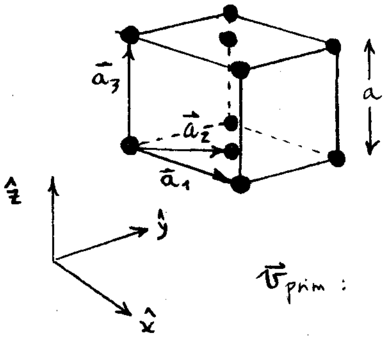
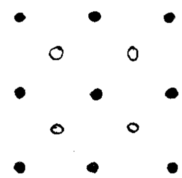
GUÍA 1: Redes cristalinas y espacio recíproco

1.

(a) cúbica centrada en la base



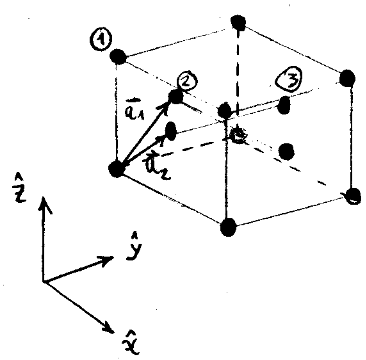


Puede verse como $\sum$ planos con dos redes SC 2D desplazadas

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{es red de Bravais}}$

$\vec{v}_{prim}$: $\boxed{\begin{aligned} \vec{a}_1 &= a\,\hat{x} \\ \vec{a}_2 &= a/2\,(\hat{x}+\hat{y}) \\ \vec{a}_3 &= a\,\hat{z} \end{aligned}}$

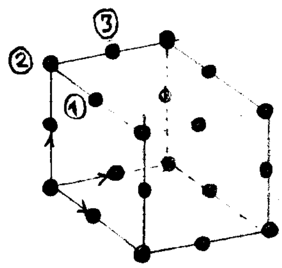
(b) cúbica centrada en los lados



Desde el punto ② tengo un vecino ③ que no veo parado en el punto ① $\rightarrow$ $\boxed{\text{No es red de Bravais}}$

SC + base $\begin{cases} \vec{0} \\ \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{y}) \;,\; \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z}) \end{cases}$

(c) cúbica centrada en las aristas

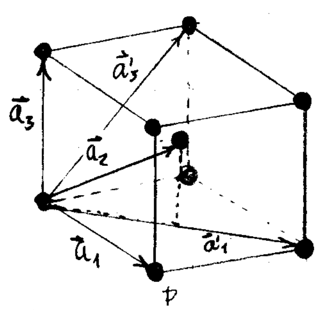


Desde ② tengo un vecino ③ que no veo parado desde ① $\rightarrow$ $\boxed{\text{No es red de Bravais}}$

SC + base $\begin{cases} \vec{0} \\ a/2\,\hat{x} \;,\; a/2\,\hat{y} \;,\; a/2\,\hat{z} \end{cases}$

2.

BCC body centered cube



$\vec{v}_{prim.}$

$\vec{a}_1 = a\hat{x}$

$\vec{a}_2 = a/2(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$

$\vec{a}_3 = a\hat{z}$

$V = |a_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)|$

$V = |a\hat{x}\cdot(\frac{a^2}{2}[-\hat{y}+\hat{x}])|$

$\boxed{V = \frac{a^3}{2}}$

$\vec{v}_{prim.}$

$\vec{a}_1' = a\,(\hat{x}+\hat{y})$

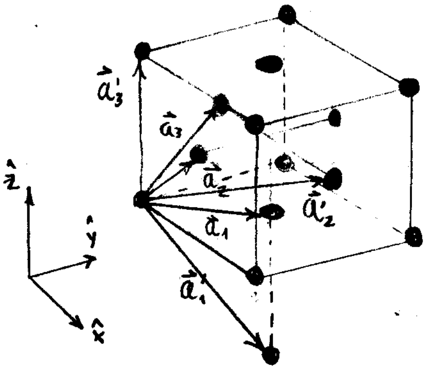
$\vec{a}_2' = \vec{a}_2 = a/2\,(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$

$\vec{a}_3' = a\,(\hat{z}+\hat{y})$

$V = |a(\hat{x}+\hat{y})\cdot(\frac{a^2}{2}(-\hat{y}+\hat{x}+\hat{z}-\hat{x})$

$\boxed{V = \frac{a^3}{2}}$

Face Centered Cube



$v_{prim.}$

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})$$
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})$$
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})$$

$v_{prim.}$

$$\vec{a}_1' = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) - a\hat{z}$$
$$\vec{a}_2' = a\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{a}{2}\hat{z}$$
$$\vec{a}_3' = a\hat{z}$$

$$V = \left| \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) \cdot \left[\frac{a^2}{4}(\hat{x}+\hat{z}) \times (\hat{y}+\hat{z})\right]\right.$$
$$V = \frac{a^3}{8}\left| (\hat{x}+\hat{y}) \cdot (\hat{z} + -\hat{x} - \hat{y}) \right| = \frac{a^3}{4}$$

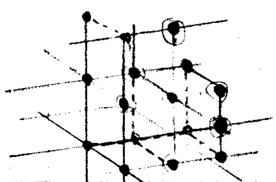
$\hat{x}\hat{y}\hat{z}\hat{x}\hat{y}$

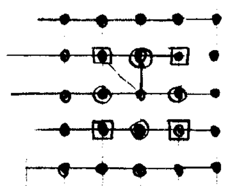
$$\boxed{V = \frac{a^3}{4}}$$

$$V = \left| \left(\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) - a\hat{z}\right) \cdot \left(-\hat{y}a^2 + \frac{a^2}{2}\hat{x}\right) \right|$$
$$V = \left| -\frac{a^3}{2} + \frac{a^3}{4} \right| = \frac{a^3}{4} \rightarrow \boxed{V = \frac{a^3}{4}}$$

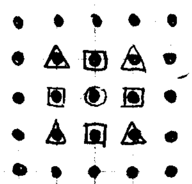
3.

* SC





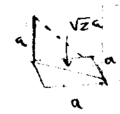
plano "central"



plano "superior" o "inferior"

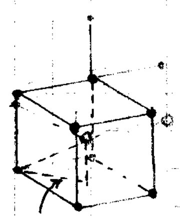
1er vecino $\odot$
2do vecino $\boxdot$
3er vecino $\triangle$

	#	d.
1eros Vecinos	6	a
2dos Vecinos	12	$\sqrt{2}\,a$
3eros Vecinos	8	$\sqrt{3}\,a$

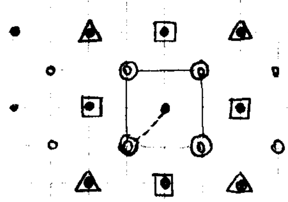


$2a^2 + a^2 = 3a^2$

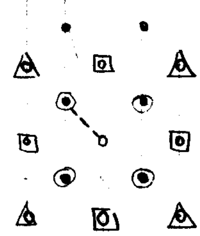
* BCC



$\frac{a^2}{2} + \frac{a^2}{4} = \frac{3}{4}a^2 \rightarrow$



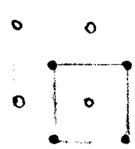
$\odot\hat{z} \longrightarrow \hat{x}$



$\hat{z}$

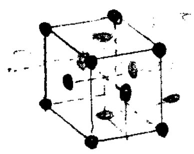
$\odot\hat{x}$

	#	d.
1eros vec.	8	$\sqrt{3}/2\,a$
2dos vec.	6	a
3eros vec.	12	$\sqrt{2}\,a$



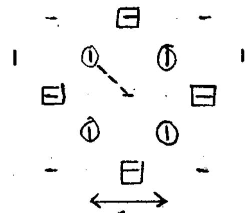
* FCC

⊙ 1º vecino
⊡ 2º vecino
△ 3º vecino

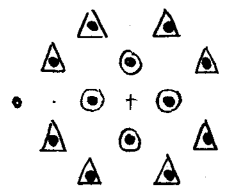


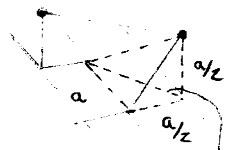
	#	d.
1eros vec.	12	$a/\sqrt{2}$
2dos vec.	4	a
3eros vec.	16	$\sqrt{\frac{3}{2}}\,a$

plano central



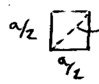
planos inferior y superior



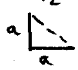


$a^2+\frac{a^2}{4}=\frac{5}{4}a^2 \to \frac{a\sqrt{5}}{2}$

$\frac{a^2 5}{4}+\frac{a^2}{4}=\frac{3a^2}{2} \to \frac{a\sqrt{3}}{\sqrt{2}}$



$\frac{a^2}{4}+\frac{a^2}{4}=\frac{a^2}{2} \to \frac{a}{\sqrt{2}}$



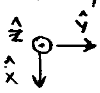
$\sqrt{2}\,a$

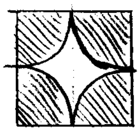
4.

