

Métodos Matemáticos 1
Tarea 1
Vectores Cartesianos 1
Fecha de entrega 7 octubre 2005

En Física del Estado Sólido tradicionalmente se describen los núcleos atómicos en una red cristalina por los radio vector posición $\vec{r} = n_a \vec{a} + n_b \vec{b} + n_c \vec{c}$ con $\{\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}\}$ los vectores a lo largo de las aristas del paralelepípedo y n_a, n_b, n_c números enteros que representan sus componentes. Los módulos de los vectores $|\vec{a}|, |\vec{b}|$ y $|\vec{c}|$ están relacionados con las distancias interatómicas que describen el tipo de red (los parámetros de la red). Tal y como se muestra en la Figura 1¹, los vectores no son necesariamente ortogonales y los ángulos que forman entre ellos son determinantes para caracterizar el tipo de estructura cristalina².

1. El diamante tiene una estructura cristalina *cúbica de cara centrada* (*FCC* por el acrónimo inglés de *Face Center Cubic*) de lado a en la cual los átomos de carbono están dispuestos en los vértices de la celda, en el centro de sus caras (representada por la “*Cubic F*” en la Figura 1) y, adicionalmente en la posición $\vec{r} = \frac{1}{4}a(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$ si tomamos una de sus aristas como origen.
 - a) Encuentre las distancias interatómicas del átomo en la posición $\vec{r} = \frac{1}{4}a(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$ con sus primeros vecinos
 - b) Encuentre los ángulos de los enlaces covalentes del átomo en la posición $\vec{r} = \frac{1}{4}a(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$ con sus primeros vecinos
2. Considere ahora una celda *FCC* igual a la anterior con lado a . Tendremos átomos dispuestos en los vértices de la celda y en el centro de sus caras. Si consideramos $\{\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}\}$ los vectores a lo largo de las aristas del cubo (es decir $|\vec{a}| = |\vec{b}| = |\vec{c}| = a$) estos vectores formarán una base para este espacio (i por qué?). También pudimos haber elegido a los vectores $\{\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'\}$ que unen a los átomos en los centros de tres caras distintas cercanos a un vértice (también en este caso $|\vec{a}'| = |\vec{b}'| = |\vec{c}'| = a'$). Este sistema se denomina romboideo y los vértices de las celdas estarán en los átomos que centran las caras del *FCC*. Muestre que el volumen del romboide es un cuarto del cubo de lado a .
3. Todas estas estructuras cristalinas surgen de los estudios de dispersión de Rayos X por la materia. Para ello se utiliza la Ley de Bragg, $2d \sin \theta = n\lambda$ donde λ es la longitud de onda de los Rayos X y d es la distancia entre planos sucesivos de átomos. Considere una vez más una celda *FCC* de lado a y encuentre las distancias entre planos sucesivos con normales $\vec{n}_1 = \mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}$, $\vec{n}_2 = \mathbf{i} + \mathbf{j}$ y $\vec{n}_3 = \mathbf{k}$ respectivamente.
4. Tres vectores no coplanares $\{\vec{a} = \vec{w}_1, \vec{b} = \vec{w}_2, \vec{c} = \vec{w}_3\}$ forman base (i por qué?). Entonce podremos construir una base recíproca $\{\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3\} \equiv \{\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'\}$ la cual se denomina base recíproca³. De forma que

$$\vec{t}_1 = \frac{(\vec{w}_2 \times \vec{w}_3)}{\vec{w}_1 \cdot (\vec{w}_2 \times \vec{w}_3)}; \quad \vec{t}_2 = \frac{(\vec{w}_3 \times \vec{w}_1)}{\vec{w}_1 \cdot (\vec{w}_2 \times \vec{w}_3)}; \quad \vec{t}_3 = \frac{(\vec{w}_1 \times \vec{w}_2)}{\vec{w}_1 \cdot (\vec{w}_2 \times \vec{w}_3)}$$

¹Figura tomada del libro de *Introduction to Solid State Physics* de Charles Kittel (Wiley; 7th edition)

²Para más detalles puede consultar los dos primeros capítulos del libro de C. Kittel arriba mencionado o algunos de los muchos enlaces en INTERNET, como por ejemplo: <http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/xray-diffraction/reciprocal1.php>, <http://www.cem.msu.edu/~cem924sg/Reciprocal.html> y <http://www-structure.llnl.gov/Xray/tutorial/spcdiff.htm>

³Esta base y este espacio son muy útiles a la hora de representar patrones de difracción de ondas (rayos X) dispersados por los distintos planos cristalinos.

- a) Si $\vec{a} = \bar{a}^1 \vec{w}_1 + \bar{a}^2 \vec{w}_2 + \bar{a}^3 \vec{w}_3$ donde las cantidades $\{\bar{a}^1, \bar{a}^2, \bar{a}^3\}$ representan las componentes del vector \vec{a} a lo largo de cada uno de los vectores base $\{\vec{w}_1, \vec{w}_2, \vec{w}_3\}$. Muestre que las componentes de este vector genérico en esta base cumplen con

$$\bar{a}^1 = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{w}_2 \times \vec{w}_3)}{\vec{w}_1 \cdot (\vec{w}_2 \times \vec{w}_3)}; \quad \bar{a}^2 = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{w}_3 \times \vec{w}_1)}{\vec{w}_1 \cdot (\vec{w}_2 \times \vec{w}_3)}; \quad \bar{a}^3 = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{w}_1 \times \vec{w}_2)}{\vec{w}_1 \cdot (\vec{w}_2 \times \vec{w}_3)}$$

