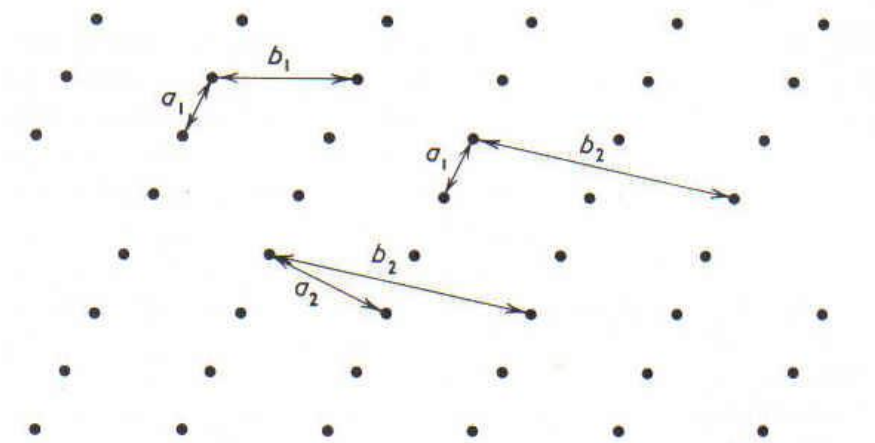


Guía de Problemas N°2

Redes y Simetría

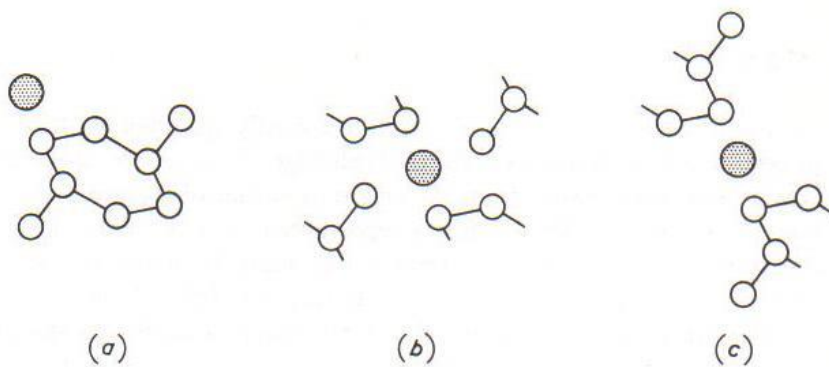
Problema 1

Examine la red de la figura y los vectores de red mencionados en ella. ¿Qué puede concluir de cada elección? ¿Qué características tiene cada una de las tres elecciones?



Problema 2

Construya la estructura periódica que se genera a partir de los vectores de red dados y el motivo en cada uno de los casos (a), (b) y (c). Primero construya la red de nodos a partir de los vectores, luego superponga un nodo con algún punto del motivo (átomo) y muévase a cada uno de los nodos vecinos de la red para generar el siguiente motivo.



Problema 3.

Considere las estructuras periódicas generadas en los casos (a) y (b) del problema 2. Midiendo con regla determine las coordenadas atómicas de todos los átomos en cada caso. Muestre que las coordenadas obtenidas están relacionadas.

Problema 4.

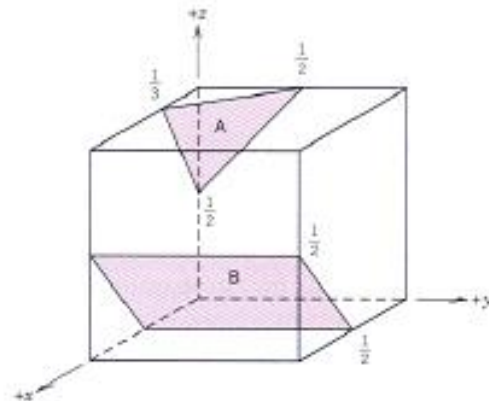
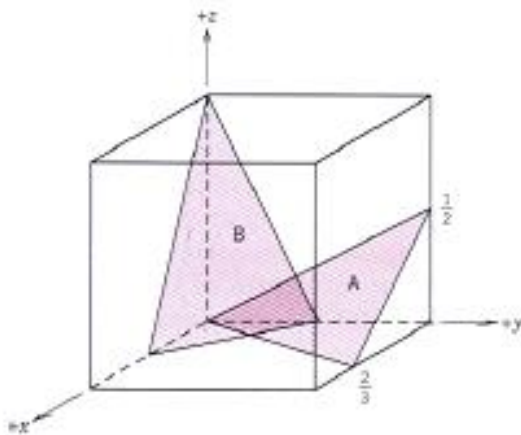
Grafique una red bidimensional primitiva y otra centrada. Descubra cuál es la ventaja de elegir una red centrada (para fundamentar su respuesta recuerde los conceptos relacionados a las simetrías).

Problema 5.

- ¿Cuál/es de las direcciones $[010]$, $[432]$, $[\bar{2}10]$, $[23\bar{1}]$, si es que hay alguna, se encuentra/n paralela/s al plano $(1\ 1\ 5)$?
- Cuál/es de los planos (112) , (321) , $(1\bar{1}1)$, si es que hay alguno, se encuentra/n paralelos a la dirección $[1\bar{1}\bar{1}]$?

Problema 6.

- Grafique las siguientes direcciones: $[\bar{1}\bar{2}1]$, $[\bar{1}02]$, $[110]$
- Determinar los índices de Miller de los siguientes planos



- Construya los planos cuyos índices de Miller son los siguientes $(11\bar{2})$, $(0\bar{1}\bar{1})$.

Problema 7.

Sabiendo que el oro metálico (Au) tiene una estructura cristalina que puede describirse ubicando a los átomos en los vértices y centros de las caras de un cubo (usualmente llamada *fcc* “*face centered cubic structure*”) y que posee un parámetro de celda $a = 4.070 \text{ \AA}$, responda los siguientes ejercicios.

- Grafique la estructura cristalina por capas y luego en una proyección tridimensional.
- Elija nodos y determine una celda.
- Elija un átomo y obtenga las distancias entre primeros vecinos, segundos vecinos y sus números de coordinación.
- Obtenga los valores de densidad y la fracción de empaquetamiento cuando consideramos los átomos de oro como esferas rígidas.

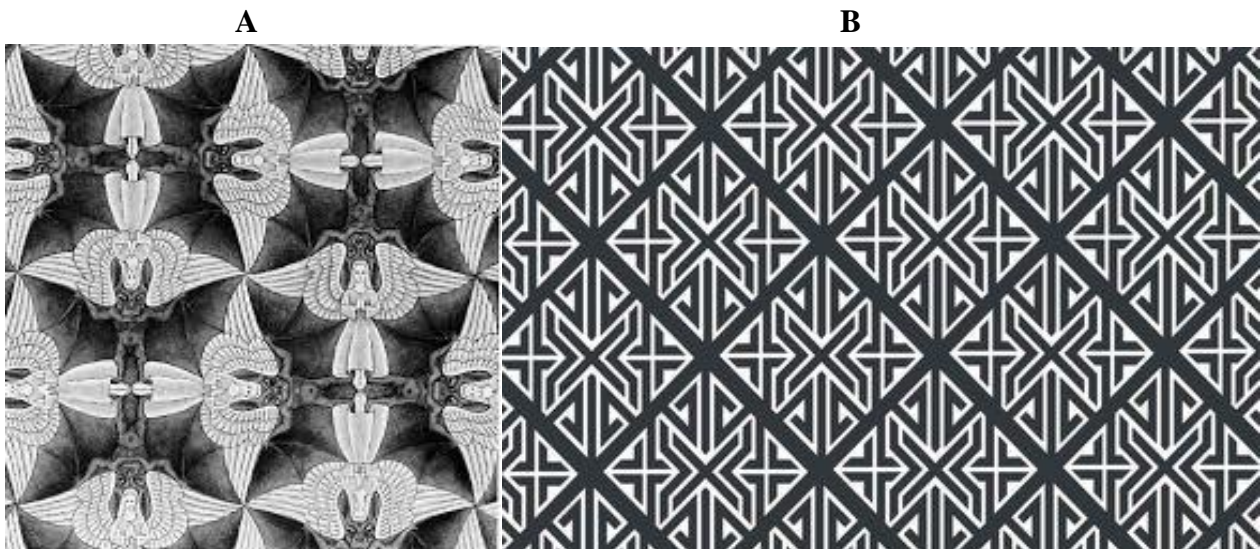
Problema 8.

El hierro (Fe) puede describirse como una estructura *fcc* con parámetro de red 3.647 \AA . La aleación Fe-C (2.0 % en masa de carbono C) puede formar una solución intersticial o una solución sólida sustitucional. Calcule el valor de la densidad en estos dos casos y compare con los valores experimentales de $7.65 \times 10^6 \text{ g/m}^3$.

Problema 9.

Las siguientes figuras corresponden a patrones en **2 dimensiones**. Para cada uno de ellos indicar lo siguiente:

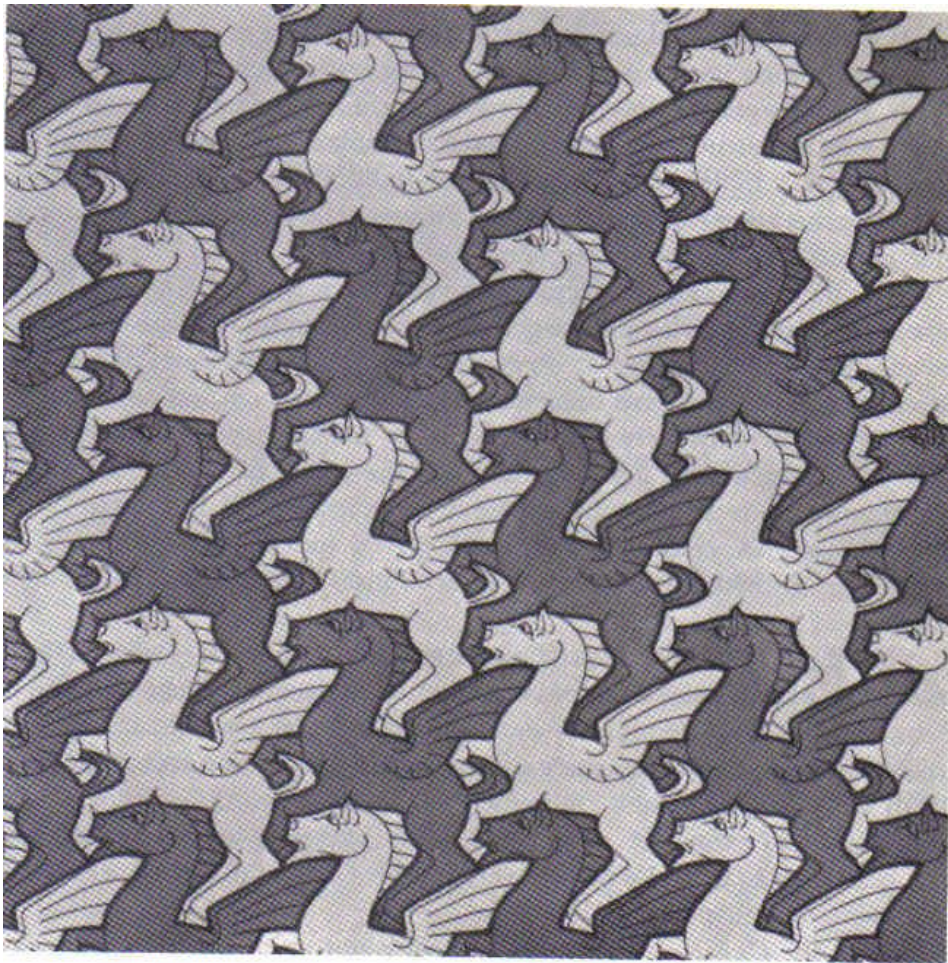
- Identifique los puntos de la red y determine la celda unidad. Ayuda: las figuras que usualmente se suelen utilizar son rectángulos, cuadrados, hexágonos, paralelepípedos...; recordar que la celda unidad puede ser tanto primitiva como centrada.
- Determine los elementos de simetría. Ayuda: para patrones en 2D, los elementos posibles son: ejes de rotación 2-, 3-, 4- y 6-, líneas de reflexión, líneas de deslizamiento –reflexión seguida de una traslación igual a la mitad de la traslación del retículo–. Notar que la reflexión en 2D es equivalente al eje de rotación 2.
- Indique qué fracción de la celda unidad elegida corresponde a la unidad asimétrica.
- Utilizando las tablas de “Grupos Planos de Simetría” de las clases teóricas, indique cual es el grupo puntual de simetría de cada una de las imágenes.