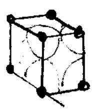
fracción de empaquetamiento $\equiv \frac{\text{volumen ocupado x átomo}}{\text{volumen total}}$

* SC

$r=a/2$





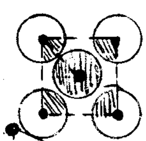


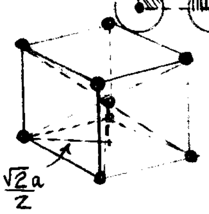
Dada la simetría en cada cubo de volumen a^3 entran ocho octavos de esfera →

$\left(\frac{8}{8}\right)\frac{4}{3}r^3\pi = \frac{4}{3}r^3\pi$; pero $r=a/2$ →

$\frac{\cancel{4}^{1}}{3}\frac{a^3}{\cancel{8}_{2}}\pi$ > $f=\frac{1/6\,\cancel{a^3}\pi}{\cancel{a^3}}=\boxed{\frac{\pi}{6}}$

* BCC





$\frac{\sqrt{3}\,a}{2}=2r$

$\frac{\sqrt{3}}{4}a=r$

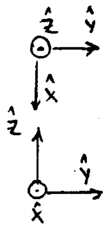
$\frac{\cancel{2}a^2}{\cancel{4}_{2}}+\frac{a^2}{4}=\frac{3}{4}a^2 \to \frac{\sqrt{3}}{2}a=d$

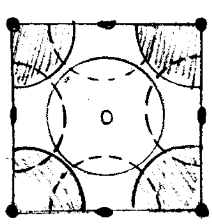
En cada cubo de volumen a^3 entran ocho octavos de esfera más una central con radio r →

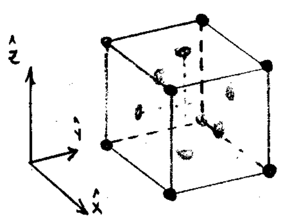
$\frac{4}{3}r^3\pi + \frac{4}{3}r^3\pi = \frac{\cancel{8}^{1}}{3}\pi a^3 \frac{\sqrt{3}^3}{4.\cancel{16}_{2}} = \frac{\pi a^3\sqrt{3}}{8}$

$$\boxed{f=\frac{\pi\sqrt{3}}{8}}$$

* FCC







$r=\frac{\sqrt{2}\,a}{4}$

$V_{esfera}=\frac{\cancel{4}^{1}}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{2}^3a^3}{\cancel{4}.16}\right)=\frac{\pi\sqrt{2}^3a^3}{16.3}$

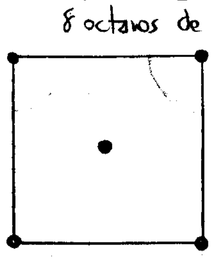
$=\frac{\pi\sqrt{2}\,a^3}{8.3}$

$6\left(\frac{1}{2}V_e\right)+8\left(\frac{1}{8}V_e\right)=\frac{\cancel{4}^{1}}{\cancel{8}_{2}}\frac{\pi}{.3}\sqrt{2}\,a^3=\frac{\pi\sqrt{2}\,a^3}{6}$

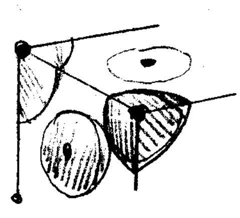
6 medias esferas
8 octavos de esfera

$$\boxed{f=\frac{\sqrt{2}\pi}{6}}$$

plano ZY

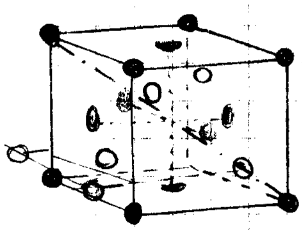


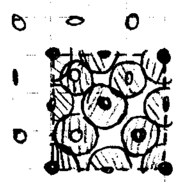
plano ZX



* DIAMANTE (No es red de Bravais)

2 Fcc interpenetradas





$\text{diag} = \sqrt{3}\,a \rightarrow 2r = \frac{\sqrt{3}\,a}{4}$

$r = \frac{\sqrt{3}\,a}{8}$

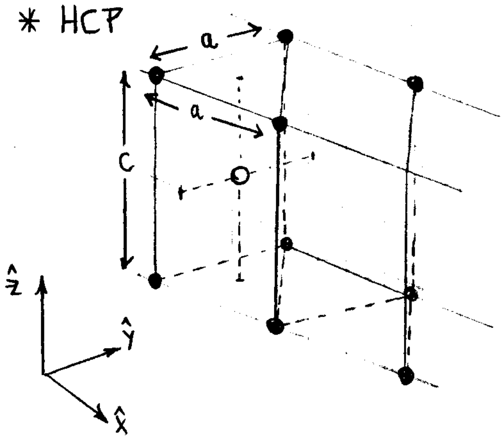
8 octavos de esfera
6 medias esferas
4 esferas completas

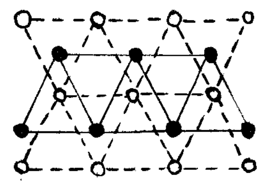
$8\,V_e = \cancel{8}^{1}\,\frac{4}{3}\,\frac{\sqrt{3}^3 a^3}{\cancel{8}_{1} \cdot 8^2}\pi = \frac{\sqrt{3}\,a^3\pi}{16}$

$\boxed{f = \frac{\pi\sqrt{3}}{16}}$

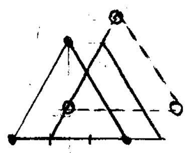
5.

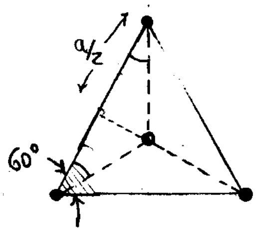
* HCP





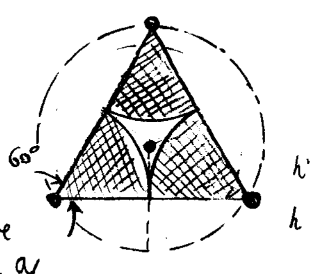
2 redes triangulares desplazadas en 1/3 en $\hat{x}$, $\hat{y}$ y 1/2 en $\hat{z}$

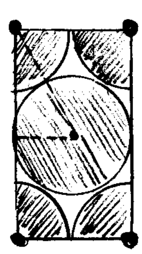




Un tubo  tendrá un $V = c \cdot \frac{a}{2} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} a = \frac{c a^2 \sqrt{3}}{4}$

* HCP ideal





$6\left(\frac{1}{6}\right)\frac{1}{2}$ esfera de $r = a/2$

1 esfera − 3(calotas)

$3 \cdot \left(\frac{1}{3}\pi h^2 \left(3\frac{a}{2} - h\right)\right)$

h' es la dist. ⊥ a los lados → $h' + h = a/2$

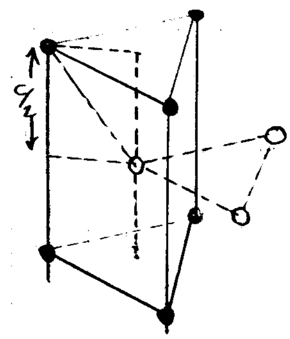
$\rightarrow h = \frac{a}{2} - \frac{a}{2\sqrt{3}} = \frac{a}{2}\left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$

$$\frac{1}{2}\cdot\frac{4}{3}\pi\frac{a^3}{8} + \frac{4}{3}\pi\frac{a^3}{8} - \pi\frac{a^2}{4}\left(1-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2\left(a+\frac{a}{2\sqrt{3}}\right)$$

$$\frac{\pi a^3}{12} + \frac{\pi a^3}{6} - \pi\frac{a^3}{4}\left(1+\frac{1}{3}-\frac{2}{\sqrt{3}}\right)\left(1+\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)$$

$$\left(\frac{4}{3}-\frac{2}{\sqrt{3}}\right)\left(1+\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)$$

$$\frac{4}{3}+\frac{2}{3\sqrt{3}}-\frac{2}{\sqrt{3}}-\frac{1}{3}$$



$$V_e = \frac{\pi a^3}{4} - \frac{\pi a^3}{4}\left(1-\frac{4}{3\sqrt{3}}\right)$$

$$V_e = \frac{\pi a^3 4}{12\sqrt{3}} = \frac{\pi a^3}{3\sqrt{3}}$$

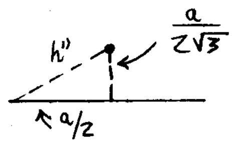
$$f = \frac{\pi a^3}{3\sqrt{3}}\,\frac{4}{c\,a^2\sqrt{3}} = \boxed{\frac{\pi a\, 4}{9c}}$$

$$f_{ideal} = \frac{4}{9}\pi\cdot\sqrt{\frac{3}{8}} \cong 0{,}855$$

diamante $\approx 0{,}34$
fcc $\approx 0{,}74$
bcc $\approx 0{,}68$
sc $\approx 0{,}52$

tiene el mayor volumen ocupado

HCP ideal



$$h''^2 = \frac{a^2}{4}+\frac{a^2}{4\cdot 3} = \frac{a^2}{3}$$

$$\left(\frac{c}{2}\right)^2 + \frac{a^2}{3} = a^2$$

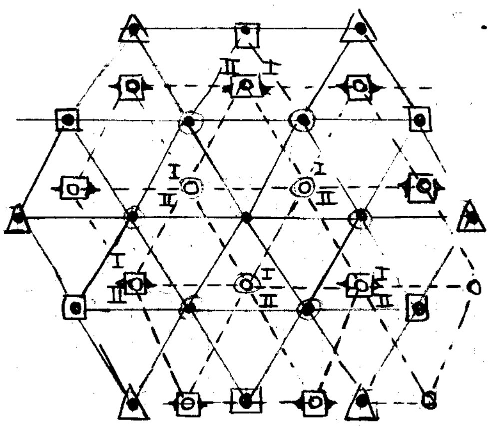
$$\frac{c^2}{4} = \frac{2a^2}{3}$$

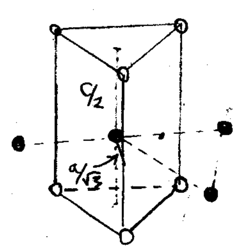
$$\left(\frac{c}{a}\right)^2 = \frac{8}{3} \Rightarrow \boxed{\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}}$$

