TEXTOS DOCENTS

237

PROBLEMES DE CRISTAL·LOGRAFIA

M.A. Cuevas Diarte
T. Calvet
S. Galí
M. Labrador
J.M. Nogués
J. Solans
X. Solans
E. Tauler
M. Vendrell

Departament de Cristal·lografia, Mineralogia i Dipòsits Minerals

UNIVERSITAT DE BARCELONA

TEXTOS DOCENTS

237

PROBLEMES DE CRISTAL·LOGRAFIA

M.A. Cuevas Diarte
T. Calvet
S. Galí
M. Labrador
J.M. Nogués
J. Solans
X. Dolans
E. Tauler
M. Vendrell

Departament de Cristal·lografia, Mineralogia i Dipòsits Minerals

Publicacions i Edicions

UNIVERSITAT DE BARCELONA

INTRODUCCIÓ

Existeixen molts textos i manuals docents de Cristal·lografia. La major part d'ells de molta qualitat. Alguns textos inclouen enunciats de problemes a resoldre, però la majoria són manuals teòrics. Paral·lelament, cada cop apareixen més materials docents a Internet per a l'ensenyament a través d'ordinador d'aspectes diversos de la Cristal·lografia, en forma de cursos no presencials, materials de suport, etc. En tot els casos, però, es troben a faltar problemes resolts que ajudin a entendre millor els conceptes teòrics.

Per tal d'omplir aquest buit, els professors del Departament de Cristal·lografia, Mineralogia i Dipòsits Minerals de la Universitat de Barcelona que tenen o han tingut algun tipus de responsabilitat en la docència de Cristal·lografia dels ensenyaments de Geologia i de Química, vàrem decidir preparar un manual exclusivament de problemes de Cristal·lografia.

Aquest manual ha estat pensat de manera que sigui d'ajut real i efectiu als alumnes. Va dirigit, sobretot, als alumnes d'un curs d'introducció a la Cristal·lografia, tot i que inclou alguns problemes que són més adients per a cursos superiors. Els problemes s'han dividit en cinc blocs que considerem bàsics, que qualsevol programa inclou normalment, i dels quals s'han responsabilitzat alguns dels autors: Teoria reticular (X. Solans i M. A. Cuevas Diarte), Simetria puntual (X. Solans, M. Vendrell i J. M. Nogués), Simetria espacial (M. A. Cuevas Diarte i T. Calvet), Difracció de raigs X (M. Labrador i S. Galí), i Cristal·loquímica (E. Tauler, J. Solans i X. Solans). Voluntàriament hem exclòs alguns tipus de problemes que en la pràctica docent del nostre departament han deixat d'utilitzar-se, com per exemple els càlculs goniomètrics. Hem diferenciat tres tipus diferents. Problemes de tipus A, on a partir de l'enunciat s'explica la seva resolució pas a pas, partint de la base que l'alumne ha adquirit els conceptes teòrics necessaris en cada cas. Problemes de tipus B, on la solució es dóna de forma resumida per tal que l'alumne els intenti resoldre ell mateix. Problemes de tipus C, on només es dóna l'enunciat i la solució, tot i que en alguns casos aquesta pugui ser més o menys extensa, numèrica o gràfica.

Els autors som conscients que ens hem beneficiat de l'experiència aportada per altres professors de l'àrea de Cristal·lografia que en un moment o altre han participat amb la seva docència en aquest departament. No donarem els seus noms per tal de no incórrer en errors d'oblit, però volem deixar constància del nostre reconeixement. Igualment cal fer constar la participació més activa d'alguns dels autors en la correcció del material produït: S. Galí, X. Solans, T. Calvet, i M. A. Cuevas Diarte. Una menció a part constitueix el nostre agraïment a Mercedes Aguilar pel seu treball de posada en forma del material, fonamental i no gens fàcil en un manual de característiques com les d'aquest. Per acabar, volem agrair el suport del Gabinet d'Avaluació i Innovació Universitària de la Universitat de Barcelona.

Miquel Àngel Cuevas Diarte
Editor i coautor

Barcelona, juny del 2001

INDEX

INTRODUCCIÓ

CAPÍTOL I. TEORIA RETICULAR 1
Exercicis A 1
Exercicis C 17

CAPÍTOL II. SIMETRÍA PUNTUAL 22
Exercicis A 22
Exercicis B 34
Exercicis C 44

CAPÍTOL III. SIMETRÍA ESPACIAL 48
Exercicis A 48
Exercicis B 68
Exercicis C 77

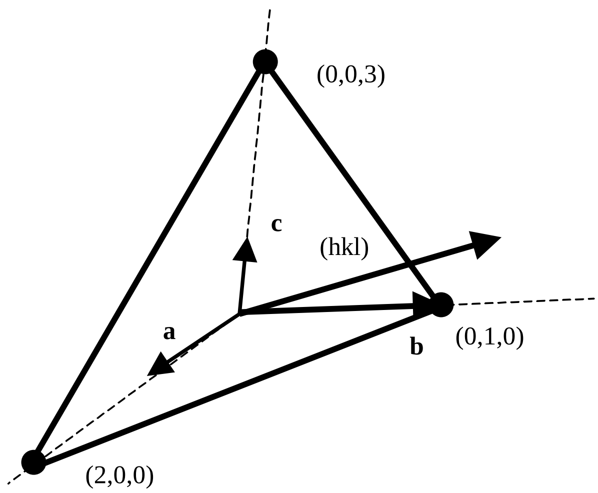
CAPÍTOL IV. DIFRACCIÓ DE RAIGS X 93
Exercicis A 93
Exercicis B 107
Exercicis C 125

CAPÍTOL V. CRISTAL·LOQUÍMICA 134
Exercicis A 134
Exercicis B 159
Exercicis C 163

CAPÍTOL I. TEORIA RETICULAR

A.1.Trobeu els índexs de Miller del pla reticular que talla els eixos cristal·logràfics en els punts (2,0,0), (0,1,0) i (0,0,3).

Mètode 1:



A partir de la definició d'índex de Miller.

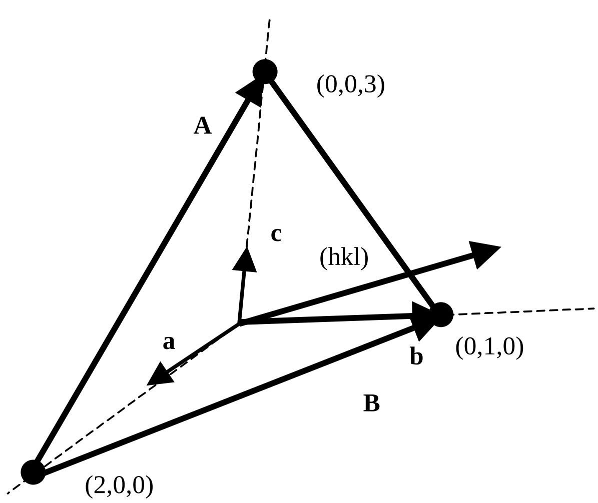
h = m.c.m (2,1,3)/2 = 6/2 = 3   k = m.c.m. (2,1,3)/1 = 6/1 = 6

l = m.c.m (2,1,3)/3 = 6/3 = 2

Per tant (362).

Mètode 2:

Definim dos vectors continguts en el pla.



