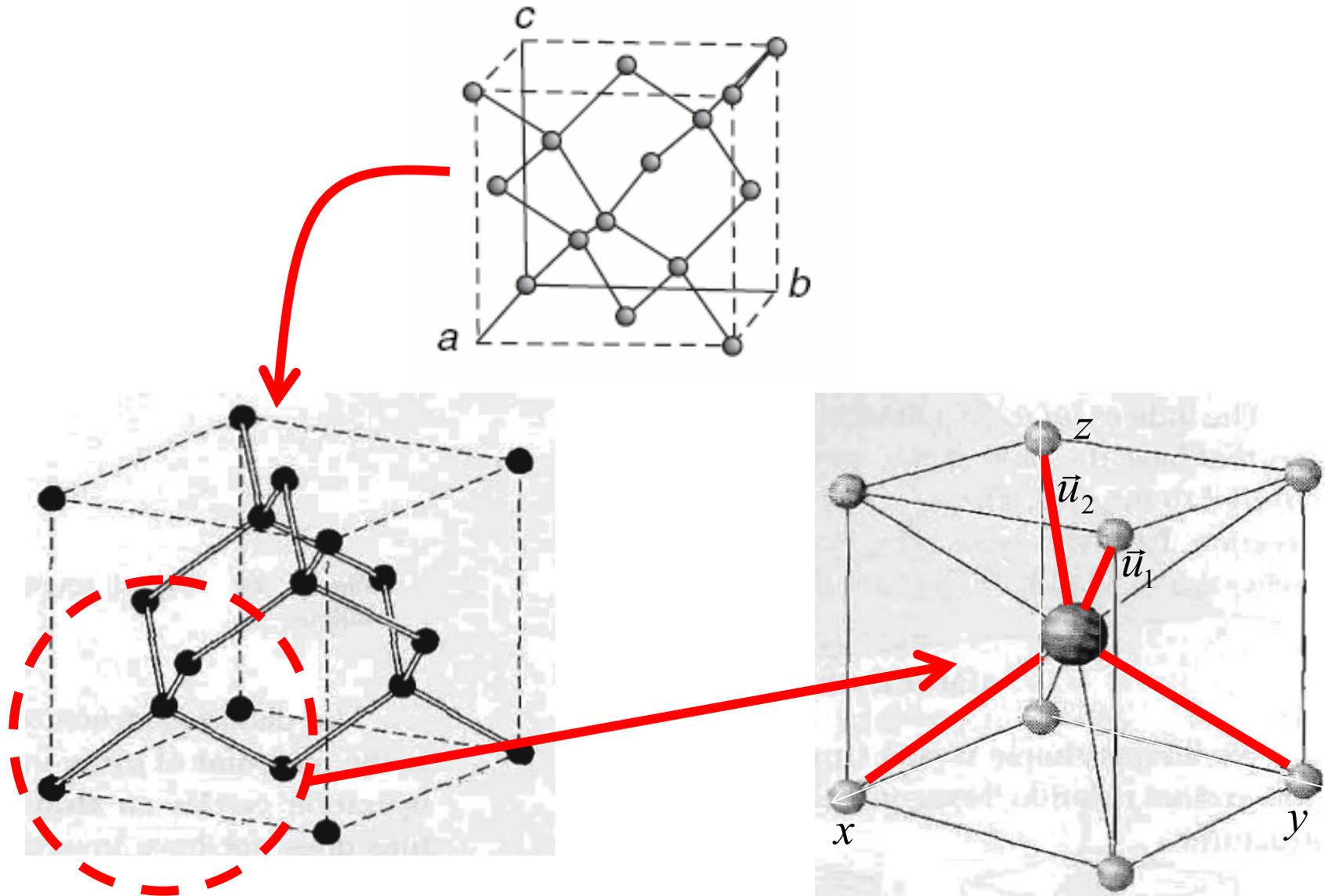
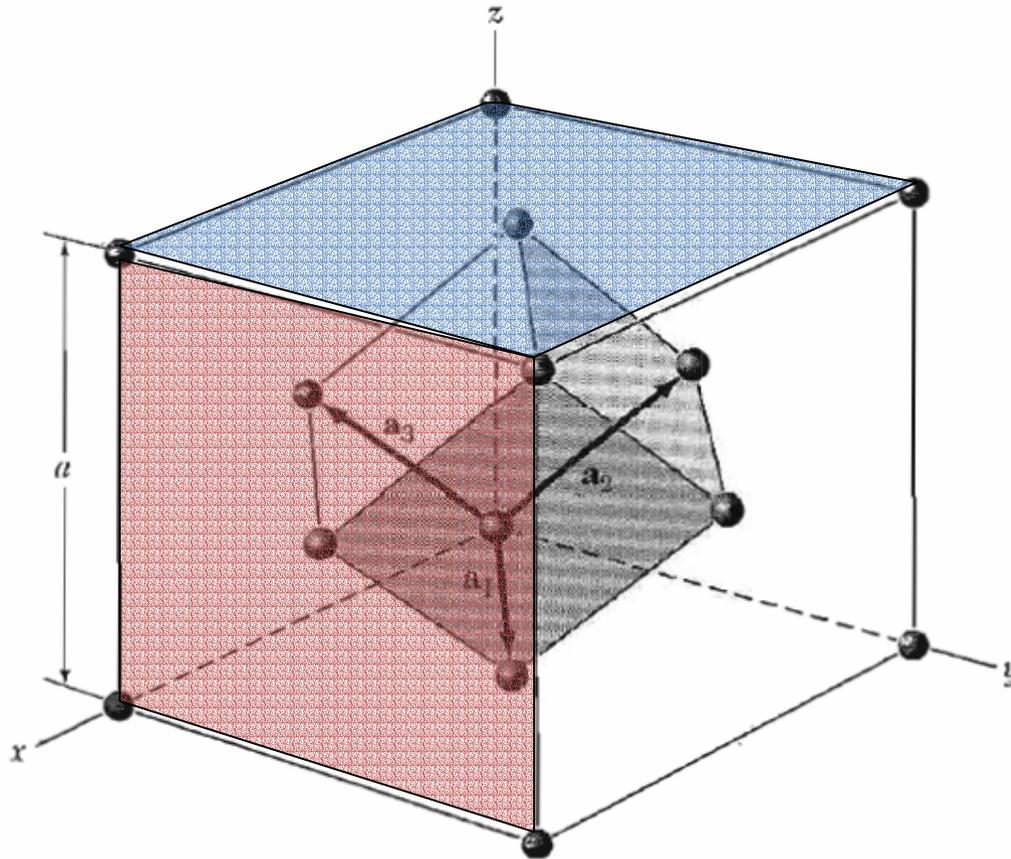