	#	d	
1eros vecinos	12	a	○
2dos vecinos	18	$\sqrt{2}\,a$	⊡
3eros vecinos	6	$\sqrt{3}\,a$	□

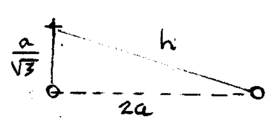
La HCP no es una red de Bravais.

. Consideremos punto central un átomo "●"; siendo I layer inferior y II layer superior de átomos "o"



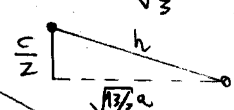


* distancia de un vecino 3ero △



$$4a^2 + \frac{a^2}{3} = h^2$$

$$\sqrt{\frac{13}{3}}\,a = h$$

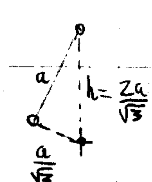


$$\rightarrow h = \sqrt{\frac{c^2}{4}+\frac{13a^2}{3}}$$

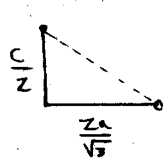
$$h = \sqrt{\frac{8a^2}{12}+\frac{13a^2}{3}}$$

$$h = \sqrt{5}\,a$$

* distancia de un vecino 2do ⊡



$\oplus$



$$h = \sqrt{a^2+\frac{a^2}{3}} = \frac{2a}{\sqrt{3}}$$

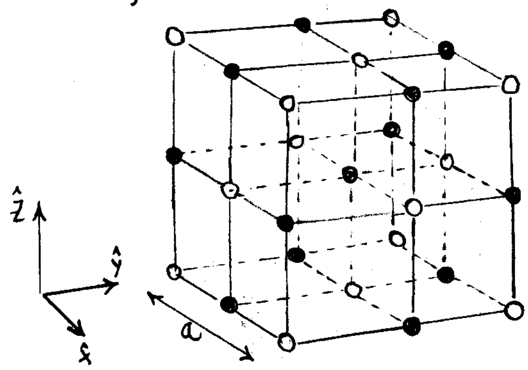
$$\frac{c^2}{4} + \frac{4a^2}{3} = h^2$$

$$\frac{8}{3\cdot 4}a^2 + \frac{4a^2}{3} = a^2 2 = h^2 \rightarrow h = \sqrt{2}\,a$$

6.

* **NaCL** : iones de sodio y cloro situados en puntos alternados de una red SC

(Cloruro de sodio)



(o CL) en FCC + base (• Na)

con parámetro a

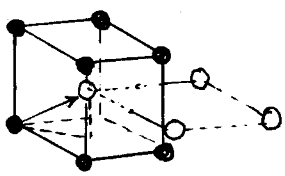
$$\begin{cases} \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \\ \vec{0} \quad (CL) \end{cases}$$

NOTA

Todos los otros (• Na) los puedo describir como CL de la (o CL) Fcc + $\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$

* **CsCL** : iones de Cesio y cloro situados en los puntos de una BCC de manera que cada ion tiene 8 vecinos del otro tipo

(cloruro de cesio)



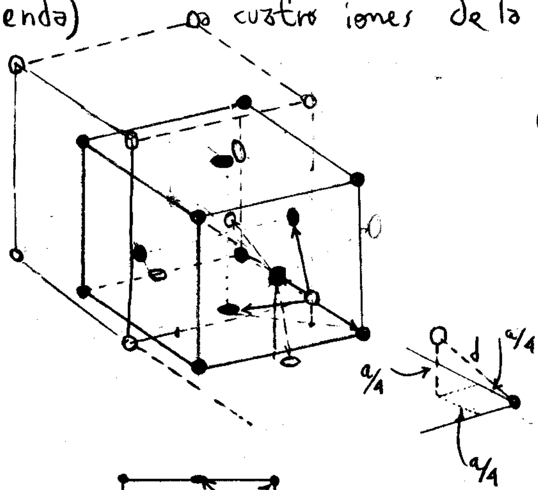
(• Cs) en SC + base (o CL)

con parámetro a

$$\begin{cases} \vec{0} \\ \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \end{cases}$$

* **ZnS** : iones de zinc y de azufre situados en los puntos de una red tipo diamante de modo que cada ión tiene como vecinos cuatro iones de la otra especie

(Zinc Blenda)

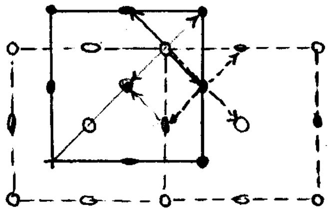


(• Zn) en FCC + base (o S)

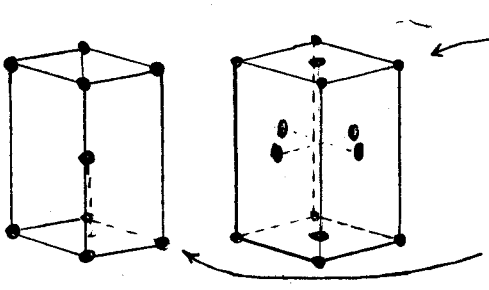
con parámetro a

$$\begin{cases} \vec{0} \\ \frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \end{cases}$$

$d = \frac{a\sqrt{3}}{4}$

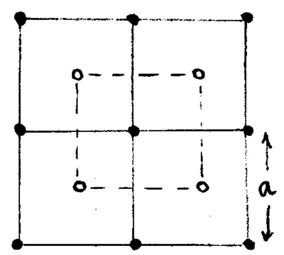


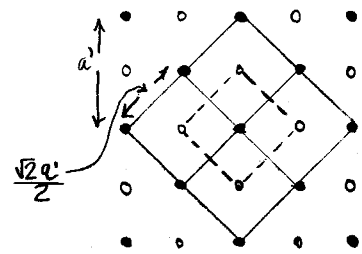
7.



* **FCT** : Faced-Centered Tetragonal

* **BCT**. Body-Centered Tetragonal





BCT: una estructura (•) en un plano y otra (o) desplazada en $c/2$; con parámetros a

FCT: torciendo los ejes en $\pi/4$ tengo la misma estructura BCT con parámetro $\frac{\sqrt{2}a'}{2}$

$\Rightarrow$ BCT & FCT son equivalentes si $a = \frac{\sqrt{2}a'}{2} = \frac{a'}{\sqrt{2}}$

donde $\begin{cases} a \\ c \end{cases}$ parámetros de la BCT y $\begin{cases} a' = \sqrt{2}a \\ c \end{cases}$ parámetros de la FCT

En el caso de BCC $c = a$ $\Rightarrow$ el plano de (o) se halla en $a/2$

Para la FCC será $c = a'$ $\Rightarrow$ el plano de (o) se halla en $a'/2$ $\Rightarrow$ si busco que FCC sea equivalente a BCC necesito $a' = \sqrt{2}a$ pero

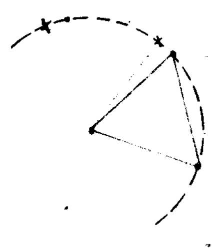
dist. plano (o) FCC $\frac{a'}{2} = \frac{a}{\sqrt{2}} \neq \frac{a}{2}$ dist. plano (o) BCC

Por ello no son equivalentes

8.