Aquests poden ser **A** = (0,0,3) - (2,0,0) = -2 **a** + 3 **c** i **B** = (0,1,0) - (2,0,0) = -2 **a** + **b**. Com que el vector (hkl) és perpendicular al pla, aquest serà paral·lel al vector **A** x **B**, per tant (hkl) = k **A** x **B**

$$(hkl) = k\,\mathbf{A} \times \mathbf{B} = k\,V_c \begin{vmatrix} \mathbf{a^*} & \mathbf{b^*} & \mathbf{c^*} \\ -2 & 0 & 3 \\ -2 & 1 & 0 \end{vmatrix} = k\,V_c \{\mathbf{a^*}[0 \cdot 0 - 3 \cdot 1] + \mathbf{b^*}[3 \cdot (-2) - (-2) \cdot 0] +$$

$$+ \mathbf{c^*}[(-2) \cdot 1 - 0 \cdot (-2)]\} = k\,V_c(-3\,\mathbf{a^*} - 6\,\mathbf{b^*} - 2\,\mathbf{c^*})$$

On V_c és el volum de la cel·la definida pels vectors **a**, **b** i **c**. D'acord amb les condicions que han de satisfer els índexs de Miller [les seves components han de ser nombres enters i primers entre ells], (hkl) = (362)

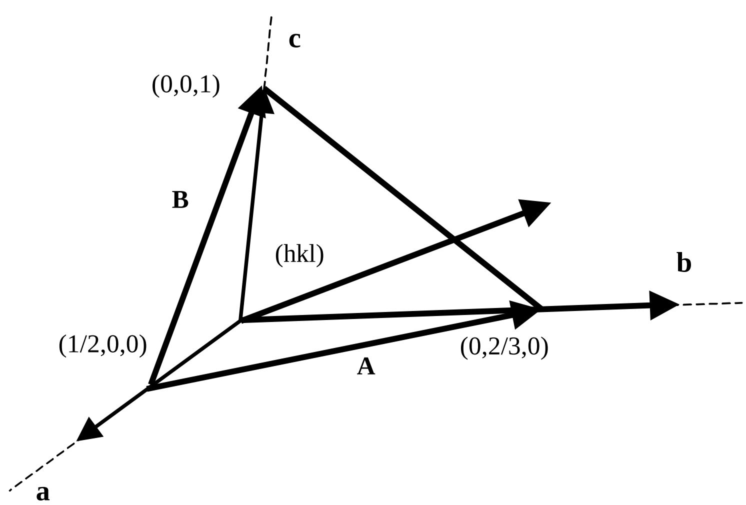
A.2.Trobeu els índexs de Miller del pla que talla els eixos cristal·logràfics en els punts: 1/2 ***a****; 2/3****b*** *i* ***c****.*

Es defineixen dos vectors continguts en el pla: **A** = 2/3 **b** - 1/2 **a** i **B** = **c** - 1/2 **a**

$$(hkl) = k\,\mathbf{A} \times \mathbf{B} = k\,V_c \begin{vmatrix} \mathbf{a^*} & \mathbf{b^*} & \mathbf{c^*} \\ -1/2 & 2/3 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1 \end{vmatrix} = k\,V_c\,(2/3\,\mathbf{a^*} + 1/2\,\mathbf{b^*} + 1/3\,\mathbf{c^*})$$

$$(hkl) = k\,V_c\,(4\,\mathbf{a^*} + 3\,\mathbf{b^*} + 2\,\mathbf{c^*})/6$$

Per tant (hkl) = (432)

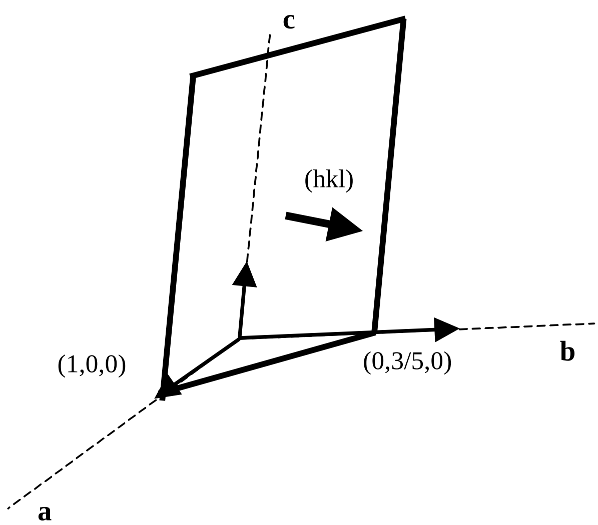


*A.3. Trobeu els índexs de Miller del pla que talla els eixos cristal·logràfics en els punts: **a**; 3/5**b** i no talla el tercer eix.*

Un vector contingut en el pla serà **a** - 3/5 **b**, mentre que el vector **c** és paral·lel al pla. Com que el vector (hkl) és perpendicular al pla

$$(hkl) = k\,[\mathbf{a} - 3/5\,\mathbf{b}] \times \mathbf{c} = k\,V_c \begin{vmatrix} \mathbf{a^*} & \mathbf{b^*} & \mathbf{c^*} \\ 1 & -3/5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = k\,V_c\,(-3/5\,\mathbf{a^*} - \mathbf{b^*}) = -k\,Vc\,(3\,\mathbf{a^*} + 5\,\mathbf{b^*})/5$$

(hkl) = (350)



A.4.Trobeu el volum del paral·lelepípede definit pels vectors de translació [$\bar{1}$ 2 1], [$\bar{1}$ 1 0] i [$\bar{1}$ 0 1].

El volum del paral·lelepípede serà el producte mixt d'aquests tres vectors: [$\bar{1}$ 2 1] · ([$\bar{1}$ 1 0] x [$\bar{1}$ 0 1])

$$= [\bar{1}\ 2\ 1]\ Vc \begin{vmatrix} \mathbf{a^*} & \mathbf{b^*} & \mathbf{c^*} \\ -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = Vc\,[\bar{1}\ 2\ 1] \cdot (1\ 1\ 1) = Vc\,(-1 + 2 + 1) = 2\,Vc$$

Un altre mètode de resoldre el problema és: [$\bar{1}$ 2 1] · ([$\bar{1}$ 1 0] x [$\bar{1}$ 0 1]) = $\begin{vmatrix} -1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{vmatrix}$ Vc = 2 Vc

El volum del paral·lelepípede definit per tres vectors de translació sempre és un nombre enter de vegades el volum de la cel·la.

A.5. Trobeu les distàncies de la periodicitat en les direccions [121], [031], [102] i [$\bar{1}$02] en un cristall de paràmetres a = 5.561, b = 4.976, c = 13.561 Å i $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta = 106.6°$

La distància de la periodicitat en la direcció [121] serà el mòdul d'aquest vector

$|[121]| = [(\mathbf{a} + 2\,\mathbf{b} + \mathbf{c}) \cdot (\mathbf{a} + 2\,\mathbf{b} + \mathbf{c})]^{1/2} = [a^2 + 4\,b^2 + c^2 + 2\,a\,c\cos\beta]^{1/2} = 16.456$ Å

$|[031]| = [\,9\,b^2 + c^2]^{1/2} = 20.17$ Å

$|[10\,2]| = [a^2 + 4\,c^2 + 4\,a\,c\cos\beta]^{1/2} = 26.08$ Å

$|[\,\bar{1}\,0\,2]| = [a^2 + 4\,c^2 - 4\,a\,c\cos\beta]^{1/2} = 29.20$ Å

A.6. El Zn cristal·litza en el sistema hexagonal amb a = b = 2.664 i c = 4.945 Å, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$. L'àtom de Zn ocupa les posicions (0,0,0) i (1/3,2/3,1/2). Determineu la distància Zn-Zn.

La distància entre els dos àtoms de Zn serà el mòdul del vector que uneix els dos punts

(1/3,2/3,1/2) - (0,0,0) = (1/3,2/3,1/2)

$d = |1/3\,\mathbf{a} + 2/3\,\mathbf{b} + 1/2\,\mathbf{c}| = [(1/9)\,a^2 + (4/9)\,b^2 + (1/4)\,c^2 + 2 \cdot (2/9)\,\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + 2 \cdot (2/6)\,\mathbf{a} \cdot \mathbf{c} +$

$+ 2 \cdot (2/6)\,\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}]^{1/2}$

Com que sols γ és diferent de 90°: $d = [(1/9)\,a^2 + (4/9)\,b^2 + (1/4)\,c^2 + (4/9)\,a\,b\cos 120]^{1/2} = 2.912$ Å

A.7. Calculeu l'angle que formen la filera reticular [001] i el vector perpendicular al pla (001) en els sistemes:
a) ròmbic: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
b) monoclínic: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta = 106°$

Per calcular l'angle entre dos vectors calcularem el producte escalar entre ells.

