

Estructura de la Materia 2

IGNACIO POGGI

ignaciop.3@gmail.com

11 de octubre de 2022

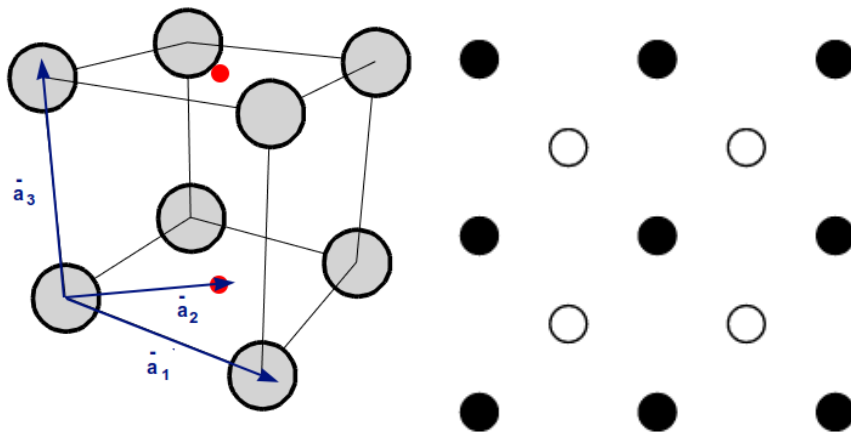
Resumen

Apuntes y ejercicios resueltos de Estructura de la Materia 2 (2º cuatrimestre 2022).

1. Guía 1: Redes Cristalinas y Espacio Recíproco

1.1.

- En este ítem nos piden describir una estructura cúbica centrada en la base (SC con puntos adicionales en las caras horizontales de la celda).



(a) Red cúbica centrada en la base con una posible elección de vectores primitivos.

(b) Vista cenital de la red periódica.

Esta red puede pensarse como suma de planos con dos redes SC en dos dimensiones superpuestas, por lo tanto, es red de Bravais (de ahora en adelante, RB).

Una posible elección de vectores primitivos es la siguiente:

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\hat{x} \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \\ \vec{a}_3 = a\hat{z} \end{cases}$$

- Para la cúbica centrada en los lados (SC con puntos adicionales en las caras verticales de la celda), es análogo al caso a), describiendo a los vectores primitivos de la siguiente manera:

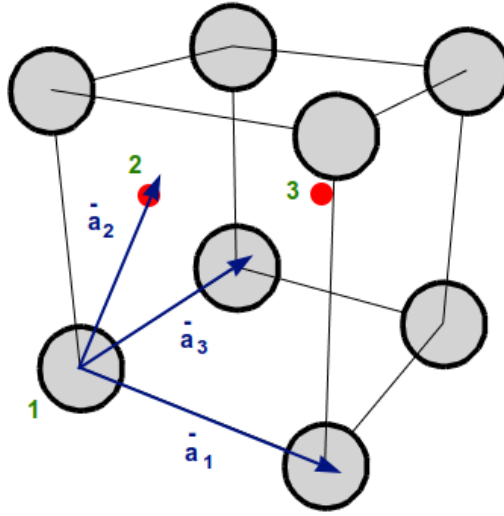


Figura 2: Red cúbica centrada en la base con una posible elección de vectores primitivos.

Observamos que no es una RB (como vemos en la figura (2) en color verde, desde el punto 2, vemos al punto 3; pero desde éste no llegamos a 1). Podemos describir la red como una $SC + base$:

$$base = \{\vec{0}, \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{y}), \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})\}$$

- Para la red cúbica centrada en las aristas, tenemos el mismo problema que la anterior (desde el punto 2 tengo al punto vecino 3; que no se ve desde 1 \Rightarrow no es RB).

