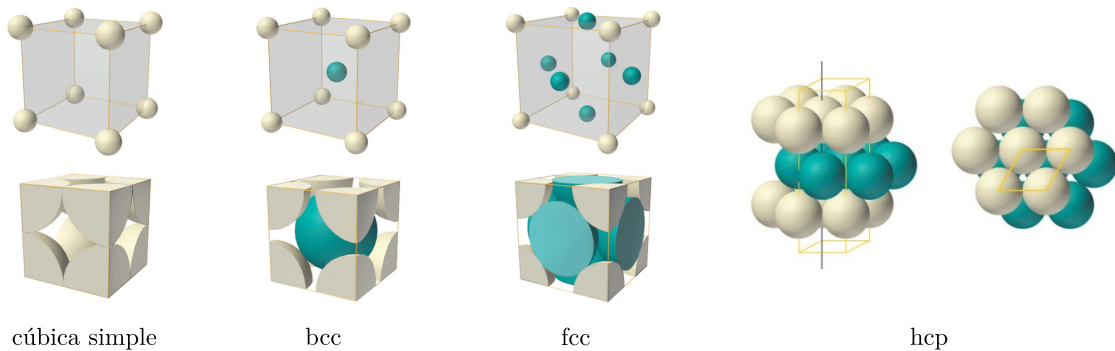


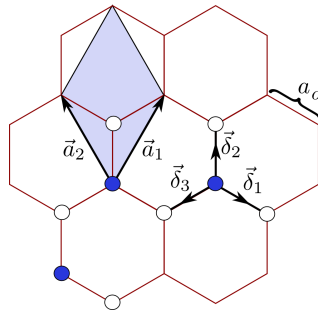
## Práctica 1: Estructuras cristalinas

- Para las redes cúbica simple, fcc, bcc, y hcp, determinar:
  - El número de puntos de la red por celda convencional.
  - Un conjunto de vectores primitivos.
  - El volumen de la celda convencional y de la primitiva.
  - El número de primeros vecinos y la separación entre ellos.
  - La fracción del espacio ocupado por la disposición correspondiente de esferas rígidas.

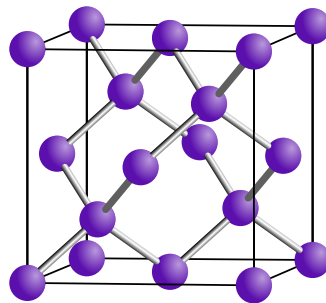


- Probar que la razón ideal  $c/a$  para una estructura hcp es  $2\sqrt{\frac{2}{3}} \approx 1.633$ .
  - El sodio se transforma de bcc a hcp a 23 K (transformación martensítica). Suponiendo que la densidad permanece constante, encontrar la constante de red  $a$  de la fase hexagonal sabiendo que en la fase cúbica  $a = 4.23 \text{ \AA}$ , y que la razón  $c/a$  es prácticamente la ideal.
- Indicar, en cada uno de los siguientes casos, si la estructura es una red de Bravais. Si la respuesta es afirmativa, dar tres vectores primitivos. Si es negativa, describirla como una red de Bravais con motivo.
  - Cúbica centrada en las bases (cúbica simple con puntos adicionales en los centros de las caras horizontales de la celda cúbica)
  - Cúbica centrada en los costados (cúbica simple con puntos adicionales en los centros de las caras verticales de la celda cúbica)
  - Cúbica centrada en los lados (cúbica simple con puntos adicionales en los puntos medios de las líneas que unen los primeros vecinos)
- Determinar cuál es la red de Bravais formada por todos los puntos con componentes cartesianas  $(n_1, n_2, n_3)$ , si:
  - Los  $n_i$  son todos pares o todos impares.
  - La suma de los  $n_i$  es par.

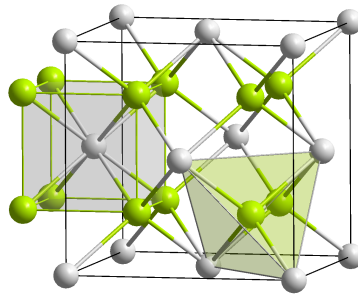
5. El grafito esta formado por capas de átomos, cada una de las cuales consiste en anillos hexagonales de carbonos como un panel de abejas (honeycomb) de forma tal que cada átomo tiene tres vecinos a una distancia  $a$ . Determinar la red de Bravais de la estructura bidimensional.



