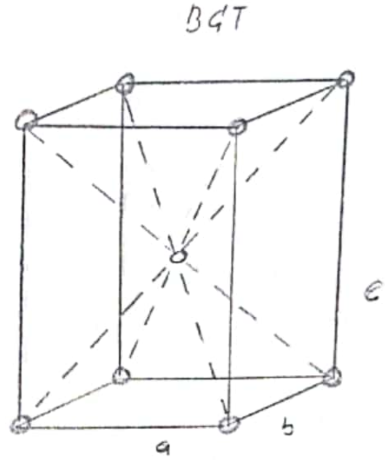
1.- Mostrar geometricamente que la *estructura centrada en las caras tetragonal* es equivalente a una *estructura centrada en el cuerpo tetragonal*, tales que el lado de la base de las celdas unitarias es $1/\sqrt{2}$ veces mayor que la respectiva al arreglo centrado en las caras. Explicar porque dichas estructuras son distintas.

Sean dos estructuras:

i) Estructura centrada en las caras tetragonal (FCT)

ii) Estructura centrada en el cuerpo tetragonal (BCT)



Uniendo dos estructuras FCT, se observa que conforman una estructura BCT

Considerando que la longitudes de la BCT, son: a, b, c, y las longitudes de la FCT, son: a', b', c'.

Vease que:

$$b' = \sqrt{a^2+b^2}$$

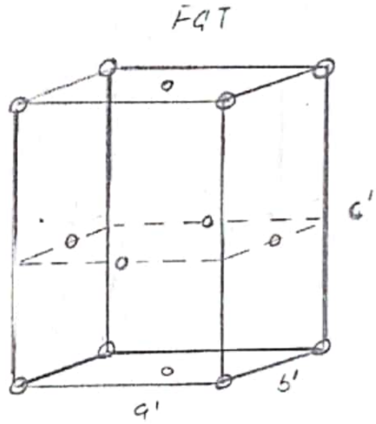
Dado que la base es cuadrada: $b' = a' \wedge a = b$.

Entonces:

$$a' = \sqrt{a^2+a^2}$$

$$\Rightarrow a' = a\sqrt{2}$$

$$\therefore \quad a = \frac{a'}{\sqrt{2}}$$



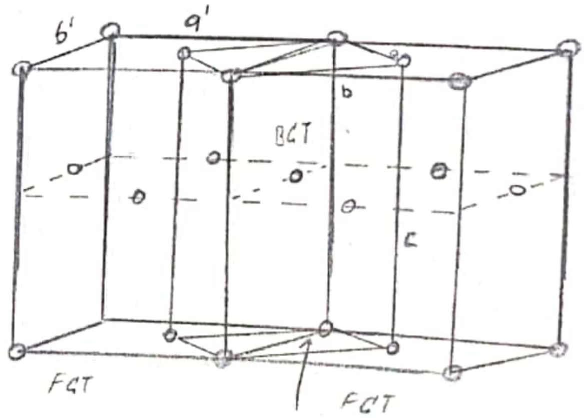
Es decir la base de la BCT es $\frac{1}{\sqrt{2}}$ veces la base de las FCT que constituyen a la BCT

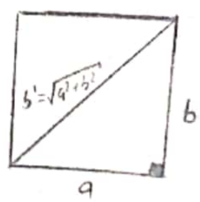
Se observa que: los angulos se conservan (90°).

