Estructura de la Materia 2

Clase 2 - Teoría

Docentes

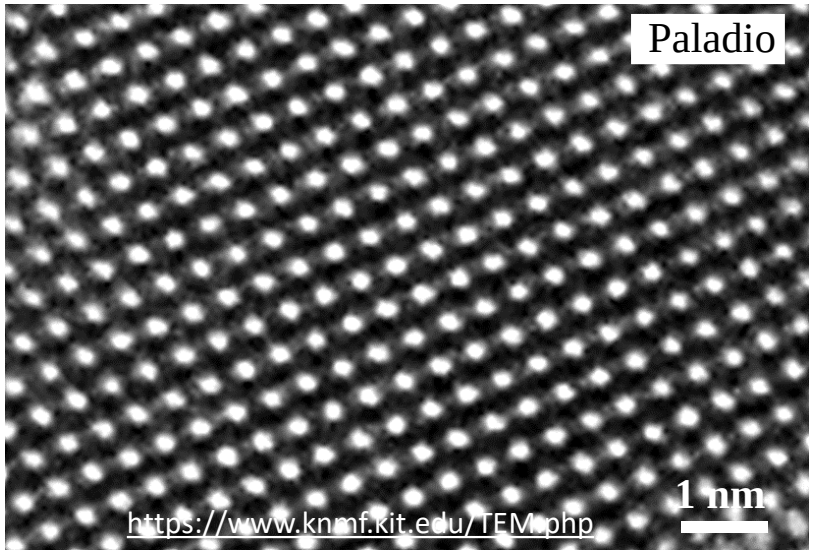
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Adán Garros

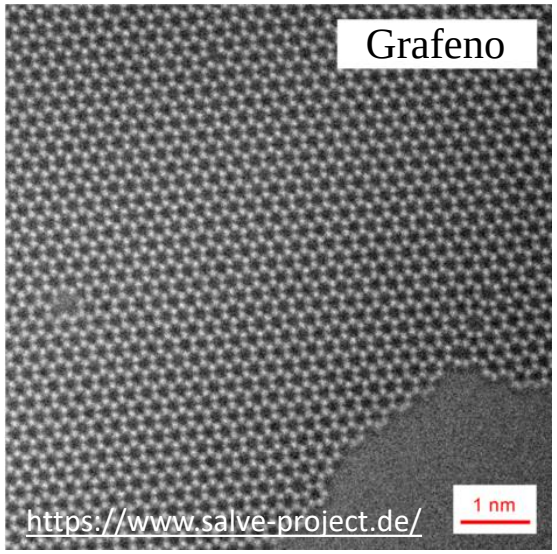
Departamento de Física, FCEN, UBA – Primer Cuatrimestre, 2025

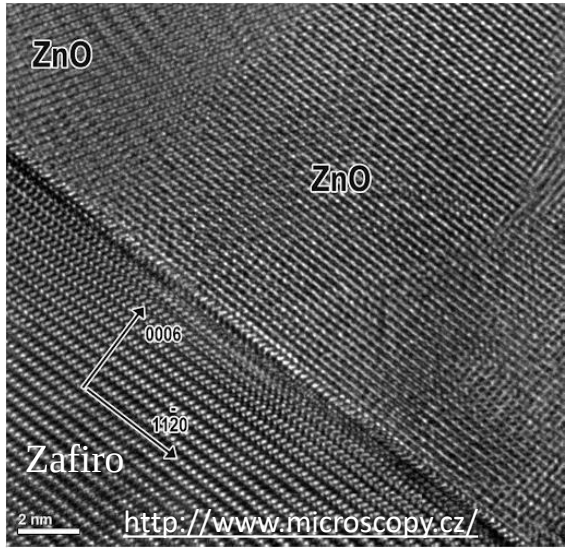
Web: https://asignaturas.df.uba.ar/edlm2-grinblat/

Repaso

Sólidos cristalinos







Red de Bravais (RB)

1) Arreglo infinito de puntos discretos que se ve exactamente igual desde cualquiera de los puntos de la red.
2) Todos los puntos $\bar{R}$ tal que $\bar{R} = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3$ $(\forall\, n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z})$

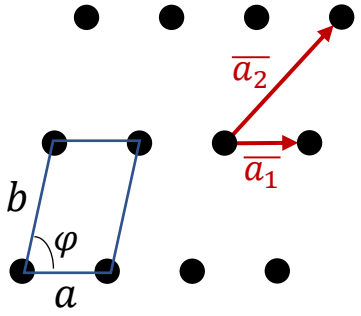
   $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3 \rightarrow$ Vectores linealmente independientes (*vectores primitivos* -VP-) que generan la red.

