Determinación Estructural - Curso 2002/2003 - Serie 1ª

1- Demuestra que una rotación de ángulo α en sentido contrario a las agujas del reloj alrededor del eje z se puede expresar mediante la matriz:

$$R_\alpha(z) = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -sen\,\alpha & 0 \\ sen\,\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

2- a) Demuestra que la existencia de dos ejes de rotación de orden 4 perpendiculares, implica la existencia de cuatro ejes ternarios y precisar la orientación de los mismos. b) Demuestra que lo recíproco no es cierto. c) Demuestra que la existencia de dos planos de simetría perpendiculares, implica la existencia de un eje de rotación binario.

3- Halla las transformaciones en el sistema monoclínico que convierten: a) una celdilla centrada en A en otra centrada en C; b) una celdilla centrada en I en otra centrada en C; c) una celdilla centrada en todas las caras (F) en otra centrada en C; d) una celdilla centrada en B en otra primitiva; e) ¿Por qué una celdilla no puede estar centrada exclusivamente en las caras A y C?

4- Halla las posiciones equivalentes de simetría del grupo $P2_1/c$.

5- Considera el grupo espacial del sistema monoclínico con las siguientes posiciones equivalentes de simetría:

$$(x,y,z) \quad (x,-y,z+½) \quad (x+½,y+½,z) \quad (x+½,-y+½,z+½)$$

Encuentra el tipo de red y todos los elementos de simetría de este grupo. Caracterízalo por un símbolo. ¿Cuales son las posiciones especiales de este grupo espacial?

6- Utiliza la relación $V = \mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})$ para encontrar las expresiones que proporcionan el volumen de las celdillas triclínica, monoclínica y rómbica en términos de los parámetros de la celdilla unidad, a, b, c , α, β, γ.

7- La red recíproca se puede definir formalmente mediante las siguientes relaciones:

$$\mathbf{a}^* = \frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})};\quad \mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})};\quad \mathbf{c}^* = \frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}$$

Demuestra que se verifican las siguientes relaciones entre vectores del espacio real y el recíproco: $\mathbf{a}\cdot\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\cdot\mathbf{b}^* = \mathbf{c}\cdot\mathbf{c}^* = 1$ y $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}^* = \mathbf{a}\cdot\mathbf{c}^* = \mathbf{b}\cdot\mathbf{a}^* = \mathbf{b}\cdot\mathbf{c}^* = \mathbf{c}\cdot\mathbf{a}^* = \mathbf{c}\cdot\mathbf{b}^* = 0$. Calcula el volumen de la celdilla unidad de una red recíproca, expresándolo en términos de V. Pista: Utiliza la fórmula del análisis vectorial: $\mathbf{p}\times(\mathbf{q}\times\mathbf{r}) = \mathbf{q}\cdot(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})\text{-}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}$

8- Encuentra los índices de Miller que corresponden a los planos cuyas intersecciones con los ejes cristalográficos tienen lugar en (2a,3b, 2c) y (2a, -b, ∞).

9- Demuestra que la distancia entre dos planos contiguos de índices de Miller (h k l), en una red rómbica, viene dada por la siguiente expresión: $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2$. Demuestra la siguiente relación entre la distancia entre planos de índices de Miller (nh nk nl) y los, planos de índices de Miller (h k l): $d_{nhnknl} = \frac{d_{hkl}}{n}$. Para una red rómbica con a = 2.0 Å, b = 3.0 Å y c = 4.0 Å, obtener la separación entre los planos (123) y entre los planos (246).

10- Identifica los tipos de red, los sistemas cristalinos y los elementos de simetría característicos de los siguientes grupos espaciales: $P\bar{1}$, $C2/m$, $R\bar{3}$, $Fm\bar{3}m$, $P2_12_12_1$ y $Pnma$