Ejes de orden 5 $\rightarrow$ rotación en $\frac{2\pi}{5}$ no nos deja la misma red

Supongamos que hay simetría para una rotación en $2\pi/5$



9. * La red recíproca (RR) está formada por aquellos $\vec{k}$ para los cuales

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$$

, donde $\vec{R}$ es el vector de posición de un punto de la red de Bravais directa (RD).
Entonces:

$$\vec{k}\cdot\vec{R} = 2\pi n \qquad n \in \mathbb{Z}$$

La red recíproca (RR)' de la RR anterior serán aquellos $\vec{k}'$ tales que

$$e^{i\vec{k}'\cdot\vec{k}} = 1$$

luego

$$e^{i\vec{k}'\cdot\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Rightarrow \boxed{\vec{k}' = \vec{R}}$$

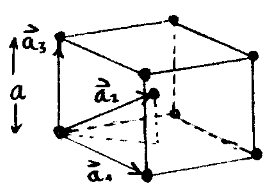
La (RR) de la (RR) es la (RD)

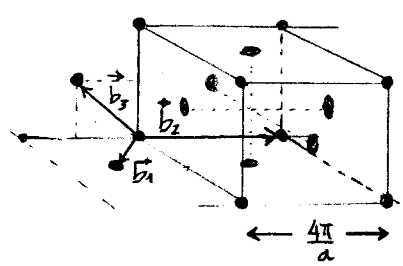
* Para la BCC es:

$$\vec{a}_1 = a\hat{x}$$
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{a}_3 = a\hat{z}$$

$$V = \vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)$$
$$V = a\hat{x}\cdot\left[\frac{a^2}{2}(-\hat{y}+\hat{x})\right] = \frac{a^3}{2}$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3/2}\,a^2/2\,(-\hat{y}+\hat{x}) = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y})$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a^3/2}\,a^2\hat{y} = \frac{4\pi}{a}\hat{y}$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a^3/2}\,a^2/2\,(\hat{z}-\hat{y}) = \frac{2\pi}{a}(\hat{z}-\hat{y})$$





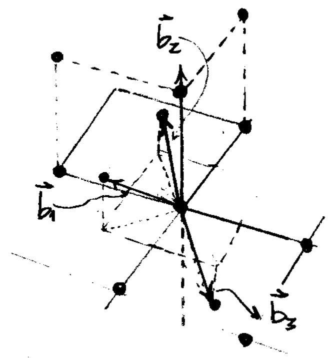
La RR de una BCC es una FCC de lado $\frac{4\pi}{a}$ (donde a es el parámetro de la BCC)

* Para la FCC es

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})$$
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})$$
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})$$

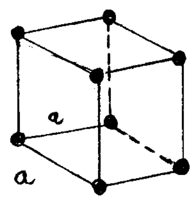
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3/4}\cdot\frac{a^2}{4}(\hat{z}-\hat{y}-\hat{x}) = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a^3/4}\cdot\frac{a^2}{4}(-\hat{z}+\hat{y}-\hat{x}) = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a^3/4}\,\frac{a^2}{4}(-\hat{z}+\hat{x}-\hat{y}) = \frac{2\pi}{a}(+\hat{x}-\hat{y}-\hat{z})$$

$$V = \left|\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})\cdot\left[\frac{a^2}{4}(\hat{z}-\hat{y}-\hat{x})\right]\right|$$
$$V = \left|-\frac{a^3}{8}-\frac{a^3}{8}\right| = \frac{a^3}{4}$$



La RR de una FCC de parámetro a es una BCC de parámetro $\left(\frac{4\pi}{a}\right)$

* En el caso de una SC se tiene.

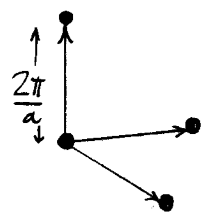


$$\vec{a}_1 = a\hat{x}$$
$$\vec{a}_2 = a\hat{y}$$
$$\vec{a}_3 = a\hat{z}$$
$$V = a^3$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3}\,a^2\,\hat{x} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a^3}\,a^2\,\hat{y} = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a^3}\,a^2\,\hat{z} = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

La RR de una SC de parámetro a es otra SC de parámetro $\frac{2\pi}{a}$

La SC es autorecíproca.



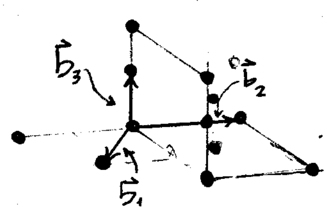
* En el caso de una red C centrada en la base

$$a_1 = a\hat{x}$$
$$a_2 = a/2\,(\hat{x}+\hat{y})$$
$$a_3 = a\hat{z}$$

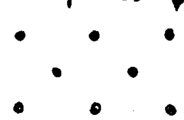
$$V = (a\hat{x})\cdot\left(\frac{a^2}{2}[-\hat{y}+\hat{x}]\right) = \frac{a^3}{2}$$

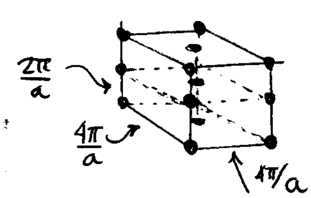
$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3/2}\,\frac{a^2}{2}(\hat{x}-\hat{y}) = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y})$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a^3/2}\,a^2\hat{y} = \frac{4\pi}{a}\hat{y}$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a^3/2}\,\frac{a^2}{2}(\hat{z}) = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

La RR de una red Cúbica centrada en la base es una red oblonga centrada también en la base

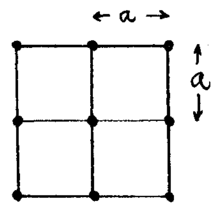


Sucesión de estos planos



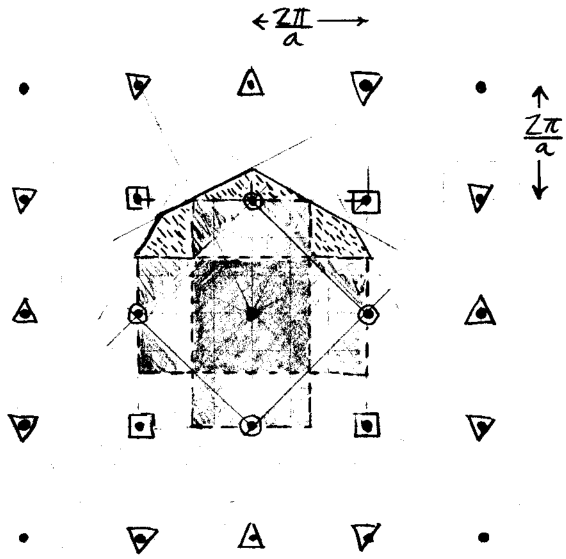


10.



$$\vec{a}_1 = a\hat{x}$$
$$\vec{a}_2 = a\hat{y}$$
$$V = a^2$$

$$b_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} \quad , \quad b_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$



⊙ 1er vecino
⊡ 2do vecino
△ 3er vecino
▽ 4to vecino

Es necesario tener en cuenta también el # de vecinos que

$$V_{1er\ ZONA\ B.} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 = \frac{4\pi^2}{a^2}$$

$$V_{2da\ ZONA\ B.} = \left(\sqrt{2}\,\frac{2\pi}{a}\right)^2 - \frac{4\pi^2}{a^2} = \frac{4\pi^2}{a^2}$$

$$V_{3er\ ZONA\ B.} = 8\left(\frac{\pi^2}{2a^2}\right) = \frac{4\pi^2}{a^2}$$

Los volúmenes se mantienen a cada "orden" de la zona de Brillouin tomada

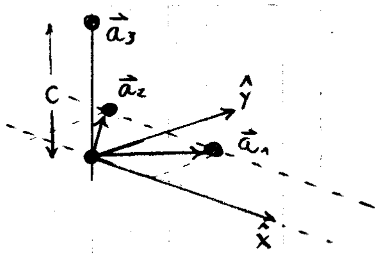
11.

$$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} + \frac{1}{2}a\hat{y}$$
$$\vec{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} + \frac{1}{2}a\hat{y}$$
$$\vec{a}_3 = c\hat{z}$$

$$V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$$

$$V = \left|\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}\right)\cdot\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ac\,\hat{y} + \frac{ac}{2}\hat{x}\right)\right|$$

$$V = \frac{a^2c\sqrt{3}}{4} + \frac{a^2\sqrt{3}c}{4} = \frac{\sqrt{3}\,a^2c}{2}$$



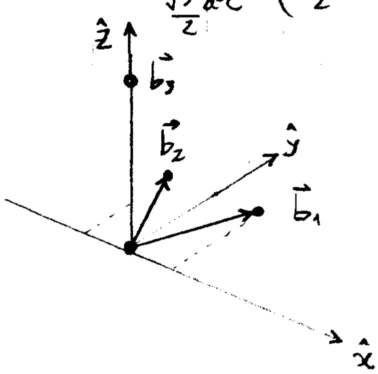
a) $$\boxed{V_{c\,prim} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c}$$

b)

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\frac{\sqrt{3}a^2c}{2}}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ac\,\hat{y} + \frac{ac}{2}\hat{x}\right) = \frac{2\pi}{\frac{\sqrt{3}}{2}a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} + \frac{1}{2}\hat{x}\right)$$