$[001] \cdot (001) = |[001]| \cdot |(001)| \cdot \cos\delta$

En aquest cas, al tractar-se d'un vector de la xarxa directa i un de la recíproca, el producte escalar és igual a

$[001] \cdot (001) = [\,0\,\mathbf{a} + 0\,\mathbf{b} + 1\,\mathbf{c}\,]\,(\,0\,\mathbf{a^*} + 0\,\mathbf{b^*} + 1\,\mathbf{c^*}\,) = 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 + 1 \cdot 1 = 1$

Ara calculem els mòduls dels vectors [001] i (001):

$|[001]| = |0\,\mathbf{a} + 0\,\mathbf{b} + 1\,\mathbf{c}| = [0^2\,\mathbf{a}^2 + 0^2\,\mathbf{b}^2 + 1^2\,\mathbf{c}^2 + 2\cdot\ 0\cdot\ 0\cdot\ \mathbf{a}\cdot\ \mathbf{b} + 2\cdot\ 0\cdot\ 1\cdot\ \mathbf{a}\cdot\ \mathbf{c} + 2\cdot\ 0\cdot\ 1\cdot\ \mathbf{b}\cdot\ \mathbf{c}]^{1/2} =$

$= [c^2]^{1/2} = c$

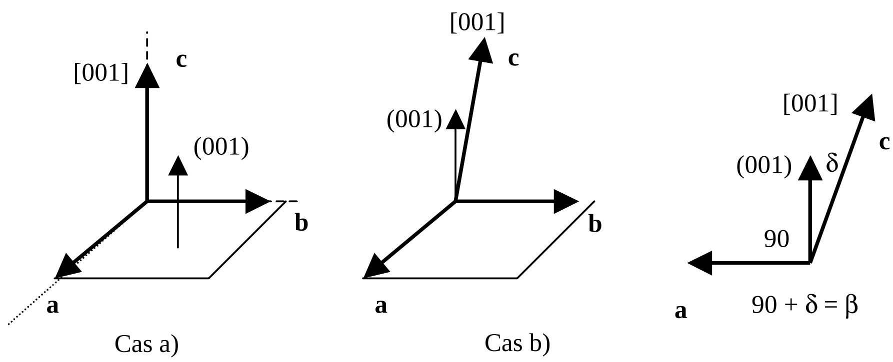
$|(001)| = [0^2\,\mathbf{a}^{*2} + 0^2\,\mathbf{b}^{*2} + 1^2\,\mathbf{c}^{*2} + 2\cdot\ 0\cdot\ 0\cdot\ \mathbf{a}^*\cdot\ \mathbf{b}^* + 2\cdot\ 0\cdot\ 1\cdot\ \mathbf{a}^*\cdot\ \mathbf{c}^* + 2\cdot\ 0\cdot\ 1\cdot\ \mathbf{b}^*\cdot\ \mathbf{c}^*]^{1/2} = [c^{*2}]^{1/2} =$

$= c^*$

Per tant $\qquad \cos\delta = 1/(c\ c^*)$

Cas a) com que $\alpha = \beta = \gamma = 90°$ $c^* = 1/c$, d'on $\cos\delta = 1$ i $\delta = 0°$

Cas b) com que $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta = 106°$ $c^* = 1/(c \sin\beta)$, d'on $\cos\delta = \sin\beta$; $\delta = \beta - 90 = 16°$



A.8. Indiqueu l'angle entre els vectors $[0\,\bar{1}\,1]$ i $[1\,1\,0]$ en una xarxa:
a) $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
b) $a = b = 10.3$, $c = 7.6$; $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$

a) Com $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. i $\mathbf{a}\cdot\ \mathbf{b} = \mathbf{b}\cdot\ \mathbf{c} = \mathbf{c}\cdot\ \mathbf{a} = 0$

$\cos\varphi = -b^2/[(b^2 + c^2)^{1/2}\,(a^2 + b^2)^{1/2}] = -1/2 \qquad \varphi = 120°$

b) En aquest cas: $\mathbf{b}\cdot\ \mathbf{c} = \mathbf{a}\cdot\ \mathbf{c} = 0$, mentre que $\mathbf{a}\cdot\ \mathbf{b} = a^2 \cos 120°$

$\cos\varphi = (a^2 \cos 120 - b^2)/[(b^2 + c^2)^{1/2}\,(a^2 - 2\,a^2 \cos 120° + b^2)^{1/2}] = -[3]^{1/2}/\{2[\,1 + (c/a)^2\,]^{1/2}\}$

$\varphi = 134.2°$

A.9. Un compost té l'àtom A en la posició (1/3,2/3,1/4), B en (2/3,1/3,3/4) i C en (1/3,-1/3,1/4). Indiqueu en funció dels paràmetres de la cel·la la distància entre els àtoms A i B, la de B i C i l'angle entre ABC. Els paràmetres de la cel·la són:
$a = b = 10.3$Å, $c = 7.6$Å; $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$.

$d_{AB} = \left|(1/3, -1/3, 1/2)\right| = [(1/9)\ a^2 - (2/9)\ a^2 \cos 120° + (1/9)\ b^2 + (1/4)\ c^2\ )^{1/2} = (\ a^2/3 + c^2/4\ )^{1/2} =$

$= 7.06$ Å

$d_{BC} = \left|(-1/3, -2/3, -1/2)\right| = ((1/9)\ a^2 + (4/9)\ a^2 \cos 120° + (4/9)\ b^2 + (1/4)\ c^2)^{1/2} = (\ a^2/3 + c^2/4\ )^{1/2} =$

$= 7.06$ Å

Per calcular l'angle amb vèrtex a l'àtom B hem de resoldre el producte escalar dels vectors **BA** i **BC**

$\mathbf{BA}\ .\ \mathbf{BC} = d_{AB} \cdot\ d_{BC} \cdot\ \cos\varphi$

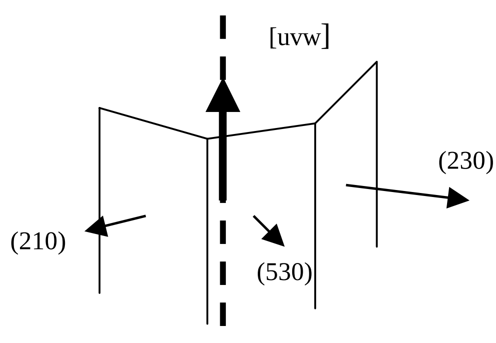
$\mathbf{BA}\ .\ \mathbf{BC} = (\ a^2/3 + c^2/4\ ) \cos\varphi$

$\mathbf{BA}\ .\ \mathbf{BC} = (\ -1/3, 1/3, -1/2) \cdot\ (\ -1/3, -2/3, -1/2) = (1/9)\ a^2 + (1/9)\ a^2 \cos 120° - (2/9)\ b^2 + (1/4)\ c^2 =$

$= -\ a^2/6 + c^2/4$

$\cos\varphi = [\ -\ a^2/6 + c^2/4\ ] / (\ a^2/3 + c^2/4\ )$ $\qquad\qquad \varphi = 93.7°$

A.10. Donades les cares següents indiqueu si tenen un eix de zona comú.
a) (210), (530) i (230)
b) (211), (321) i (511)



a) L'eix de zona de les cares (210) i (530) serà una filera de la xarxa directa paral·lela a les dues cares, per tant serà perpendicular als vectors de la xarxa recíproca (210) i (530), d'on

$$[uvw] = k\ (210) \times (530) = k\ V_c^* \begin{vmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} \\ 2 & 1 & 0 \\ 5 & 3 & 0 \end{vmatrix} = k\ V_c^*\ [\ \mathbf{c}\ ]$$

Per tant l'eix de zona és [001]. Si la tercera cara pertany a la mateixa zona, aquest vector [001] serà perpendicular al vector normal a la cara, per tant

$$[001] \cdot (230) = |[001]||(230)| \cos 90 = 0$$

$$[001] \cdot (230) = [\ \mathbf{c}\ ] \cdot (\ 2\ \mathbf{a^*} + 3\ \mathbf{b^*}\ ) = 0 \cdot 2 + 0 \cdot 3 + 1 \cdot 0 = 0$$

Les tres cares pertanyen a la zona que té com a direcció [001].

