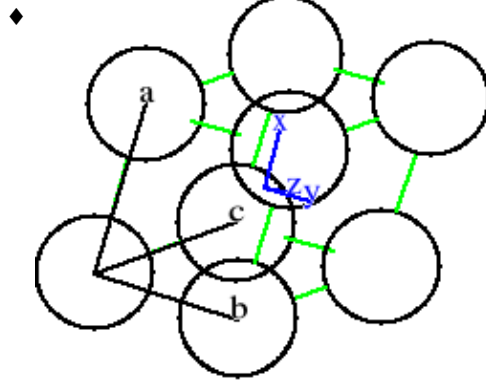


- **ESTRUCTURA CRISTALINA Y ANISOTROPÍA. BANDAS DE ENERGÍA.**
- **OBTENCIÓN Y TRATAMIENTO DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS MEDIANTE ORDENADOR.**
- **ESTRUCTURAS CRISTALINAS. PROGRAMA CARINE CRYSTALLOGRAPHY 3.1.**
- **objetivos.**

- Comprobar que una red FCC es recíproca de la red BCC.

- **material.**

- ♦ Programa CaRIne Crystallography 3.1.



procedimiento y conclusiones.

- ♦ Visualizar la red BCC.

- ♦ $|\vec{a}| = 3.00 \text{ \AA}$ $\vec{a} = ai$

- ♦ $|\vec{b}| = 3.00 \text{ \AA}$ $\vec{b} = aj$

- ♦ $|\vec{c}| = 2.60 \text{ \AA}$ $\vec{c} = \frac{a}{2}(i + j + k)$

Medir el módulo de los vectores primitivos.

- ♦ $\angle aob = 90.00^\circ$

$\angle boc = 54.74^\circ$

$\angle coa = 54.74^\circ$

Medir el ángulo mutuo.

- ♦ $V = 13.51 \text{ \AA}^3$

Calcular el volumen de la celda primitiva.

- ♦ $\rho = 0.31 \text{ \AA}^{-3}$

Calcular la densidad de la celda primitiva.

- ♦ Construir la red de Bravais a partir de translaciones de la red.

$$\diamond$$

$$\mathbf{r}_b^* \mathbf{r}_c^* = \begin{vmatrix} i & j & k \\ 0 & a & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^2}{2}(i-k)$$

$$\mathbf{r}_c^* \mathbf{r}_a^* = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ a & 0 & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^2}{2}(j-k)$$

$$\mathbf{r}_a^* \mathbf{r}_b^* = \begin{vmatrix} i & j & k \\ a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \end{vmatrix} = a^2 k$$

$$\mathbf{r}_a^* (\mathbf{r}_b^* \mathbf{r}_c^*) = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}$$

$$\mathbf{r}_a^* = 2\pi \frac{\mathbf{r}_b^* \mathbf{r}_c^*}{\mathbf{r}_a^* (\mathbf{r}_b^* \mathbf{r}_c^*)} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(i-k)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(i-k)$$

Señalar los planos que delimitan el cubo y cortarlos para ver la celda unidad no primitiva. Para ello hay que hallar los vectores primitivos de la red recíproca.

$$i = \frac{a}{4\pi} \left(2\mathbf{r}_a^* + \mathbf{r}_c^* \right)$$

$$j = \frac{a}{4\pi} \left(2\mathbf{r}_b^* + \mathbf{r}_c^* \right)$$

$$k = \frac{a}{4\pi} \mathbf{r}_c^*$$

$$\mathbf{r}_b^* = 2\pi \frac{\mathbf{r}_c^* \mathbf{r}_a^*}{\mathbf{r}_b^* (\mathbf{r}_c^* \mathbf{r}_a^*)} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(j-k)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(j-k)$$

$$\mathbf{r}_c^* = 2\pi \frac{\mathbf{r}_a^* \mathbf{r}_b^*}{\mathbf{r}_c^* (\mathbf{r}_a^* \mathbf{r}_b^*)} = 2\pi \frac{a^2 k}{\frac{a^3}{2}} = \frac{4\pi}{a} k$$

$$A_i = \frac{Aa}{4\pi} \left(2a^{\frac{r}{c}} + c^{\frac{r}{c}} \right)$$

$$B_j = \frac{Ba}{4\pi} \left(2b^{\frac{r}{c}} + c^{\frac{r}{c}} \right)$$

$$C_k = \frac{Ca}{4\pi} c^{\frac{r}{c}}$$

B_j

A_i

C_k

$$[201] \quad [\bar{2}0\bar{1}] \quad [021] \quad [0\bar{2}\bar{1}] \quad [001] \quad [00\bar{1}]$$

Los planos que hay que cortar son los siguientes:

- ◇ Visualizar la red recíproca y ver que es FCC.
- ◇ Representar el diagrama de difracción de rayos X. Identificar los planos que corresponden a picos de difracción iguales.
- ◇ Identificar los planos que corresponden a los ángulos de difracción siguientes:
- ◇ Si se realiza el diagrama de difracción de rayos X a una longitud de onda mayor, aparece menor número de planos que difractan la radiación. Esto es debido a que la longitud de onda es mayor que la distancia entre planos.
- ◇ Para la celda unidad primitiva de una red *zincblenda*:

$$|a|^{\frac{r}{c}} = 3.83 \text{ \AA}$$

$$|b|^{\frac{r}{c}} = 3.83 \text{ \AA}$$

$$|c|^{\frac{r}{c}} = 3.83 \text{ \AA}$$

$$\text{distancia entre } 000 \text{ y } \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4} = |d|^{\frac{r}{c}} = 2.34 \text{ \AA}$$

$$aob = 60.00$$

$$boc = 60.00$$

$$coa = 60.00$$

$$aod = 35.26$$

$$V = 39.59 \text{ \AA}^3$$

$$\rho = 0.70 \text{ \AA}^{-3}$$

Los planos no son los determinados por la geometría FCC pura porque el átomo de S no se encuentra justo en el centro de las caras del cubo que forma la celda unidad, sino que está encajonado entre cuatro átomos de Zn.