Problema 10.

Para responder los siguientes ejercicios utilice la imagen que se indica a continuación pero sin tener en cuenta los colores de los caballos (o sea, todos iguales). También corresponde a un patrón en **2 dimensiones**.

- Construya una red bidimensional para describir la figura y elija tres pares posibles de vectores que le permitan describir la red, cada uno conteniendo un solo nodo de red.
- Halle los parámetros de celda (utilice regla).
- ¿Sería posible utilizar una figura con geometría rectangular para describir la red? ¿Cuántos nodos de red contendría esa celda?
- Utilizando las tablas de “Grupos Planos de Simetría” de las clases teóricas, indique cual es el grupo puntual de simetría de cada una de la imagen.

**Problema 11.**

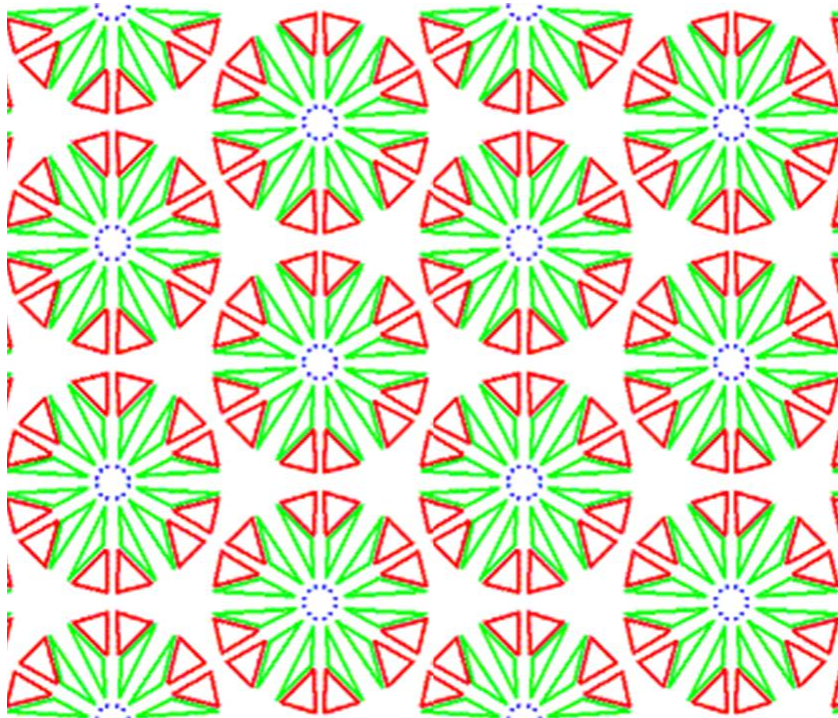
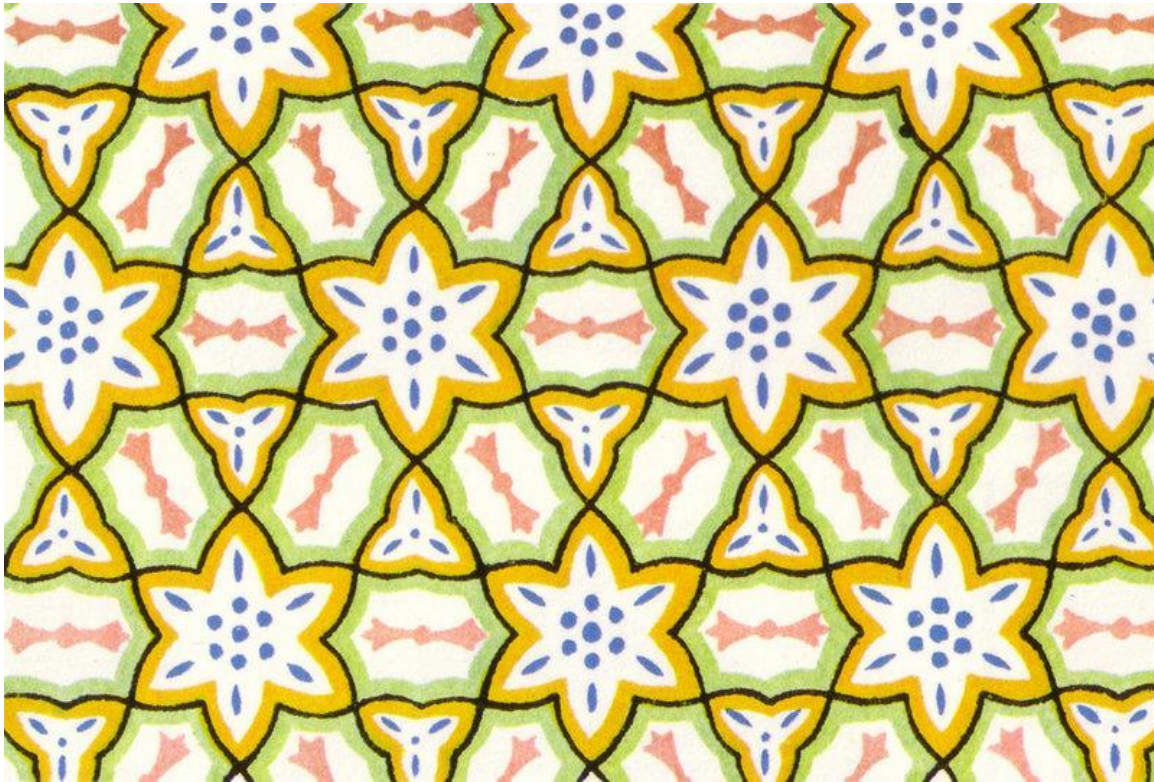
Para resolver estos ejercicios debe utilizar nuevamente la imagen de los caballos, pero ahora considere que hay dos colores diferentes blancos y negro.

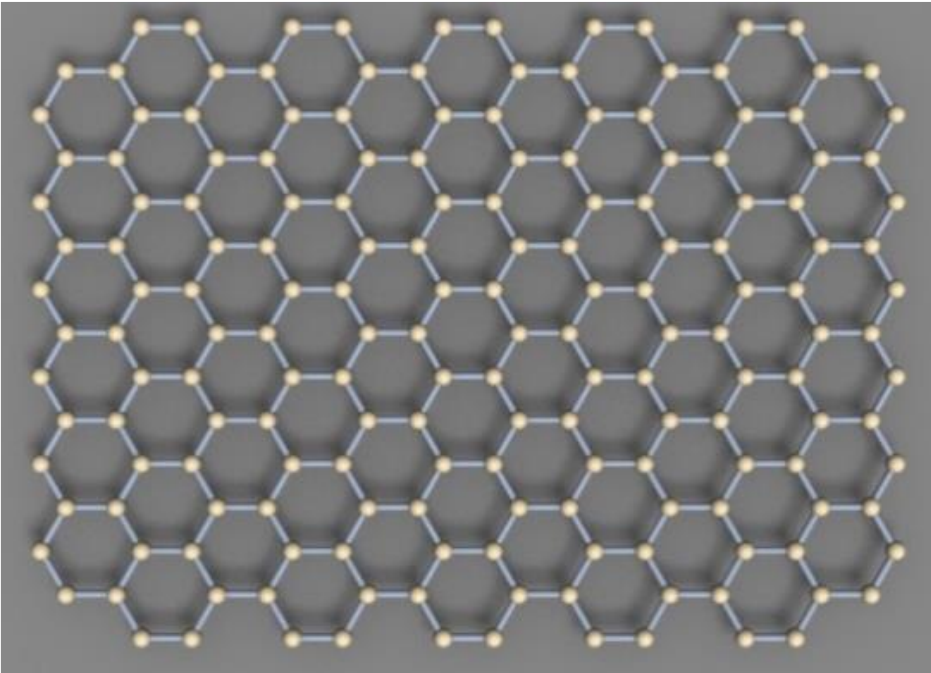
- Halle la red correspondiente y encuentre vectores que la describen.
- Halle una celda que contenga un caballo blanco completo (no en partes) y que sea lo más simple posible. ¿Cuántos caballos blancos contiene en total?
- Utilizando las tablas de “Grupos Planos de Simetría” de las clases teóricas, indique cual es el grupo puntual de simetría de la imagen.

Problema 12.

Demostrar que el grafeno y las dos imágenes que corresponden a patrones decorativos que se indican a continuación pertenecen al mismo grupo espacial en 2D

Para demostrar esto, determine la celda unidad en cada caso, y defina los elementos y operaciones de simetría.