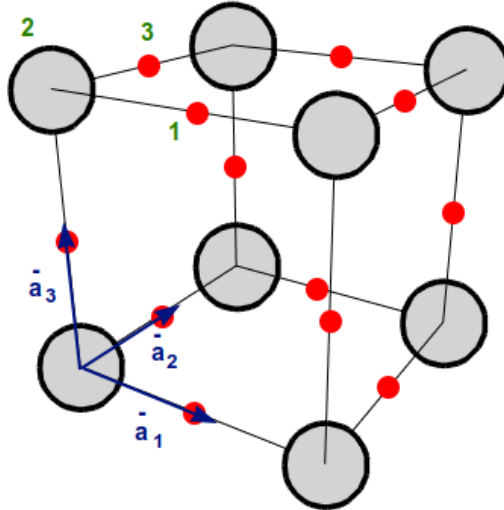


Figura 3: Red cúbica centrada en la base con una posible elección de vectores primitivos.

La describimos así:

$$SC + base = SC + \{\vec{0}, \frac{a}{2}\hat{x}, \frac{a}{2}\hat{y}, \frac{a}{2}\hat{z}\}$$

1.2.

Red BCC (Body Centered Cube):

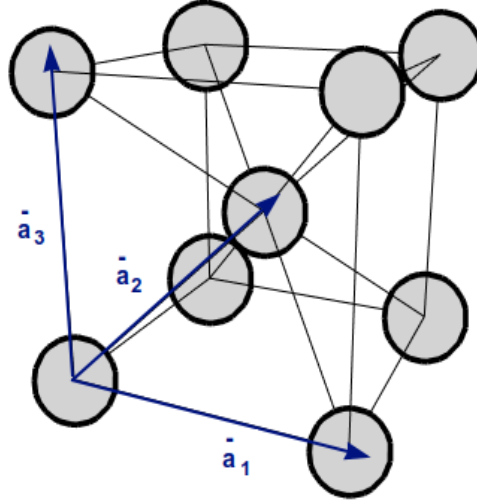


Figura 4: Red BCC con una posible elección de vectores primitivos.

Como vemos en la figura (4), uno de los posibles conjuntos de vectores primitivos para esta red es:

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\hat{x} \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{a}_3 = a\hat{z} \end{cases}$$

Otra elección:

$$\begin{cases} \vec{a}'_1 = a(\hat{x} + \hat{y}) \\ \vec{a}'_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{a}'_3 = a(\hat{y} + \hat{z}) \end{cases}$$

Para hallar el volumen de la celda unidad, utilizamos la relación:

$$V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| \quad (1)$$

donde los \vec{a}_i son los vectores primitivos. Entonces:

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ 0 & 0 & a \end{vmatrix} = \left(\frac{a^2}{2}, -\frac{a^2}{2}, 0\right) = \frac{a^2}{2}(\hat{x} - \hat{y})$$

$$\Rightarrow \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = (a, 0, 0) \cdot \left(\frac{a^2}{2}, -\frac{a^2}{2}, 0\right) = \frac{a^3}{2}$$

$$\Rightarrow V_{BCC} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = \left|\frac{a^3}{2}\right| = \frac{a^3}{2}$$

Con la otra elección de vectores primitivos \vec{a}'_i , obtenemos el mismo resultado.

Red FCC (Face Centered Cube):

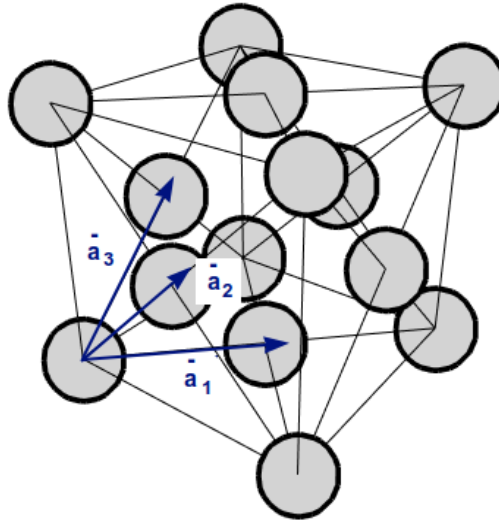


Figura 5: Red FCC con una posible elección de vectores primitivos.

