

Estructura de la Materia 2
Curso de verano 2021
Guía 1: Redes Cristalinas y Espacio Recíproco

1. Indicar si las siguientes estructuras son redes de Bravais. Si lo son, dar un conjunto de vectores primitivos. Si no lo son, describirlas como una red con la menor base posible.
 - (a) Cúbica centrada en la base (SC con puntos adicionales en las caras “horizontales” de la celda).
 - (b) Cúbica centrada en los lados (SC con puntos adicionales en las caras “verticales” de la celda).
 - (c) Cúbica centrada en las aristas (SC con puntos adicionales en los centros de las aristas de la celda).
2. Encuentre dos conjuntos de vectores primitivos diferentes para las redes BCC y FCC. Calcule el volumen de la celda unidad generada en cada caso.
3. Encuentre el número de primeros vecinos (número de coordinación), segundos y terceros vecinos para las redes cúbicas (SC, BCC y FCC). Indique a qué distancia se encuentran en función del parámetro de red a .
4. Calcule la fracción de empaquetamiento (relación volumen ocupado por átomos / volumen total) para las redes SC, BCC, FCC y diamante. Suponga para esto que los átomos que forman el sólido son esferas rígidas de radio r , centradas en los puntos de la red y que se tocan sin superponerse.
5. Usando la misma aproximación del problema anterior, demuestre que el valor de c/a para una red HCP “ideal” es de $(8/3)^{1/2}$. Compare con alguna tabla que dé estos valores para materiales reales (por ej. tabla 4.4 del Ashcroft-Mermin). ¿Cuántos primeros, segundos y terceros vecinos tiene una HCP? Compare con una red FCC.
6. Describa las estructuras del NaCl, CsCl y ZnS en términos de una red de Bravais con base.
7. Probar que una estructura tetragonal centrada en las caras (FCT) es equivalente a una tetragonal centrada en el cuerpo (BCT). ¿Por qué no sucede lo mismo con la FCC y la BCC?

8. Muestre que una red de Bravais bidimensional no puede tener ejes de rotación de orden cinco (C_5).
9. Demuestre que la red recíproca de la red recíproca es una red directa. Muestre que la red recíproca de la BCC es la FCC y viceversa. ¿Cuáles de las redes de Bravais son autorrecíprocas?
10. Dibuje la primera, segunda y tercera zona de Brillouin para una red cuadrada bidimensional. Calcule el “volumen” de cada zona en el espacio recíproco.
11. Los vectores primitivos hexagonales pueden tomarse como: $\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} + \frac{1}{2}a\hat{y}$, $\vec{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} + \frac{1}{2}a\hat{y}$ y $\vec{a}_3 = c\hat{z}$.
 - (a) Encuentre el volumen de la celda primitiva.
 - (b) Encuentre las traslaciones primitivas en el espacio recíproco.
 - (c) Describa y dibuje la primera zona de Brillouin.
12. Dibuje para una red SC los planos descritos por los índices de Miller (100), (110) y (111). Describa la red bidimensional sobre esos planos y calcule la distancia entre planos. Idem para una red FCC y una BCC.
13. Considere la celda convencional de una estructura ortorrómbica ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$), de lados $a = 2 \text{ \AA}$, $b = 3 \text{ \AA}$ $c = 4 \text{ \AA}$. ¿Cuál es la distancia entre planos de la familia $\{112\}$?
14. Si (100) y (001) son los índices de Miller de dos planos de la red FCC respecto del conjunto de vectores primitivos $\vec{a}_i = 1/2a(\hat{j} + \hat{k})$, calcule los índices de Miller de esos mismos planos respecto del conjunto de vectores primitivos:

$$\vec{a}_1 = a\hat{x}$$

$$\vec{a}_2 = 1/2a(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{a}_3 = 1/2a(\hat{y} + \hat{z})$$

15. Frecuentemente es conveniente representar una red FCC como una SC de parámetro de red a con una base de cuatro puntos.

