

CRISTALOGRAFÍA

PRÁCTICA 4

230 GRUPOS ESPACIALES. PROYECCIÓN DE ESTRUCTURAS

1.- El óxido de niobio, NbO, cristaliza en el grupo espacial cúbico $Pm\bar{3}m$, siendo su parámetro reticular $a = 4,21\text{Å}$. Las posiciones atómicas en la celda elemental son:

Nb: $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

O: $\frac{1}{2}, 0, 0$; $0, \frac{1}{2}, 0$; $0, 0, \frac{1}{2}$

(a) Projete la estructura de este compuesto sobre el plano (001). Para hacer la proyección considere los siguientes radios iónicos arbitrarios: $r(\text{Nb}^{2+}) = 0,2\text{Å}$ y $r(\text{O}^{2-}) = 0,5\text{Å}$ (b) Delimite una celda unidad elemental en la proyección.

2.- La fluorita, CaF₂, es un mineral que cristaliza en el grupo espacial cúbico $Fm\bar{3}m$, siendo su parámetro reticular $a = 5,46\text{Å}$. Las posiciones atómicas en la celda elemental son:

Ca: $0, 0, 0$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$; $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

F: $\pm(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$; $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$; $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$; $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$

(a) Projete la estructura de la fluorita sobre el plano (001). Para hacer la proyección considere los siguientes radios iónicos arbitrarios: $r(\text{Ca}^{2+}) = 0,2\text{Å}$ y $r(\text{F}) = 0,5\text{Å}$ (b) Delimite una celda unidad elemental en la proyección.

3.- El sulfuro de paladio, PdS, cristaliza en el grupo espacial tetragonal $P4_2/m$ y sus parámetros reticulares son $a = 6,429\text{Å}$ y $c = 6,608\text{Å}$. Una celda unidad de PdS contiene 8 átomos de Pd y 8 de S. Mientras los átomos de azufre ocupan posiciones generales ($8k$) con $x = 0,19$, $y = 0,32$ y $z = 0,23$, el Pd se encuentra en las siguientes tres posiciones cristalográficamente diferentes:

2Pd(1): en $2e$

2Pd(2): en $2c$

4Pd(3): en $4j$ con $x = 0,48$, $y = 0,25$

En la tabla 1 se describen las posiciones equivalentes en el grupo espacial $P4_2/m$ según la notación de Wyckoff. **(a)** Escriba las coordenadas fraccionarias de todas las posiciones en las que se encuentra el Pd y el S dentro de una celda unidad de PdS. **(b)** Projete cuatro celdas unidad de la estructura del PdS sobre el plano (001) indicando en una celda unidad las coordenadas z de todos los átomos. **(c)** Con ayuda de la figura 1, indique los elementos de simetría sobre la proyección de la estructura. **(d)** Calcule la distancia entre dos átomos de S más próximos.

No. of positions	Wyckoff notation	Point symmetry	Positions
8	k	1	$x, y, z; \bar{y}, x, \frac{1}{2} + z; \bar{x}, \bar{y}, z; y, \bar{x}, \frac{1}{2} + z;$ $x, y, \bar{z}; \bar{y}, x, \frac{1}{2} - z; \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}; y, \bar{x}, \frac{1}{2} - z$
4	j	m	$x, y, 0; \bar{y}, x, \frac{1}{2}; \bar{x}, \bar{y}, 0; y, \bar{x}, \frac{1}{2}$
4	i	2	$0, \frac{1}{2}, z; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} + z; 0, \frac{1}{2}, \bar{z}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} - z$
4	h	2	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z$
4	g	2	$0, 0, z; 0, 0, \frac{1}{2} + z; 0, 0, \bar{z}; 0, 0, \frac{1}{2} - z$
2	f	$\bar{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$
2	e	$\bar{4}$	$0, 0, \frac{1}{4}; 0, 0, \frac{3}{4}$
2	d	$2/m$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, 0$
2	c	$2/m$	$0, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$
2	b	$2/m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
2	a	$2/m$	$0, 0, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$

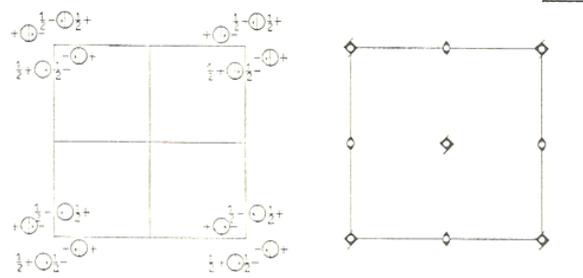
Tabla 1. Posiciones equivalentes en el grupo espacial $P4_2/m$

$P4_2/m$

No. 84

 C_{4h}^2 $P4_2/m$ $4/m$

Tetragonal

Patterson symmetry $P4/m$ Origin at centre ($2/m$) on 4_2 Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq \frac{1}{2}$

Symmetry operations

- (1) $\bar{1}$ 0,0,0 (2) 2 0,0,z (3) 4^+ (0,0, $\frac{1}{2}$) 0,0,z (4) 4^- (0,0, $\frac{1}{2}$) 0,0,z
 (5) $\bar{1}$ 0,0,0 (6) m x,y,0 (7) 4^+ 0,0,z; 0,0, $\frac{1}{2}$ (8) 4^- 0,0,z; 0,0, $\frac{1}{2}$

Figura 1. Elementos de simetría del grupo espacial $P4_2/m$

4.- El cuarzo de baja temperatura, α - SiO_2 , cristaliza en el grupo espacial trigonal $P3_121$ y sus parámetros reticulares son: $a = 4,913 \text{ \AA}$; $c = 5,405 \text{ \AA}$; $\beta = 120^\circ$. Los átomos de Si ocupan posiciones ($3a$) con $x = 0,465$ y los átomos de oxígeno posiciones ($6c$) con $x = 0,2722$, $y = 0,420$ y $z = 0,454$. En la tabla 1 se describen las posiciones equivalentes en el grupo espacial $P3_121$. (a) Escriba las coordenadas fraccionarias de todas las posiciones en las que se encuentra el Si y el O dentro de una celda unidad de cuarzo. (b) Projete cuatro celdas unidad de la estructura del α - SiO_2 sobre el plano (0001).

No. of positions	Wyckoff notation	Point symmetry	Positions
6	c	1	$x, y, z; y, x, \frac{1}{3} - z; \bar{y}, x - y, \frac{1}{3} + z;$ $\bar{x}, y - x, \frac{2}{3} - z; y - x, \bar{x}, \frac{2}{3} + z;$ $x - y, \bar{y}, \bar{z},$
3	b	2	$x, 0, \frac{1}{2}; 0, x, \frac{5}{6}; \bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{6}$
3	a	2	$x, 0, 0; 0, x, \frac{1}{3}; \bar{x}, \bar{x}, \frac{2}{3}$

Tabla 2. Posiciones equivalentes en el grupo espacial $P3_121$

