AB}\right) = \cos^{-1}\left(\frac{-1}{\sqrt{3}\sqrt{3}}\right) = 109{,}28^\circ$$

2.) (100):

Los puntos de intersección de los ejes primitivos son:

$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x}+\hat{y})$, $\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{y}+\hat{z})$, $\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{z}+\hat{x})$. Podemos interpretar que para llegar al plano (100) se requiere que $\vec{a}_1$ avance $\frac{2}{a}$ veces, es decir $\frac{2}{a}\vec{a}_1 = \hat{x} + \frac{2}{a}\hat{y}$, lo mismo ocurre para $\vec{a}_3$, pero para $\vec{a}_2$

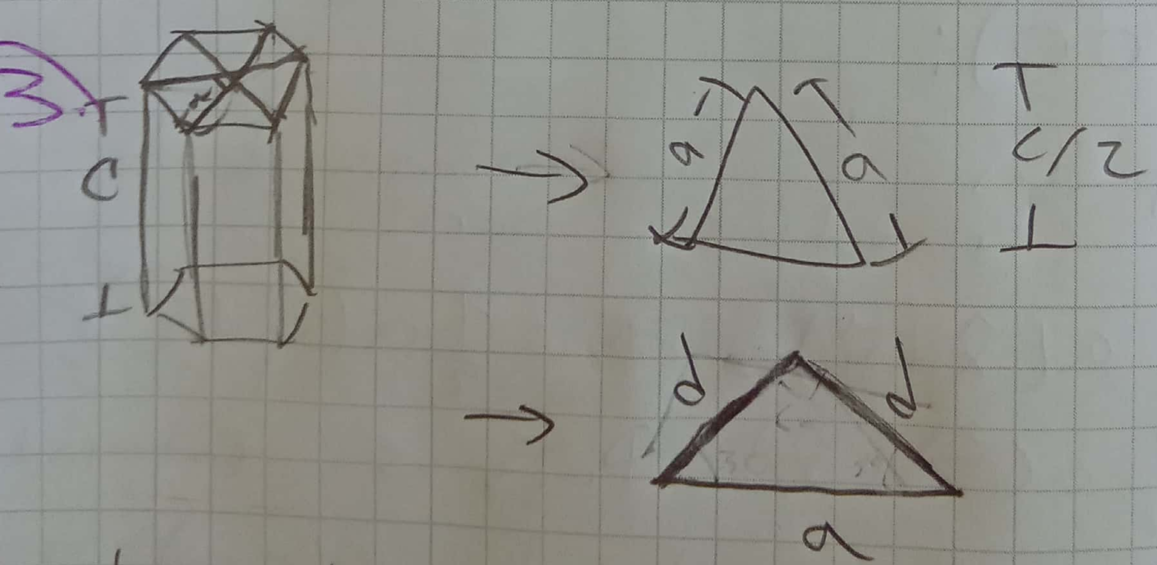
Se requiere que el vector se escalan infinitas veces para cortar con el plano, es decir cortar en el infinito con el, por que en el espacio real se tendría los índices $(\frac{2}{a}\ \infty\ \frac{2}{c})$

en el recíproco serían $(\frac{a}{2}\ 0\ \ldots)$ multiplicando por $\frac{2}{a}$ para llegar a un entero $(1\ 0\ 1)$

$(0\ 0\ 1)$:

Análogamente al caso anterior, pero ahora con un plano normal al eje z en el espacio real tenemos $(\infty\ \frac{2}{a}\ \frac{2}{a})$, en el recíproco $(0\ \frac{a}{2}\ \frac{a}{2})$, multiplicando por $\frac{2}{a}$ se obtiene $(0\ 1\ 1)$

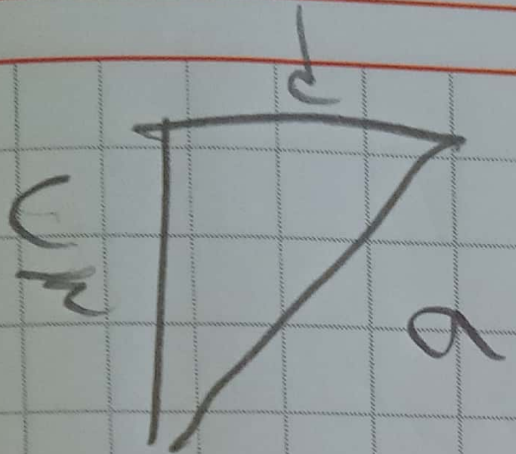
3)




