
ESTRUCTURA DE LA MATERIA 2

SEGUNDO CUATRIMESTRE DE 2024

GUÍA 1: REDES CRISTALINAS, ESPACIO RECÍPROCO Y DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Red de Bravais y estructuras cristalinas.

1. Indique si las siguientes estructuras son redes de Bravais. Si lo son, dar un conjunto de vectores primitivos para ellas; si no lo son, describirlas por medio de una red de Bravais y una base con la menor cantidad posible de elementos.
 - a) Cúbica centrada en la base: cúbica simple (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 (cúbica centrada en el cuerpo) y FCC (cúbica centrada en las caras). Calcule el volumen de la celda unidad primitiva generada en cada caso.
3. Encuentre el número de primeros vecinos (también llamado número de coordinación), y de segundos y terceros vecinos para las diferentes redes cúbicas (SC, BCC y FCC).
Indique a qué distancia se encuentran en función del parámetro de red a .
4. Calcule el factor de empaquetamiento atómico o relación entre el volumen ocupado por los átomos y el volumen total del material, para las redes SC, BCC, FCC y diamante. Suponga para ello que los átomos que forman el sólido son esferas rígidas de radio r , centradas en los puntos de la red, 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 de libro de Ashcroft y 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. Pruebe 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).

Espacio recíproco. Red recíproca. Planos cristalinos.

9. Dada una red de Bravais, demuestre que la red recíproca de la red recíproca de ésta es la propia red de Bravais o red directa. Muestre que la red recíproca de la BCC es la FCC y viceversa. ¿Qué redes de Bravais son autorrecíprocas?
10. Dibuje la primera, segunda y tercera zona de Brillouin para una red cuadrada bidimensional. Calcule la superficie 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 $\vec{a}_3 = c\hat{z}$.
- Encuentre el volumen de la celda primitiva.
 - Encuentre las traslaciones primitivas en el espacio recíproco.
 - 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 ellos. Repita esto para una red FCC y una BCC.
13. Considere la celda convencional de una estructura ortorrómbica (para la cual $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$), 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 $\vec{a}_i = \frac{a}{2}(\hat{j} + \hat{k})$, calcule los índices de Miller de esos mismos planos respecto del conjunto de vectores primitivos:

$$\begin{aligned}\vec{a}'_1 &= a\hat{x} \\ \vec{a}'_2 &= \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \\ \vec{a}'_3 &= \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})\end{aligned}$$

Determine además la distancia de separación que hay entre esos planos.

Difracción de rayos X.

15. Frecuentemente se representa una red FCC como una SC de parámetro de red a con una base de cuatro puntos.
- Muestre que el factor de estructura es 0 ó 4 en todos los puntos de la red recíproca de la SC.
 - 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. Considerando a la red BCC como una SC de parámetro de red $a = 4 \text{ \AA}$ con una base:
- Encontrar las condiciones de extinción para la difracción.
 - Si en una experiencia de Debye-Scherrer se incide con Rx de $\lambda = 2.5 \text{ \AA}$, ¿cuáles son los tres primeros ángulos ϕ ($\phi = 2\theta$) para los que se espera ver máximos de intensidad?
 - Si en una experiencia de Laue se incide con un haz de Rx paralelo al eje \hat{z} , de longitudes de onda $2.5 \text{ \AA} < \lambda < 3 \text{ \AA}$ ¿qué espera observar?
17. Polvo cristalino de tres diferentes cristales es examinado en una cámara de Debye-Scherrer. Se sabe que una muestra es FCC, otra BCC y la tercera es tipo diamante. Las posiciones aproximadas de los primeros cuatro anillos de difracción se indican en la Tabla 1.
- Identifique la estructura cristalina de A, B y C.
 - Si λ del haz de Rx es de 1.5 \AA ¿cuál es el parámetro de red en cada caso?

Cuadro 1: Mediciones de $\phi(2\theta)$ para las distintas muestras

Muestra A	Muestra B	Muestra C
42.2°	28.8°	42.8°
49.7°	41.0°	73.2°
72.0°	50.8°	89.0°
87.3°	59.6°	115.0°

- c) Si la estructura de diamante fuera reemplazada por una blenda de Zn con una celda unitaria de la misma medida, ¿a qué ángulos estarían ahora los primeros cuatro anillos?
18. Considere un cristal cuya red de Bravais es rectangular centrada, de lados de la celda convencional $a = 10 \text{ \AA}$ y $b = 5 \text{ \AA}$ y con una base de átomos idénticos en $(0,0)$ y $(1/2,1/2)$.
- a) Si se hace un diagrama de polvo con Rx de $\lambda = 2 \text{ \AA}$ encuentre el ángulo de Bragg θ para las tres reflexiones de más bajo índice de Miller (sin contar las que son idénticas por simetría).
- b) ¿Hay ausencias sistemáticas? Explique cuáles y por qué.
- c) Si suponemos que los electrones están esencialmente alrededor de los núcleos y la base es de C ($Z = 6$) y O ($Z = 8$), ¿cuál es la intensidad relativa de las líneas observadas?
19. El α -Co (cobalto alfa) tiene estructura *hcp* con parámetros de red $a = 2.51 \text{ \AA}$ y $c = 4.07 \text{ \AA}$; El β -Co es *fcc*, con parámetro de red (convencional) $a = 3.55 \text{ \AA}$. ¿Cuál es la diferencia de densidad entre ambas estructuras?
20. **Difracción de polvo de cristales hcp y fcc.**
- El cobalto tiene dos estructuras (ver problema anterior): α -Co, con estructura *hcp* ($a = 2.51 \text{ \AA}$) y β -Co, con estructura *fcc* ($a = 3.55 \text{ \AA}$). Suponga que la estructura *hcp* es ideal ($\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$). Calcule y compare la posición de los cinco primeros picos de difracción. La cantidad $K = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}$ puede utilizarse para caracterizar la posición de los picos (λ es la longitud de onda y 2θ es el ángulo de dispersión).