problemas

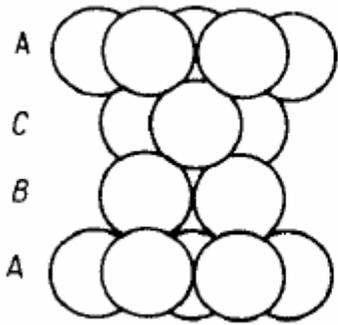
Problema 1. **Ángulos tetraedrales.** Los ángulos entre las uniones tetraedrales de la estructura diamante son iguales a los que existen entre las diagonales de un cubo. Hacer un análisis vectorial para hallar el valor del ángulo.



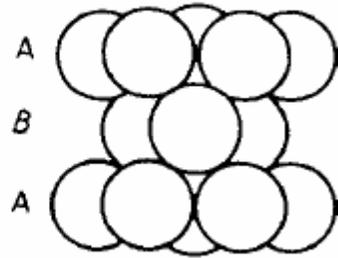
Problema 2. **Índices de planos.** Considerar los planos con índices (100) y (001). La red es fcc y los índices están referidos a la celda cúbica convencional. ¿Cuáles son los índices de esos planos cuando se refieren a la celda primitiva?



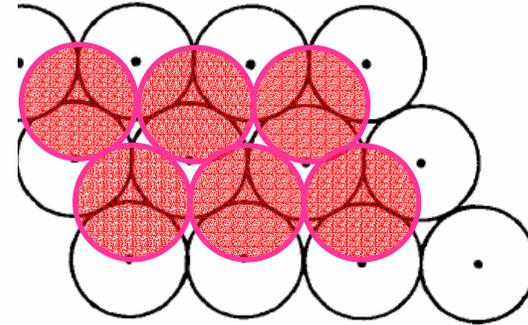
Problema 3. **Estructura hcp.** Mostrar que la relación c/a para la estructura hexagonal compacta es $(8/3)^{1/2} = 1.6333\dots$



fcc



hcp



plano basal hcp

Problema 4: Red hexagonal

Los vectores de traslación primitivos de la red hexagonal pueden tomarse como

$$\vec{a} = \left(\frac{3^{1/2} a}{2} \right) \hat{x} + \left(\frac{a}{2} \right) \hat{y} \quad \vec{b} = -\left(\frac{3^{1/2} a}{2} \right) \hat{x} + \left(\frac{a}{2} \right) \hat{y} \quad \vec{c} = c \hat{z}$$

