

Estructura de la Materia 2
2do Cuatrimestre 2018
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 $(8/3)^{1/2}$. Comparar 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 $\vec{a}_3 = c\hat{z}$.
 1. Encuentre el volumen de la celda primitiva.
 2. Encuentre las traslaciones primitivas en el espacio recíproco.
 3. Describa y dibuje la primera zona de Brillouin.