Observamos en la a figura (5), los vectores primitivos para esta red:

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \end{cases}$$

Una elección más turbia sería:

$$\begin{cases} \vec{a}'_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) - a\hat{z} \\ \vec{a}'_2 = a\hat{x} + \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{a}'_3 = a\hat{z} \end{cases}$$

Luego:

$$\begin{aligned} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 &= \begin{vmatrix} \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \left(-\frac{a^2}{4}, -\frac{a^2}{4}, \frac{a^2}{4}\right) = \frac{a^2}{4}(-\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \\ \Rightarrow \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) &= \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right) \cdot \left(-\frac{a^2}{4}, -\frac{a^2}{4}, \frac{a^2}{4}\right) = -\frac{a^3}{4} \end{aligned}$$

Aplicamos (1) para hallar el volumen de esta celda:

$$\Rightarrow V_{FCC} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = \left| -\frac{a^3}{4} \right| = \frac{a^3}{4}$$

1.3.

Los primeros vecinos, por definición, son todos aquellos que están a distancia mínima de un elemento de la red. Se denomina **número de coordinación** al numero total de éstos.

Los segundos y terceros vecinos son los que le siguen en distancia, respectivamente.

Red cúbica simple:

Para identificar más fácilmente a los vecinos, veámosla en 2D (teniendo en cuenta que la figura se repite en $\pm\hat{z}$, hacía afuera/dentro de la hoja):

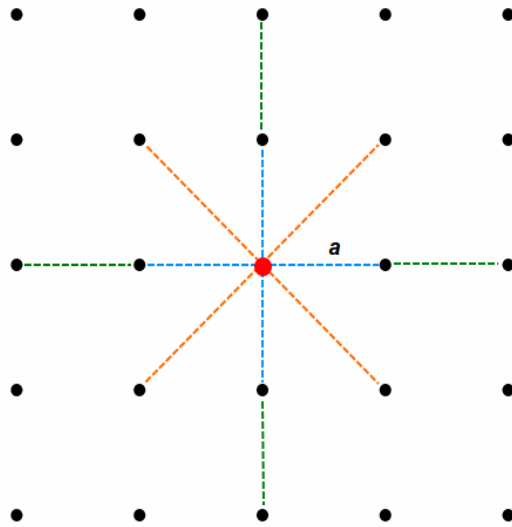
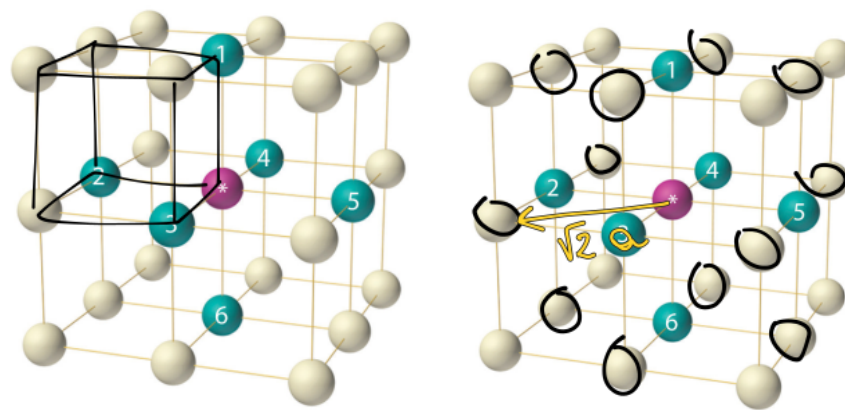


Figura 6: Plano xy de la red cúbica. Las líneas azules marcan la distancia a primeros vecinos, las naranjas a segundos vecinos; y las verdes a terceros vecinos. El parámetro de red es a .