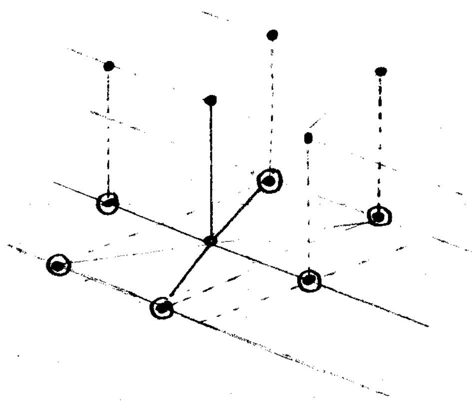
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ac\,\hat{y} - \frac{ac}{2}\hat{x}\right) = \frac{2\pi}{\frac{\sqrt{3}}{2}a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} - \frac{1}{2}\hat{x}\right)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a^2\,\hat{z} + \frac{\sqrt{3}}{2}a^2\,\hat{z}\right) = \frac{2\pi\,\cancel{\sqrt{3}/2\,a^2}}{\cancel{\sqrt{3}/2\,a^2}\,c}\,\hat{z} = \frac{2\pi}{c}\hat{z}$$

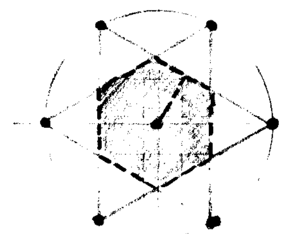


Un SH (simple hexagonal) tiene como RR otra SH.

c)



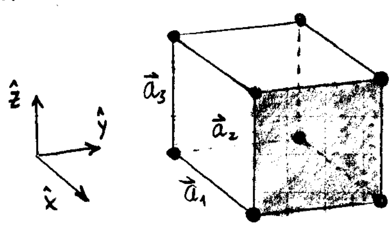
Sea $c>a$ $\Rightarrow$ los $1^{\underline{eros}}$ vecinos están en un plano



La $1^{\underline{er}}$ zona de Brillouin resulta ser un hexágono de apotema $a/2$ (es 2D)

12.

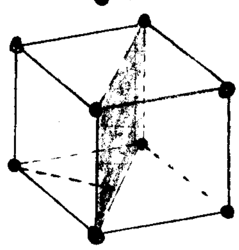
* Para la SC



(100) significa que $\vec{K} = 1.\vec{b}_1 + 0.\vec{b}_2 + 0.\vec{b}_3$

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

distancia entre planos es a

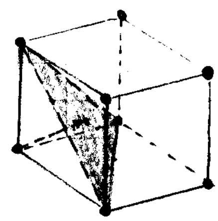


(110)

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$

$$|\vec{K}| = \sqrt{\frac{4\pi^2}{a^2}2} = \frac{2\sqrt{2}\pi}{a}$$

distancia entre planos $\frac{a}{\sqrt{2}}$

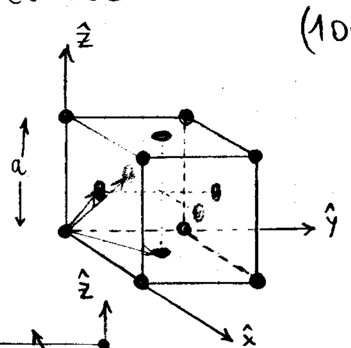


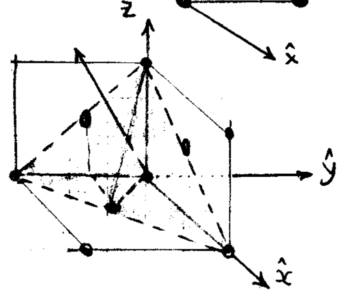
(111)

$$|\vec{K}| = \sqrt{\frac{4\pi^2 3}{a^2}} = \sqrt{3}\,\frac{2\pi}{a}$$

distancia entre planos es $\frac{a}{\sqrt{3}}$

* Para la red FCC





(100) Sean

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})$$

$$V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$$

$$V = \left|\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z}) \cdot \left(\frac{a^2}{4}(\hat{z}-\hat{y}+\hat{x})\right)\right|$$

$$V = \left|\frac{a^3}{8} + \frac{a^3}{8}\right| = \frac{a^3}{4}$$

$$\vec{K} = 1\vec{b}_1$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3/4}\frac{a^2}{2^2}(\hat{z}-\hat{y}+\hat{x})$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})$$

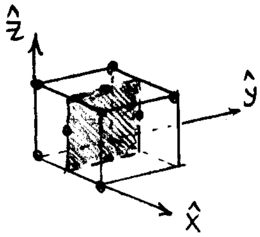
$$|\vec{b}_1| = \sqrt{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 3}$$

$$b_1 = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a}$$

$$b_1 = \frac{2\pi}{\frac{a}{\sqrt{3}}}$$

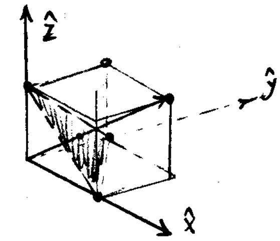
$$d = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

(110) $\vec{K} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \cancel{\hat{z}}) + \frac{2\pi}{a}(-\cancel{\hat{z}} + \hat{x} + \cancel{\hat{y}}) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)2\hat{x}$



$|\vec{K}| = \frac{2\pi}{a/2} \rightarrow d = a/2$

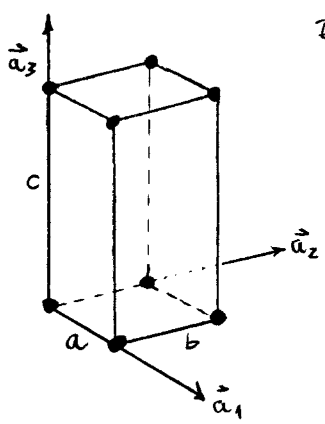
(111) $\vec{K} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} 2\hat{x} + \frac{2\pi}{a}(\hat{z} + \hat{y} - \hat{x}) = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$



$|\vec{K}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3} \rightarrow d = \frac{a}{\sqrt{3}}$

* Para la Red BCC

13.



Estructura ortorrómbica

familia $\{112\}$

Con la estructura cúbica calculo los $\vec{K} \in RR$ sabiendo que las coordenadas de $\vec{K}$ son (112)

$a = 2$ Å

$b = 3$ Å

$c = 4$ Å

Red Recíproca

$\vec{a}_1 = a\hat{x}$ $\qquad \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a\cancel{bc}}\cancel{bc}(\hat{x}) = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$

$\vec{a}_2 = b\hat{y}$ $\qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\cancel{a}b\cancel{c}}\cancel{ca}(\hat{y}) = \frac{2\pi}{b}\hat{y}$

$\vec{a}_3 = c\hat{z}$ $\qquad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\cancel{ab}c}\cancel{ab}(\hat{z}) = \frac{2\pi}{c}\hat{z}$

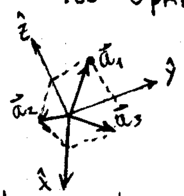
$V = abc$

$\vec{K}_{\{112\}} = \frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{b}\hat{y} + \frac{4\pi}{c}\hat{z} = \pi\hat{x} + \pi\frac{2}{3}\hat{y} + \pi\hat{z} \rightarrow |\vec{K}| = \sqrt{\pi^2 + \frac{4}{9}\pi^2 + \pi^2} = \sqrt{\frac{22}{9}\pi^2}$

$\boxed{d = \frac{6}{\sqrt{22}}} \Leftarrow |\vec{K}| = \frac{\sqrt{22}}{3}\pi = 2\pi\frac{\sqrt{22}}{6}$

14.

(100), (001) respecto de los $\vec{v}_{prim}$ →



$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) \end{cases}$$

$$V = \frac{a^3}{4}$$

Nuevo set de $v_{prim.}$

$$\begin{cases} \vec{a}_1' = a\hat{x} \\ \vec{a}_2' = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) \\ \vec{a}_3' = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}) \end{cases} \qquad V = \frac{a^3}{4}$$

* Para el (100)

$$\rightarrow \vec{K} = 1\vec{b}_1 = \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V}\frac{a^2}{4}(+\hat{y}-\hat{x}+\hat{z})$$
$$= \frac{2\pi}{a}(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$
$$|\vec{b}_1| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$$

distancia del plano → $d = \frac{a}{\sqrt{3}}$

* Para el (001)

$$\vec{K} = 1\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V}\frac{a^2}{4}(\hat{x}-\hat{z}+\hat{y})$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{z}+\hat{y})$$
$$d = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

Con el nuevo set será:

$$\vec{b}_1' = \frac{2\pi}{V}\frac{a^2}{4}(\hat{z}-\hat{y}+\hat{x}) \qquad \vec{b}_2' = \frac{2\pi}{V}\frac{a^2}{2}(-\hat{z}+\hat{y}) \qquad \vec{b}_3' = \frac{2\pi}{V}\cdot\frac{a^2}{2}(\hat{z})$$

$$\vec{b}_1' = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z}) \qquad \vec{b}_2' = \frac{2\pi}{a}2(\hat{y}-\hat{z}) \qquad \vec{b}_3' = \frac{2\pi}{a}2\hat{z}$$

