

ESTRUCTURA DE LA MATERIA 2
RESOLUCIÓN EJ. 14 Y 16, GUÍA 1

Ejercicio 14: La base canónica de la red SC de parámetro de red a es: $\{a\hat{x}, a\hat{y}, a\hat{z}\}$. La base de la red recíproca (RR) es: $\{\frac{2\pi}{a}\hat{x}, \frac{2\pi}{a}\hat{y}, \frac{2\pi}{a}\hat{z}\} \equiv \{\mathbf{b}_x, \mathbf{b}_y, \mathbf{b}_z\}$. Si pensamos la red FCC como una SC más una base¹, la opción más común es:

$$\text{FCC: SC} + \left\{ \vec{0}, \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}), \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}) \right\}$$

El factor de estructura $S(\mathbf{q})$ es, por definición:

$$S(\mathbf{q}) = e^0 + e^{i\mathbf{q} \cdot \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})} + e^{i\mathbf{q} \cdot \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})} + e^{i\mathbf{q} \cdot \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})}$$

Para los \mathbf{q} en la RR, $\mathbf{q} \equiv \mathbf{K} = n_x\mathbf{b}_x + n_y\mathbf{b}_y + n_z\mathbf{b}_z$, con $n_i \in \mathbb{Z}, \forall i$:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}) &= 1 + e^{i\pi(n_x+n_y)} + e^{i\pi(n_y+n_z)} + e^{i\pi(n_z+n_x)} \\ &= 1 + (-1)^{n_x+n_y} + (-1)^{n_y+n_z} + (-1)^{n_z+n_x} \end{aligned}$$

Es fácil verificar que los siguientes casos son todos los posibles, si (n_x, n_y, n_z) son:

$$\begin{aligned} \text{todos pares: } & S = 4 \\ \text{uno impar, dos pares: } & S = 0 \\ \text{uno par, dos impares: } & S = 0 \\ \text{todos impares: } & S = 4 \end{aligned}$$

El ítem b queda para los alumnos, pero conceptualmente es esperable obtener una red BCC, ya que la RR de la FCC es una BCC con parámetro $4\pi/a$.²

Ejercicio 16: El ítem a es el más difícil de entender, porque no es obvio que nos piden. Lo más sencillo es, de la tabla provista, obtener las relaciones entre los ángulos y tratar de ver con cuál de las posibles redes, BCC, FCC o diamante se corresponden. Las condición para un máximo de interferencia es:

$$K = 2k \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) = 2\frac{2\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \quad (1)$$

donde λ es la longitud de onda de los Rx incidentes, ϕ es el ángulo de scattering (ϕ es dos veces el ángulo de Bragg) y K es el módulo de los vectores de la RR. La idea es entonces hacer “ingeniería inversa” y a partir de los K obtener los ϕ posibles. La red BCC tiene recíproca FCC, las distancias a los cuatro vecinos más cercanos es³:

$$\text{BCC} \xrightarrow{\text{RR}} \text{FCC: } K = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{4}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{6}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{8}$$

Para la red FCC:

$$\text{FCC} \xrightarrow{\text{RR}} \text{BCC: } K = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{4}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{8}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{11}$$

¹Ver Ashcroft & Mermin, pag. 45, ec. 4.8.

²Ibid., cap. 5, pag. 88.

³Ibid., ej. 7, pag. 83

La red diamante puede pensarse como una red BCC con extinciones⁴:

$$\text{Diamante} \xrightarrow{\text{RR}} \text{BCC, con extinciones: } K = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{8}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{11}, \frac{2\pi}{a}\sqrt{16}$$

Esto genera, a partir de (1), la siguiente relación entre ángulos:

$$\text{BCC: } \frac{\sin(\phi_2/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{2}; \frac{\sin(\phi_3/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{3} \text{ y } \frac{\sin(\phi_4/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{4}$$

$$\text{FCC: } \frac{\sin(\phi_2/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{\frac{4}{3}}; \frac{\sin(\phi_3/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{\frac{8}{3}} \text{ y } \frac{\sin(\phi_4/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{\frac{11}{3}}$$

$$\text{Diamante: } \frac{\sin(\phi_2/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{\frac{8}{3}}; \frac{\sin(\phi_3/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{\frac{11}{3}} \text{ y } \frac{\sin(\phi_4/2)}{\sin(\phi_1/2)} = \sqrt{\frac{16}{3}}$$

Si reemplazamos los ángulos de la tabla, podemos verificar que A = FCC; B = BCC y C = Diamante. El ítem b es más sencillo. Si λ es dato, podemos despejar a a partir de la relación (1) obteniendo previamente, por ejemplo, K_1 al reemplazar ϕ_1 de la tabla. Así, obteniendo $K_1 = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\phi_1}{2}\right)$ y usando que:

$$\text{BCC: } K_1 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{2}$$

$$\text{FCC: } K_1 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$$

$$\text{Diam.: } K_1 = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$$

podemos despejar el valor de a en cada caso. Para el ítem c, debemos tener en cuenta que la estructura zincblenda no es monoatómica⁵ y entonces el factor de estructura atómico no se factoriza. En consecuencia, en general, no podemos esperar que las extinciones ocurran. Por lo tanto, todos los posibles máximos aparecerían.

⁴*Ibid.*, pag: 106-107.

⁵*Ibid.*, pag. 81.