Igualment podem comprovar que les tres cares estaran en zona si el determinant de les seves components és nul, cosa que indica que els tres vectors (hkl) estan en un mateix pla i són linealment dependents.

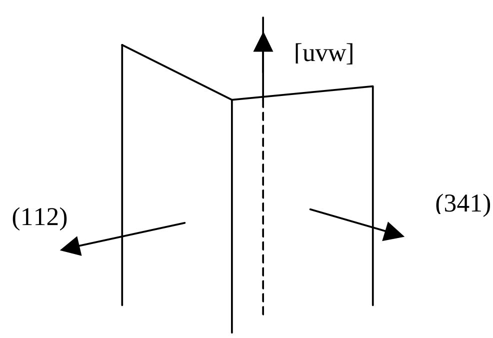
$$(230) \cdot [(210) \times (530)] = V_c^* \begin{vmatrix} 2 & 3 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 5 & 3 & 0 \end{vmatrix} = 0$$

b) Es calcula el determinant $\begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 1 \\ 5 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 4 + 5 + 3 - 10 - 3 - 2 = -3 \neq 0$

Per tant aquestes tres cares no pertanyen a la mateixa zona i els tres vectors (hkl) no estan en un mateix pla.

A.11. Quin és l'eix de zona que conté les cares (112) i (341)? Pertany la cara (112) a la zona [20$\bar{1}$]. Quina és la cara comuna a les zones d'eixos [$\bar{7}$51] i [$\bar{2}$01]?

Pregunta 1:

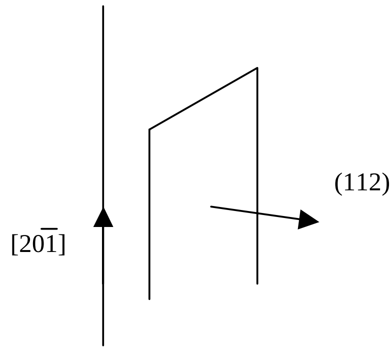


L'eix de zona és paral·lel a les dues cares. Això vol dir que serà perpendicular als dos vectors normals a les cares. Per trobar un vector perpendicular a altres dos es fa el producte vectorial d'aquests. L'eix de zona serà paral·lel a aquest vector perpendicular

$$[uvw] = k\ (112) \times (341) = k\ V_c^* \begin{vmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} \\ 1 & 1 & 2 \\ 3 & 4 & 1 \end{vmatrix} = k\ V_c^* [\ -7\ \mathbf{a} + 5\ \mathbf{b} + \mathbf{c}\ ]$$

Per tant [uvw] = [$\bar{7}$ 5 1]

Pregunta 2:

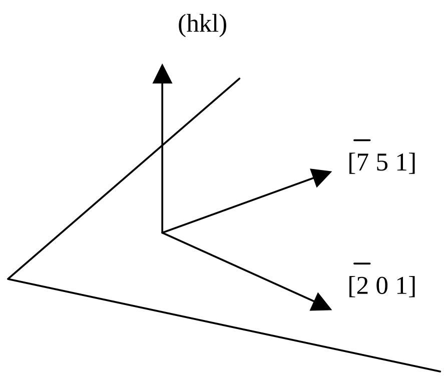


Si la cara (112) pertany a aquesta zona el vector normal al pla ha de ser perpendicular a l'eix de zona. El seu producte escalar serà zero

$$(112) \cdot [2\ 0\ \bar{1}] = (\mathbf{a^*} + \mathbf{b^*} + 2\,\mathbf{c^*}) \cdot [2\,\mathbf{a} - \mathbf{c}] = 1 \cdot 2 + 1 \cdot 0 + 2 \cdot (-1) = 0$$

Per tant la cara (112) pertany a la zona d'eix $[2\ 0\ \bar{1}]$.

Pregunta 3:



La cara comuna a aquestes dues zones serà paral·lela a aquest dos vectors. El vector (hkl) que indica aquest pla és perpendicular al pla i per tant als dos eixos de zona

$$(hkl) = k\ [\bar{7}\ 5\ 1] \times [\bar{2}\ 0\ 1] = k\, V_c \begin{vmatrix} \mathbf{a^*} & \mathbf{b^*} & \mathbf{c^*} \\ -7 & 5 & 1 \\ -2 & 0 & 1 \end{vmatrix} = k\, V_c\, (5\,\mathbf{a^*} + 5\,\mathbf{b^*} + 10\,\mathbf{c^*})$$

D'on (hkl) = (112)

A.12. Demostreu que les cares (111), $(23\bar{3})$ i $(12\bar{4})$ pertanyen a la mateixa zona. Trobeu el símbol d'aquesta zona i calculeu l'angle entre aquesta i la filera reticular [100] en un sistema on $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$.

a) Si pertanyen a la mateixa zona, el determinant de les seves components serà nul:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & -3 \\ 1 & 2 & -4 \end{vmatrix} = V_c^* (-12 - 3 + 4 - 3 + 8 + 6) = 0$$

b) Fent el producte vectorial de dos dels vectors de la xarxa recíproca normal a les cares trobarem el vector perpendicular a aquests dos vectors, que serà paral·lel als plans, i per tant paral·lel a l'eix de zona.

$$(111) \times (2\ 3\ \bar{3}) = k\ V_c^* \begin{vmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & -3 \end{vmatrix} = k\ V_c^* \left[-6\ \mathbf{a} + 5\ \mathbf{b} + \mathbf{c}\right]$$

D'on $[uvw] = [\bar{6}\ \ 5\ 1\ ]$

c) Per trobar l'angle entre l'eix de zona i la direcció [100], utilitzarem el producte escalar:

$[\bar{6}\ \ 5\ 1] \cdot\ \ [1\ 0\ 0] = (-6\ \mathbf{a} + 5\ \mathbf{b} + \mathbf{c}) \cdot\ \ \mathbf{a} = -6\ a^2\ = |[\bar{6}\ \ 5\ 1]|\ |[1\ 0\ 0]|\cos\delta$

$|[1\ 0\ 0]|\ = a$ $\qquad$ $|[\bar{6}\ \ 5\ 1]| = [36 + 25 + 1]^{1/2}\ a$ $\qquad$ $\cos\delta = -6/62^{1/2}$

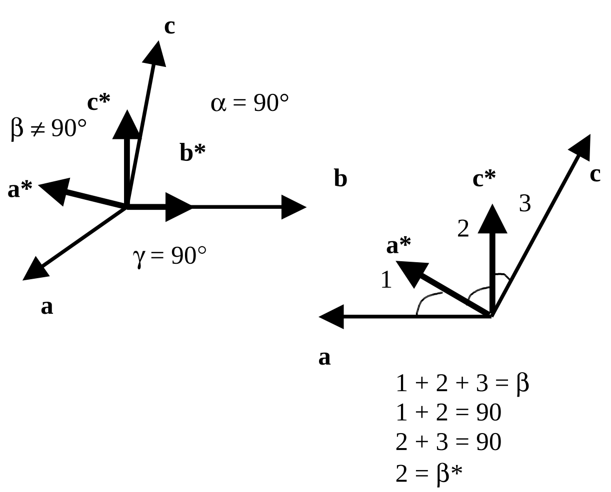
$\delta = 139.64°$

A.13.Una xarxa cristal·lina té $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma\ = 90°$, $\beta > 90°$ (sistema monoclínic). Deduïu els paràmetres de la xarxa recíproca en funció dels valors dels paràmetres de la xarxa directa. Trobeu l'expressió de l'espaiat reticular.

Determinació dels paràmetres de la xarxa recíproca

Mètode 1:

Es dibuixa primer la cel·la. Es situen en el dibuix **a***, **b*** i **c*** que són, respectivament, perpendiculars a (**b**, **c**); (**a** , **c**) i (**a** , **b**) segons la seva definició.