De igual forma, las alturas: $c = c'$

No obstante, la longitud de la base no: $a = \frac{a'}{\sqrt{2}}$

Por tanto: las estructuras son distintas





2.- Mostrar que las proporciones maximas de espacio que pueden ser llenadas por un arreglo compacto de esferas en distintas redes, esta dado por:

Cubico simple: $\pi/6$

Cubica centrada en el cuerpo: $\pi\sqrt{3}/8$

Cubica centrada en las caras: $\pi\sqrt{2}/6$

Hexagonal compacta: $\pi\sqrt{2}/6$

Estructura tipo diamante: $\pi\sqrt{3}/16$

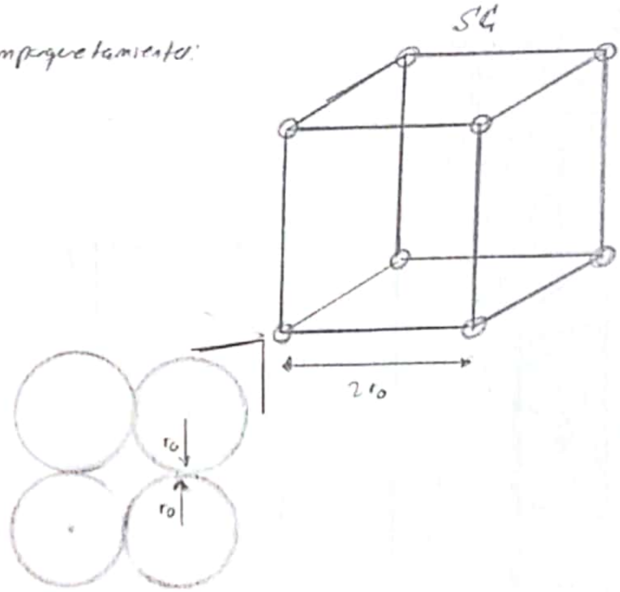
Partiendo de la definición del factor de empaquetamiento:

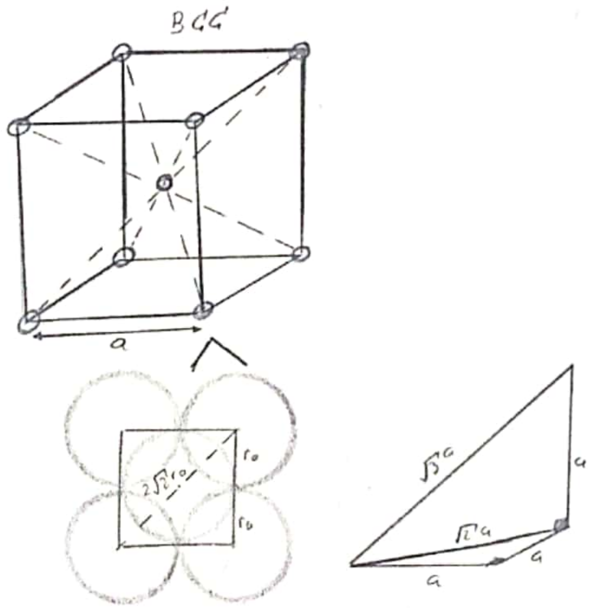
$$P_E := \frac{N V_{atomos}}{V_{celda}}$$

a) Para el caso de una estructura cubica simple (SC), si se considera que el radio atómico es: r_0, entonces:

$$P_E = \frac{(1)\frac{4}{3}\pi(r_0)^3}{(2r_0)^3} \quad \text{(1 átomo/c.u.)}$$

$$\Rightarrow P_E = \frac{\pi}{6}$$





b) Para el caso de una estructura cubica centrada en el cuerpo (BCC), si se considera que el radio atomico es: r_0,

Vease que:

$$P_E = \frac{(2)\frac{4}{3}\pi(r_0)^3}{a^3} \quad \text{(2 átomos/c.u.)}$$

Ahora, para el Volumen de la celda: $V_{celda} = a^3$

$$\sqrt{3}a = 4r_0$$

$$\therefore a = \frac{4}{\sqrt{3}}r_0$$

Por tanto:

$$P_E = \frac{\frac{8}{3}\pi(r_0)^3}{(\frac{4}{\sqrt{3}}r_0)^3}$$

$$\Rightarrow P_E = \frac{8}{3}\cdot\frac{3\sqrt{3}}{64}\pi$$

$$\therefore P_E = \frac{\sqrt{3}\pi}{8}$$

c) Para el caso de una estructura cúbica centrada en las caras (FCC), si se considera que el radio atómico es: r_0, entonces:

