

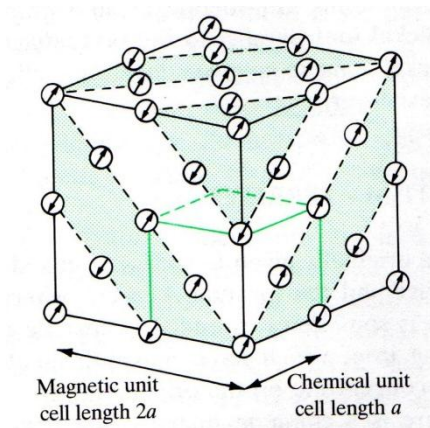
Ejercicios de Introducción a la Ciencia de Materiales

En las Tablas Internacionales de Cristalografía, el grupo espacial no. 205 es ***P a 3***, según la nomenclatura Hermann-Mauguin. Según la nomenclatura Hall, la notación es ***P 2₁/a 3***. ¿Qué tipo de celda se tiene? Indique los elementos de simetría que pueda identificar, dadas las nomenclaturas anteriores.

<i>P a 3</i>		No. 205	<i>P 2₁/a 3</i>	<i>m 3</i> Cubic
<i>T_h⁶</i>		Origin at centre (3)		
24	<i>d</i>	1	$x, y, z; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \bar{z}; \bar{x}, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z; \frac{1}{2} - x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z;$ $z, x, y; \frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} - x, \bar{y}; \bar{z}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y; \frac{1}{2} - z, \bar{x}, \frac{1}{2} + y;$ $y, z, x; \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z, \bar{x}; \bar{y}, \frac{1}{2} + z, \frac{1}{2} - x; \frac{1}{2} - y, \bar{z}, \frac{1}{2} + x;$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, z; x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z; \frac{1}{2} + x, y, \frac{1}{2} - z;$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}; \frac{1}{2} - z, \frac{1}{2} + x, y; z, \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y; \frac{1}{2} + z, x, \frac{1}{2} - y;$ $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}; \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z, x; y, \frac{1}{2} - z, \frac{1}{2} + x; \frac{1}{2} + y, z, \frac{1}{2} - x.$	General: <i>hkl</i> : No conditions <i>Ok</i> l: $k=2n$ <i>h</i> 0l: $(l=2n)$ <i>hk</i> 0: $(h=2n)$ <i>h, k, l</i> not permutable
8	<i>c</i>	3	$x, x, x; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x, \bar{x}; \bar{x}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x; \frac{1}{2} - x, \bar{x}, \frac{1}{2} + x;$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + x, x; x, \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + x; \frac{1}{2} + x, x, \frac{1}{2} - x.$	Special: as above, plus no extra conditions
4	<i>b</i>	$\bar{3}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}.$	} <i>hkl</i> : $h+k, k+l, (l+h)=2n$
4	<i>a</i>	3	$0, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0.$	
314				

En la imagen de arriba se dan las posiciones de este grupo espacial. Haga un esquema de la celda que se obtiene con las posiciones 4a. Haga otro esquema con las posiciones 4b. ¿Cuál es la diferencia que hay entre ellas? Haga un cálculo de las posiciones 24d, tomando $x=1/2, y=1/2$ y $z=1/2$. ¿Qué obtiene? ¿Qué puede concluir?

En la imagen inferior se tiene una celda cúbica de un material magnético. Proporcione los índices de Miller de los planos descritos por las líneas punteadas. Responda basándose en lo aprendido en clase y observando la figura: ¿todos los planos descritos por las líneas punteadas son equivalentes? Dicho de otro modo, ¿estos planos forman una familia? Fundamente su respuesta.



El rutilo, TiO_2 , tiene parámetros de celda $a=b=4.58 \text{ \AA}$, $c=2.95 \text{ \AA}$ y $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$. Las coordenadas atómicas son para el Ti $0,0,0$ y $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Para el O son $x,x,0$; $-x,-x,0$; $\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}$, donde $x=0.31$. Dibuje una proyección de la celda unitaria en el plano que contenga a los ejes x y y . Determine el número de unidades fórmula que contiene una celda unitaria. Encuentre el número de átomos que rodean a un átomo de titanio (su número de coordinación).

En una celda cúbica dibuje los planos $(1\ 1\ 1)$, $(\bar{1}\ 1\ 1)$, $(1\ \bar{1}\ 1)$ y $(1\ 1\ \bar{1})$. En el problema anterior, la proyección que realizó de la celda unitaria, ¿qué índices de Miller tiene? ¿Cuál es la distancia entre los planos que definen estos índices de Miller? Si tiene usted el plano $(1\ 1\ 1)$, y se traza una línea perpendicular a este plano, lo cual corresponde a una línea de dirección, ¿qué índices de Miller le corresponderán a esta línea?