$d = a \tan 30 = \frac{a}{\sqrt{3}}$

Junio - June

D M A

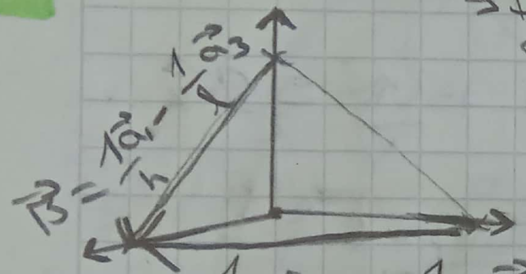



$$\rightarrow a^2 = \frac{c^2}{4} + d^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3}$$

$$\therefore \quad \frac{2}{3} a^2 = \frac{c^2}{4} \rightarrow \frac{a}{c} = \sqrt{\frac{3}{8}} = 1{,}63$$

## Problemas del capítulo 2:

1) a) Considere plano $(hkl)$, muestre que la red $\vec{\sigma} = h\vec{b_1} + k\vec{b_2} + l\vec{b_3}$ es $\perp$ a $(hkl)$:




→ todo punto del plano es combinación lineal de $\vec{A}$ ∧ $\vec{B}$

$$\vec{A}\cdot\vec{\sigma} = \frac{1}{h}\cdot h\cdot 2\pi - \frac{1}{k}\cdot k\cdot 2\pi = 0$$

$$\vec{A} = \frac{1}{h}\vec{a_1} - \frac{1}{k}\vec{a_2} \qquad \vec{B}\cdot\vec{\sigma} = \frac{1}{h}\, h\, 2\pi - \frac{1}{l}\cdot l\, 2\pi = 0$$

$\therefore$ $\vec{\sigma}$ es $\perp$ al plano $hkl$ descrito por $\vec{A}$, $\vec{B}$

b) Ya que sabemos que $\vec{\sigma}$ nos sirve como vector normal al plano, nos sirve para definir un vector unitario y así poder proyectar cualquier vector del corte sobre tal unitario y definimos que es la distancia entre planos:

$$\frac{\vec{\sigma}}{|\sigma|} = \hat{n}, \qquad d = \frac{1}{h}\vec{a_1}\odot\hat{n} = \frac{1}{h}\frac{2\pi h}{|\vec{\sigma}|} = \frac{2\pi}{|\sigma|}$$

$$d = \frac{1}{k}\vec{a_2}\odot\hat{n} = \frac{1}{k}\frac{2\pi k}{|\vec{\sigma}|} = \frac{2\pi}{|\sigma|}$$

(b) Ya que sabemos que $\vec{\sigma}$ nos sirve como vector normal al plano, nos sirve para definir un vector unitario y así poder proyectar cualquier vector del corte sobre tal unitario y definimos pues la distancia entre planos:

$$\frac{\vec{\sigma}}{|\sigma|} = \hat{n}, \qquad \boxed{d = \frac{1}{h}\vec{a}_1 \cdot \hat{n}} = \frac{1}{h}\frac{2\pi h}{|\vec{\sigma}|} = \frac{2\pi}{|\sigma|}$$

$$d = \frac{1}{k}\vec{a}_2 \cdot \hat{n} = \frac{1}{k}\frac{2\pi k}{|\vec{\sigma}|} = \frac{2\pi}{|\sigma|}$$

$$d = \frac{1}{l}\vec{a}_3 \cdot \hat{n} = \frac{1}{l}\frac{2\pi l}{|\vec{\sigma}|} = \frac{2\pi}{|\vec{\sigma}|}$$

(c) Para una celda cúbica se tiene $\vec{\sigma} = (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)$

pero $|\vec{b}_i \cdot \vec{b}_i|^{1/2} = \frac{2\pi}{a} \;\therefore\; \vec{b}_i = \frac{2\pi}{a}\hat{b}_i$

$$\vec{\sigma} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{b}_1 + k\hat{b}_2 + l\hat{b}_3) \;\therefore\; d = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{a}(h^2+k^2+l^2)^{1/2}}$$

$$d^2 = \frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}$$

2) (a) $\vec{a}_1 = \sqrt{3}\,\frac{a}{2}\,\hat{x} + \frac{a}{2}\,\hat{y}$ ; $\vec{a}_2 = -\sqrt{3}\,\frac{a}{2}\,\hat{x} + \frac{a}{2}\,\hat{y}$