Número de coordinación (NC): Es el número de primeros vecinos de un punto de la red.

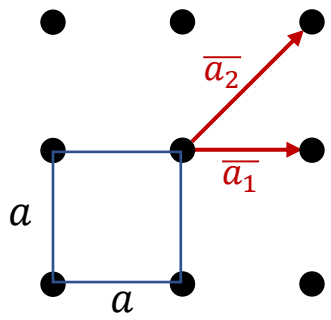
Repaso

Redes de Bravais en 2D

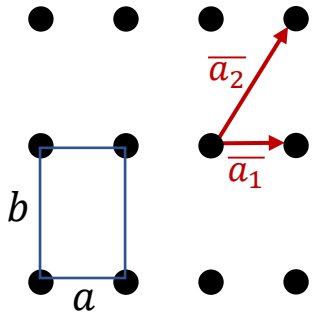
Oblicua



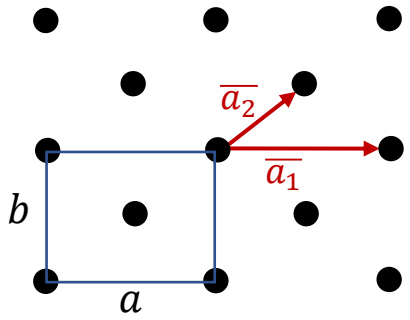
Cuadrada



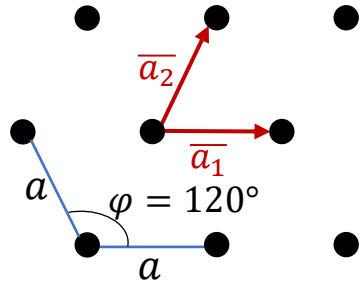
Rectangular



Rectangular centrada

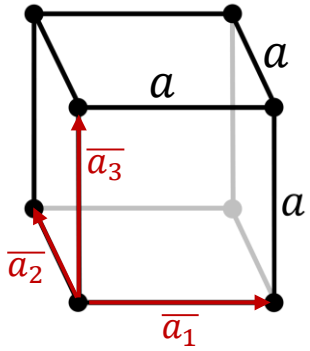


Hexagonal

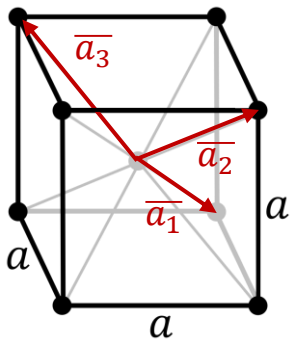


Redes de Bravais en 3D (selección)