- ◇ La celda unidad *cuautet.cel* es una red FCC.
- ◇ La celda unidad no primitiva *cuaudeso.cel* es también una red FCC.

◇ Asociar las dos redes y realizar el diagrama de difracción de rayos X.

La red desordenada presenta menos picos de difracción ya que los átomos no ocupan posiciones fijas en los nudos de la red y esto constituye un defecto del cristal. A su vez, los picos están desplazados con respecto a la red ordenada porque los planos cristalográficos no son exactamente planos, debido a los átomos sustitucionales.

◆ **bandas de energía.**

◆ **objetivos.**

◇ Familiarizarse con las bandas de energía de aislantes y semiconductores.

◇ **material.**

· Programa Bandas v1.13.

· **procedimiento y conclusiones.**

- Representar la banda de energía para el Si. Hallar el band-gap, los vectores de onda de los máximos de la banda de valencia y de los mínimos de la banda de conducción, así como la variación en el vector de onda de la transición indirecta de energía mínima.
- $Band - gap = 1.3 eV$

Vectores de onda de la capa de valencia (0.0,0.0,0.0)

Vectores de onda de la capa de conducción (0.4,0.4,0.4) y (0.0,0.7,0.0)

Variación en el vector de onda (0.0,0.7,0.0)

Representar la banda de energía del Si cambiando el parámetro de red de 5.43 a 4.8 Å. Explicar qué cambios implica el hacer una red más compacta.

El band-gap es menor (0.8 eV). Además, los máximos de la capa de valencia son más altos y los mínimos de la capa de conducción son más bajos, lo que implica que las bandas en sí son más anchas.

•

$$|a| = 3.00 \text{ Å} \quad \vec{a} = a\hat{i}$$

$$|b| = 3.00 \text{ Å} \quad \vec{b} = a\hat{j}$$

$$|c| = 2.60 \text{ Å} \quad \vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})$$

•

$$\angle aob = 90.00^\circ$$

$$\angle boc = 54.74^\circ$$

$$\angle coa = 54.74^\circ$$

$$V = 13.51 \text{ Å}^3$$

$$\rho = 0.31 \text{ Å}^{-3}$$

•

- $$\overset{\text{r}}{b} * \overset{\text{r}}{c} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ 0 & a & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^2}{2}(i - k)$$

$$\overset{\text{r}}{c} * \overset{\text{r}}{a} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ a & a & a \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^2}{2}(j - k)$$

$$\overset{\text{r}}{a} * \overset{\text{r}}{b} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \end{vmatrix} = a^2 k$$

$$\overset{\text{r}}{a}(\overset{\text{r}}{b} * \overset{\text{r}}{c}) = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}$$

$$\overset{\text{r}}{a} = 2\pi \frac{\overset{\text{r}}{b} * \overset{\text{r}}{c}}{\overset{\text{r}}{a}(\overset{\text{r}}{b} * \overset{\text{r}}{c})} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(i - k)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(i - k)$$

- $$\overset{\text{r}}{b} = 2\pi \frac{\overset{\text{r}}{c} * \overset{\text{r}}{a}}{\overset{\text{r}}{a}(\overset{\text{r}}{b} * \overset{\text{r}}{c})} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(j - k)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(j - k)$$

$$\overset{\text{r}}{c} = 2\pi \frac{\overset{\text{r}}{a} * \overset{\text{r}}{b}}{\overset{\text{r}}{a}(\overset{\text{r}}{b} * \overset{\text{r}}{c})} = 2\pi \frac{a^2 k}{\frac{a^3}{2}} = \frac{4\pi}{a} k$$

- $$i = \frac{a}{4\pi}(2\overset{\text{r}}{a} + \overset{\text{r}}{c})$$

$$j = \frac{a}{4\pi}(2\overset{\text{r}}{b} + \overset{\text{r}}{c})$$

$$k = \frac{a}{4\pi} \overset{\text{r}}{c}$$

- Ck

-

- $|a|^r = 3.83 \text{ \AA}$
- $|b|^r = 3.83 \text{ \AA}$
- $|c|^r = 3.83 \text{ \AA}$

distancia entre 000 y $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4} = |d|^r = 2.34 \text{ \AA}$

$aob = 60.00$

$boc = 60.00$

$coa = 60.00$

$aod = 35.26$

$V = 39.59 \text{ \AA}^3$

$\rho = 0.70 \text{ e}^{-3}$

$[1\bar{1}0] \bullet 42.58$

$[001] \bullet 61.73$

- $[201] \quad [\bar{2}0\bar{1}] \quad [021] \quad [0\bar{2}\bar{1}] \quad [001] \quad [00\bar{1}]$

- $Ai = \frac{Aa}{4\pi} (2a^r + c^r)$

$Bj = \frac{Ba}{4\pi} (2b^r + c^r)$

$Ck = \frac{Ca}{4\pi} c^r$

- Bj

- Ai

42.58 • $[1\bar{1}0]$

61.73 • $[001]$

- $Band - gap = 1.3 eV$

Vectores de onda de la capa de valencia $(0.0, 0.0, 0.0)$

Vectores de onda de la capa de conducci n $(0.4, 0.4, 0.4)$ y $(0.0, 0.7, 0.0)$

Variaci n en el vector de onda $(0.0, 0.7, 0.0)$

-