$\vec{a}_3 = c\,\hat{z}$ . $[V = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|] = |\vec{a}_1 \cdot (-\sqrt{3}\,\frac{a}{2}(-\hat{y})c + \frac{a}{2}\,\hat{x}c)|$

$$V = \left| +\frac{\sqrt{3}\,a^2}{4} + \frac{\sqrt{3}\,a^2}{4} \right| = \frac{\sqrt{3}}{2}\,a^2 c$$

(b) $[\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_2 \times \vec{a}_3] = \frac{2\pi}{V}\left(-\sqrt{3}\,\frac{a}{2}\right)(-c\,\hat{y}) + \frac{2\pi}{V}\,\frac{a}{2}\,c\,\hat{x}$

$$= \frac{\pi a \cancel{c}}{\sqrt{3}\,\cancel{a^2}\,\cancel{c}} \times 2\,\hat{x} + \frac{2\pi\,\sqrt{3}\,\cancel{a}\,c}{2 \times \frac{\sqrt{3}}{2}\,\cancel{a^2}\,\cancel{c}}\,\hat{y}$$

$$= \frac{2\pi}{\sqrt{3}\,a}\,\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\,\hat{y}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{V}\,c\,\sqrt{3}\,\frac{a}{2}\,\hat{y} + \frac{2\pi}{V}\,c\,\frac{a}{2}\,(-\hat{x})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi\,c\,\sqrt{3}\,\cancel{a}}{\cancel{2}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\,\cancel{a^2}\,\cancel{c}}\,\hat{y} + \frac{2\pi\,\cancel{c}\,\cancel{a}}{\cancel{2}\,\frac{\sqrt{3}}{2}\,\cancel{a^2}\,\cancel{c}}\,(-\hat{x}) = \frac{2\pi}{a}\,\hat{y} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}\,a}\,\hat{x}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{V}\left(\frac{\sqrt{3}\,a^2}{4}\right)\hat{z} + \frac{2\pi\sqrt{3}}{V}\,\frac{a^2}{4}\,\hat{z} =$$

$$= \frac{\pi\,\sqrt{3}\,\cancel{a^2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}\,\cancel{a^2}\,c}\,\hat{z} = \frac{2\pi}{c}\,\hat{z}$$

(c)

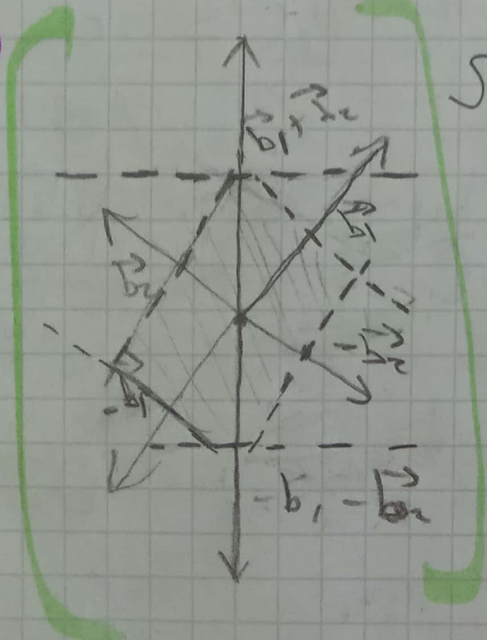
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{V}\, c\sqrt{3}\frac{a}{2}\,\hat{y} + \frac{2\pi}{V}\, c\frac{a}{2}(-\hat{x})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{\cancel{2}\pi \cancel{c}\cancel{\sqrt{3}}\cancel{a}}{\cancel{2}\frac{\cancel{\sqrt{3}}}{2}a^{\cancel{2}}\cancel{c}}\,\hat{y} + \frac{\cancel{2}\pi \cancel{c}\cancel{a}}{\cancel{2}\frac{\sqrt{3}}{2}a^{\cancel{2}}\cancel{c}}(-\hat{x}) = \frac{2\pi}{a}\,\hat{y} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\,\hat{x}$$

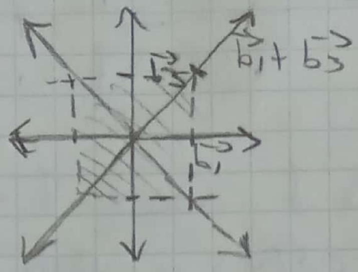
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V}\,\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{V}\left(\sqrt{3}\frac{a^2}{4}\right)\hat{z} + \frac{2\pi\sqrt{3}}{V}\frac{a^2}{4}\,\hat{z} =$$