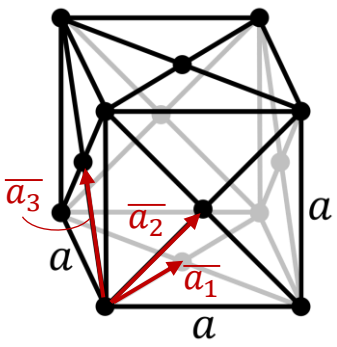
SC



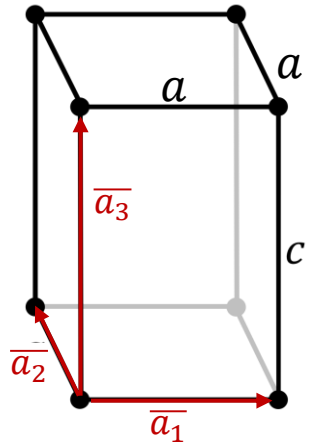
BCC



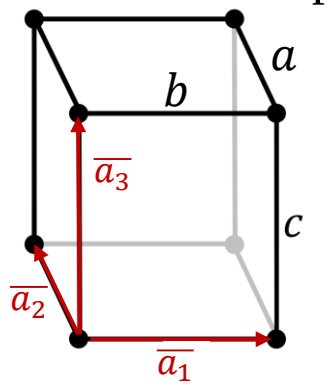
FCC



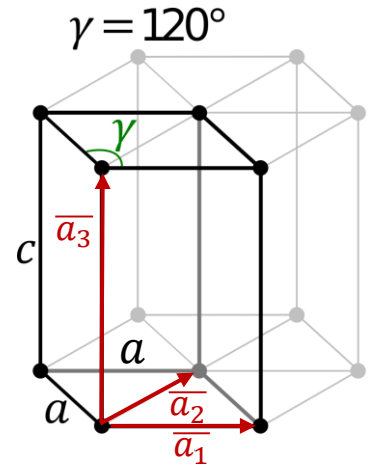
Tetragonal simple



Ortorrómbica simple



Hexagonal simple

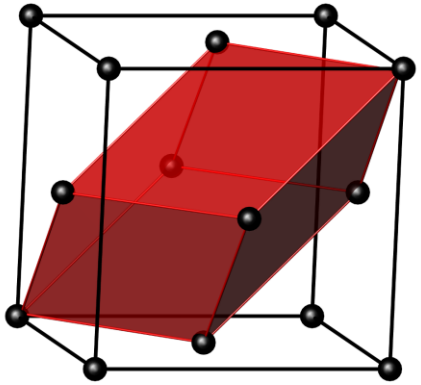


Repaso

Celda primitiva (CP)

Volumen del espacio que al ser trasladado a través de todos los vectores de la RB llena el espacio sin que haya ni superposiciones ni vacíos. Contiene exactamente un punto de la red.

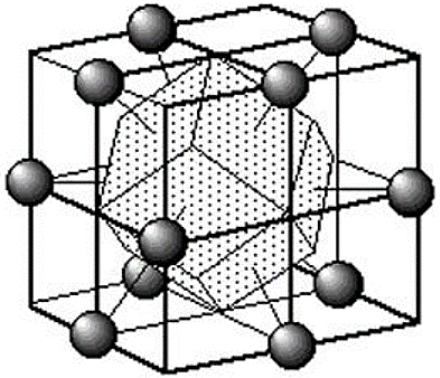
CP (FCC)



Celda de Wigner-Seitz (WZ)

Es una CP que no depende de los VP elegidos, y mantiene la simetría de la red. Para un punto dado, es la región del espacio que se encuentra más cercana a ese punto que a cualquier otro de la red.

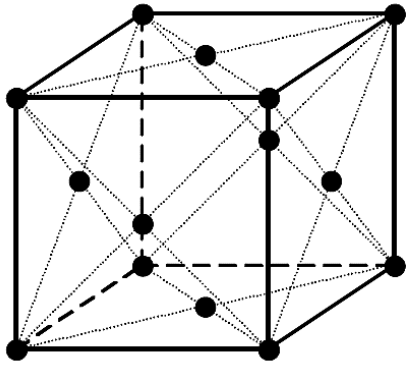
Celda WZ (FCC)



Celda unidad (CU)

Celda unidad convencional o celda unidad (CU): Volumen del espacio que al ser trasladado a través de un subconjunto de vectores de la RB llena el espacio sin que haya ni superposiciones ni vacíos.

CU cúbica (FCC)



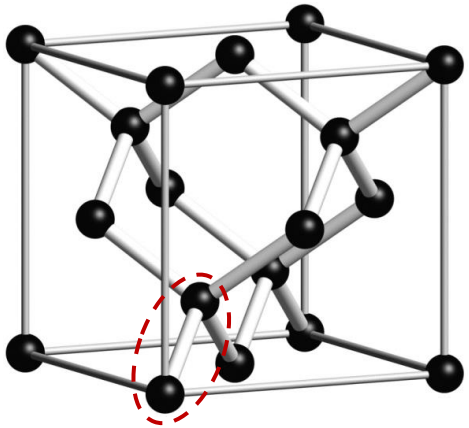
Repaso

Estructura cristalina; Red con una base

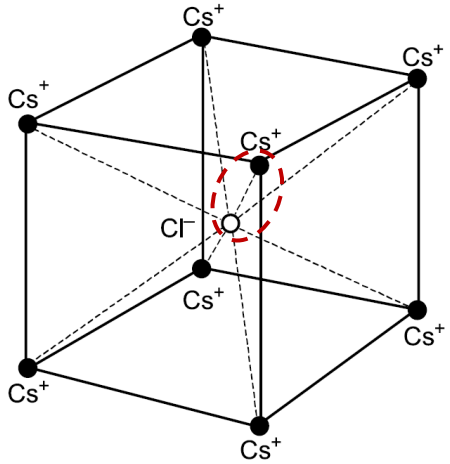
Todos los puntos $\bar{R}$ tal que $\bar{R} = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3 + \bar{d}_i, \quad \forall\, n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z},\ \{\bar{d}_i\} = \{\bar{d}_1, d_2, \ldots, \bar{d}_N\}$.