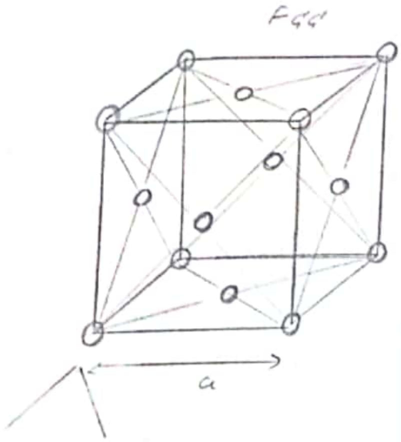
$$P_E = \frac{(4)\ \frac{4}{3}\pi (r_0)^3}{a^3} \qquad (4 \text{ átomos/c.u.})$$

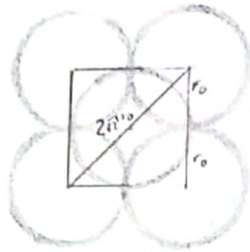
Ahora, de: $a = 2\sqrt{2} r_0$, entonces:

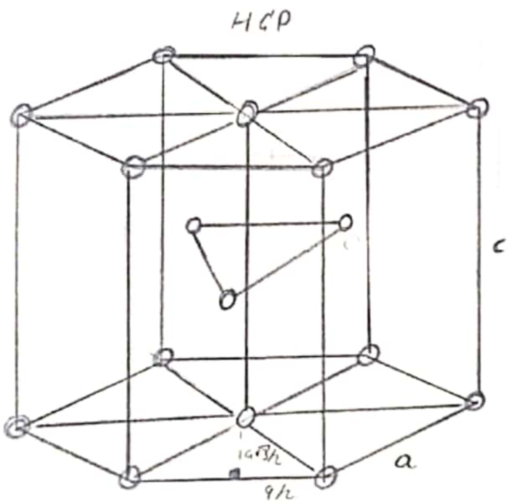
$$P_E = \frac{\frac{16}{3}\pi r_0^3}{(2\sqrt{2} r_0)^3}$$

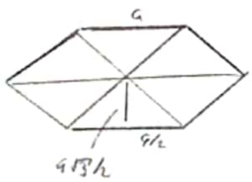
$$\Rightarrow P_E = \frac{\frac{16}{3}\pi r_0^3}{16\sqrt{2} r_0^3}$$

$$\therefore P_E = \frac{\sqrt{2}\pi}{6}$$









d) Para el caso de una estructura Hexagonal compacta (HCP), si se considera que el radio atómico es r_0, entonces:

$$P_E = \frac{(6)\ \frac{4}{3}\pi (r_0)^3}{(P a_p) c} \qquad (6 \text{ átomos/c.u.})$$

Donde: $P = 6a$ (perímetro) $\quad c$ (altura)

$a_p = \frac{a\sqrt{3}}{2}$ (apotema)

Por tanto:

$$P_E = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \frac{r_0^3}{a^2 c}$$

De un análisis geométrico, se obtiene que: $a^2 c = \frac{16}{\sqrt{6}} r_0^3$

$$\Rightarrow P_E = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \cdot \frac{r_0^3}{16/\sqrt{6}\ r_0^3}$$

$$\therefore P_E = \frac{\sqrt{2}\pi}{6}$$

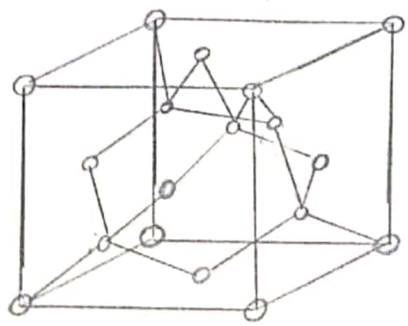
e) Para el caso de una estructura tipo diamante. Si se considera que el radio atómico es: r_0, entonces:

$$P_E = \frac{(8)\ \frac{4}{3}\pi (r_0)^3}{a^3}$$

Tomando $a = \frac{8}{\sqrt{3}} r_0$

$$\Rightarrow P_E = \frac{\frac{32}{3}\pi r_0^3}{\frac{512}{3\sqrt{3}} r_0^3} = \frac{96\sqrt{3}}{1536}\pi$$

$$\therefore P_E = \frac{\sqrt{3}\pi}{16}$$



3.- Discutir (fisicamente) porque un cristal no puede poseer 5 ejes de simetria rotacional.

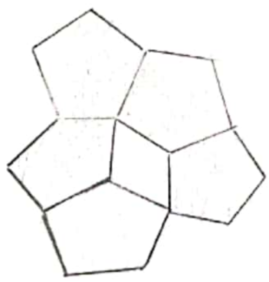
La estructura cristalina es un conjunto de átomos unidos por enlaces (de algun tipo), de forma ordenada. Estas estructuras conforman diversas redes geometricas, las cuales, dados los parametros físicos de enlaces, conforman estructuras complejas.

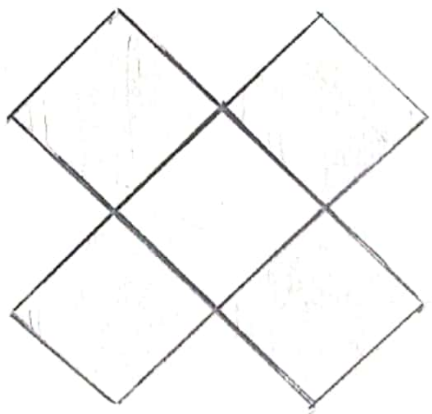
Las estructuras cristalinas, mas comunes ($\mathbb{R}^3$), son:

- Cubica centrada en las caras (FCC)
- Cubica centrada en el cuerpo (BCC)
- Cubica simple (CS)
- Hexagonal compacta (HCP)

De forma que la mayoria de compuestos solidos tienen alguna de estas estructuras. Los compuestos formados por estructuras cristalinas se conforman mediante repeticiones inmensas de lo que se conocen como: celdas unitarias. De forma que si se conocen las distancias angulos y ejes de las celdas, se puede conocer la estructura y caracteristicas del material.

Dado que la naturaleza de una estructura cristalina se basa en una combinación geometrico-físico, donde se busca que la estructura sea estable, entonces hay restricciones para la creación de estos cristales. Las estructuras cristalinas suelen tener simetrias del tipo: 2, 3, 4, 6



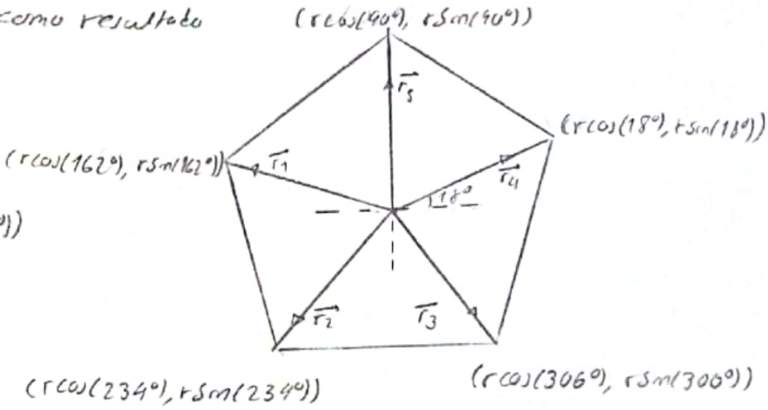


4-Fold

Sea una estructura cristalina con 5-folds (5 ejes de simetría rotacional): $\vec{r_1}, \vec{r_2}, \vec{r_3}, \vec{r_4}, \vec{r_5}$

De la condición de: $\forall\, i, j \in [1,5] \subset \mathbb{N},\ \exists\, k \in [1,5] \subset \mathbb{N}: \ \vec{r_i} + \vec{r_j} = \vec{r_k}$.