$\hat{x}$) $-\frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}h \rightarrow h=-1$

$\hat{y}$) $\frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}(-h+2k) \rightarrow 1 = -h+2k \rightarrow k=0$ $\qquad \boxed{(-1,0,1)}$

$\hat{z}$) $\frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}(h-2k+2l) \rightarrow 1 = h-2k+2l \rightarrow l=1$

$\hat{x}$) $\frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}h \rightarrow h=1$

$\hat{y}$) $\frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}(-h+2k) \rightarrow 1 = -h+2k \rightarrow k=1$ $\qquad \boxed{(1,1,0)}$

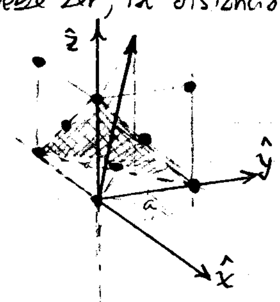
$\hat{z}$) $-\frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}(h-2k+2l) \rightarrow -1 = h-2k+2l \rightarrow l=0$

Estos dos planos están separados por $d = \frac{a}{\sqrt{3}}$

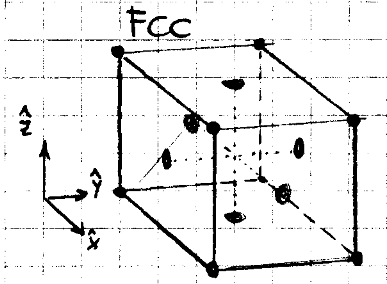
$$\vec{K} = \left|-\frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z}) + \frac{2\pi}{a}2\hat{z}\right| = \frac{2\pi}{a}\left|-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}\right| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$$

$$\vec{K} = \left|\frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z}) + \frac{2\pi}{a}2(\hat{y}-\hat{z})\right| = \frac{2\pi}{a}\left|\hat{x}+\hat{y}-\hat{z}\right| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$$

Como debe ser, la distancia entre planos debe conservarse (es $d = \frac{a}{\sqrt{3}}$)



15.



SC + base

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\,\hat{x} \\ \vec{a}_2 = a\,\hat{y} \\ \vec{a}_3 = a\,\hat{z} \end{cases} \qquad \begin{cases} \vec{0} \\ a/2\,(\hat{y}+\hat{z}) \\ a/2\,(\hat{z}+\hat{x}) \\ a/2\,(\hat{x}+\hat{y}) \end{cases}$$

a)
$$S_K = \sum_{n=1}^{4} e^{i\vec{K}\cdot\vec{d}_n} = 1 + e^{i\vec{K}\cdot\frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})} + e^{i\vec{K}\cdot\frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x})} + e^{i\vec{K}\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})}$$

, como $\vec{K}$ pertenece a la red recíproca, será:

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a}\left(n_1\hat{x} + n_2\hat{y} + n_3\hat{z}\right)$$

$$S_K = 1 + e^{i\pi(n_2+n_3)} + e^{i\pi(n_3+n_1)} + e^{i\pi(n_1+n_2)}$$

$$S_K = 1 + (-1)^{n_2+n_3} + (-1)^{n_3+n_1} + (-1)^{(n_1+n_2)}$$

Como par + par = par, impar + impar = par $\Big\} \rightarrow$ $S_K = 4$ con $n_1\ n_2\ n_3$ pares / $n_1\ n_2\ n_3$ impares

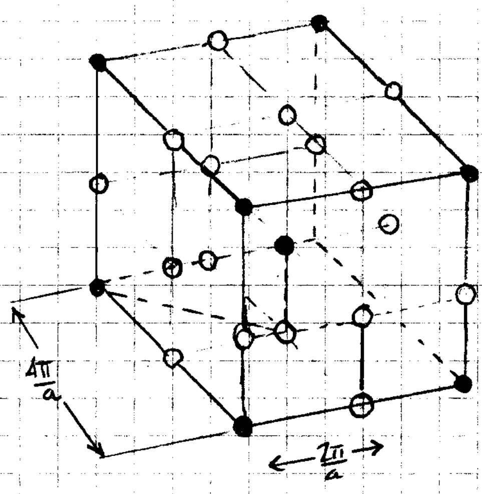
par + impar = impar $\} \rightarrow$ $S_K = 0$ con

uno par	/ dos impares
n_1	$n_2\,n_3$
n_2	$n_1\,n_3$
n_3	$n_2\,n_1$
uno impar	**/ dos pares**
n_1	$n_2\,n_3$
n_2	$n_1\,n_3$
n_3	$n_2\,n_1$

$$\Rightarrow \boxed{S_K = \begin{cases} 4 & \text{con } n_1, n_2, n_3 \rightarrow \text{pares} \\ & \phantom{\text{con } n_1, n_2, n_3} \rightarrow \text{impares} \\ 0 & \text{con alguno par / impar} \end{cases}}$$

b) Si se remueven aquellos puntos para los cuales $S_K = 0$

● puntos con n_1, n_2, n_3 pares ó impares
○ puntos con algún n_i par ó
puntos con algún n_i impar



Si removemos de la red recíproca aquellos puntos para los cuales el $S_K = 0$ nos queda una red BCC de parámetro $4\pi/a$ lo cual es lo esperable ya que:

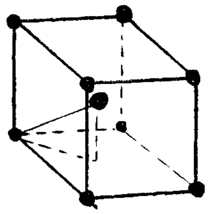
Red recíproca de FCC con parámetro a es Red BCC con parámetro $\frac{4\pi}{a}$

(ver ejercicio 9)

NB: El cero es par

16.

BCC $\longrightarrow$ SC + base



$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\hat{x} \\ \vec{a}_2 = a\hat{y} \\ \vec{a}_3 = a\hat{z} \end{cases} \qquad \begin{cases} \vec{0} \\ \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \end{cases}$$

$$a = 4\ \text{Å}$$

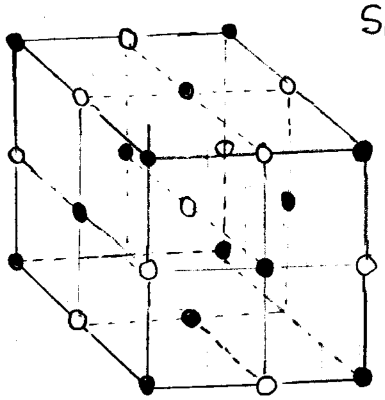
(a)

$$S_K = \sum_{n=1}^{2} e^{i\vec{K}\cdot\vec{d}_n} = 1 + e^{i\frac{2\pi}{a}(n_1\hat{x}+n_2\hat{y}+n_3\hat{z})\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})}$$

$$S_K = 1 + e^{i\pi(n_1+n_2+n_3)}$$

$$S_K = 1 + (-1)^{n_1+n_2+n_3}$$

$$S_K = \begin{cases} 2 & n_1+n_2+n_3 \text{ par} \\ 0 & n_1+n_2+n_3 \text{ impar} \end{cases}$$



$\leftarrow$ Removiendo aquellas para los cuales $n_1+n_2+n_3$ es impar resulta en una FCC en el espacio recíproco

(b) Para Debye-Scherrer es

$$|\vec{K}| = 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)\operatorname{sen}\left(\frac{\phi}{2}\right) \qquad \text{donde } \vec{K} \in \text{Red recíproca}$$

Tendremos $|\vec{K}|$ diferentes según el orden de vecinos $\Rightarrow$ La red recíproca de una BCC es FCC de parámetro $a' = \frac{4\pi}{a}$

Para FCC:

vecino	dist.
1º	$a'/\sqrt{2}$
2º	a'
3º	$\sqrt{3/2}\,a'$

$$\Rightarrow \quad |\vec{K}|_1 = 4\pi/\sqrt{2}a \qquad |\vec{K}|_2 = 4\pi/a \qquad |\vec{K}|_3 = 4\pi\sqrt{3}/\sqrt{2}a$$

$$\phi_j = 2 \cdot \operatorname{asen}\left(\frac{K_j\lambda}{4\pi}\right) \Rightarrow$$

$$\phi_1 = 2 \cdot \operatorname{asen}\left(\frac{2{,}5}{\sqrt{2}\cdot 4}\right) \cong 52{,}45°$$

$$\phi_2 = 2 \cdot \operatorname{asen}\left(\frac{2{,}5}{4}\right) \cong 77{,}36°$$

$$\phi_3 = 2 \cdot \operatorname{asen}\left(\frac{2{,}5\sqrt{3}}{\sqrt{2}\cdot 4}\right) \cong 99{,}9°$$