Com que **b** és paral·lel a **b***, **a*** i **c*** estan en el pla definit per **a** i **c.** Deduïm que $\alpha^* = 90°$ i $\gamma^* = 90°$. De la projecció sobre el pla definit per **a** i **c**, es dedueix que $\beta = 1 + 2 + 3 =\ 90 + 3 = 90 + (90 - 2) = 180 - \beta^*$. Per tant $\beta^* = 180 - \beta$, (en aquest cas β i β^*són angles suplementaris).

Per deduir el valor dels paràmetres de la xarxa recíproca

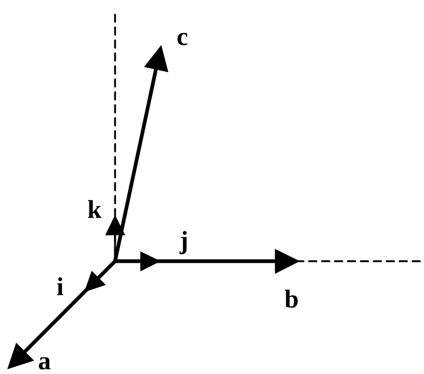
$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a^*} = 1 = a \cdot a^* \cos 1 = a \cdot a^* \cos(\beta - 90) = a \cdot a^* \sin\beta \qquad a^* = 1/(a \sin\beta)$$

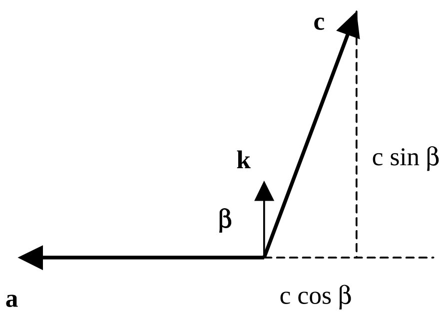
$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{b^*} = 1 = b \cdot b^* \cos 0° = b \cdot b^* \qquad b^* = 1/b$$

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{c^*} = 1 = c \cdot c^* \cos 3 = c \cdot c^* \cos(\beta - 90) = c \cdot c^* \sin\beta \qquad c^* = 1/(c \sin\beta)$$

Mètode 2:

Es posen els vectors **a**, **b** i **c** en funció de tres vectors **i**, **j** i **k** de mòdul 1 i perpendiculars entre ells.





El vector **a** es pot posar paral·lel a **i.** Com que **b** fa un angle de 90° amb **a** ($\gamma = 90°$) la seva direcció pot coincidir amb la de **j**. Com que **c** fa amb **b** un angle de 90° ($\alpha = 90°$) estarà en el pla definit per **i** i **k**, mentre que fa un angle diferent a 90° amb **a**. D'on:

$$\mathbf{a} = a\,\mathbf{i}$$

$$\mathbf{b} = b\,\mathbf{j}$$

$$\mathbf{c} = c \cos\beta\,\mathbf{i} + c \sin\beta\,\mathbf{k}$$

De la definició dels vectors de la xarxa recíproca:

$$\mathbf{a^*} = (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) / V_c \qquad \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ 0 & b & 0 \\ c\cos\beta & 0 & c\sin\beta \end{vmatrix} = b\,c \sin\beta\,\mathbf{i} - b\,c\cos\beta\,\mathbf{k}$$

$$V_c = \mathbf{a}\,(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = a\,\mathbf{i}\,(b\,c\sin\beta\,\mathbf{i} - b\,c\cos\beta\,\mathbf{k}) = a\,b\,c\sin\beta$$

Per tant $\mathbf{a^*} = (b \cdot c\sin\beta\,\mathbf{i} - bc\cos\beta\,\mathbf{k}) / abc\sin\beta \qquad \mathbf{a^*} = (1/a)\,\mathbf{i} - (1/a)(\cos\beta / \sin\beta) \cdot \mathbf{k}$

$$a^* = [\mathbf{a^*}\,\mathbf{a^*}]^{1/2} = [\,1/a^2 + \cos^2\beta/(a^2\sin^2\beta)]^{1/2} = [\,(\sin^2\beta + \cos^2\beta)/(a^2\sin^2\beta)]^{1/2} = 1/(a\sin\beta)$$

$$\mathbf{b^*} = (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) / V_c \qquad \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ c\cos\beta & 0 & c\sin\beta \\ a & 0 & 0 \end{vmatrix} = a\,c\sin\beta\,\mathbf{j}$$

$\mathbf{b^*} = \mathbf{j} / b$ $\qquad$ $b^* = 1 / b$

$\mathbf{c^*} = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) / V_c$ $\qquad$ $\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \end{vmatrix} = a\, b\, \mathbf{k}$

$\mathbf{c^*} = \mathbf{k} / (c \sin \beta)$ $\qquad$ $c^* = 1 / (c \sin \beta)$

Per trobar els angles:

α^* és l'angle que fan **b*** i **c***, per tant $\mathbf{b^*} \cdot \mathbf{c^*} = b^* c^* \cos \alpha^* = [\,\mathbf{j} / b\,] \cdot [\,\mathbf{k} / (c \sin \beta)\,] = 0$, d'on $\alpha^* = 90°$.

β^* és l'angle entre **a*** i **c***, $\mathbf{a^*} \cdot \mathbf{c^*} = a^* c^* \cos \beta^* = [\mathbf{i} / a - \cos \beta\, \mathbf{k} / (a \sin \beta)\,] \cdot [\mathbf{k} / (c \sin \beta)\,] =$

$= - \cos \beta / (a\, c \sin^2 \beta)$; $\cos \beta^* = - \cos \beta$; $\beta^* = 180 - \beta$.

γ^* és l'angle entre **a*** i **b*; a*** $\cdot$ **b*** $= a^* b^* \cos \gamma^* = [\mathbf{i} / a - \cos \beta\, \mathbf{k} / (a \sin \beta)\,] \cdot [\mathbf{j} / b] = 0$ i

$\gamma^* = 90°$.

Determinació de l'espaiat reticular

$d_{hkl} = 1 / |(hkl)|$

$|(hkl)| = [\,(hkl) . (hkl)\,]^{1/2} = [\,h^2\, \mathbf{a^*} \cdot \mathbf{a^*} + k^2\, \mathbf{b^*} \cdot \mathbf{b^*} + l^2\, \mathbf{c^*} \cdot \mathbf{c^*} + 2\, h\, k\, \mathbf{a^*} \cdot \mathbf{b^*} + 2\, h\, l\, \mathbf{a^*} \cdot \mathbf{c^*}$

$+ 2\, k\, l\, \mathbf{b^*} \cdot \mathbf{c^*}\,]^{1/2}$

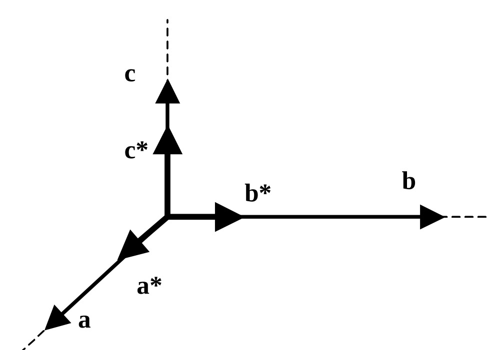
$= [\,h^2/(a \sin \beta)^2 + k^2 / b^2 + l^2 / (\,c \sin \beta)^2 + 2\, h\, l \cos \beta^* / (a\, c \sin^2 \beta)\,]^{1/2} =$

$= [\,h^2/(a \sin \beta)^2 + k^2 / b^2 + l^2 / (\,c \sin \beta)^2 - 2\, h\, l \cos \beta / (a\, c \sin^2 \beta)\,]^{1/2}$

$d_{hkl} = 1 / \, [\,h^2/(a \sin \beta)^2 + k^2 / b^2 + l^2 / (\,c \sin \beta)^2 - 2\, h\, l \cos \beta / (a\, c \sin^2 \beta)\,]^{1/2}$

A.14. Un cristall té a = 8Å, b = 6Å, c = 4 Å i α = β = γ = 90°, calculeu l'espaiat reticular del pla (321).