- b) Muestre que

$$\vec{w}_1 \cdot \vec{t}_1 = \vec{w}_2 \cdot \vec{t}_2 = \vec{w}_3 \cdot \vec{t}_3 = 1; \quad \text{y} \quad \vec{w}_1 \cdot \vec{t}_2 = \vec{w}_2 \cdot \vec{t}_1 = \vec{w}_3 \cdot \vec{t}_2 = \vec{w}_2 \cdot \vec{t}_3 = \vec{w}_3 \cdot \vec{t}_1 = \vec{w}_1 \cdot \vec{t}_3 = 0$$

- c) Del mismo modo muestre que

$$\vec{w}_1 = \frac{(\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}; \quad \vec{w}_2 = \frac{(\vec{t}_3 \times \vec{t}_1)}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}; \quad \vec{w}_3 = \frac{(\vec{t}_1 \times \vec{t}_2)}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$

y equivalentemente

$$\bar{a}^1 = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}; \quad \bar{a}^2 = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{t}_3 \times \vec{t}_1)}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}; \quad \bar{a}^3 = \frac{\vec{a} \cdot (\vec{t}_1 \times \vec{t}_2)}{\vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$

donde $\vec{a} = \bar{a}^1 \vec{t}_1 + \bar{a}^2 \vec{t}_2 + \bar{a}^3 \vec{t}_3$. Más aún muestre que

$$\vec{a} = (\vec{a} \cdot \vec{w}_1) \vec{t}_1 + (\vec{a} \cdot \vec{w}_2) \vec{t}_2 + (\vec{a} \cdot \vec{w}_3) \vec{t}_3 = \vec{a} = (\vec{a} \cdot \vec{t}_1) \vec{w}_1 + (\vec{a} \cdot \vec{t}_2) \vec{w}_2 + (\vec{a} \cdot \vec{t}_3) \vec{w}_3$$

- d) Considere ahora el siguiente vector

$$\vec{a} = 5 \mathbf{i} - 2 \mathbf{j} + 8 \mathbf{k} \quad \text{con} \quad \vec{w}_1 = 3 \mathbf{i} - 4 \mathbf{j}; \quad \vec{w}_2 = \mathbf{j} + 4 \mathbf{k}; \quad \vec{w}_3 = -\mathbf{i} + \mathbf{j} + 2 \mathbf{k}$$

- 1) Compruebe que efectivamente $\{\vec{w}_1, \vec{w}_2, \vec{w}_3\}$ forman base.
- 2) Expresé el vector \vec{a} en términos de la base $\{\vec{w}_1, \vec{w}_2, \vec{w}_3\}$
- 3) Construya la base recíproca $\{\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3\}$ y vuelva a expresar el vector \vec{a} como una combinación lineal de los vectores de esa base recíproca.

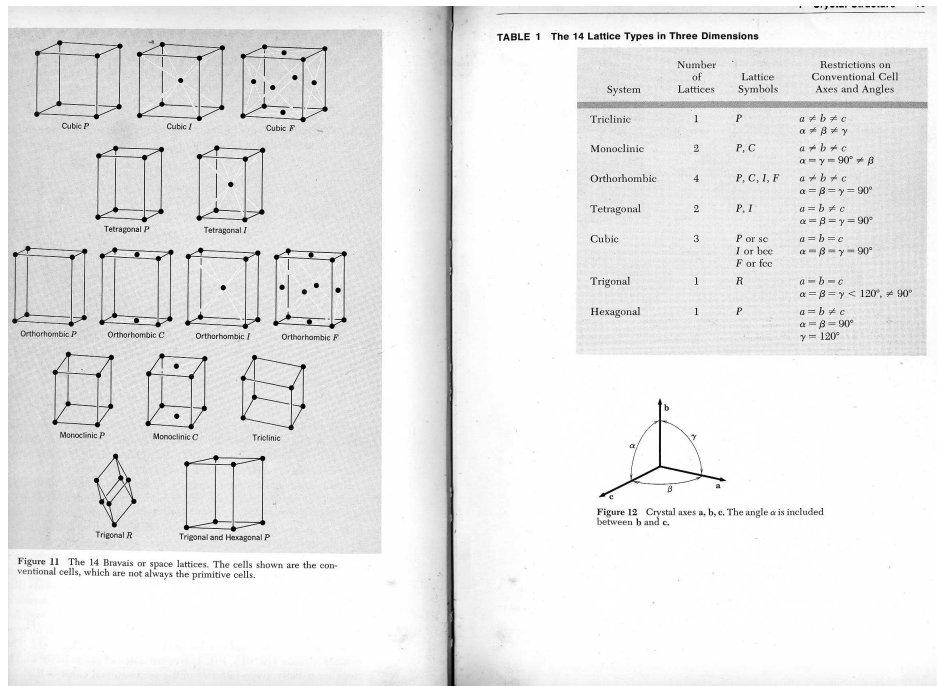


TABLE 1 The 14 Lattice Types in Three Dimensions

System	Number of Lattices	Lattice Symbols	Restrictions on Conventional Cell Axes and Angles
Triclinic	1	<i>P</i>	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoclinic	2	<i>P, C</i>	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Orthorhombic	4	<i>P, C, I, F</i>	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	<i>P, I</i>	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cubic	3	<i>P</i> or <i>sc</i> <i>I</i> or <i>bcc</i> <i>F</i> or <i>fcc</i>	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	1	<i>R</i>	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
Hexagonal	1	<i>P</i>	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$

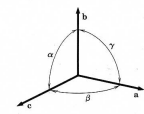


Figure 12 Crystal axes a, b, c. The angle α is included between b and c.

Figura 1: Redes cristalinas y parámetros de la red