Departamento de Física
Facultad de Ciencias
Universidad de Chile

Introducción a la Física del Estado Sólido

Profesores: Eduardo Menéndez
Sergio Davis, Gonzalo Gutiérrez

Guía 1: Estructura cristalina. Cap. 1 Kittel; Cap. 4 y 5 A-M. Vie.21 Marzo 2014

---

1. Muchos materiales (ej: Cu,Au) poseen una red cristalina de tipo fcc monoatómica. a) Modelando cada atomo como una esfera rigida, encuentre la relación r/a (r: radio atómico, a: constante de la red) para que las esferas estén en contacto.
   b) Encuentre la fracción del volumen total que es ocupado por las esferas.

2. La estructura del Si se describe por una red fcc y una base diatómica, cuyas coordenadas relativas al punto de la red correspondiente son $(0, 0, 0)$ y $(a/4, a/4, a/4)$, (a es la constante de la red). Calcule la distancia de enlace en función de a. A partir del dato de la densidad $\rho = 2{,}33$ g/cm^3 y la masa atómica $m(Si) = 28{,}086$ uma (1 uma=$1{,}66 \times 10^{-27}$ kg), calcule la constante de la red.

3. Para el silicio, a) Modelando cada átomo como una esfera rígida, encuentre la relación r/a (r radio atómico, a constante de la red) para que las esferas estén en contacto. b) Encuentre la fracción del volumen total que es ocupado por las esferas. c) Compare las estructuras del Si con la del Cu, en cuanto a número de coordinación y fracción de volumen ocupado.

4. El compuesto TeO_2 presenta una estructura tetragonal con parámetros de red $a = 4{,}8082$ Å, $c = 7{,}612$ Å. Encuentre el ángulo que forman entre sí los planos (011) y (111). Encuentre el ángulo que forman las direcciones [011] y [111].

5. El níquel tiene una estructura de cristal de Bravais con una red cúbica centrada en las caras (bcc). Si se sustituyen los átomos de níquel situados en los centros de las caras por átomos de aluminio, se obtiene una aleación ordenada níquel-aluminio. Determine la composición de esta aleación, la red, y la base.

6. Demuestre que los únicos de simetría compatibles con una red son los ejes de orden 2,3, 4 y 6.

7. Considere los planos cristalinos (100) y (001); la red es fcc y los índices se refieren a la celda cúbica convencional. Encuentre los índices de estos planos referidos a los ejes primitivos.

8. Calcule la máxima fracción de volumen total que pueden ocupar esferas duras en las redes cúbica simple y cúbica centrada en el interior.

9. Considere los vectores

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \qquad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \qquad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \tag{1}$$

   a) Demuestre que $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$.
   b) Demuestre que si $\mathbf{R} = u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3$ y $\mathbf{G} = v_1\mathbf{b}_1 + v_2\mathbf{b}_2 + v_3\mathbf{b}_3$ entonces $\exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}) = 1$.
   c) Demuestre que el plano cristalino (hkl) es perpendicular al vector $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$.