Es dibuixa primer la cel·la. Es situen en el dibuix **a***, **b*** i **c*** que són, respectivament, perpendiculars a (**b**, **c**); (**a** , **c**) i (**a** , **b**) segons la seva definició.



S'observa que **a*** és paral·lel a **a**, **b*** a **b** i **c*** a **c**. Al calcular **a*** · **a** = 1 = a* a cos 0 = a* a. D'on a* = 1/a.
De la mateixa forma es dedueix que b* = 1/ b, i c* = 1/c.
$d_{hkl} = 1 / [h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2]^{1/2}$ i $d_{321} = 1 / [3^2/8^2 + 2^2/6^2 + 1^2/4^2]^{1/2} = 1.784$ Å

Mètode 2:

Al ser un sistema ortogonal es pot prendre **a** = a **i**, **b =** b **j,** i **c** = c **k**.

b x **c** = b c **i** V_c = **a** · (**b** x **c**) = (a **i**) · (b c **i**) = a b c **a*** = **i** / a

c x **a** = a c **j** **b*** = **j** / b **a** x **b** = a b **k** **c* = k** / c

A partir d'aquí es segueix com en el mètode 1.

A.15.En un cristall ròmbic amb relació paramètrica: a:b:c = 0.813:1:1.903 (a/b = 0.813 i c/b = 1.903) hi ha un pla (hkl) orientat de forma que l'angle entre (001) i (hkl) és de 55.5° i entre (010) i (hkl) és de 77.55°. Determineu els índexs de Miller d'aquest pla.

Nota prèvia a la resolució del problema. Per resoldre aquest problema hem d'utilitzar l'anomenat teorema de Pitàgoras trigonomètric en l'espai tridimensional. Aquest teorema diu que la suma dels quadrats dels cosinus directors d'un vector en un sistema de referència ortogonal és igual a 1.

Si considerem un sistema de referència ortogonal i definit per uns vectors unitaris **i**, **j** i **k**, les components d'un vector **A** = A_x **i** + A_y **j** + A_z **k** són:

$\mathbf{A} \cdot \mathbf{i} = A_x = |\mathbf{A}|\,|\mathbf{i}| \cos \alpha_1 = A\ 1 \cos \alpha_1$

$\mathbf{A} \cdot \mathbf{j} = A_y = |\mathbf{A}|\,|\mathbf{j}| \cos \alpha_2 = A\ 1 \cos \alpha_2$

$\mathbf{A} \cdot \mathbf{k} = A_z = |\mathbf{A}|\,|\mathbf{k}| \cos \alpha_3 = A\ 1 \cos \alpha_3$

On cos α_1, cos α_2 i cos α_3 són els cosinus directors del vector **A**. Si calculem el mòdul del vector **A**

$A = [A_x^2 + A_y^2 + A_z^2]^{1/2} = [A^2 \cos^2 \alpha_1 + A^2 \cos^2 \alpha_2 + A^2 \cos^2 \alpha_3]^{1/2}$

Per tant $A^2 = A^2 [\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 + \cos^2 \alpha_3]$

i $\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 + \cos^2 \alpha_3 = 1$

Resolució:

(hkl) · (001) = (h **a*** + k **b*** + l **c***) · (**c***) = l c^{*2} = |(hkl) | |(001) | cos 55.5 = |(hkl) | c* cos 55.5;

$l = c^{*-1}$ |(hkl)| cos 55.5 = c |(hkl)| cos 55.5

Al tractar-se d’un cristall ròmbic $a^* = 1/a$; $b^* = 1/b$ i $c^* = 1/c$

$$(hkl) \cdot (010) = (h\,\mathbf{a^*} + k\,\mathbf{b^*} + l\,\mathbf{c^*}) \cdot (\mathbf{b^*}) = k\,b^{*2} = |(hkl)|\,|(010)| \cos 77.55 =$$

$$= |(hkl)|\, b^* \cos 77.55;$$

$$k = b^{*-1} |(hkl)| \cos 77.55 = b\,|(hkl)| \cos 77.55$$

El cosinus de l'angle que farà el vector (hkl) amb (100) serà: $\cos^2 \delta + \cos^2 77.55 + \cos^2 55.5 = 1$

$$\cos \delta = 0.795$$

D'on $(hkl) \cdot (100) = (h\,\mathbf{a^*} + k\,\mathbf{b^*} + l\,\mathbf{c^*}) \cdot (\mathbf{a^*}) = h\,a^{*2} = |(hkl)|\,|(100)|\, 0.795 = |(hkl)|\, a^*\, 0.795$

$$h = a^{*-1} |(hkl)|\, 0.795 = a\,|(hkl)|\, 0.795$$

Dividint la primera equació per la segona i la tercera per la segona es dedueix que

$$l/k = (c/b) \cos 55.5/\cos 77.55 = 1.903 \cdot 2.627 = 5$$

$$h/k = (a/b)\, 0.795/\cos 77.55 = 0.813 \cdot 3.688 = 3$$

Per tant (hkl) = (315). No es pot prendre, per exemple k = 2 perquè s'obtindria (6 2 10) i els índexs no serien nombres primers entre ells.

A.16.Trobeu la relació paramètrica (a:b:c) i l'angle β en un cristall monoclínic $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90°$ i $\beta > 90°$, sabent que l'angle que formen les cares (110) i $(1\bar{1}0)$ és de 68.5°; (001) i $(1\bar{1}0)$ 82.33° i (001) i $(\bar{1}01)$ 33.2°

$$(1\,1\,0) \cdot (1\,\bar{1}\,0) = (\mathbf{a^*} + \mathbf{b^*}) \cdot (\mathbf{a^*} - \mathbf{b^*}) = a^{*2} - b^{*2} = |\mathbf{a^*} + \mathbf{b^*}|\,|\mathbf{a^*} - \mathbf{b^*}| \cos 68.5 = (a^{*2} + b^{*2}) \cos 68.5$$

$$(0\,0\,1) \cdot (1\,\bar{1}\,0) = a^*\, c^* \cos \beta^* = c^* (a^{*2} + b^{*2})^{1/2} \cos 82.33$$

$$(0\,0\,1) \cdot (\bar{1}\,0\,1) = -\,a^*\, c^* \cos \beta^* + c^{*2} = c^* (a^{*2} - 2\,a^*\, c^* \cos \beta^* + c^{*2})^{1/2} \cos 33.2$$

De la primera equació $0.633\, a^{*2} = 1.367\, b^{*2}$ $\quad a^* = 1.47\, b^*$

De la segona equació $\cos \beta^* = (1 + 0.463)^{1/2}\, 0.133$ $\quad \beta^* = 80.71°$ $\quad \beta = 99.29°$

Recordem que en el sistema monoclínic: $\beta^* = 180 - \beta$; $\alpha^* = \gamma^* = 90°$ i $a^* = 1/(a \sin \beta)$; $b^* = 1/b$ i $c^* =$
$= 1/(c \sin \beta)$

L'equació $a^* = 1.47\, b^*$ es pot escriure $1/(a \sin 99.29) = 1.47/b$ i $a/b = 0.6893$

De la tercera equació $0.0261\, a^{*2} - 0.3232\, a^*\, c^* + c^{*2} = 0.7\, (a^{*2} - 0.3232\, a^*\, c^* + c^{*2})$

$$0 = 0.6745\, a^{*2} + 0.0968\, a^*\, c^* - 0.2994\, c^{*2}$$

Dividint l'equació per c*, s'obté una equació de segon grau en a*/c*

$$0 = 0.6745\ (a^*/c^*)^2 + 0.0968\ (a^*/c^*) - 0.2994$$

Aquesta equació sols té una solució positiva,

a* / c* = 0.5983,

d'on c/a = 0.5983 i c/b = (c/a) (a/b) = 0.4124

A.17.La baddeleyita (ZrO_2) cristal·litza en el sistema monoclínic, a = 5.15, b = 5.20 i c = 5.31 Å, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta = 99.19$
Trobeu:
a) La distància entre els àtoms Zr1-O1 i Zr1-O2, si les coordenades dels àtoms són: per al Zr1 és (0.2742, 0.0389, 0.2095); per al O1 és (0.0628, 0.3279,0.3471) i per al O2 és (0.0628, 0.1721, -0.1529).
b) L'angle O1-Zr1-O2.
c) L'espaiat reticular dels plans (110) i (121).
d) L'equació del pla definit per als àtoms Zr1, O1 i O2.
e) L'angle que fa aquest pla amb els eixos cristal·logràfics.
f) El volum de la cel·la.