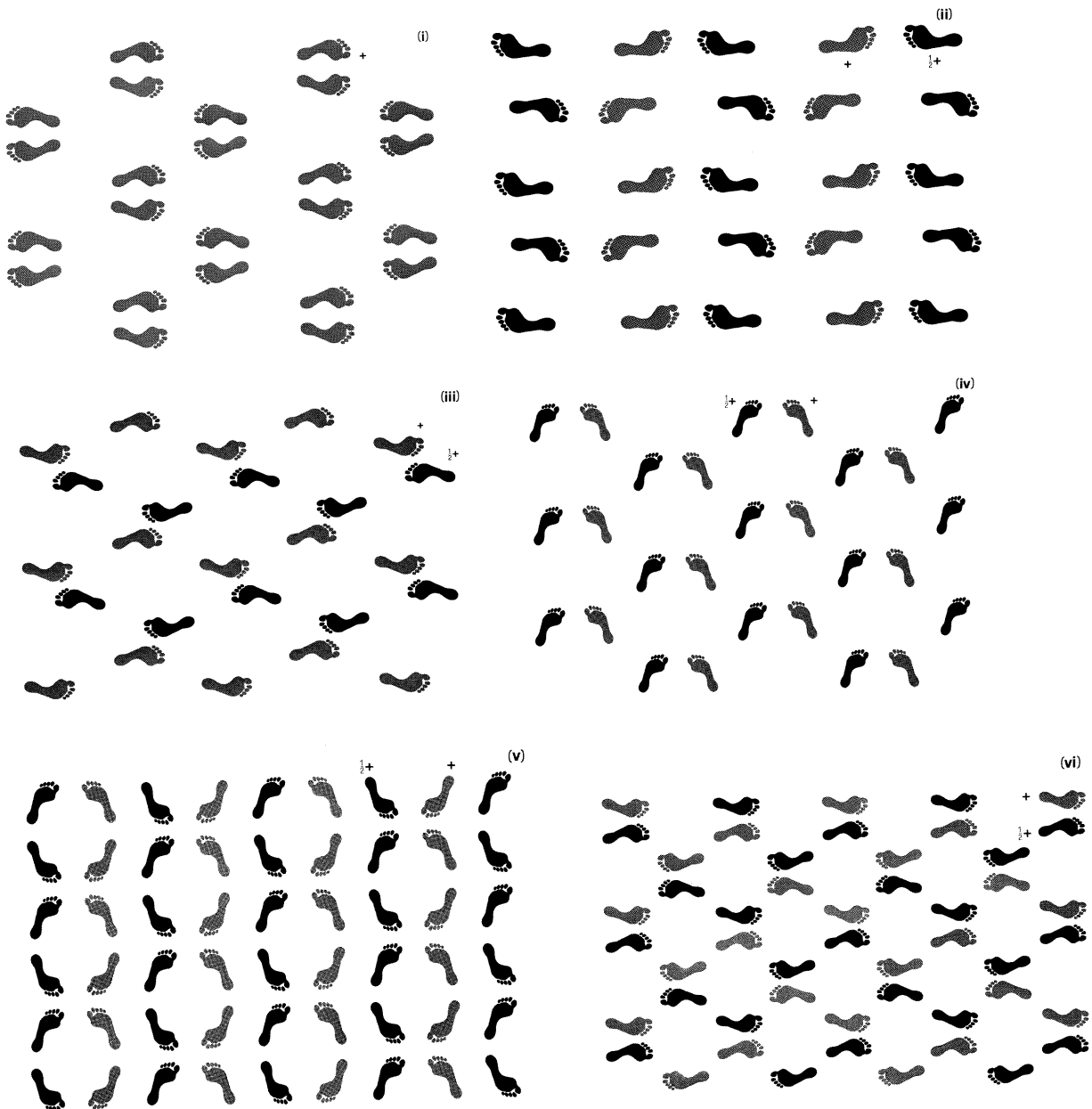




Problema 13

Las siguientes figuras “piecitos”, corresponden a **patrones en 3 dimensiones**. Para cada uno de ellos responder los ejercicios que se indican a continuación. **ATENCIÓN:** Las figuras ii-vi presentan 2 colores para representar diferentes alturas o niveles. El gris corresponde al plano de la hoja y el negro a +1/2 en el eje perpendicular a la hoja.

- Identifique los puntos de la red y determine la celda unidad (recordar recomendaciones para ejercicios en 2D)
- Encuentre los elementos de simetría (para patrones en 3D, los elementos posibles son: ejes de rotación 2-, 3-, 4- y 6-, líneas de reflexión, líneas de deslizamiento –reflexión seguida de una traslación igual a la mitad de la traslación del retículo–). Notar que la reflexión en 2D es equivalente al eje de rotación 2. Utilizar las tablas de las clases teóricas como referencia.
- Indique qué fracción de la celda unidad elegida es la unidad de simetría.



Rta: (i) Pma2 (plane group pmg) ii) Pnc2 iii) Pbn21 iv) Cc v) Cmc21 vi) Aba2

Problema 14.

En la Figura 1, complete el diagrama con todas las operaciones de simetría correspondientes y asigne el grupo espacial. En la Figura 2, complete el diagrama con todos los motivos correspondientes, respetando posición en z y orientación tomando como referencia al motivo indicado en rojo.

Fig. 1

No. 53

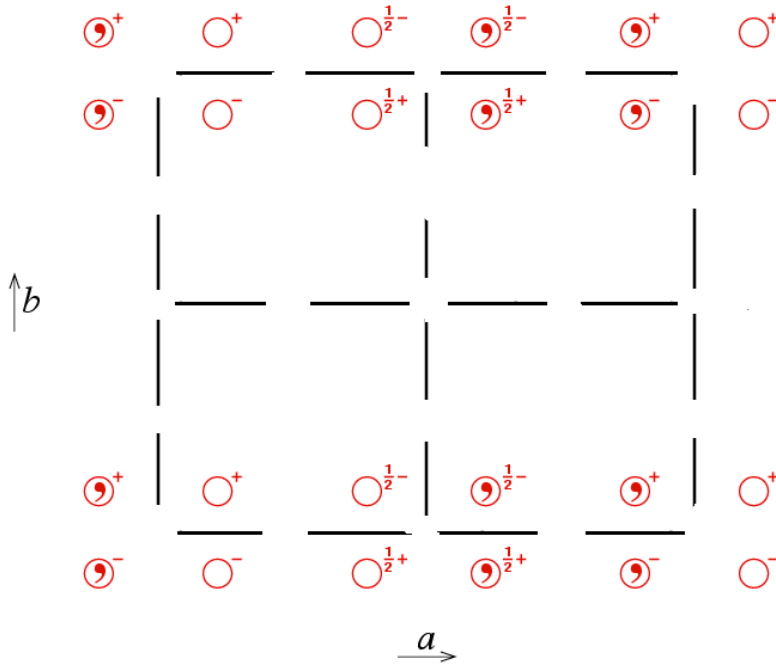
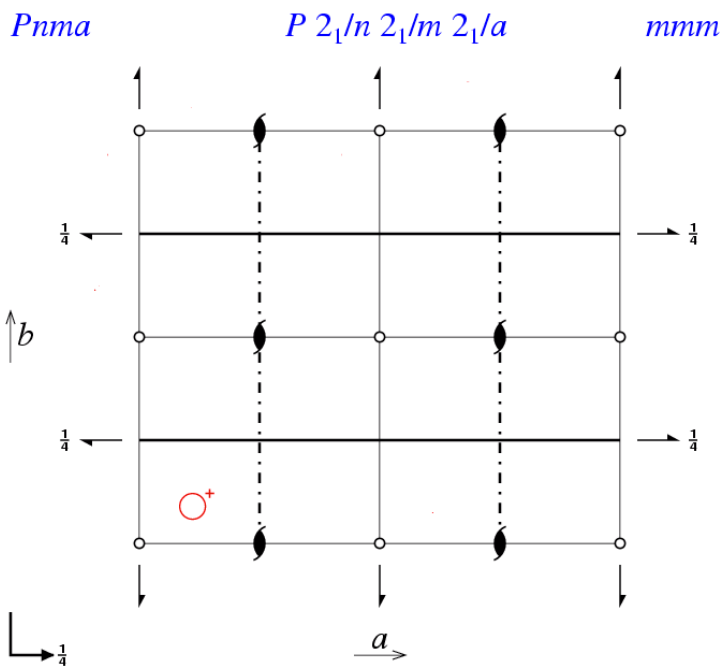


Fig. 2



No. 62



Problema 15.

a) Dados los diagramas I) y II) complete todos los motivos correspondientes, respetando la posición en z y orientación, tomando como referencia al motivo indicado en rojo.

I) *Pban* *P 2/b 2/a 2/n* *mmm* No. 50

1 x, y, z
 2 $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, z$
 3 $\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, z$
 4 $\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, \bar{z}$
 5 $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, \bar{z}$
 6 x, \bar{y}, \bar{z}
 7 \bar{x}, y, \bar{z}
 8 \bar{x}, \bar{y}, z

II) *Pmc2₁* *P m c 2₁* *mm2* No. 26

1 x, y, z
 2 \bar{x}, y, z
 3 $x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$
 4 $\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$

b) Dados los diagramas III) y IV) donde lo considere, complete el cada uno de ellos con todas las operaciones de simetría.

III) $P2_1/c$ $P 1 2_1/c 1$ $2/m$ No. 14

1 x, y, z
 2 $\bar{x}, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$
 3 $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$
 4 $x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z$

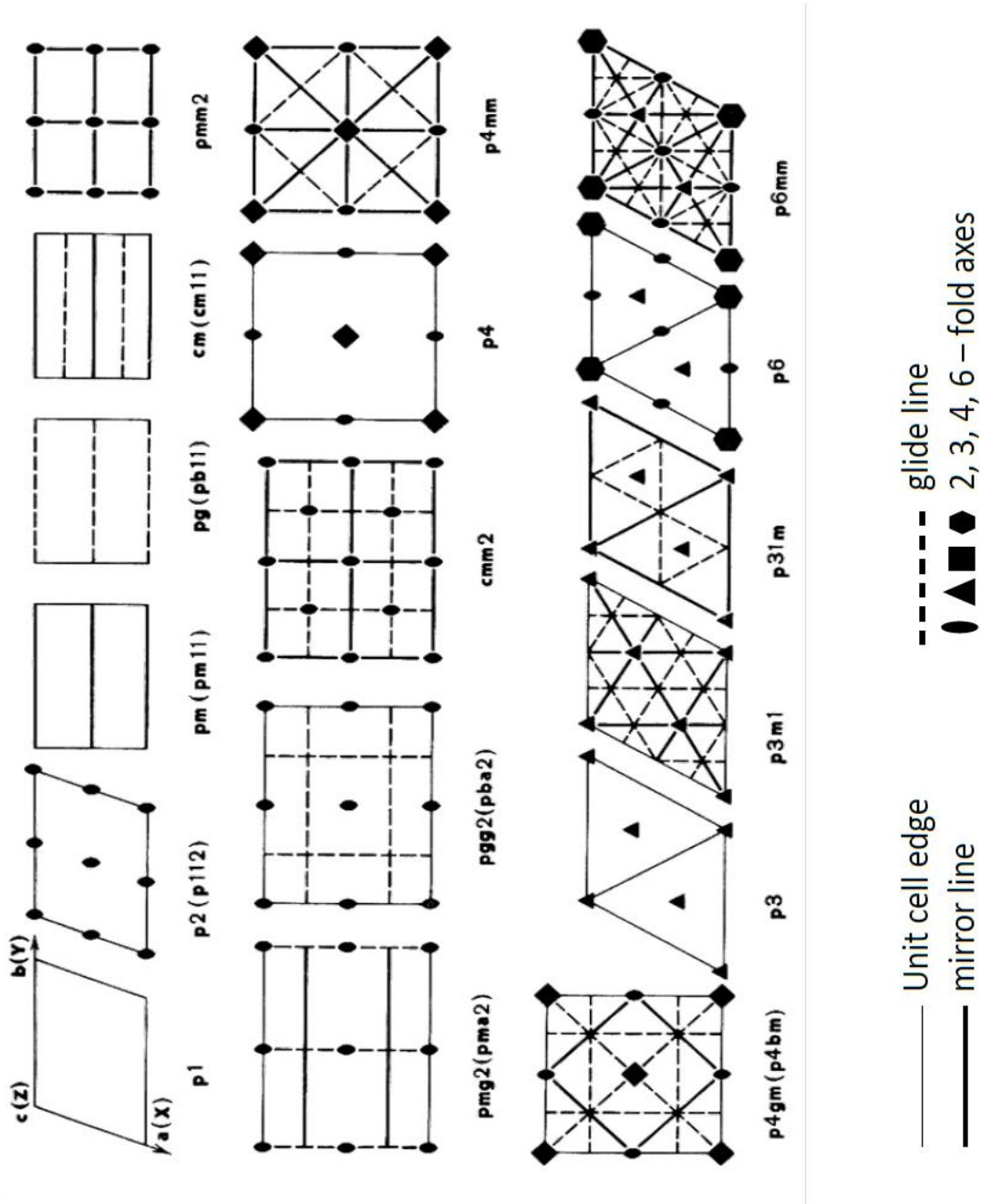
IV) $Pm\bar{m}a$ $P 2_1/m 2/m 2/a$ mmm No. 51