Es decir, cualquier suma de simetrías debe dar como resultado otra simetría ya conocida. Vease que



$$\vec{r_1} + \vec{r_4} = (r\cos(162°), r\sin(162°)) + (r\cos(18°), r\sin(18°))$$

$$\Rightarrow \vec{r_1} + \vec{r_4} = (r\cos(162°) + r\cos(18°),\ r\sin(162°) + r\sin(18°))$$

De: $\cos(162°) = -\cos(18°) \ \wedge \ \sin(162°) = \sin(18°)$

$$\Rightarrow \vec{r_1} + \vec{r_4} = (0, 2r)$$

Pero: $\nexists\, \vec{r_1}, \vec{r_2}, \vec{r_3}, \vec{r_4}, \vec{r_5}: \ \vec{r_i} = (0, 2r)$.

Por tanto: $\vec{r_1}$ y $\vec{r_2}$ no generan otro eje rotacional conocido. Por tanto, no se puede conformar una estructura cristalina con 5 ejes de simetría rotacional.

9.- Mostrar apartir de los resultados de la teoria electromagnetica de Maxwell, para onas planas con capacidades de ser buenos conductores ($\sigma \to \infty$, $\kappa \to \infty$, con σ la conductividad y κ la constante dielectrica), se debe esperar una alta superficie reflejante y una fuerte absorción interna.

Sean las ecuaciones de Maxwell:

$$\nabla \cdot \vec{E} = \rho/\varepsilon_0 \qquad \nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \qquad \nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

De la definición de densidad electrica: $\vec{J} = \sigma \vec{E}$, para $\nabla \times \vec{B}$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \sigma \vec{E} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Ahora, vease el Laplaciano del campo electrico: $\nabla^2 \vec{E}$; de la identidad
$\nabla^2 \vec{F} = \nabla(\nabla \cdot \vec{F}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{F})$, entonces

$$\nabla^2 \vec{E} = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla \times (\nabla \times \vec{E})$$

$$\rightarrow \nabla^2 \vec{E} = \nabla(\rho/\varepsilon_0) - \nabla \times \left(-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}\right)$$

De: $\nabla a = 0 \quad \forall a$ constante $\wedge \quad \nabla \times \partial_t = \partial_t \nabla \times$

$$\Rightarrow \nabla^2 \vec{E} = \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \vec{B})$$

$$\Rightarrow \nabla^2 \vec{E} = \frac{\partial}{\partial t}\left[\mu_0 \sigma \vec{E} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}\right]$$

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu_0 \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

Esta es la ecuación de onda amortiguada. Tomando como solución a:
$\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$, tal que $E_z = E_0 e^{i(\omega t - \beta z)} e^{-\alpha z}$. Entonces, para z:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2} = \mu_0 \sigma \frac{\partial E_z}{\partial t} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial z^2}\left[E_0 e^{i(\omega t - \beta z) - \alpha z}\right] = \mu_0 \sigma \frac{\partial}{\partial t}\left[E_0 e^{i(\omega t - \beta z) - \alpha z}\right] + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left[E_0 e^{i(\omega t - \beta z) - \alpha z}\right]$$

$$\Rightarrow E_0 e^{i(\omega t - \beta z) - \alpha z}(-i\beta - \alpha)^2 = \mu_0 \sigma E_0 e^{i(\omega t - \beta z) - \alpha z}(i\omega) + \frac{1}{c^2} E_0 e^{i(\omega t - \beta z) - \alpha z}(i\omega)^2$$