a)
d (Zr1-O1) = |[(0.0628, 0.3279, 0.3471) - (0.2742, 0.0389, 0.2095)]| = |(-0.2114,0.2890, 0.1376)| =

$$= [0.2114^2\, a^2 + 0.2890^2\, b^2 + 0.1376^2\, c^2 - 2 \cdot 0.2114 \cdot 0.1376\ a\ c \cos 99.19]^{1/2} = 2.057\ \text{Å}$$

d (Zr1-O2) = |[(0.0628, 0.1721,-0.1529) - (0.2742, 0.0389, 0.2095)]| = |(-0.2114,0.1332, -0.3624)| =

$$= [0.2114^2\, a^2 + 0.1332^2\, b^2 + 0.3624^2\, c^2 + 2 \cdot 0.2114 \cdot 0.3624\ a\ c \cos 99.19]^{1/2} = 2.168\ \text{Å}$$

b) δ(O1-Zr1-O2):

(-0.2114,0.2890, 0.1376) (-0.2114,0.1332, -0.3624) =

= |(-0.2114,0.2890, 0.1376)| |(-0.2114,0.1332,-0.3624)| cos δ =

= (-0.2114 **a** + 0.2890 **b** + 0.1376**c**) (-0.2114 **a** + 0.1332 **b** - 0.3624**c**) =

$$= 0.2114\, a^2 + 0.2890 \cdot 0.1332\, b^2 - 0.1376 \cdot 0.3624\, c^2 + (0.2114 \cdot 0.3624 - 0.2114 \cdot 0.1376)\ a\ c$$

$\cos 99.19 = 1.617 \cdot 2.145 \cos \delta = 0.6126$ $\cos \delta = 0.1766$ $\delta = 82.11°$

c) Segons s'ha vist en un problema precedent, en el sistema monoclínic

$$d_{hkl} = [h^2/(a \sin \beta)^2 + k^2/b^2 + l^2/(c \sin \beta)^2 - 2\ h\ l \cos \beta/(a\ c \sin^2 \beta)]^{-1/2}$$

d_{110} = 1/|(110)| = $[1/(a^2 \sin^2 99.19) + 1/b^2]^{-1/2}$ = 3.635 Å

d_{121} = 1/|(121)| = $[1/(a^2 \sin^2 99.19) + 4/b^2 + 1/(c^2 \sin^2 99.19) - 2 \cos 99.19/(a\, c \sin^2 99.19)]^{-1/2}$ = 2.06 Å

d) El pla definit pels àtoms Zr1, O1 i O2 s'indica per un vector perpendicular a aquest pla. Dos vectors del pla són Zr1O1 i Zr1O2. Per tant

$$[-0.2114, 0.2890, 0.1376] \times [-0.2114, 0.1332, -0.3624] = V_c \begin{vmatrix} \mathbf{a^*} & \mathbf{b^*} & \mathbf{c^*} \\ -0.2114 & 0.2890 & 0.1376 \\ -0.2114 & 0.1332 & -0.3624 \end{vmatrix} =$$

$= V_c\,(-0.123\, \mathbf{a^*} - 0.106\, \mathbf{b^*} + 0.329\, \mathbf{c^*})$

D'on el pla s'indica pel vector de la xarxa recíproca $-0.123\, \mathbf{a^*} - 0.106\, \mathbf{b^*} + 0.329\, \mathbf{c^*}$

e) Els angles que forma aquest pla amb els eixos cristal·logràfics seran

$(-0.123\, \mathbf{a^*} - 0.106\, \mathbf{b^*} + 0.329\, \mathbf{c^*}) \cdot [100] = -0.123 = 0.067\ 5.15 \cos \alpha_1 \quad \alpha_1 = 110.9$
$(-0.123\, \mathbf{a^*} - 0.106\, \mathbf{b^*} + 0.329\, \mathbf{c^*}) \cdot [010] = -0.106 = 0.067\ 5.20 \cos \alpha_2 \quad \alpha_2 = 107.7$
$(-0.123\, \mathbf{a^*} - 0.106\, \mathbf{b^*} + 0.329\, \mathbf{c^*}) \cdot [001] = 0.329 = 0.067\ 5.31 \cos \alpha_3 \quad \alpha_3 = 22.4$

f) En el problema que abans s'ha comentat també es va calcular el volum de la cel·la monoclínica
$V_c = a\, b\, c \sin \beta = a\, b\, c \sin 99.19 = 140.4$ Å^3

A.18. En un cristall amb $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$, $c/a = 1.577$, un pla (hkl) pertany a la mateixa zona que el (201) i ($2\bar{1}0$) i fa amb aquest darrer pla un angle de 15.25°. Trobeu els índexs h, k i l.

Si el pla (hkl) pertany a la mateixa zona que el (2 0 1) i ($2\ \bar{1}\ 0$) indica que el vector (hkl) és co-planar amb els altres dos, per tant serà combinació lineal d'ells

$(h\ k\ l) = m\ (2\ 0\ 1) + n\ (2\ \bar{1}\ 0)$;
$h = 2m + 2n$
$k = -n$
$l = m$

D'on $h = 2l - 2k$

D'altra banda $(h\ k\ l) \cdot (2\ \bar{1}\ 0) = 2h\, a^{*2} - k\, a^{*2} = (h^2 a^{*2} + k^2 a^{*2} + l^2 c^{*2})^{1/2} (5)^{1/2}\, a^* \cos 15.25$

$(4l - 5k)\, a^{*2} = [(4l^2 + 5k^2 - 8lk)\, a^{*2} + l^2 c^{*2}]^{1/2} [5]^{1/2}\, a^* \cos 15.25$

$16 l^2 + 25 k^2 - 40 lk = [(4 l^2 + 5 k^2 - 8 lk) + l^2 (a/c)^2]\ 5 \cos^2 15.25$

$16 l^2 + 25 k^2 - 40 lk = [(4 l^2 + 5 k^2 - 8 lk) + l^2\ 0.4021]\ 4.65$

$$-4.4779\, l^2 + 1.7296\, k^2 - 2.7674\, lk = 0$$

Ho dividim per k^2 i obtenim una equació de segon grau en (l^2/k^2):

$$-4.4779\left(\frac{l}{k}\right)^2 - 2.7674\left(\frac{l}{k}\right) + 1.7296 = 0$$

d'on $\frac{l}{k} = -1.0031$; $\frac{l}{k} = -0.3851$

Rebutgem la segona solució, ja que l i k han de ser sencers i petits. Fem $\frac{l}{k} = -1$, d'on l = -k.
Com que h = 2l – 2k, resulta h = 4l.

El pla ($4\,\bar{1}\,1$) és el pla d'índex de Miller més petit que compleix les condicions.