Otro método es considerar la BCC como SC + base con $n_1+n_2+n_3$ par en el vector $\vec{K}$ del espacio recíproco $\Rightarrow$

n_1, n_2, n_3 pares

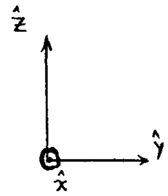
n_1, n_2 impares n_3 par

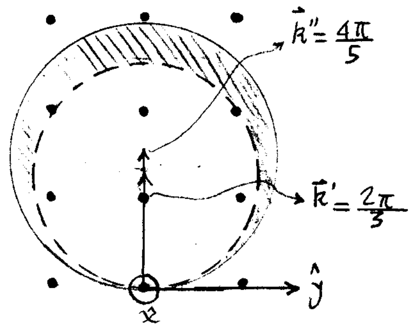
$$|\vec{K}| = \frac{\cancel{2\pi}}{a}\sqrt{n_1^2+n_2^2+n_3^2} = 2\left(\frac{\cancel{2\pi}}{\lambda}\right)\operatorname{sen}\left(\frac{\phi}{2}\right)$$

Los n's que verifican serán:

n'	n''	n'''			
0	0	0			
1	1	0	$\longrightarrow$	52,45°	(ϕ_1)
2	1	1	$\longrightarrow$	99,9°	(ϕ_3)
2	0	0	$\longrightarrow$	77,36°	(ϕ_2)

(c)





$$2{,}5\,Å < \lambda < 3\,Å$$

$$\frac{2\pi}{2{,}5\,Å} = 2{,}513\ Å^{-1} \qquad \frac{2\pi}{3\,Å} = 2{,}094\ Å^{-1}$$

$$\frac{2\pi}{3}\,Å^{-1} < k < \frac{4\pi}{5}\,Å^{-1}$$

SC de RR $2\pi/a = a' \rightarrow$ $a = 4Å \rightarrow$

$a' = \pi/2$ 1^er^ vecino

Esto determinará dos condiciones que deben cumplirse:

$$1)\ K_x^2 + K_y^2 + \left(K_z - \frac{2\pi}{3}\right)^2 \geq \left(\frac{2\pi}{3}\right)^2$$

$$2)\ K_x^2 + K_y^2 + \left(K_z - \frac{4\pi}{5}\right)^2 \leq \left(\frac{4\pi}{5}\right)^2$$

$$3)\ S_K \neq 0$$

$$\vec{b}_i = \frac{2\pi}{a}\hat{i} \qquad \hat{i} = \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$$

$$\vec{K} = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3$$

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a}\left(n_1\hat{x} + n_2\hat{y} + n_3\hat{z}\right)$$

$$1)\ \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 n_1^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 n_2^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\left(n_3 - \frac{a}{3}\right)^2 \geq \frac{4\pi^2}{9}$$

$$n_1^2 + n_2^2 + \left(n_3 - \frac{a}{3}\right)^2 \geq \frac{a^2}{9}$$

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 - n_3\frac{2a}{3} + \cancel{\frac{a^2}{9}} \geq \cancel{\frac{a^2}{9}}$$

$$2)\ \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 n_1^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 n_2^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\left(n_3 - \frac{2a}{5}\right)^2 \leq \left(\frac{4\pi}{5}\right)^2$$

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 - \frac{4a}{5}n_3 + \cancel{\frac{4a^2}{25}} \leq \cancel{\frac{4a^2}{25}}$$

$$\frac{4a\,n_3}{5} \geq n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \geq \frac{a\,n_3\,2}{3}$$

$a = 4Å$

$h+k+l$ = par

011 no contribuye
112 contribuyen
002 no contribuye

$n_1 + n_2 + n_3$ par $\Rightarrow$ 110 $\rightarrow$ (No)
112 $\rightarrow$ $\frac{8a}{5} \geq 6 \geq a\frac{4}{3}$ (Sí

17. Para el enfoque de Von Laue
Tendremos interferencia constructiva si:

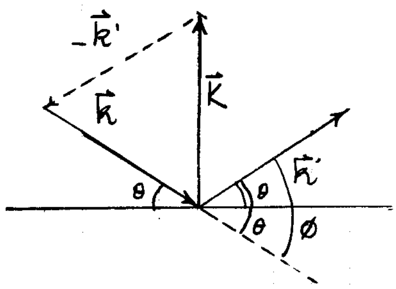
$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}' \in \text{Red recíproca},$$

en cuyo caso:

$$e^{i\,\vec{R}\cdot\vec{K}} = 1 \quad , \text{donde } \vec{R} \in \text{Red directa}$$

Dado que $\vec{k}$ es el vector de onda de la radiación incidente y $\vec{k}'$ el de la radiación scatterada, siendo ambos de igual módulo se observarán picos de difracción (anillos) para los ángulos ϕ ($2\theta = \phi$ donde θ es el ángulo de incidencia) que verifiquen:

$$|R| = 2\,|k|\,\text{sen}\left(\phi/2\right)$$



La condición se muestra en el dibujo.
EL ángulo de incidencia θ se mide respecto del plano de reflexión y se ve que el ángulo ϕ entre los vectores $\vec{k}$, $\vec{k}'$ es dos veces θ.

Como $|\vec{K}|$ es el módulo de vectores en la red recíproca de una muestra dada, se sigue que los diferentes picos de difracción corresponderán a los diferentes órdenes de vecinos en la red.

Luego, dado que los cocientes entre las distancias entre vecinos de la red de un orden dado no dependen del parámetro de red sino solamente del tipo de red se puede identificar a c/u de ellas.

(a) Según ejercicio 3 se tiene:

	dist 2do vecino / dist. 1er vecino
BCC	$2/\sqrt{3} \approx 1,15$
FCC	$\sqrt{2} \approx 1,41$
Diamante	No es red de Bravais $\Rightarrow$ no puedo asegurar vecinos a una misma distancia

Evaluamos $|\vec{K}|$ para las muestras teniendo en cuenta que solo necesitamos sen($\phi/2$) para los cocientes

Muestra	Cociente $\lvert\vec{K}\rvert_2 / \lvert\vec{K}\rvert_1$	
A	$\text{sen}\left(\frac{49{,}7^\circ}{2}\right)/\text{sen}\left(\frac{42{,}2^\circ}{2}\right) \approx 1{,}167$	$\Rightarrow$ red recíproca será BCC
B	$\text{sen}\left(\frac{41^\circ}{2}\right)/\text{sen}\left(\frac{28{,}8^\circ}{2}\right) \approx 1{,}408$	$\Rightarrow$ " " " FCC
C	$\text{sen}\left(\frac{73{,}2^\circ}{2}\right)/\text{sen}\left(\frac{42{,}8^\circ}{2}\right) \approx 1{,}634$	

Dado que ésto define la red recíproca de cada muestra y sabemos que la recíproca de una red puede cambiar el carácter de la misma (ejercicio 9) se tiene

$\boxed{\text{Muestra A es FCC, Muestra B es BCC y Muestra C es diamante}}$

, donde la muestra C debe ser de diamante por eliminación [luego se confirmará]

(b) Usando $\lambda = 1{,}5\,\text{Å}$ se tendrá:

	$\lvert\vec{K}\rvert_1$
Muestra A	$3{,}016\ \text{Å}^{-1}$
Muestra B	$2{,}083\ \text{Å}^{-1}$
Muestra C	$3{,}056\ \text{Å}^{-1}$

Según ejercicio 9:

la Red recíproca de una FCC de parámetro a es una BCC de parámetro $\frac{4\pi}{a} \equiv a'$

La red recíproca de una BCC de parámetro a es una FCC de parámetro $\frac{4\pi}{a} \equiv a'$

Según ejercicio 3 las distancias para los primeros vecinos son:

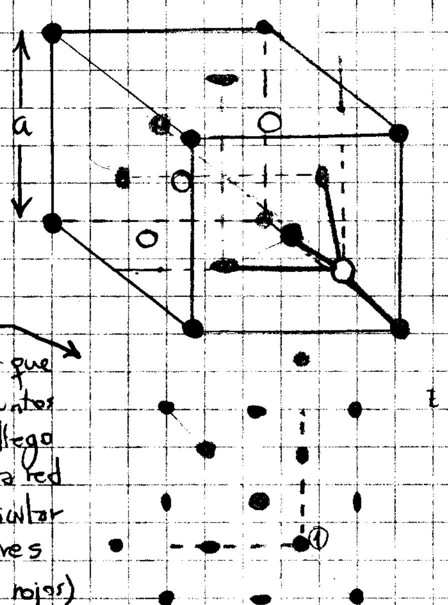
BCC $\rightarrow \frac{\sqrt{3}}{2}a$ FCC $\rightarrow \frac{a}{\sqrt{2}}$

Luego, en el espacio recíproco se tendrá que:

$*$A $3{,}016\ \text{Å}^{-1} = \frac{\sqrt{3}}{2}a' = \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{4\pi}{a} \Rightarrow \boxed{a \cong 3{,}61\ \text{Å}}$ ✓

$*$B $2{,}083\ \text{Å}^{-1} = \frac{a'}{\sqrt{2}} = \frac{4\pi}{a\sqrt{2}} \Rightarrow \boxed{a \cong 4{,}26\ \text{Å}}$ ✓

Dado que la estructura diamante no es una red de Bravais debe describirse como red + base



Es fácil ver que con dos puntos de base llego a toda la red (en particular a los tres restantes rojos) pues parado en ① salto a los otros con los primitivos

