

Simetría, cristales y difracción

I. ACTIVIDAD RESUMEN

Nombre:

Nombre:

A. Estructura cristalina de Haeckelitas

Un alótropo de carbono propuesto por investigadores del IFUNAM (Phys. Rev. Lett. 84, 1716) consiste en pentágonos, hexágonos y heptágonos como se muestra a continuación.

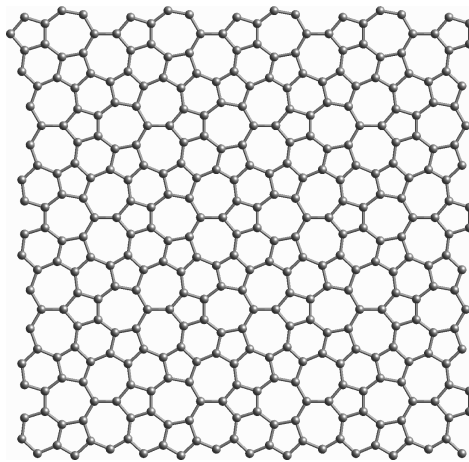


Figure 1: Estructura de la haeckelita 567

1. Define una celda unitaria primitiva
2. Identifica la base atómica
3. Identifica su grupo puntual

B. Zona de Brillouin

La celda primitiva de una red cúbica centrada en el cuerpo (BCC) está dada por los vectores a los sitios en el centro de los cubos colindantes:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-1, 1, 1)$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, -1, 1)$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, -1)$$

1. Muestra que la red recíproca de una red BCC es una red cúbica centrada en las caras (FCC)
2. Muestra que la red recíproca de la red FCC es una red BCC
3. Muestra que la zona de Brillouin de la red BCC es igual a la celda Wigner-Seitz de la red (en espacio real) FCC

C. Grupo espacial y propiedades físicas

El diamante y el grafito son dos alótropos de carbono, que sin embargo tienen estructuras muy distintas que dan pie a propiedades físicas también muy distintas.

1. Verifica que el grupo puntual del diamante es O_h , mientras que el del grafito es D_{6h}
2. El grupo espacial del diamante es $Fd\bar{3}m$ y el del grafito es $P6/mmm$. Utilizando la información en <http://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/tensor.pl>, compara el tensor de elasticidad (C_{ijkl} que relaciona $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl}$) y de conductividad eléctrica ($J_i = \sigma_{ij}E_j$) para las dos estructuras.

D. Espectro de difracción de rayos-x del sulfuro de cinc

El sulfuro de cinc (ZnS) se cristaliza en dos estructuras que compiten en energía, por lo que en la mayoría de las muestras, uno encuentra una combinación de ambas. La primera estructura es la de la wurtzita (ver pregunta anterior). La segunda es la de la cínclenda que consiste en dos subredes de tipo cúbica centrada en las caras desplazadas $(1/4, 1/4, 1/4)$ (similar a la estructura del diamante), cada una con una sola especie: Zn o S. Por lo tanto, la base de la estructura convencional consiste en ocho átomos: 4 tipo Zn $((0, 0, 0), (0, 1/2, 1/2), (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0))$ y 4 tipo S $((1/4, 1/4, 1/4), (1/4, 3/4, 3/4), (3/4, 1/4, 3/4), (3/4, 3/4, 1/4))$.

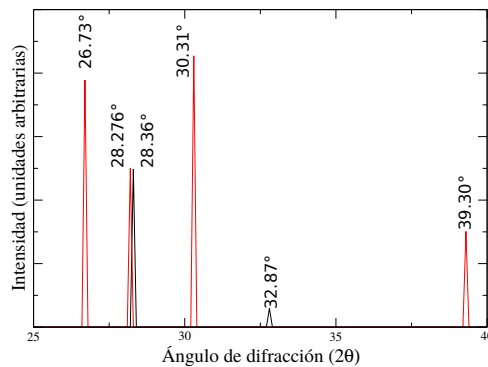


Figure 2: Espectro de difracción de ZnS en sus dos fases cristalinas

1. Encuentra los primeros 2 planos de difracción permitidos a partir del factor de estructura para la wurtzita
2. Encuentra los primeros 2 planos de difracción permitidos a partir del factor de estructura para la cínclenda
3. Considera el espectro de difracción en la figura 2 obtenido con una longitud de onda de 1.54 \AA . Dado que el parámetro de red para la fase cúbica es de $a^c = 5.41$ y los de la wurtzita son $a_1^w = a_2^w = 3.85$, $a_3^w = 6.31$, identifica qué señales corresponden a cada una de las estructuras.

E. Método para el cálculo del patrón de difracción

Implementa un método en la clase `crystal` que calcule el espectro de difracción de Rayos-X, utilizando el factor de estructura y la aproximación de la densidad atómica puntual. Considera índices menores o igual a 6. Para cada línea de difracción permitida, añade una función Lorentziana con un ancho de 0.5 grados. Considera una fuente de rayos-X de cobre ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$)