Tomando $E_0 \neq 0 \quad \wedge \quad e^{\alpha t} > 0 \quad \forall t \in \mathbb{C}$.

$$\Rightarrow (\alpha + i\beta)^2 = i\mu_0 \sigma \omega - \frac{\omega^2}{c^2}$$

$$\therefore \quad \alpha^2 - \beta^2 + 2i\alpha\beta = i\mu_0 \sigma \omega - \frac{\omega^2}{c^2}$$

Analizando las partes reales e imaginarias:

$$\alpha^2 - \beta^2 = -\frac{\omega^2}{c^2} \quad \wedge \quad 2\alpha\beta = \mu_0 \sigma \omega$$

De: $2\alpha\beta = \mu_0\sigma\omega \Rightarrow \beta = \frac{\mu_0\sigma\omega}{2\alpha}$, entonces:

$$\alpha^2 - \beta^2 = -\frac{\omega^2}{c^2}$$

$$\Rightarrow \alpha^2 - \frac{\mu_0^2\sigma^2\omega^2}{4\alpha^2} = -\frac{\omega^2}{c^2}$$

$$\Rightarrow \frac{4\alpha^4 - \mu_0^2\sigma^2\omega^2}{4\alpha^2} = -\frac{\omega^2}{c^2}$$

$$\Rightarrow 4\alpha^4 + 4\frac{\omega^2}{c^2}\alpha^2 - \mu_0^2\sigma^2\omega^2 = 0$$

$$\Rightarrow (2\alpha^2)^2 + 2(2\alpha)\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right) + \left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 = (\mu_0\sigma\omega)^2 + \left(-\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2$$

$$\Rightarrow \left(2\alpha^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 = \mu_0^2\sigma^2\omega^2 + \omega^4/c^4$$

$$\Rightarrow 2\alpha^2 + \frac{\omega^2}{c^2} = \sqrt{\mu_0^2\sigma^2 + \frac{\omega^2}{c^4}}\,\omega$$

$$\Rightarrow 2\alpha^2 = \sqrt{\mu_0^2\sigma^2c^4 + \omega^2}\,\frac{\omega}{c^2} - \frac{\omega^2}{c^2}$$

$$\Rightarrow \alpha^2 = \left[\sqrt{\frac{\mu_0^2\sigma^2c^4}{\omega^2} + 1} - 1\right]\frac{\omega^2}{2c^2}$$

$$\Rightarrow \alpha = \sqrt{\sqrt{\frac{\mu_0^2\sigma^2c^4}{\omega^2} + 1} - 1}\;\frac{\omega}{\sqrt{2}c}$$

Tomando para un buen conductor la condición: $\frac{\mu_0\sigma c^2}{\omega} >> 1$

$$\Rightarrow \alpha \approx \sqrt{\sqrt{\frac{\mu_0^2\sigma^2c^4}{\omega^2}} - 1}\;\frac{\omega}{\sqrt{2}c}$$

$$\Rightarrow \alpha \approx \sqrt{\frac{\mu_0\sigma c^2}{\omega} - 1}\;\frac{\omega}{\sqrt{2}c}$$

$$\Rightarrow \alpha \approx \sqrt{\frac{\mu_0\sigma c^2}{\omega}\cdot\frac{\omega^2}{2c^2}}$$