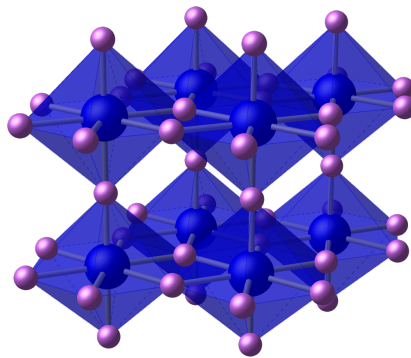
6. La estructura cristalina del diamante (y la del Si y Ge) es una fcc con 4 átomos extra en las posiciones  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})a$ ,  $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})a$ ,  $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})a$ , y  $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})a$ , donde  $a$  es la constante de red de la celda convencional cúbica.
- Determinar la red de Bravais y el motivo.
  - ¿Cuántos átomos de carbono existen por celda convencional? ¿Cuántos por celda primitiva?
  - ¿Cuál es la longitud de los vectores base de la celda primitiva?  $a = 3 \text{ \AA}$ .



7. El titanato de bario es un material prototipo de la familia de las perovskitas ferroeléctricas. Su estructura consta de átomos de Ba localizados en los vértices de un cubo, átomos de O en los centros de las caras y un átomo de Ti en el centro del cubo. Determinar la red de Bravais y el motivo atómico.
8. La estructura cristalina de la fluorita (ver figura) consiste en una fcc de Ca, con 8 átomos de F en las posiciones  $\frac{a}{2}(1, 1, 1) + \frac{a}{4}(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$  con todas las combinaciones de signos  $\pm$ , donde  $a$  es la constante de red de la celda convencional cúbica.
- Determinar la red de Bravais y dar una posible terna de vectores primitivos.
  - Indicar el conjunto de átomos que constituye el motivo.
  - ¿Cuántos átomos hay por celda primitiva, y cuántos por celda convencional?



9. Dada la estructura cristalina mostrada en la figura, correspondiente al nitruro de litio:
- Determinar la red de Bravais y dar una posible terna de vectores primitivos.
  - Indicar el conjunto de átomos que constituye el motivo.
  - ¿Cuántos átomos hay por celda primitiva?



10. Determinar la red recíproca y la primera zona de Brillouin de:
- Una cadena lineal de puntos equiespaciados.
  - Una red cuadrada bidimensional. Una red rectangular bidimensional.
11. Determinar la red recíproca de las estructuras cúbica simple, bcc, y fcc. En la figura 1 se muestra la primera zona de Brillouin de las tres redes.

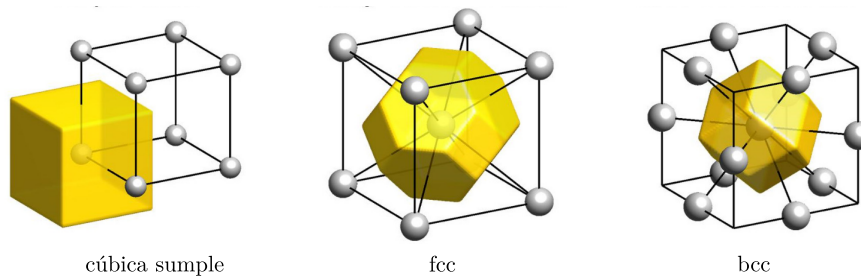


Figure 1: De izquierda a derecha: Cubo, octaedro truncado y dodecaedro rómbico

12. Encontrar la red recíproca y la primera zona de Brillouin de:
- (a) Una red hexagonal plana.
  - (b) Una red hexagonal tridimensional.
13. Una red directa bidimensional está formada por la repetición de un paralelogramo  $ABCD$ , donde  $AB = 4$  unidades,  $AC = 3$  unidades, y el ángulo  $BAD = \pi/3$ . Determinar su red recíproca.
14. La red de Bravais generada por tres vectores primitivos de igual longitud, formando ángulos oblicuos iguales entre sí, es conocida como red trigonal. Determinar su red recíproca.