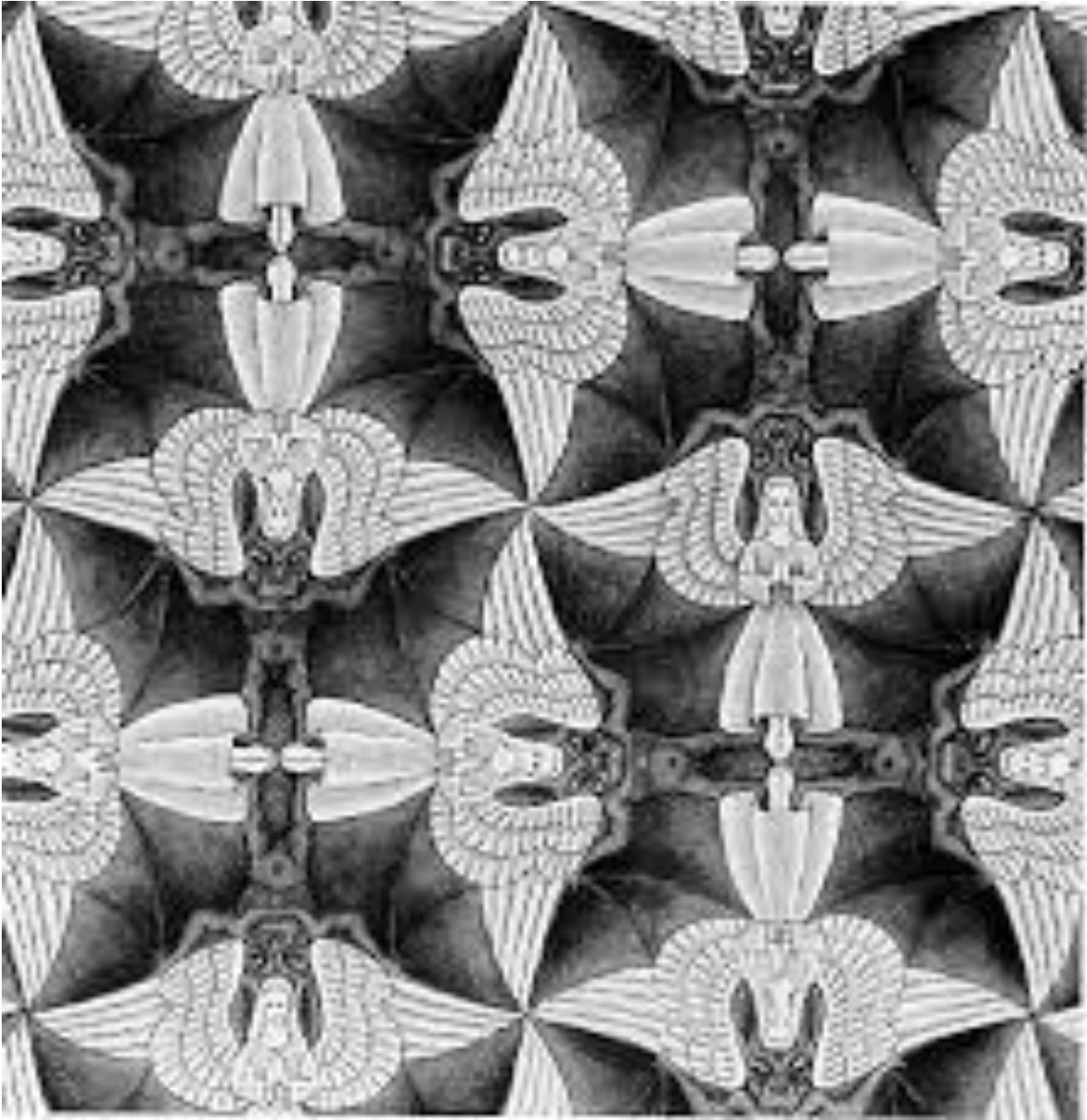
1 x, y, z
 2 $\frac{1}{2} - x, y, z$
 3 x, \bar{y}, z
 4 $\frac{1}{2} + x, y, \bar{z}$
 5 $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$
 6 $\frac{1}{2} + x, \bar{y}, \bar{z}$
 7 \bar{x}, y, \bar{z}
 8 $\frac{1}{2} - x, \bar{y}, z$

ANEXO: Figuras en mayor tamaño

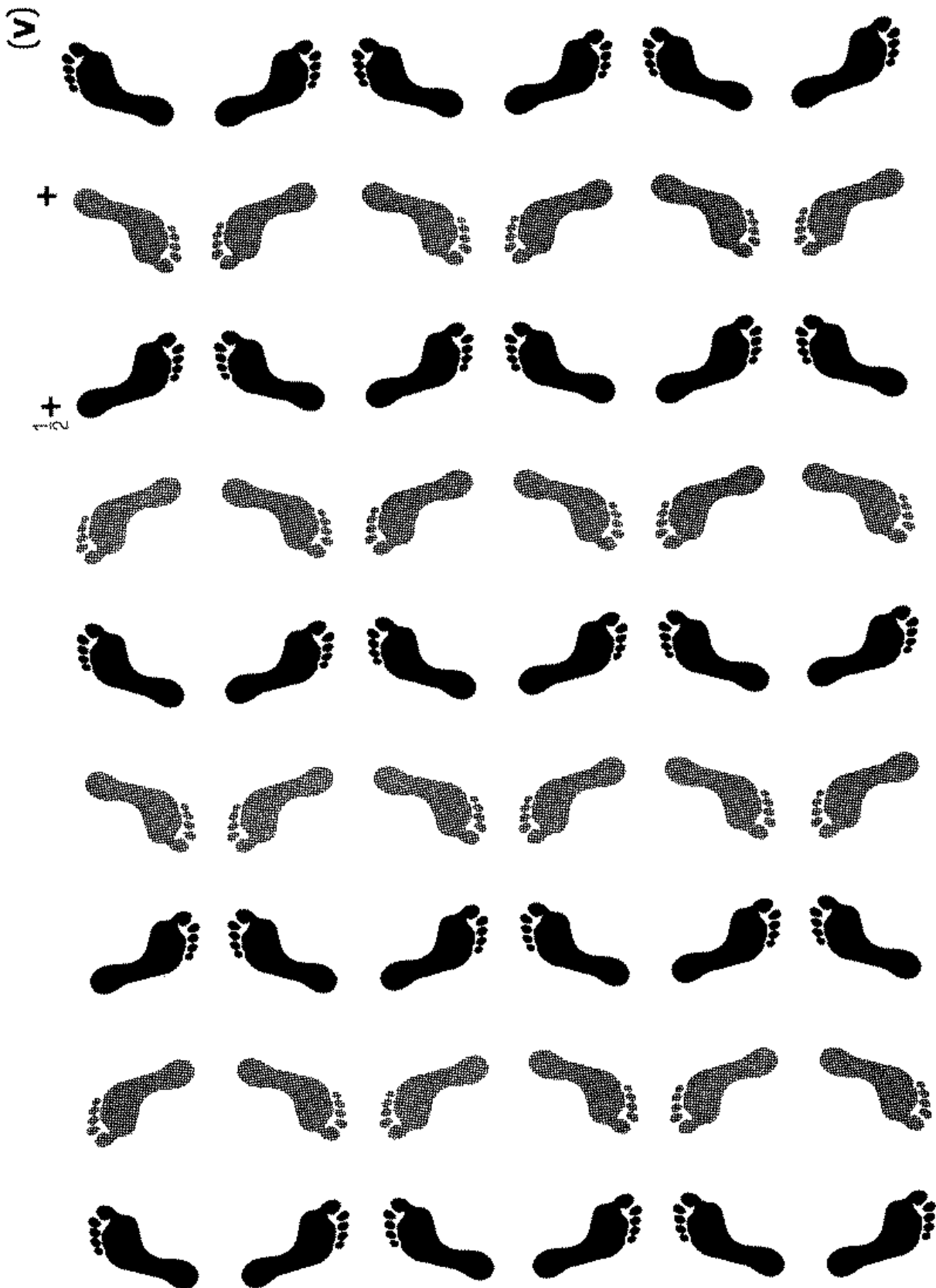
Algunas están giradas para ampliar la imagen, en esos casos utilizar la hoja en orientación horizontal

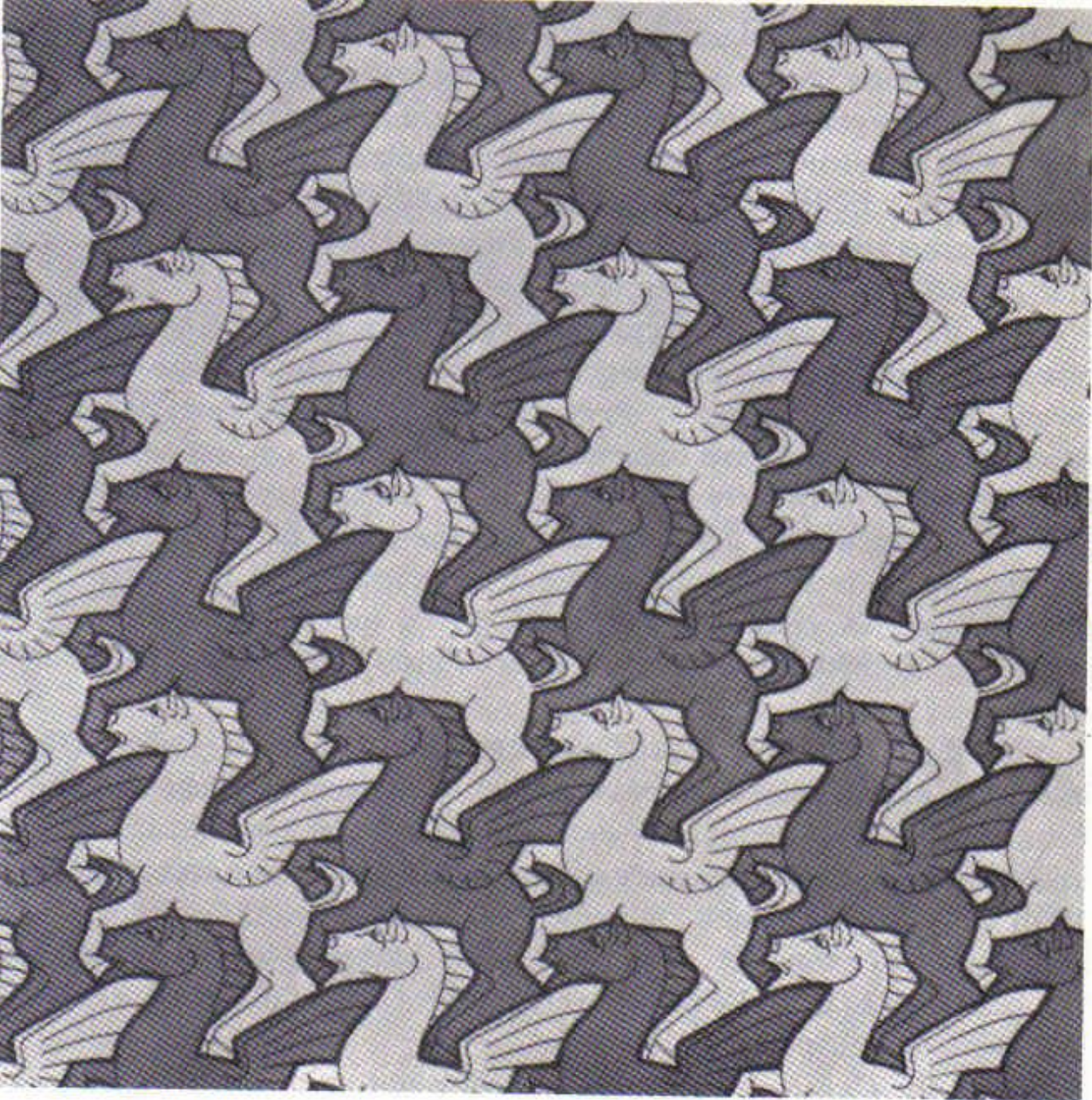
Symmetry Elements of the 2D Space Groups