- (a) Muestre que el factor de estructura es 0 ó 4 en todos los puntos de la red recíproca de la SC.
- (b) Muestre que cuando los puntos con factor de estructura nulo son removidos de la red, los restantes forman una red BCC de parámetro de red $4\pi/a$. ¿Por qué debe esperarse esto?
16. En la Fig.1 se muestran dos patrones de difracción correspondientes a los compuestos KCl y KBr que cristalizan en la estructura cloruro de sodio. Analice las diferencias entre los patrones teniendo en cuenta que el factor de forma atómico f está relacionado con el número de electrones de los iones en cuestión (K^+ , Cl^- y Br^-).

Datos: La Fig.2 muestra la estructura cloruro de sodio. El número atómico del potasio K, del cloro Cl y del bromo Br son $Z_K = 19$, $Z_{Cl} = 17$ y $Z_{Br} = 35$, respectivamente.

17. Considere una red con una base de n iones. Suponga que el ion i -simo de la base, localizado en $\vec{r} = 0$, puede pensarse compuesto por m_i partículas puntuales de carga $-z_{ij}e$ localizadas en posiciones \vec{b}_{ij} con $j= 1, \dots, m_i$.

- (a) Muestre que el factor de forma atómico f_i está dado por:

$$f_i = \sum_{j=1}^{m_j} z_{ij} e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_{ij}}$$

- (b) Muestre que el factor de estructura:

$$S_K = \sum_{j=1}^n f_j(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{d}_j}$$

obtenido a partir del factor de forma del item anterior es idéntico al factor de estructura que se obtendría si la red fuese equivalentemente descripta con una base de $m_1 + \dots + m_n$ iones puntuales.

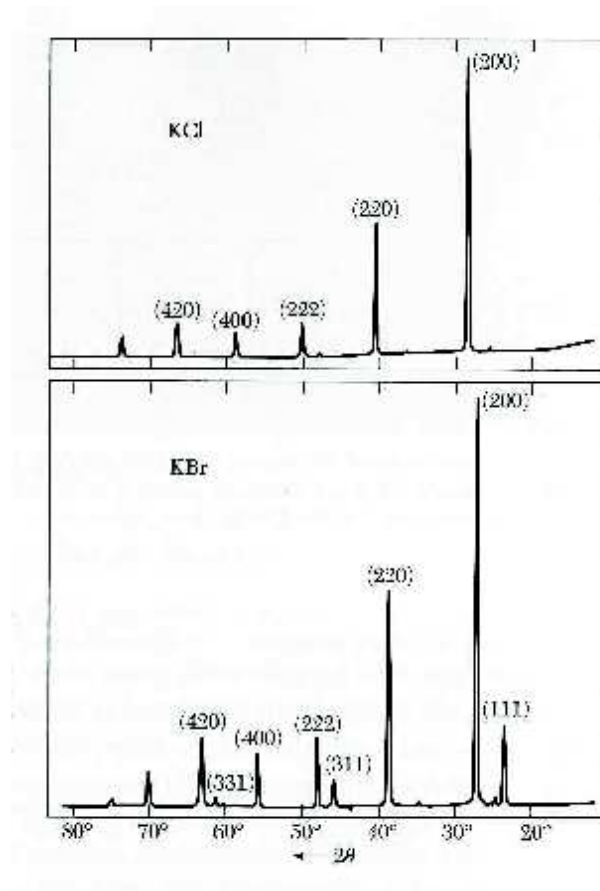


Figure 1: Patrones de difracción de muestras de polvo de KCl y KBr.

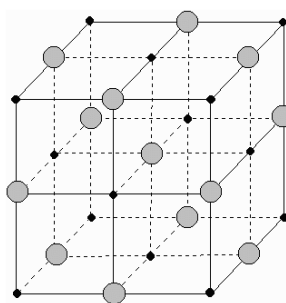


Figure 2: Estructura del NaCl.