

Tema 1. Sólidos cristalinos y amorfos. Estructura de los sólidos cristalinos. Notación de los elementos de una red, índices de Miller. Difracción. Red recíproca y sus propiedades. Zonas de Brillouin.

Problemas

1) El cesio posee una estructura de cristal de Bravais BCC. Si se sustituyen los átomos de cesio, Cs, situados en el centro de los cubos por átomos de talio, Tl, se obtiene una aleación cesio-talio. Determinar la composición, la red cristalográfica y las coordenadas de la base en esta aleación.

2) El níquel posee una estructura de cristal de Bravais FCC. Si se sustituyen los átomos de níquel, Ni, situados en los centros de las caras por átomos de aluminio, Al, se obtiene una aleación ordenada níquel-aluminio. Determinar la composición, la red cristalográfica y las coordenadas de la base en esta aleación.

3) Las posiciones de los átomos en una fase del óxido de níquel son:

Ni: $(0, 0, 0)$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

O: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ $(0, \frac{1}{2}, 0)$ $(0, 0, \frac{1}{2})$

Dibujar la celda unidad. ¿Cuál es la fórmula del óxido? ¿Qué red de Bravais lo describe? ¿Cuál es la base y sus posiciones?

4) Calcular la máxima fracción del volumen total que pueden ocupar los átomos, considerados como esferas duras, en las redes cúbica simple, BCC y FCC.

5) En la estructura cúbica centrada en caras, determinar cuál de los planos $(1\ 0\ 0)$, $(1\ 1\ 0)$ y $(1\ 1\ 1)$ contiene una mayor densidad superficial de nudos de la red.

6) Determinar los vectores de traslación primitivos de la red recíproca de un cristal cuya red directa es cúbica centrada en el interior de parámetro a .

7) Determinar los vectores de traslación primitivos de la red recíproca de un cristal cuya red directa es cúbica centrada en las caras de parámetro a .

8) Demostrar que todo vector \mathbf{g} de la red recíproca de coordenadas (h, k, l) es perpendicular a la familia de planos de la red directa cuyos índices de Miller son precisamente los números (hkl) .

9) En un experimento de difracción de rayos-X se observa que la dirección del máximo de primer orden, producido por los planos cristalinos de 3 \AA de distancia interplanar, forma un ángulo de 60° con la dirección de incidencia. a) Calcular la longitud de onda del haz incidente. b) Utilizando la relación de *de Broglie*, calcular la velocidad que se debe imprimir a los electrones de un haz para que, al ser difractado por ese cristal, origine el citado máximo en las mismas condiciones.

10) En un experimento de difracción de rayos-X, una muestra de CuAl_2O_4 con estructura cúbica (tipo espinela) da un patrón en el cual las tres primeras reflexiones son $(111)\ \theta = 9.51^\circ$, $(200)\ \theta = 11.00^\circ$, (220) , $\theta = 15.65^\circ$ cuando la longitud de onda es 0.1541 nm . Calcular el parámetro de red de la espinela.

11) La celda unidad de la perovskita, CaTiO_3 , se muestra en la figura 1 (página siguiente).

- Sabiendo que $a = b = 5,41\text{ \AA}$, $c = 7,65\text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ¿Cuál es la red de Bravais que describe esta celda unidad?
- ¿Cuáles son las coordenadas de los átomos que forman la base?

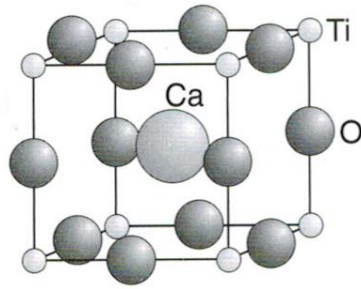


Figura 1

- c) En las figuras 2 y 3 se muestra la proyección de los puntos de la red directa respecto del eje c.
 Dibujar:
- c₁) en la figura 2 los planos (140), (230), (010)
 - c₂) en la figura 3 las direcciones cristalográficas [1 -1 0], [6 -1 0], [3 4 0], [-3 4 0]
- d) Obtener los vectores de traslación de la red recíproca \vec{a}^* , \vec{b}^* y \vec{c}^* .
- e) Dibujar esquemáticamente la proyección de la red recíproca respecto del eje c.
- f) Obtener la proyección de la 1ª z. de Brillouin sobre el plano formado por los vectores \vec{a}^* , \vec{b}^* .
- g) Se difractan rayos-X de $\lambda = 3 \text{ \AA}$. ¿Qué ángulo formará con el haz incidente el haz difractado por los planos (110) de primer orden?

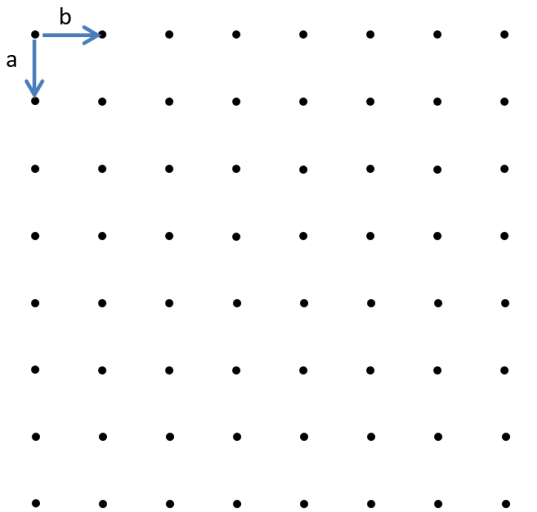


Figura 2

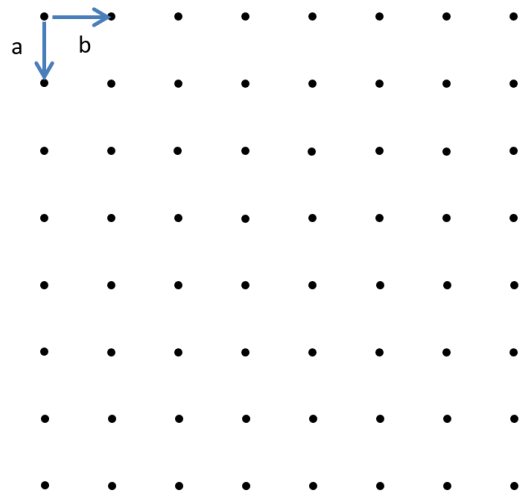
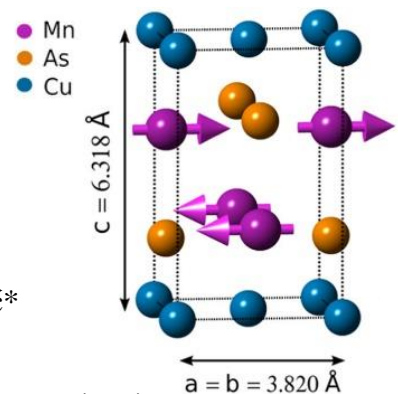


Figura 3

12) La celda unidad de cierto material se muestra en la figura 4.

- a) explicar razonadamente cuál es su fórmula química
- b) Explicar qué red de Bravais que describe esta celda unidad
- c) ¿Cuáles son las coordenadas de los átomos que forman la base?
- d) Obtener los vectores de traslación de la red recíproca: \vec{a}^* , \vec{b}^* y \vec{c}^*



P. Wadley *et al.* Scientific Reports 5, 17079 (2015)

Figura 4