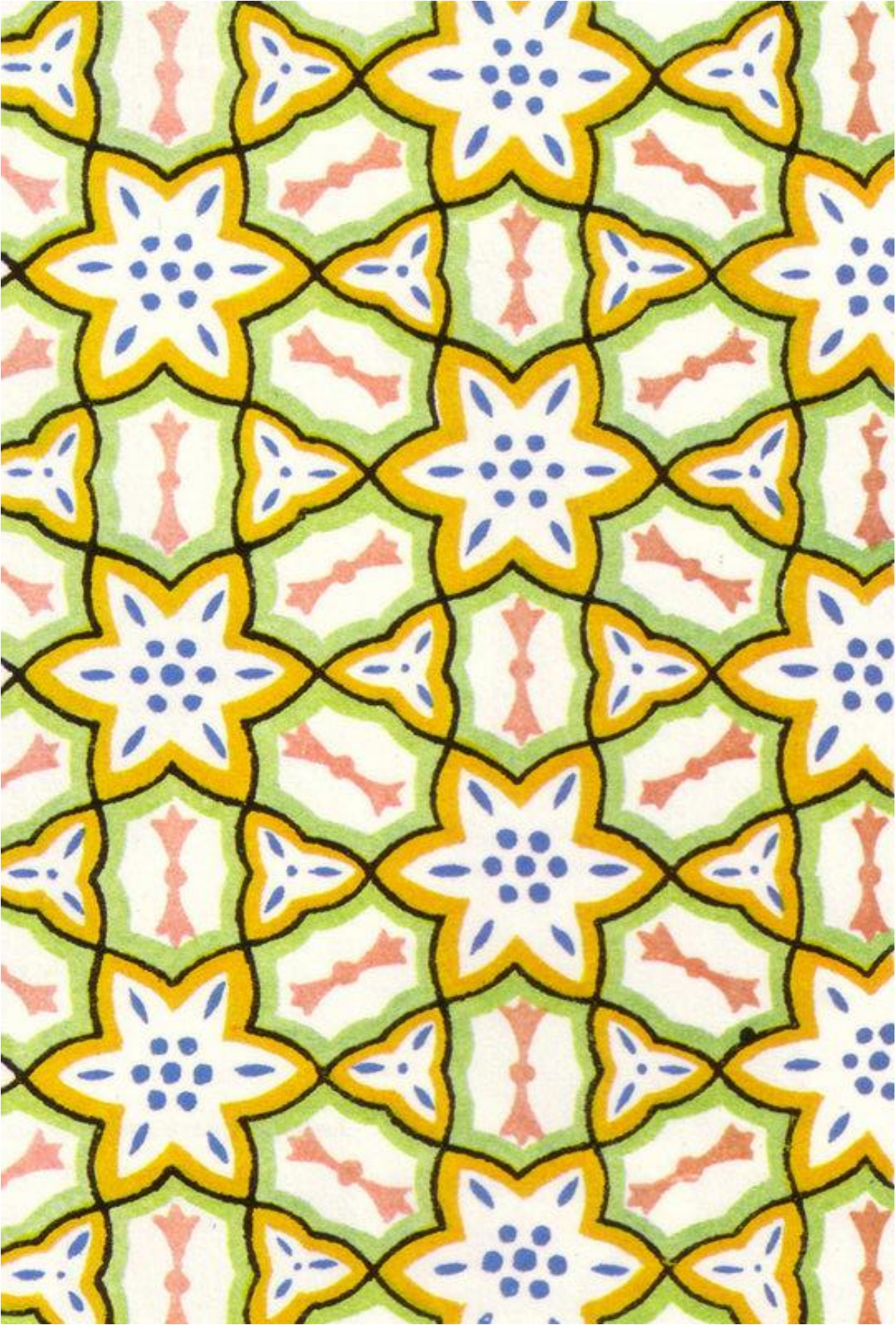


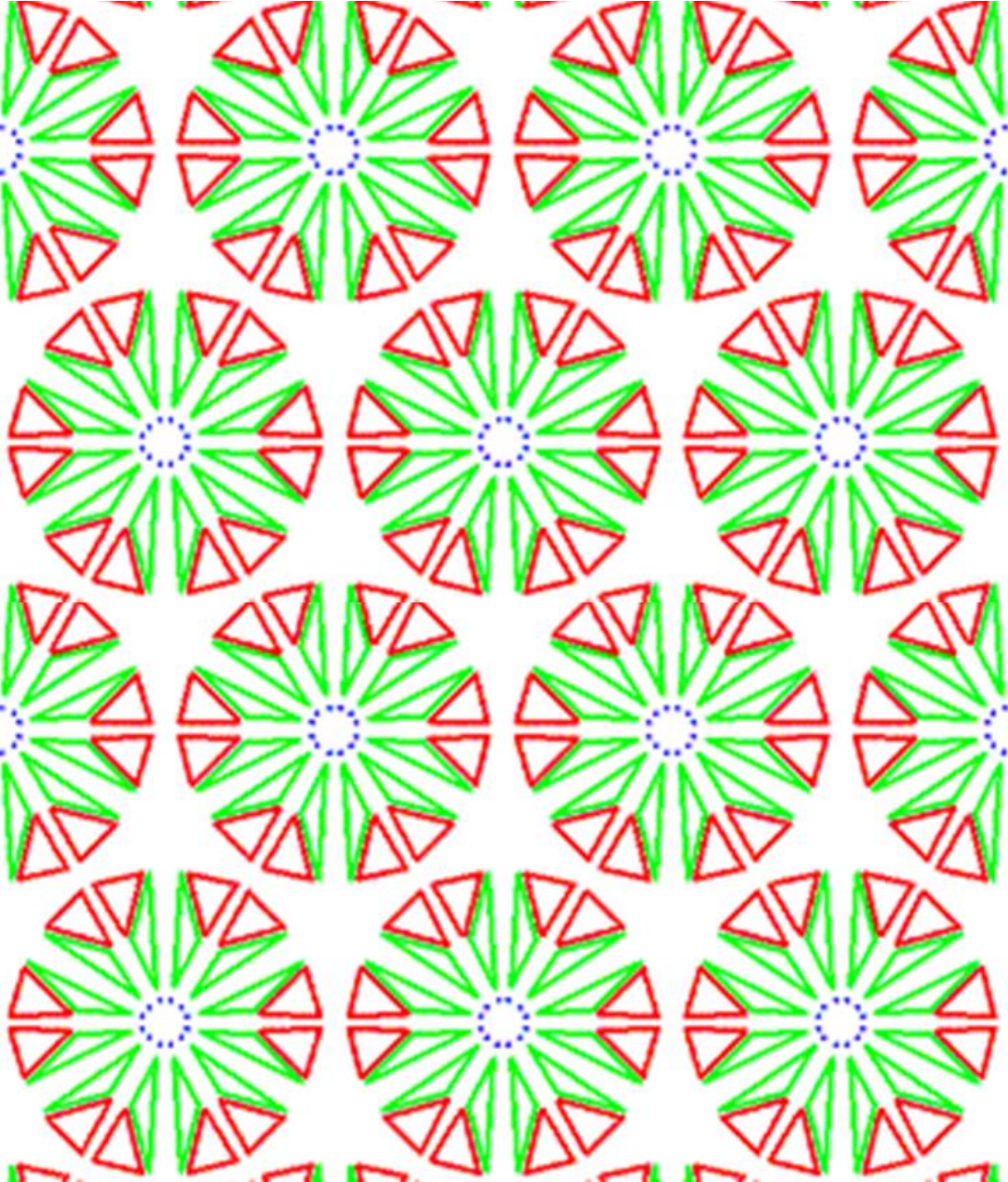


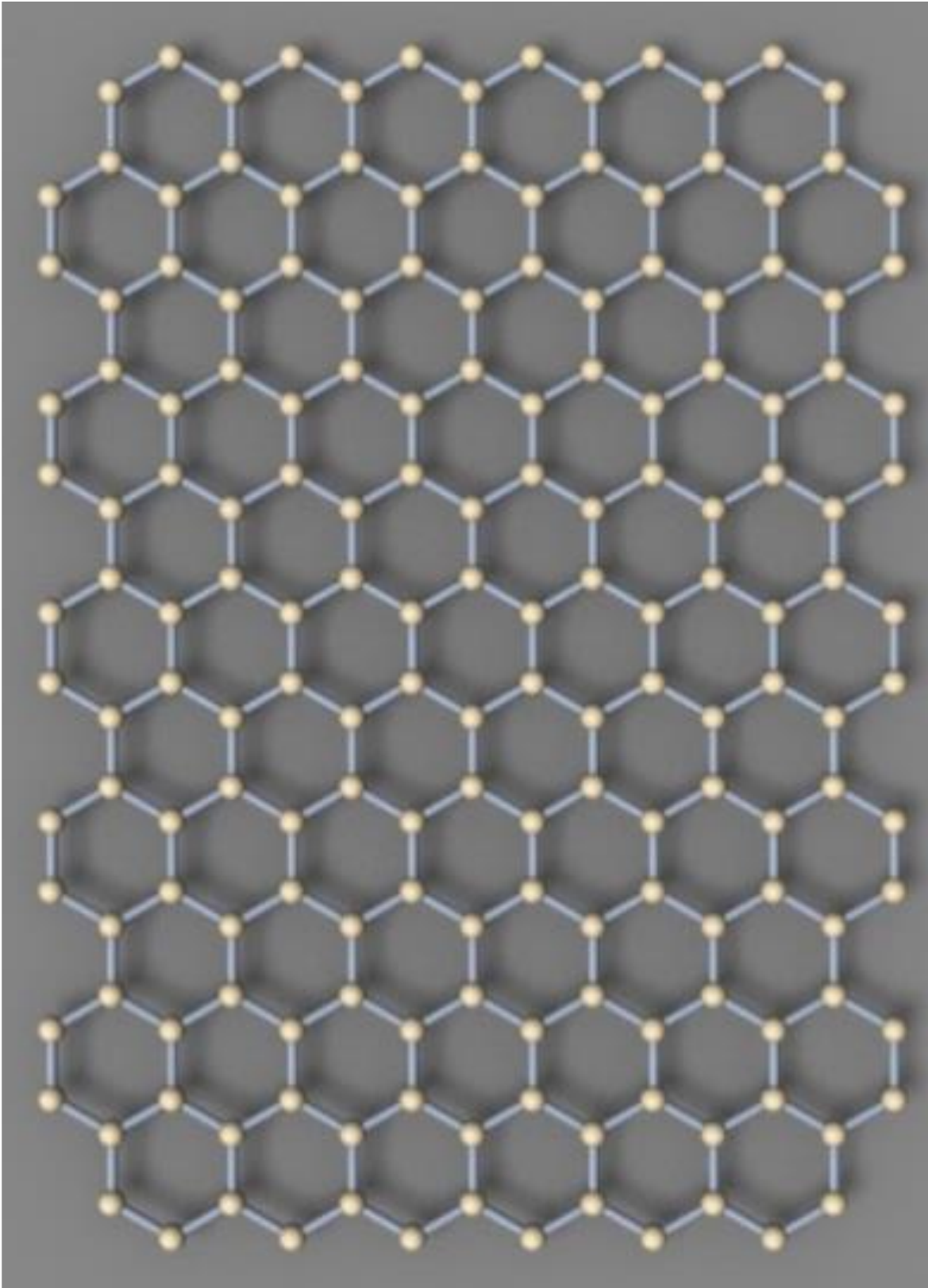


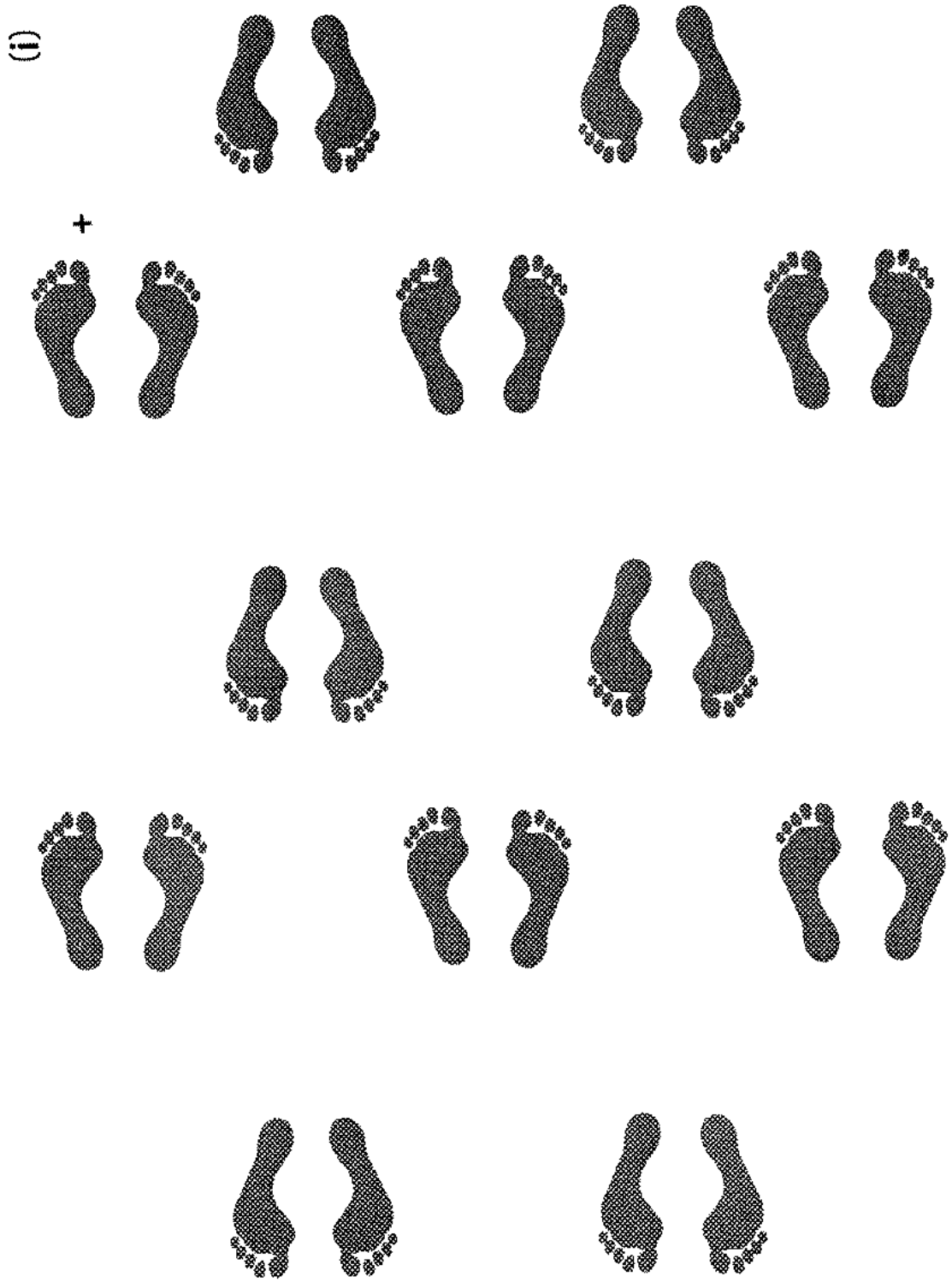


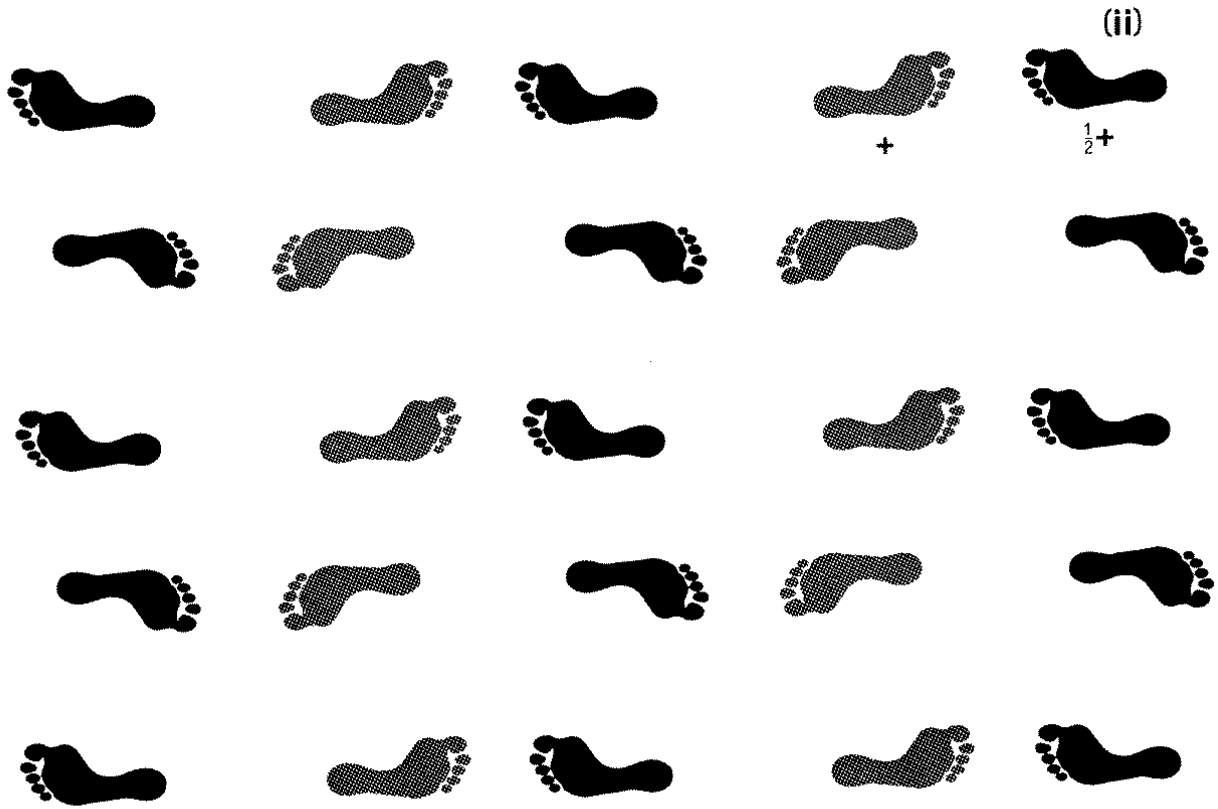