A.19. Trobeu l'angle que formen la fila reticular [111] i el pla (111) pels següents casos:
a) cel·la a = b = c; $\alpha = \beta = \gamma = 90°$.
b) a = b = 10.3, c = 7.6; $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$.

a) Per ser $\alpha = \beta = \gamma = 90°$ i $a^* = 1/a$

$$\cos\varphi = 3/ [(a^2 + b^2 + c^2)^{1/2} (a^{*2} + b^{*2} + c^{*2})^{1/2}] = 3 / [(a\, 3^{1/2}) \cdot (3^{1/2} /a)] = 1; \varphi = 0°$$

b) $\cos\varphi = 3/ [(a^2 + b^2 + 2\, a\, b \cos 120 + c^2)^{1/2} (a^{*2} + b^{*2} + 2\, a^*\, b^* \cos 60 + c^{*2})^{1/2}] =$

$3 / [(a^2 + c^2)^{1/2} (4/a^2 + 1/c^2)^{1/2}]$ $\qquad \varphi = 2.3°$

C.1. Trobeu els índexs de Miller de les arestes determinades pels següents conjunts de cares:
a) (121) i (010);
b) (232) i (111);
c) (123) i (322);
d) (001) i (331);
e) (100) i (221)

Respostes:

a) $[\bar{1}01]$;
b) $[10\bar{1}]$;
c) $[2\bar{7}4]$;
d) $[\bar{1}10]$
e) $[0\bar{1}2]$

C.2. Un cristall té a = 8 Å, b = 6 Å, c = 4 Å i $\alpha = \beta = \gamma = 90°$, calculeu l'espaiat reticular del pla (321).

Resposta:

1.7838 Å

C.3. Trobeu l'expressió de l'espaiat reticular dels plans (100) i (312) en els sistemes següents:
a) $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta > 90°$
b) $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$
c) $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

Respostes:

a) $d_{100} = a \sin \beta$; $d_{312} = [9/(a^2 \sin^2 \beta) + 1/b^2 + 4/(c^2 \sin^2 \beta) - 12 \cos \beta/(a\,c \sin^2 \beta)]^{-1/2}$
b) $d_{100} = a$; $d_{312} = (9/a^2 + 1/b^2 + 4/c^2)^{-1/2}$
c) $d_{100} = a$; $d_{312} = a/\sqrt{14}$

C.4. En un cristall tetragonal ($a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$) l'angle entre les normals a les cares ($\bar{h}k0$) i ($hk0$) és de 53.17°. Calculeu h i k.

Resposta:

(210)

C.5. Un pla reticular conté els nusos (1,1,0) (2,2,2) i (1,4,1). Determineu:
a) els seus índex de Miller;
b) l'angle que forma aquest pla amb el vector **c** *si el cristall pertany al sistema monoclínic i els paràmetres cristal·lins són: a = 3.5 Å b = 4.9 Å c = 5.6 Å i β = 105.3°.*

Respostes:

a) $(51\bar{3})$
b) 111.64°

C.6. Determineu el volum del paral·lelepípede definit pels vectors [110], [031] i [111] en:
a) una xarxa cúbica amb paràmetre a = 5.6 Å
b) una xarxa amb paràmetres a = 4.3 Å, b = 5.1 Å, c = 4.3 Å i β = 116°

Respostes:

a) 526.8 $Å^3$
b) 254.3 $Å^3$

C.7.Trobeu l'angle entre [011] i (011) en un cristall amb:
a) a = b = c, α = β = γ = 90°
b) a = b = 5.67 Å, c = 12.70 Å, α = β = γ = 90°

Respostes:

a) 0°
b) 41.8°

C.8. Calculeu l'angle entre [001] i [113] en un cristall de beril·li amb a = b = 2.28 Å, c = 3.57Å, α = β = 90°, γ = 120°. Quina cara pertany a la vegada a les zones [113] i $[\bar{2}13]$*?*

Respostes:

a) 12.02°
b) $(03\bar{1})$

C.9. Calculeu l'angle entre [111] i (131) en un cristall tetragonal amb paràmetres $a = b = 5.67$ Å, $c = 12.70$ Å i $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. Determineu si els plans reticulars (111) i (121) formen una zona comuna amb el pla (131). En cas afirmatiu doneu els índexs d'aquesta zona.

Respostes:

a) 53.5°
b) $[10\bar{1}]$

C.10. Un cristall de paràmetres de cel·la $a = 4.73$ Å, $b = 7.86$ Å, $c = 11.22$ Å i $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. Calculeu l'angle que formen les normals als plans $(\bar{2}11)$ i (021), l'angle entre les fileres [111] i $[\bar{1}11]$ i l'angle que forma la direcció [110] i la normal al pla (110).

Respostes:

a) 70.6°
b) 38.1°; 28°

C.11. Trobeu les arestes comunes a les següents parelles de cares:
a) (212) i (120)
b) (311) i (201)
c) (210) i $(32\bar{2})$

Respostes:

a) $[\bar{4}23]$
b) $[\bar{1}12]$
c) $[\bar{2}41]$

C.12. Trobeu els plans reticulars que contenen les següents parelles de fileres reticulars:
a) [100] i [110]
b) [212] i [312]

Respostes:

a) (001)
b) $(02\bar{1})$

C.13. Pertanyen a la mateixa zona els següents trios de cares?.
a) $(12\bar{1})$, $(21\bar{2})$ *i* $(\bar{1}11)$
b) (131), (111) i (101)
c) (232), (001) i (112)
d) (001), $(2\bar{1}2)$ *i* $(\bar{2}11)$
En el cas afirmatiu determineu els índexs de la zona.

Respostes:

a) $[\bar{1}0\bar{1}]$
b) $[10\bar{1}]$
c) No
d) [120]

C.14. La cara (112) pertany a la zona $[\bar{2}\ 0\ 1]$*?*

Resposta: Sí

C.15. Trobeu els índexs de l'eix de zona determinat per les següents parelles de cares:
a) (342) i (210)
b) (010) i (221)
c) (543) i (230)
d) (001) i (010)
e) (321) i (111)

Respostes:

a) $[2\bar{4}5]$
b) $[\bar{1}02]$
c) $[\bar{9}67]$
d) [100]
e) $[1\bar{2}1]$

C.16. Determineu l'expressió general de l'espaiat reticular d'una xarxa tetragonal ($a = b \neq c$ *i* $\alpha = \beta = \gamma = 90°$) *en funció dels paràmetres de la xarxa directa.*

Resposta:

$d_{hkl} = [(h^2 + k^2)/a^2 + l^2/c^2]^{-1/2}$

C.17. Definida una xarxa cristal·lina amb $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$, (sistema cúbic), deduïu els paràmetres de la xarxa recíproca en funció dels valors dels paràmetres de la xarxa directa. Trobeu l'expressió de l'espaiat reticular.

Respostes:

$a^* = b^* = c^* = 1/a$; $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$
$d_{hkl} = a/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$

C.18. Determineu si els plans reticulars (001), (110) i ($1\bar{1}1$) són paral·lels a una mateixa direcció. Trobeu les fileres reticulars intersecció d'aquest plans. Calculeu l'angle que forma el pla (001) amb el pla (110) i amb el pla ($1\bar{1}1$) en el cas d'un cristall tetragonal amb $a = b = 5$ Å, $c = 10$ Å i $\alpha = \beta = \gamma = 90°$.

Respostes:

No
[$1\bar{1}0$]; [110] i [$\bar{1}12$]
90 i 70.5°

C.19. El diamant cristal·litza en el sistema cúbic ($a = b = c$ i $\alpha = \beta = \gamma = 90°$). Les coordenades d'àtoms són: C1 (0,0,0); C2 (1/4,1/4,1/4) i C3 (1/2,0,1/2). Calculeu:
a) en funció dels paràmetres de cel·la les distàncies C1-C2 i C2-C3,
b) l'angle C1-C2-C3,
c) l'espaiat del pla (211),
d) l'angle entre la direcció [$11\bar{1}$] i la normal al pla (211).

Respostes:

a) $a\sqrt{3}/4$; $a\sqrt{3}/4$
b) 109.47°
c) $a/\sqrt{6}$
d) 61.87°

*C.20. En un cristall del grup puntual $\bar{4}2m$, amb $a = 5.94$ Å i $c = 10.90$ Å, determineu l'angle que formen el pla reticular (112) amb l'eix quaternari. Determineu, també, els índexs de Miller d'una filera reticular continguda en el pla (112) i que sigui perpendicular a l'eix cristal·logràfic **c**.*

Respostes:
a) 52.38°
b) [$\bar{1}10$]