FCC + base $\begin{cases} \vec{0} \\ \frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \end{cases}$

La red recíproca será una BCC de parámetro $\frac{4\pi}{a}$

Para la BCC podemos tomar:

$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{a}\hat{x}$

$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a}\frac{1}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$

$\vec{b}_3 = \frac{4\pi}{a}\hat{z}$

$$\vec{K} = \frac{4\pi}{a}\left(\left[n_1 + \frac{n_2}{2}\right]\hat{x} + \frac{n_2}{2}\hat{y} + \left[\frac{n_2}{2} + n_3\right]\hat{z}\right)$$ vector general de la red recíproca

$$S_K = 1 + e^{i\vec{K}\cdot\frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})}$$

$$= 1 + e^{i\pi\left(n_1 + \frac{n_2}{2} + \frac{n_2}{2} + \frac{n_2}{2} + n_3\right)}$$

$$S_K = 1 + e^{i\pi\left(n_1 + \frac{3}{2}n_2 + n_3\right)}$$

$$1 + e^{i\frac{\pi}{2}(2n_1 + 3n_2 + 2n_3)}$$

$$S_K = 1 + (i)^{(2n_1 + 3n_2 + 2n_3)}$$

$i^0 = 1$
$i^1 = i$
$i^2 = -1$
$i^3 = -i$
$i^4 = 1$
...

$\Rightarrow$
$(2n_1 + 3n_2 + 2n_3) = 2k$ con k par $\rightarrow S_K = 2$ ✓
$(2n_1 + 3n_2 + 2n_3) = 2k$ con k impar $\rightarrow S_K = 0$ ✓
$(2n_1 + 3n_2 + 2n_3)$ impar $\rightarrow S_K = 1 \pm i$ ✓

Luego, deberíamos eliminar las combinaciones $2n_1+3n_2+2n_3$ que dan $2k$ con k impar. Las combinaciones $(2n_1+3n_2+2n_3)$ impares dan un $\mathbb{C}$ que viene

$(0\ 0\ 0) \rightarrow 1+i^0 \rightarrow S_K = 2$
$(2\ 0\ 0) \rightarrow 1+i^4 \rightarrow S_K = 2$
$(0\ 0\ 2)$
$(1\ 0\ 1)$

$\Rightarrow$ Estos $n_1 n_2 n_3 \in$ una red FCC de parámetro $2\left(\frac{4\pi}{a}\right) = \frac{8\pi}{a}$

$(0\ 1\ 0) \rightarrow 1+i^3 \rightarrow S_K = 1-i$, $(1\ 1\ 0) \rightarrow 1+i^5 \rightarrow S_K = 1+i$

$$|\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\left(\left(n_1+\frac{n_2}{2}\right)^2+\left(\frac{n_2}{2}\right)^2+\left(\frac{n_2}{2}+n_3\right)^2\right)^{1/2}$$

$[200] \rightarrow \frac{4\pi}{a}(4)^{1/2} = \frac{8\pi}{a}$ → correspondería al $|\vec{K}|_4$

$[101] \rightarrow \frac{4\pi}{a}(2)^{1/2} = \frac{4\sqrt{2}\,\pi}{a}$ → correspondería al $|\vec{K}|_2$

$[010] \rightarrow \frac{4\pi}{a}\sqrt{\frac{3.1}{4}} = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a}$ → correspondería al $|\vec{K}|_1$

$[110] \rightarrow \frac{4\pi}{a}\sqrt{\left(\frac{3}{2}\right)^2+\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(\frac{1}{2}\right)^2} =$

$\frac{4\pi}{a}\sqrt{\frac{11}{4}} = \frac{2\pi\sqrt{11}}{a}$ → correspondería al $|\vec{K}|_3$

no veo de donde sale este número

$$|\vec{K}| = 3{,}056\ \text{Å}^{-1} = \frac{4\sqrt{2}\,\pi}{a} \Rightarrow \boxed{a \cong 5{,}81\ \text{Å}}$$

Asimismo podemos evaluar el cociente $|\vec{K}|_2 / |\vec{K}|_1$ y ver si podemos identificar al diamante según los picos angulares dados en la tabla 1 para muestra C. teníamos ✓

$$\frac{|\vec{K}|_2}{|\vec{K}|_1} = \frac{\operatorname{sen}\left(\frac{73{,}2}{2}\right)}{\operatorname{sen}\left(\frac{42{,}8}{2}\right)} \cong 1{,}634$$ ✓ , y con los datos de la red recíproca será

$$\frac{|\vec{K}|_2}{|\vec{K}|_1} = \frac{\cancel{4}^{2}\cancel{\pi}\sqrt{2}}{\cancel{a}} \cdot \frac{\cancel{a}}{\cancel{2}\cancel{\pi}\sqrt{3}} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \cong 1{,}633$$ ✓

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{Confirmamos que la muestra C es el diamante}}$ ✓

(c) Si reemplazamos la estructura de diamante por una zincblenda lo que cambia es que ahora tenemos iones de Zinc y de Azufre de forma que un ión de un tipo tiene cuatro del otro tipo como primeros vecinos.

$\Rightarrow$ Podemos describirla como:

$$\underset{(\text{Zinc})}{\text{FCC}} + \text{base}\begin{cases}\vec{0} \longrightarrow \text{Zinc}\\ \frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \rightarrow \text{Azufre}\end{cases}$$

$$S_K = f_Z + f_S\, e^{i\pi\left(n_1+\frac{n_2}{2}+\frac{n_2}{2}+\frac{n_2}{2}+n_3\right)}$$ ✓

$$S_K = f_Z + f_S\, e^{\frac{i\pi}{2}(2n_1+3n_2+2n_3)}$$

Ahora tendremos

$2n_1+3n_2+2n_3 = 2k$ con k par $\rightarrow$ $S_K = f_Z + f_S$
$2n_1+3n_2+2n_3 = 2k$ con k impar $\rightarrow$ $S_K = f_Z - f_S$
$2n_1+3n_2+2n_3$ impar $\rightarrow$ $S_K = f_Z + f_S \pm i f_S$

Ahora, no deberé desechar ninguna combinación de los n_1, n_2, n_3 porque en general $f_Z \neq f_S$ con lo cual

$$|\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\left(\left[n_1+\frac{n_2}{2}\right]^2+\left[\frac{n_2}{2}\right]^2+\left[\frac{n_2}{2}+n_3\right]^2\right)^{1/2}$$

$(1\ 0\ 0) \rightarrow |\vec{K}| = 4\pi/a\sqrt{1} = \frac{4\pi}{a}1 \rightarrow 2^{\circ}$
$(0\ 1\ 0) \rightarrow |\vec{K}| = 4\pi/a\sqrt{3\frac{1}{4}} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{3} \rightarrow 1^{\circ}$
$(0\ 2\ 0) \rightarrow |\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{3}$
$(1\ 0\ 1) \rightarrow |\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2} \rightarrow 3^{\circ}$
$(1\ 1\ 0) \rightarrow |\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{\frac{9}{4}+\frac{1}{4}+\frac{1}{4}} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{11} \rightarrow 4^{\circ}$
$(2\ 0\ 0) \rightarrow |\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{4} = \frac{4\pi}{a}.2$

$(1\ 1\ 1) \rightarrow |\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{\frac{9}{4}+\frac{1}{4}+\frac{9}{4}}$
$|\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\frac{\sqrt{19}}{2}$

$$2.\operatorname{asen}\left(\frac{\lambda.|\vec{K}|_i}{4\pi}\right) = \phi_i \quad \Rightarrow$$

$$\phi_1 = 2.\operatorname{asen}\left(\frac{1{,}5.\cancel{2}\cancel{\pi}\sqrt{3}}{_2\cancel{4\pi}\ a}\right) = 2.\operatorname{asen}\left(\frac{3\sqrt{3}}{4a}\right)$$
$$\phi_2 = 2.\operatorname{asen}\left(\frac{1{,}5\ \cancel{4\pi}}{\cancel{4\pi}\ a}\right) = 2.\operatorname{asen}\left(\frac{3}{2a}\right)$$
$$\phi_3 = 2.\operatorname{asen}\left(\frac{3\ \cancel{4\pi}\sqrt{2}}{\cancel{2}.a\ \cancel{4\pi}}\right) = 2.\operatorname{asen}\left(\frac{3}{\sqrt{2}a}\right)$$
$$\phi_4 = 2.\operatorname{asen}\left(\frac{3\ \cancel{4\pi}\sqrt{11}}{2\cancel{4\pi}.2a}\right) = 2.\operatorname{asen}\left(\frac{3\sqrt{11}}{4a}\right)$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \phi_1 \approx 25{,}8^{\circ} \\ \phi_2 \approx 29{,}9^{\circ} \\ \phi_3 \approx 42{,}83^{\circ} \\ \phi_1 \approx 50{,}7^{\circ} \end{array}}$$

procedimiento OK
arrastró el error en el cálculo de a