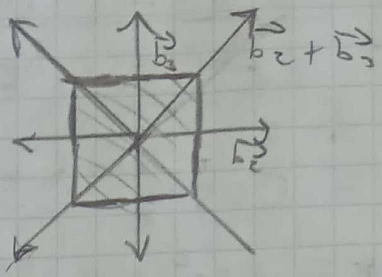
$$= \frac{\pi\sqrt{3}\,\cancel{a^2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}\cancel{a^2}\,c}\,\hat{z} = \frac{2\pi}{c}\,\hat{z}$$

(c)




a partir de $\vec{b}_1$ y $\vec{b}_2$, sus sumas y opuestas definimos rectas perpendiculares a partir del punto medio de cada segmento, luego solo intersecamos




3) Muestre que el volumen de la primera Zona de Brillouin es:

$(2\pi)^3/V_c$ donde $V_c$ es el volumen de una celda primitiva de cristal.

Pista: El volumen de una Zona de Brillouin es igual al volumen del paralelepípedo primitivo en el espacio de Fourier.

Recordar que $\left[(\vec{c}\times\vec{a})\times(\vec{a}\times\vec{b}) = (\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})\vec{a}\right]$

$$\left[V_B = \vec{b}_1\cdot(\vec{b}_2\times\vec{b}_3)\right] = \frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)\cdot\left[\frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_3\times\vec{a}_1)\times\frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)\right]$$

$$V_B = \left(\frac{2\pi}{V_c}\right)^3(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)\cdot\left[\underbrace{\vec{a}_3\cdot(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)}_{V_c}\vec{a}_1\right] = \frac{(2\pi)^3}{V_c^3}\times V_c^2$$

$$V_B = \frac{(2\pi)^3}{V_c}$$

4) $\vec{\rho}_m = m\vec{a}$, $m\in\mathbb{Z}$, $F = \sum e^{-im\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}}$

$$F = \frac{1-e^{-iM(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K})}}{1-e^{-i\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}}}$$ haciendo uso de $\sum_{m=0}^{M-1} x^m = \frac{1-x^m}{1-x}$

a) $$FF^* = \frac{1-e^{-iM(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K})}}{1-e^{-i\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}}}\times\frac{1-e^{iM(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K})}}{1-e^{i\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}}}$$

$$= \frac{1-e^{-iM(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K})}-e^{iM(\vec{a}\cdot\Delta\vec{K})}+1}{1-e^{-i\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}}-e^{i\vec{a}\cdot\Delta\vec{K}}+1}$$, pero $\left[\cos\theta = \frac{e^{i\theta}+e^{-i\theta}}{2}, \quad \operatorname{Sen}\theta = \frac{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}{2i}\right]$

$$|F|^2 = \frac{2-2\cos(M\vec{a}\cdot\Delta\vec{k})}{2-2\cos(\vec{a}\cdot\Delta\vec{k})} = \frac{1-\cos\varphi}{1-\cos\varphi}$$

$$\cos\alpha = \cos^2\frac{\alpha}{2} - \sin^2\frac{\alpha}{2} \Rightarrow 1-\cos\alpha = 1-\cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

$$1-\cos\alpha = \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)+\cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)-\cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) = 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

$$|F|^2 = \frac{2\sin^2(M\vec{a}\cdot\Delta\vec{k}/2)}{2\sin^2(\vec{a}\cdot\Delta\vec{k}/2)} = \frac{\sin^2(\frac{1}{2}M\vec{a}\cdot\Delta\vec{k})}{\sin^2(\frac{1}{2}\vec{a}\cdot\Delta\vec{k})}$$

(b) Sabemos que el máximo de difracción aparece cuando $\vec{a}\cdot\Delta\vec{k} = 2\pi n$ con $n \in \mathbb{Z}$, cambiamos $\vec{a}\cdot\Delta\vec{k} = 2\pi n + \varepsilon$ tal que $\varepsilon$ propongamos el primer cero del numerador, mientras que $\varepsilon = \frac{2\pi}{M}$

$$\sin^2\left(\frac{1}{2}M\vec{a}\cdot\Delta\vec{k}\right) = 0 \Rightarrow \sin\left(\frac{1}{2}M2\pi n\right)\cos\left(\frac{1}{2}M\varepsilon\right) + \sin\left(\frac{1}{2}M\varepsilon\right)\cos\left(\frac{1}{2}M2\pi n\right)$$

$$\sin\left(\frac{1}{2}M\varepsilon\right) = 0 \rightarrow \frac{1}{2}M\varepsilon = n\pi \Rightarrow \varepsilon = \frac{2\pi n}{M}$$

5) La estructura cristalina del diamante descrita en Capítulo 1. La base tiene 8 átomos si se toma como el cubo convencional.