$$\therefore \alpha \approx \sqrt{\frac{\mu_0\sigma\omega}{2}}$$

Ahora, para $\beta := \frac{\mu_0\sigma\omega}{2\alpha}$

$$\Rightarrow \beta = \frac{\mu_0\sigma\omega/2}{\sqrt{\mu_0\sigma\omega/2}}$$

$$\therefore \beta = \sqrt{\frac{\mu_0\sigma\omega}{2}}$$

Entonces: $\alpha = \beta = \sqrt{\frac{\mu_0\sigma\omega}{2}}$

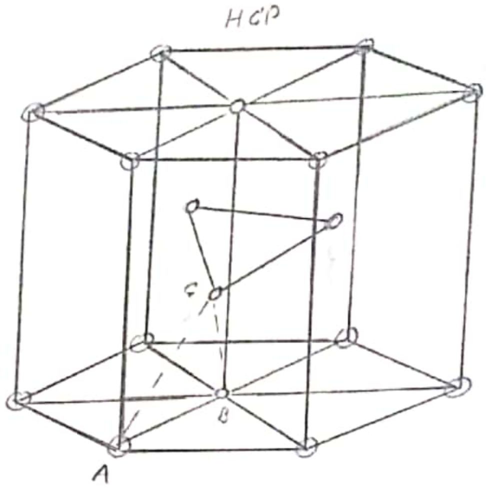
Si: $\sigma \to \infty \Rightarrow \alpha, \beta \to \infty$. Recordando que: $E_t = E_0 e^{i\omega t - i\beta z - \alpha z}$, por tanto $E \to 0$ (Totalmente reflejante)

Con lo anterior, se define el „Skin-depth" como: $\delta := \frac{1}{\alpha}$. Para este caso:

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\mu_0\sigma\omega}}$$

Si: $\sigma \to \infty \Rightarrow \delta \to 0$.

3.- **Hcp structure:** Mostrar que el ratio: c/a, para una estructura hexagonal compacta ideal, es: $(8/3)^{1/2} \approx 1.633$. Si c/a es significativamente grande que dicho valor, la estructura cristalina debe ser considerada como una composición de planos de atomos compactos, con planos no apilados.

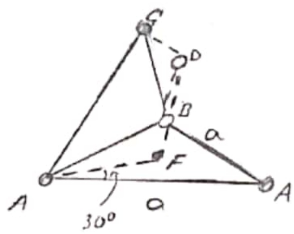


Sea una estructura hexagonal compacta (HCP). Notese que el numero de coordinación de A es 6, y el numero de coordinación de B tambien es 6.

En el caso ideal de un empaquetamiento compacto, si se quisiera agregar un átomo en el sitio intersticial de ABG, este debería ser equidistante a A, B y G.

Sea D un nuevo atomo en el intersticio del tetraedro: AABG. Entonces:

$$d(AD) = d(BD) = d(G,D)$$

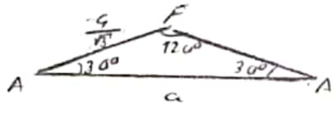


Sea F la imagen de la perpendicular desde D a la base: AAB

observese que ΔAFA, es un triangulo isosceles con dos angulos de 30°. Entonces:

$$\overline{AF} = \frac{1}{\sqrt{3}} a$$

Ahora, de: $d(A,D) = \overline{AD}$, y del teorema de pitagoras en ΔADF:

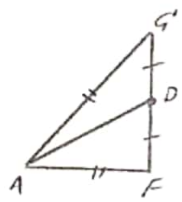


$$\overline{AD}^2 = \overline{AF}^2 + \overline{FD}^2$$

$$\Rightarrow \quad \overline{AD} = \sqrt{\frac{1}{3} a^2 + \overline{FD}^2}$$

Conociendo que: $\overline{FD}$ es colineal con $\overline{DG}$ Entonces:

$\overline{FD} = \frac{1}{2} \overline{GF}$ Sea: $\overline{GF} = c$ Entonces:



$$\overline{AD} = \sqrt{\frac{1}{3} a^2 + \frac{c^2}{4}}$$

Sabiendo que $\overline{AD} = a$

$$\Rightarrow \quad a^2 = \frac{1}{3} a^2 + \frac{c^2}{4}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{2}{3} a^2 = \frac{c^2}{4}$$

$$\Rightarrow \quad \left(\frac{c}{a}\right)^2 = \frac{8}{3}$$

$$\therefore \quad \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1.633$$