(verificar)

(a) Mostrar que el volumen de la celda primitiva es $V_{\text{Celda}} = \frac{3^{1/2}}{2} a^2 c$

(b) Mostrar que los vectores de traslación primitivos son

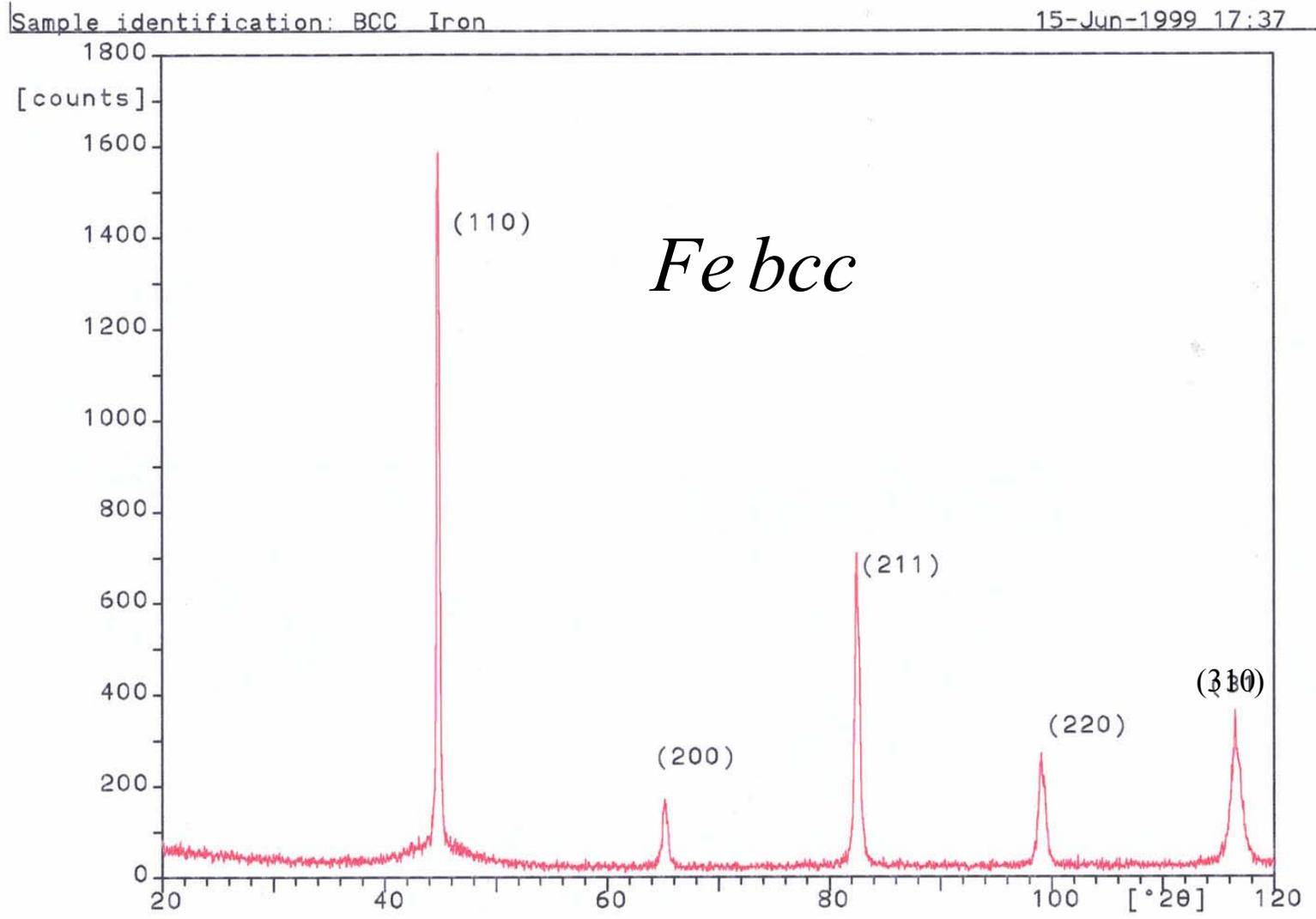
$$\vec{a}^* = \left(\frac{2\pi}{3^{1/2} a} \right) \hat{x} + \left(\frac{2\pi}{a} \right) \hat{y} \quad \vec{b}^* = -\left(\frac{2\pi}{3^{1/2} a} \right) \hat{x} + \left(\frac{2\pi}{a} \right) \hat{y} \quad \vec{c} = \left(\frac{2\pi}{c} \right) \hat{z}$$

¿A qué estructura cristalina pertenece la red recíproca? Qué puede decirse de su orientación relativa a la red directa?