(a) Encuentre el factor de estructura $S$ de la base:

Las posiciones de los 8 átomos vienen dadas por:

$(0\,0\,0)$, $(0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}\,0\,\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0)$,
$(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4})$, $(\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{4})$.

$f_i = f\ \forall i$ dado que hay átomos iguales

$$S_\sigma = f\sum_{i=0}^{7} e^{-i\vec{\sigma}\cdot\vec{r}_i} = f\left[1 + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+3k+3l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)}\right]$$

ya que $\left[\vec{\sigma} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3\right]$

(b) Factorizamos $\left[e^{-i\frac{\pi}{2}n} \quad \text{con} \quad n = h+k+l\right]$

$$\frac{S_\sigma}{f} = 1 + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\frac{\pi}{2}n}\left(1 + e^{-i\frac{\pi}{2}(2k+2l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(2h+2l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(2h+2k)}\right)$$

$$\frac{S_\sigma}{f} = \left(1 + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(h+k)}\right)\left(1 + e^{-i\frac{\pi}{2}n}\right)$$

[$\Rightarrow$ para que $S_\sigma$ sea cero requerimos que]

$$-\frac{i\pi n}{2} = -i(\pi + 2m\pi) \Rightarrow \frac{\cancel{\pi} n}{2} = \cancel{\pi}(2m+1)$$

$$n = 4m+2 \quad \text{con } n \in \mathbb{Z} \Rightarrow \underbrace{n = 2, 6, 10, \ldots}_{\text{deben ser un conjunto de pares específicos}}$$

[$\Rightarrow$ Para reflexión se requiere $S_\sigma \neq 0$] $\therefore$

$$-\frac{i\pi}{2}n = -i(2m\pi) \Rightarrow \frac{n}{2} = 2m \Rightarrow n = 4m$$

$$\therefore \quad \underset{\nu_1}{h} + \underset{\nu_2}{k} + \underset{\nu_3}{l} = 4m \quad \text{con } m \in \mathbb{Z}$$

(c) $n(r) = (\pi a_0^3)^{-1} e^{-2r/a_0}$ $\therefore$

$$\left[f = 4\pi\int_0^\infty n(r)\, r^2 \frac{\operatorname{Sen}(\sigma r)}{\sigma r}\, dr\right] = 4\pi\int_0^\infty \frac{e^{-2r/a_0}}{\pi a_0^3}\, r^2 \frac{\operatorname{Sen}(\sigma r)}{\sigma r}\, dr$$

$$f = \frac{4}{\sigma a_0^3}\int_0^\infty e^{-2r/a_0}\, r \operatorname{Sen}(\sigma r)\, dr = \frac{4}{\sigma a_0^3}\,\frac{4\sigma a_0^3}{(\sigma^2 a_0^2+4)^2} = \frac{16}{(\sigma^2 a_0^2+4)^2}$$

7) a) $A \overset{a/2}{——} B \overset{a/2}{——} A \overset{a/2}{——} B \quad \dots$

$$S_\sigma = f_1 e^{-i(0)} + f_2 e^{-i\vec{\sigma}\cdot\vec{r}} = f_1 + f_2 e^{-i\sigma r \cos\theta}$$

$$= f_1 + f_2 e^{-i\sigma \frac{a}{2}\cos\theta}$$

La interferencia se da cuando $\sigma \frac{a}{2} \cos\theta = n\pi$ ya que ahí $S_\sigma = f_1 \pm f_2$

$\sigma = \frac{2\pi}{\lambda}$ $\therefore$ $\frac{\cancel{\pi} a}{\lambda} \cos\theta = n\cancel{\pi} \Rightarrow a\cos\theta = n\lambda$

b) $I \propto |S_\sigma|^2$, • Si $n$ es par

$\Rightarrow S_\sigma = f_1 + f_2 \Rightarrow I \propto |f_1 + f_2|^2$

• Si $n$ es impar $S_\sigma = f_1 - f_2 \Rightarrow I \propto |f_1 - f_2|^2$

c) Si los factores de forma son iguales $n_A(\vec{r}) = n_B(\vec{r})$ es decir se tiene los mismos átomos y conformando una red de difracción