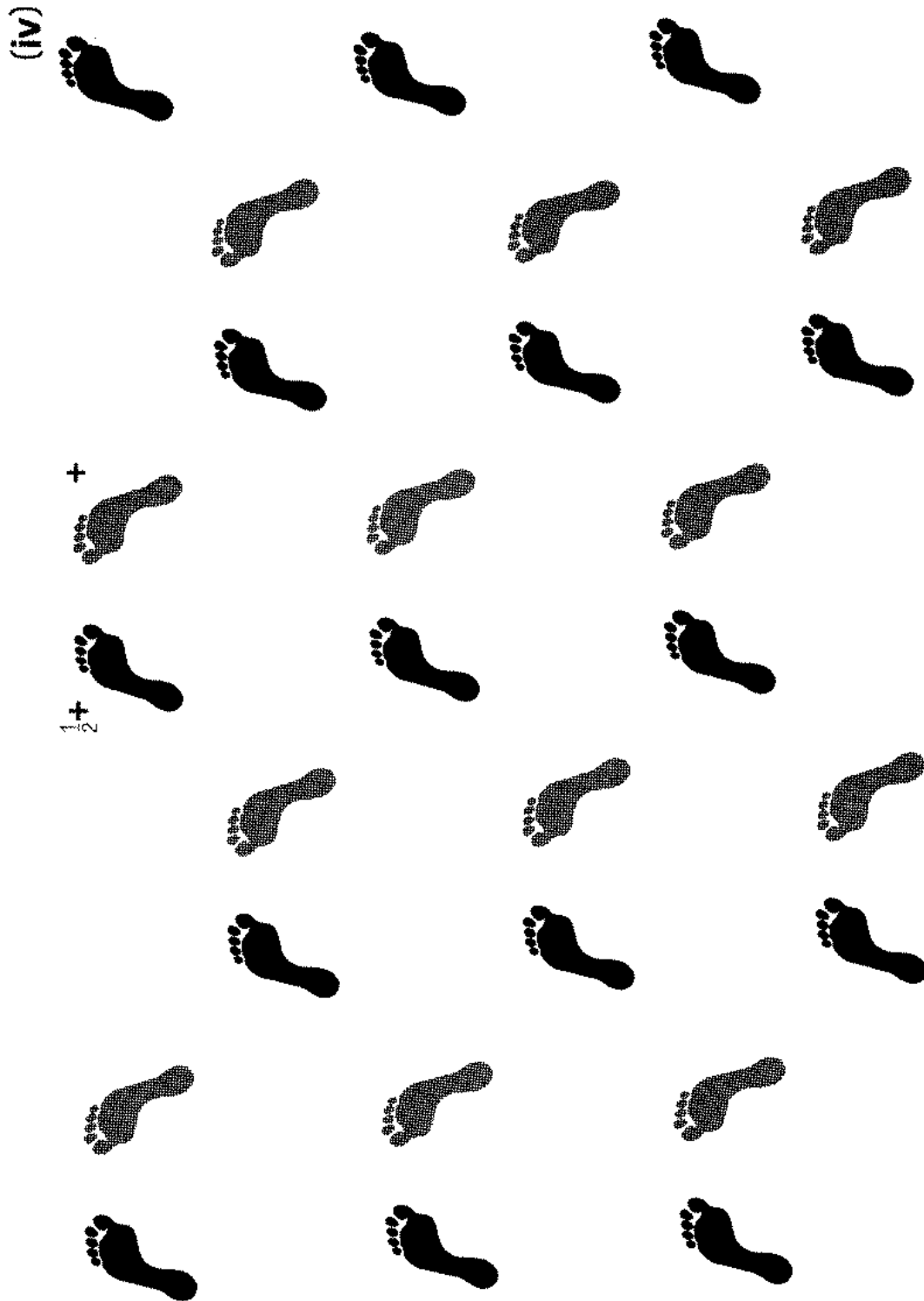


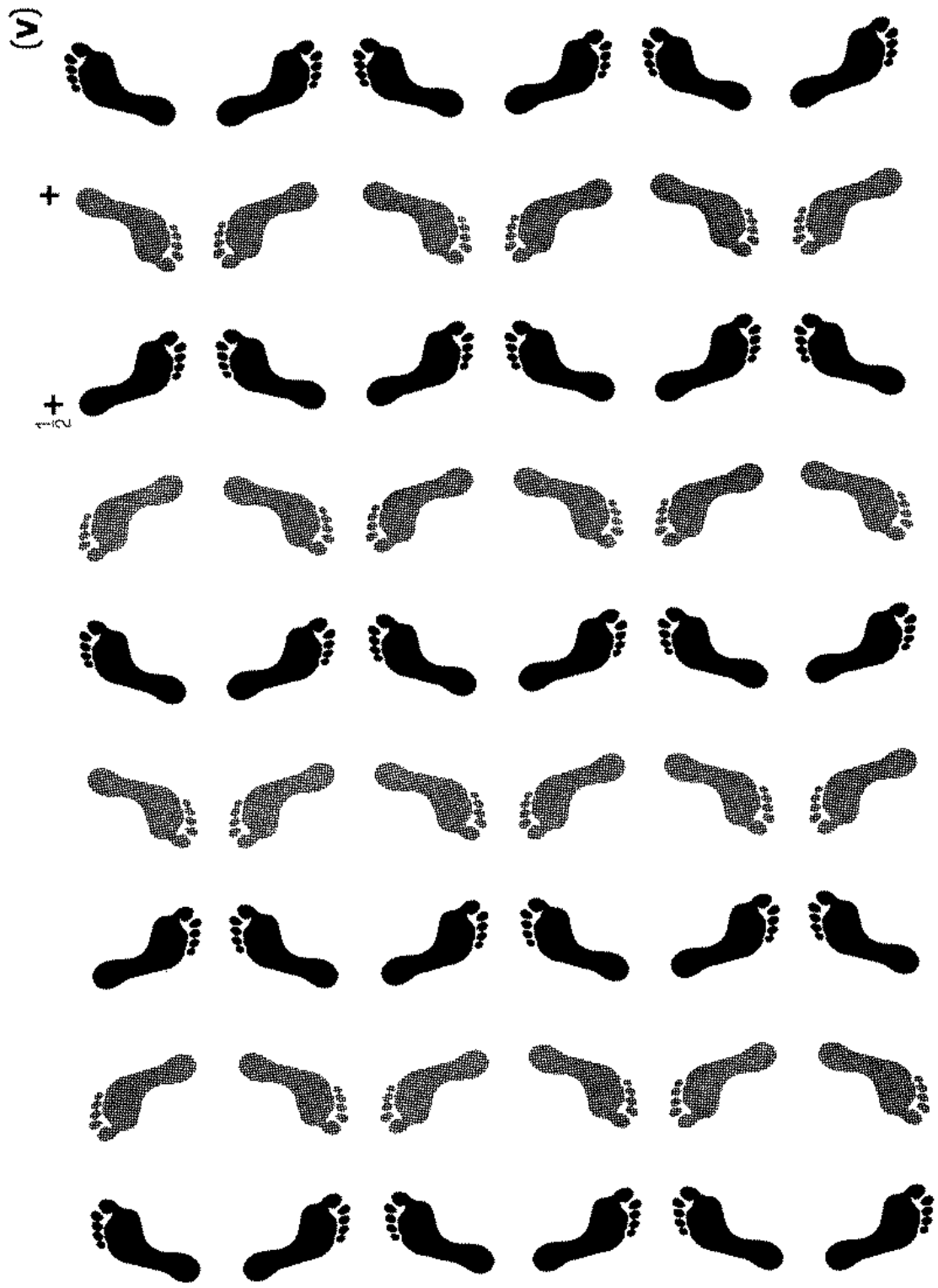


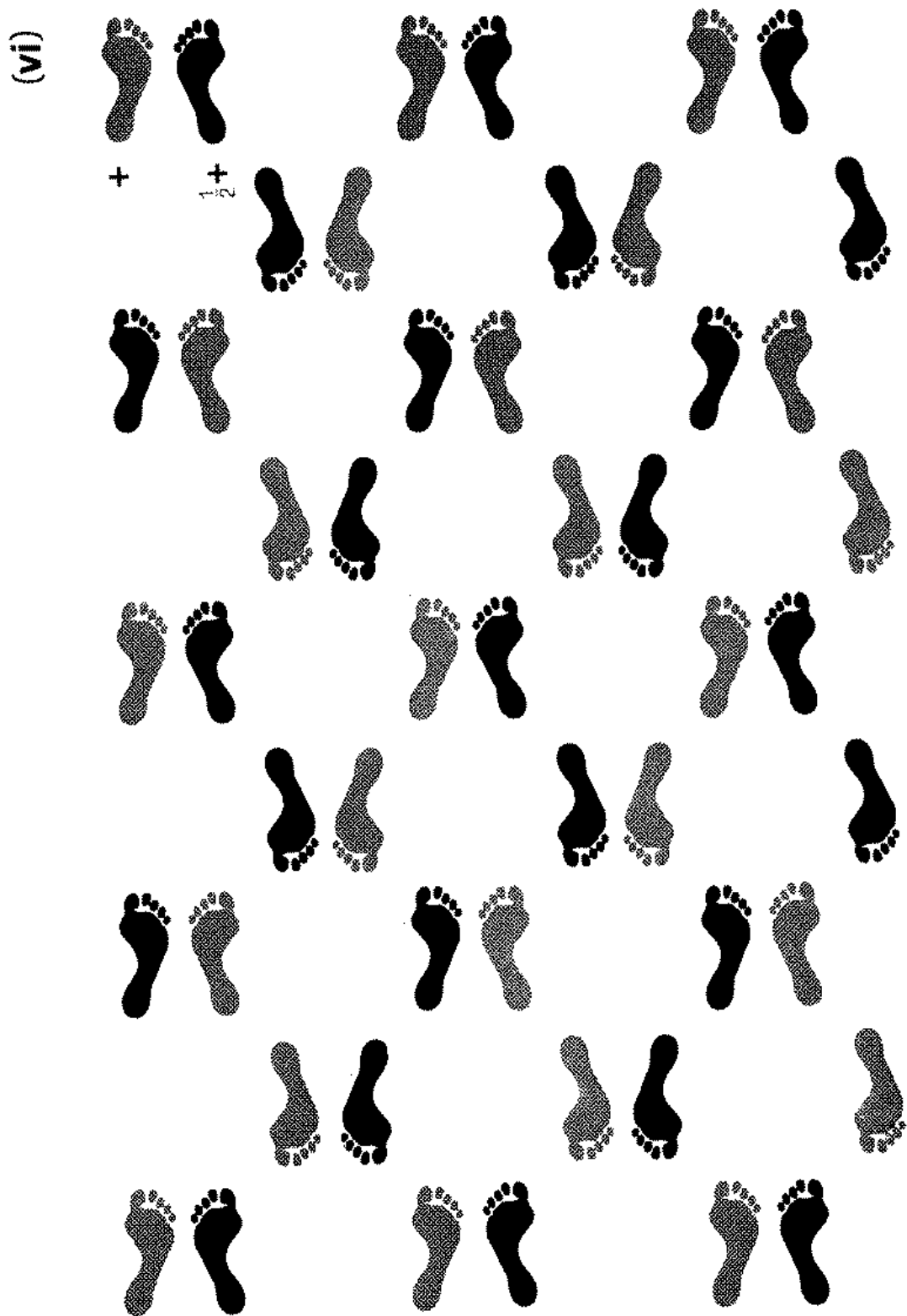






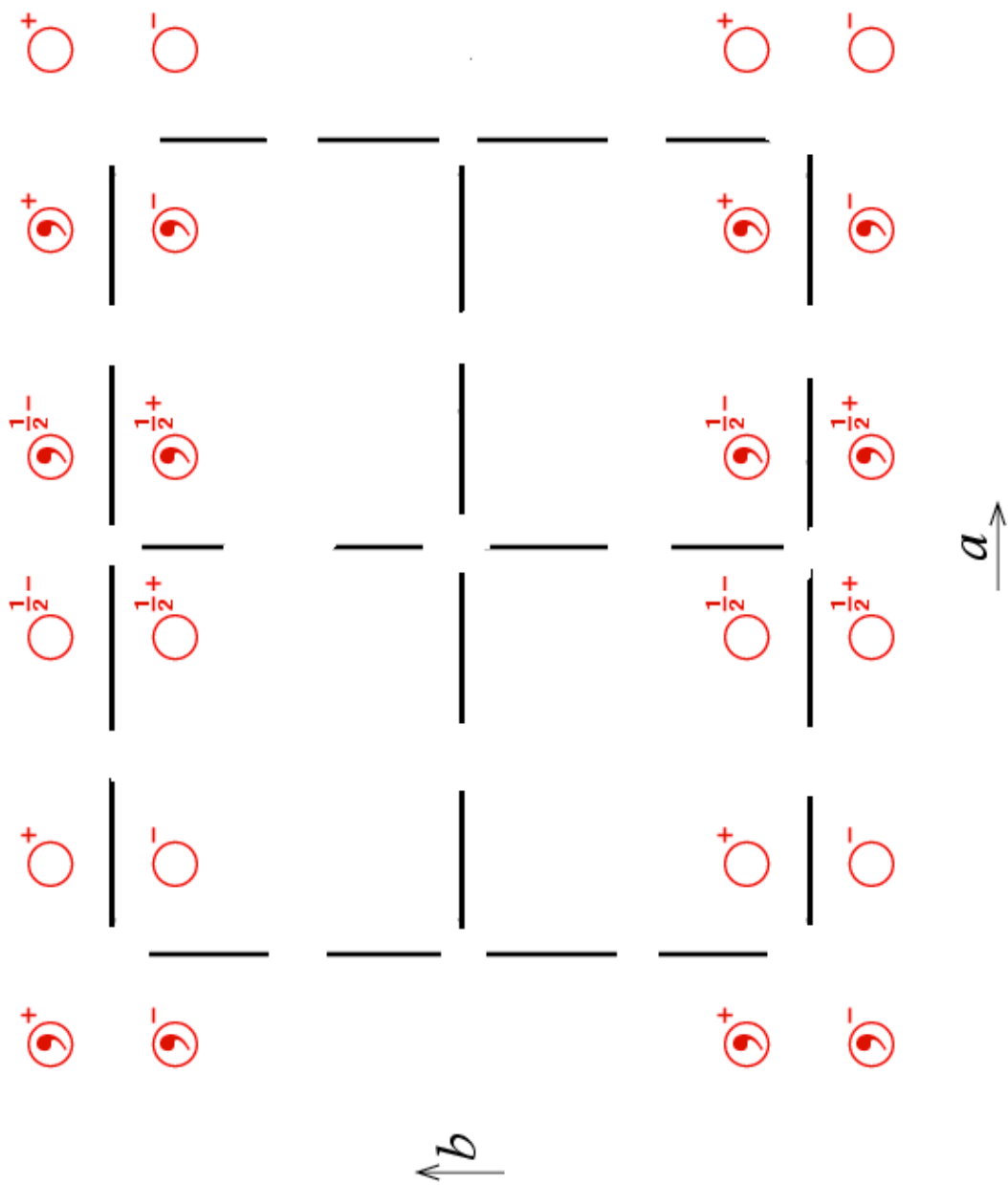