(c) Intente hacer un esquema de la primera zona de Brillouin (es la celda unitaria de la Red Recíproca) y calcule su volumen; puede usarse la identidad

$$(\vec{c} \times \vec{a}) \times (\vec{a} \times \vec{b}) = (\vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})) \vec{a}$$

Problema 5: análisis del difractograma del α -Fe (bcc) tomado con radiación de ánodo de Cu ($K\alpha$)



Problema 6: **arreglo unidimensional biatómico** (para después de la clase 4)

Considerar una línea de átomos $ABAB\dots AB$ con una separación $A-B$ de $a/2$ y con factores de forma atómicos f_A y f_B , respectivamente. El haz incidente de R_x es perpendicular a la línea de átomos.

(a) Mostrar que la condición de interferencia es $n\lambda = a\cos\theta$, siendo θ el ángulo entre el haz difractado y la línea de átomos.

(b) Mostrar que intensidad del haz difractado para n impar es proporcional a

$$|f_A - f_B|^2$$

y para n par es proporcional a

$$|f_A + f_B|^2$$

Qué pasa si $f_A = f_B$?

Problema 7: En el **potencial de Lennard - Jones** determinar ϵ y σ en función de A y B y viceversa.

Problema 8: **Energía cohesiva** del Ne bcc y fcc

Usando el potencial de Lennard – Jones calcular la relación entre las energías de cohesión del Ne en estas dos estructuras. Las sumas de red para la estructura bcc son:

$$\sum_{ij}' p_{ij}^{-12} = 9.11418 \qquad \sum_{ij}' p_{ij}^{-6} = 12.2533$$

Problema 9: **Hidrógeno molecular sólido**

Para el H₂ $\epsilon = 5 \times 10^{-15}$ ergios y $\sigma = 2.96$ Angstroms. Encontrar la energía de cohesión en kJ/mol de H₂. Suponer que cada molécula de H₂ es una esfera y utilizar la estructura fcc. Comparar el resultado con el valor experimental de 0.751 kJ/mol y discutir el origen de la diferencia con el valor calculado.

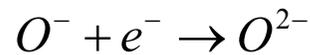
Problema 10: L KCl en la **estructura ZnS**

Usando los valores de λ , ρ y las constantes de Madelung dados en las tablas calcular la energía del KCl en la estructura ZnS y comparar con el valor correspondiente a la estructura NaCl.

Problema 11: **Cristales iónicos** divalentes

El BaO tiene la estructura del NaCl. Estimar las energías de cohesión por molécula de los cristales hipotéticos Ba^+O^- y $Ba^{2+}O^{2-}$, referida a los átomos neutros (cero de la energía). La distancia observada entre primeros vecinos es $R_0 = 0.276$ nm. Los potenciales 1ro y 2do de ionización del Ba son 5.19 y 9.96 eV. Las afinidades electrónicas del 1er y 2do electrón adicionados a un átomo neutro de oxígeno son 1.5 y -9.0 eV.

Las afinidades mencionadas son las energías liberadas en las siguientes reacciones:



Predecir qué estado de valencia ocurrirá. Suponer que R_0 es el mismo en ambos casos y desprecie la energía repulsiva.

Problema 12: **Fermiones.**

¿Cuál es el número aproximado de neutrones en una estrella de neutrones? ¿Cuál la energía del neutrón más “externo” en el estado fundamental de la estrella?

¿Porqué el nivel de Fermí tiene energía tan alta (comparar la ϵ_F de la estrella con la de un átomo). ¿Qué pasaría si la estrella estuviera compuesta de bosones?

Problema 12: Fermiones.

¿Qué importancia tiene la existencia de bandas y gaps electrónicos en sólidos?

¿Cómo puede entenderse la diferencia entre aisladores, semiconductores y conductores?

Problema 13: Fonones.

Buscar en una tabla los calores específicos a temperatura ambiente del diamante y del plomo. ¿Porqué para el diamante se encuentra un valor muy inferior al del Pb? ¿Si ambos materiales se mantuvieran sólidos a muy altas temperaturas, habría una temperatura a la cual ambos valores serían comparables? ¿Cuánto valdría el calor específico a esa temperatura?