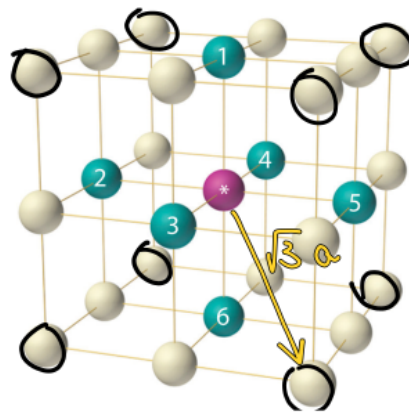
Simplemente contamos los puntos y calculamos las respectivas distancias al elemento elegido (rojo):

$$\begin{aligned} \# \text{ primeros vecinos} &= 6 \text{ (4 en el plano } xy, 1 \text{ en } +\hat{z} \text{ y } 1 \text{ en } -\hat{z}) \Rightarrow d = a \\ \# \text{ segundos vecinos} &= 12 \text{ (4 en el plano } xy, 4 \text{ en } +\hat{z} \text{ y } 4 \text{ en } -\hat{z}) \Rightarrow d = \sqrt{2}a \\ \# \text{ terceros vecinos} &= 8 \text{ (4 en } +\hat{z} \text{ y } 4 \text{ en } -\hat{z}) \Rightarrow d = \sqrt{3}a \end{aligned}$$

En 3D:



(a) Primeros vecinos en color verde. (b) Segundos vecinos marcados en negro.



(c) Terceros vecinos marcados en negro.

Figura 7: Primeros, segundos y terceros vecinos de una red SC tridimensional.

Red BCC:

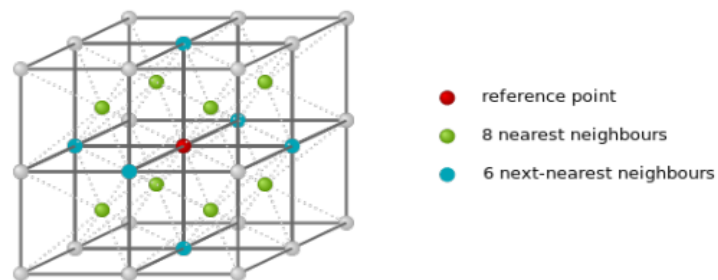


Figura 8: Primeros, segundos y terceros vecinos de una red BCC tridimensional.

Red FCC:

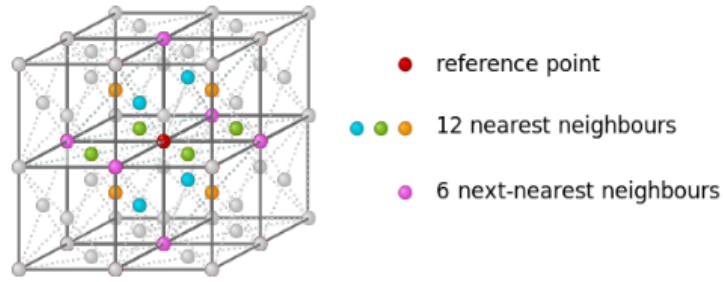


Figura 9: Primeros, segundos y terceros vecinos de una red FCC tridimensional.

1.4.

La fracción de empaquetamiento es la relación entre el volumen de las esferas (átomos) y el volumen de la celda unidad:

$$\rho_X = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{V_X} \quad (2)$$

donde

$$r = \frac{d_{1^\circ \text{vecinos}}}{2}$$

En la siguiente figura se observan las distribuciones aproximadas para cada red pedida:

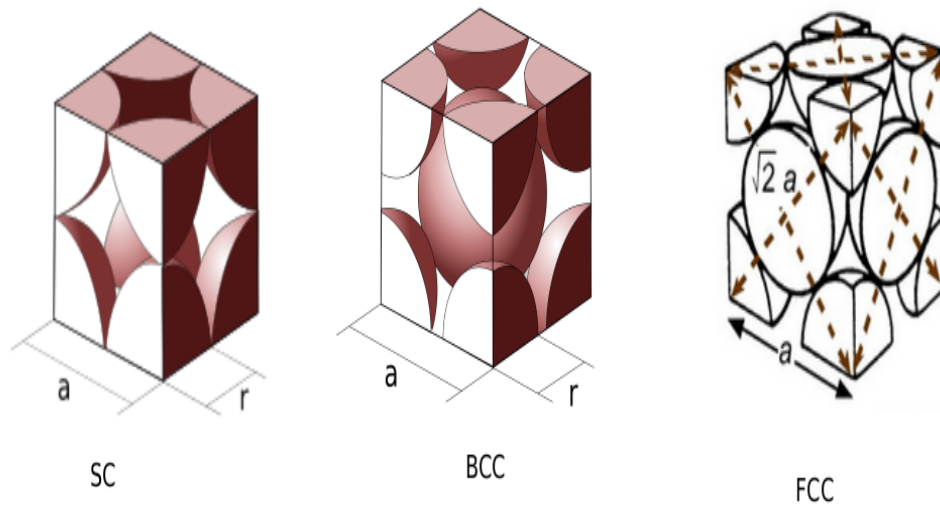


Figura 10: Empaquetamientos de las redes SC, BCC y FCC.

Aplicamos la ecuación (2) a cada red, con los datos de las distancias a primeros vecinos y volumen de cada celda unidad obtenidos en el ejercicio anterior, entonces:

$$\rho_{SC} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{V_{SC}} = \frac{\frac{4}{3}\pi (\frac{a}{2})^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0,52$$

$$\rho_{BCC} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{V_{BCC}} = \frac{\frac{4}{3}\pi(\frac{\sqrt{3}}{4}a)^3}{\frac{a^3}{2}} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0,68$$

$$\rho_{FCC} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{V_{FCC}} = \frac{\frac{4}{3}\pi(\frac{\sqrt{3}}{2}a)^3}{\frac{a^3}{4}} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi \approx 0,74$$

Para la red diamante, veamos un esquema para orientarnos un poco mejor:

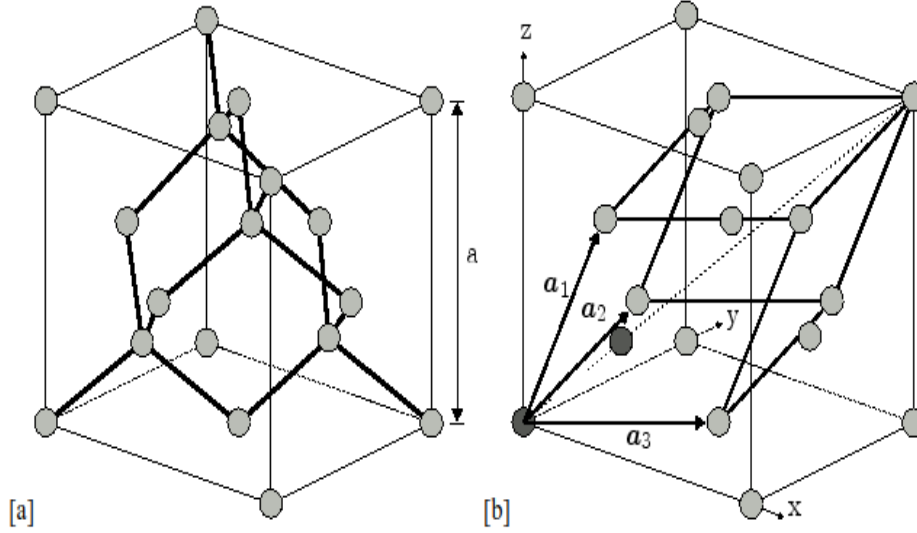


Figura 11: (a) Celda unidad de la estructura de diamante. (b) Se resaltan los vectores primitivos de una FCC, más los dos átomos que conforman la base.

Esta red puede pensarse como dos FCC intercaladas, desplazadas una de la otra sobre la diagonal en $\frac{a}{4}(1, 1, 1)$.

Podemos hacer la siguiente elección para los vectores primitivos:

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \end{cases}$$

Entonces:

$$Diamante = FCC + \{\vec{0}, \frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\}$$

Finalmente, calculemos su fracción de empaquetamiento:

$$\rho_{DIAMANTE} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{V_{DIAMANTE}} = \frac{\frac{4}{3}\pi(\frac{\sqrt{3}}{8}a)^3}{\frac{a^3}{4}} = \frac{\sqrt{3}^3}{96}\pi \approx 0,17$$

1.5.

2. Referencias