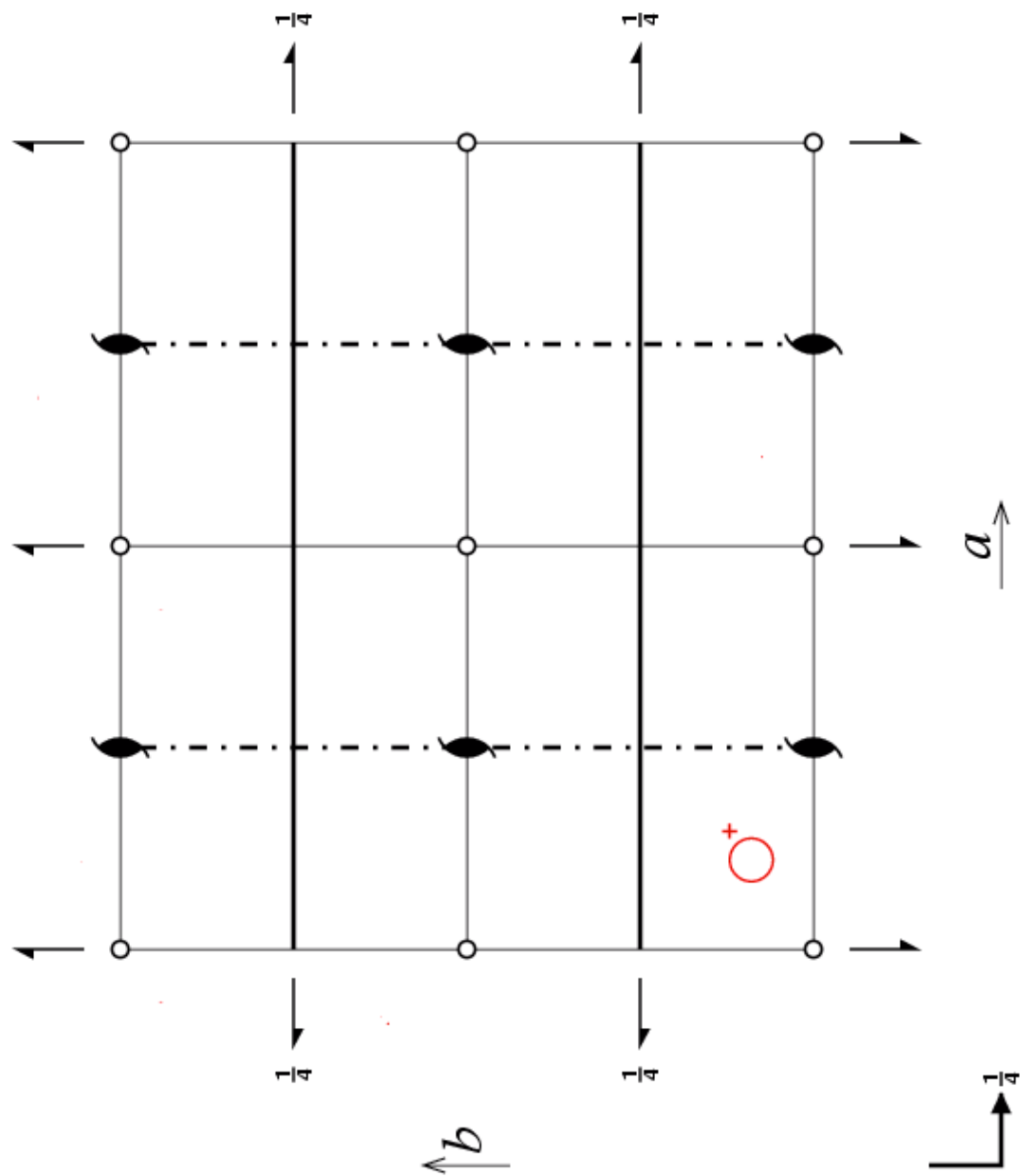
No. 53



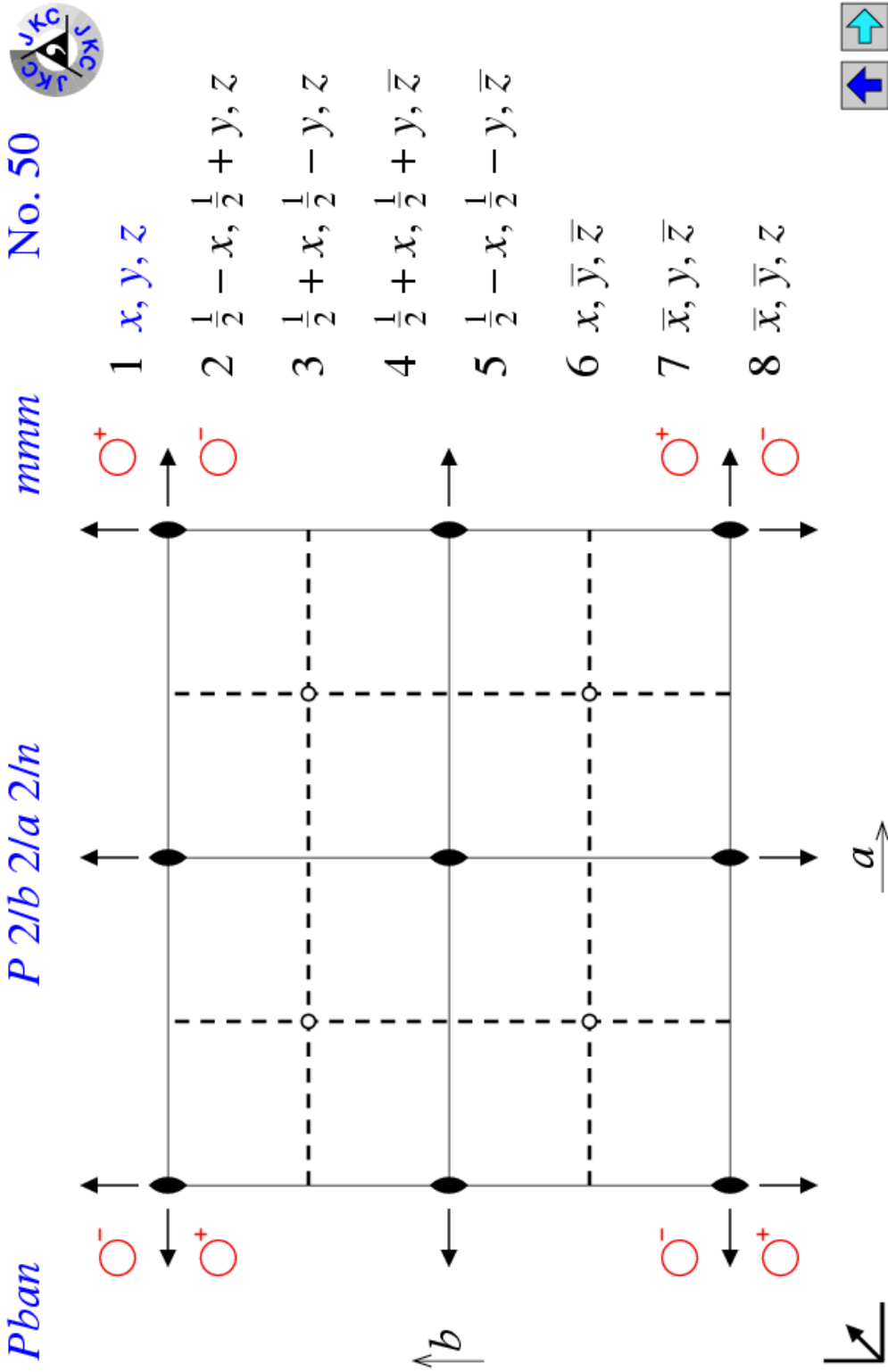


No. 62

$Pnma$ $P 2_1/n 2_1/m 2_1/a$ mmm



I)



II)

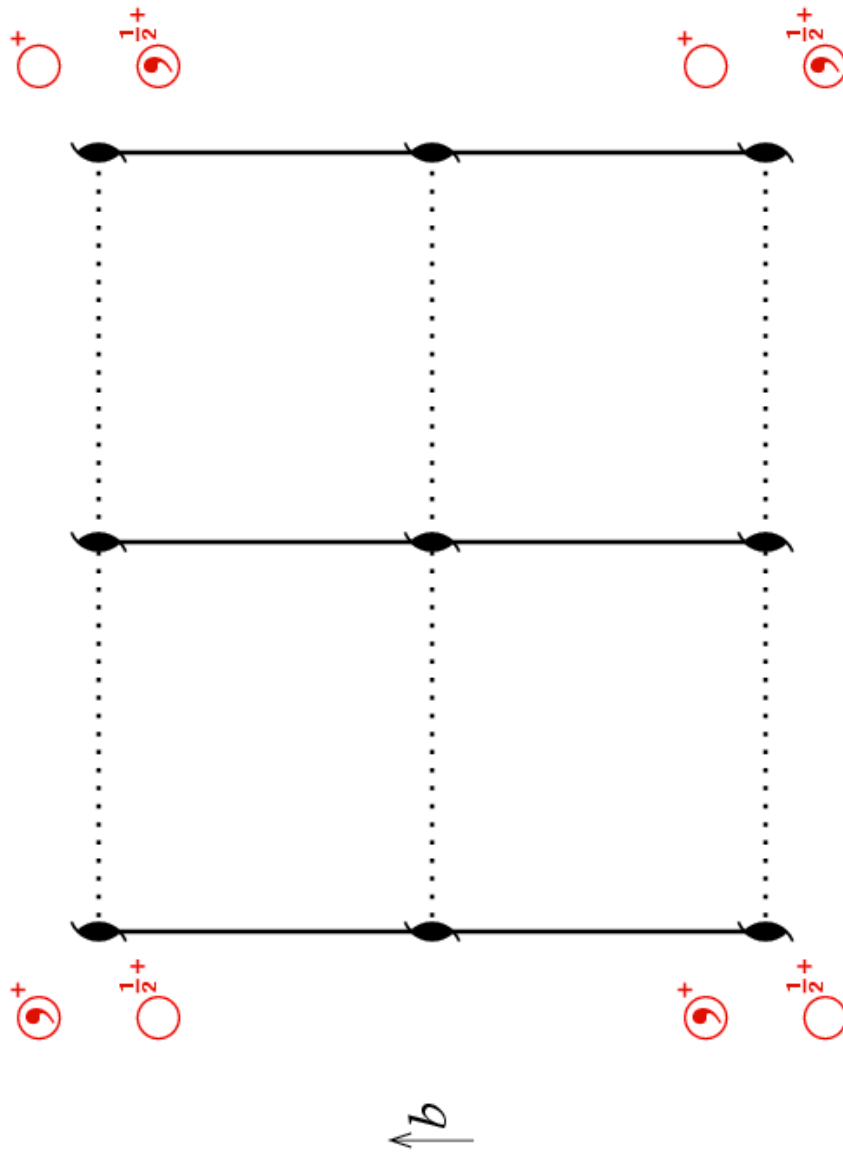


No. 26

$mm2$

$Pmc2_1$

$Pmc2_1$



- 1 x, y, z
- 2 \bar{x}, y, z
- 3 $x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$
- 4 $\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2} + z$



IV)