RB + base (descripción del arreglo de elementos -átomos/iones/moléculas- dentro de una CP).

Diamante

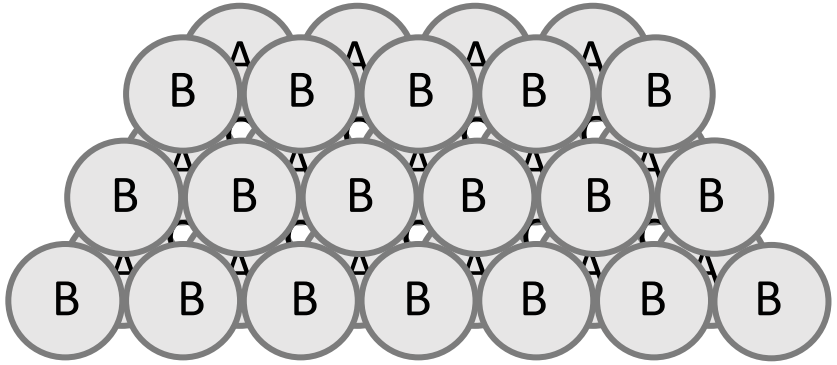


Cloruro de Cesio

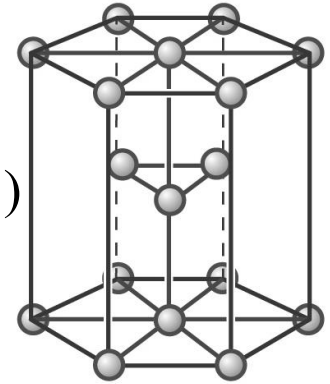


Empaquetamiento compacto

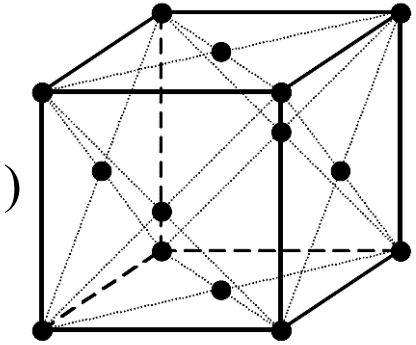
Apilamos pequeñas esferas rígidas ("átomos") que se atraen e intentan acercarse lo máximo posible.



HCP (…ABABAB…)

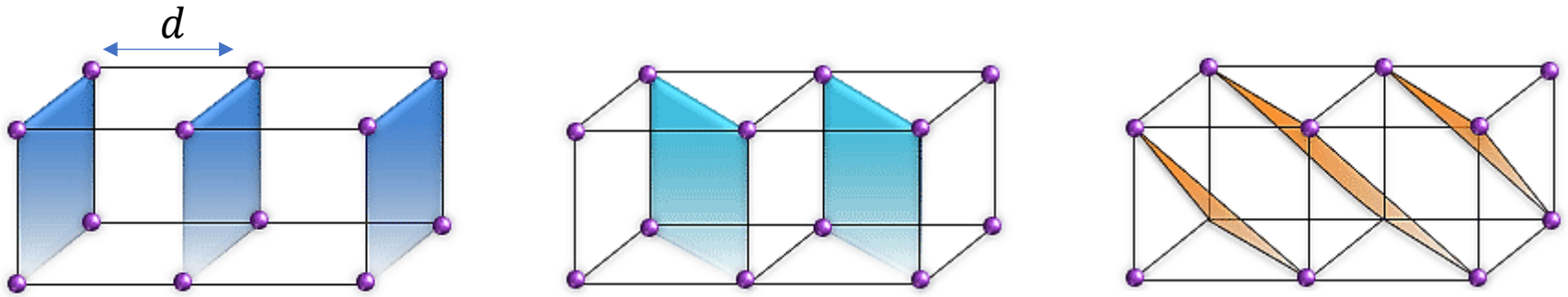


FCC (…ABCABC…)



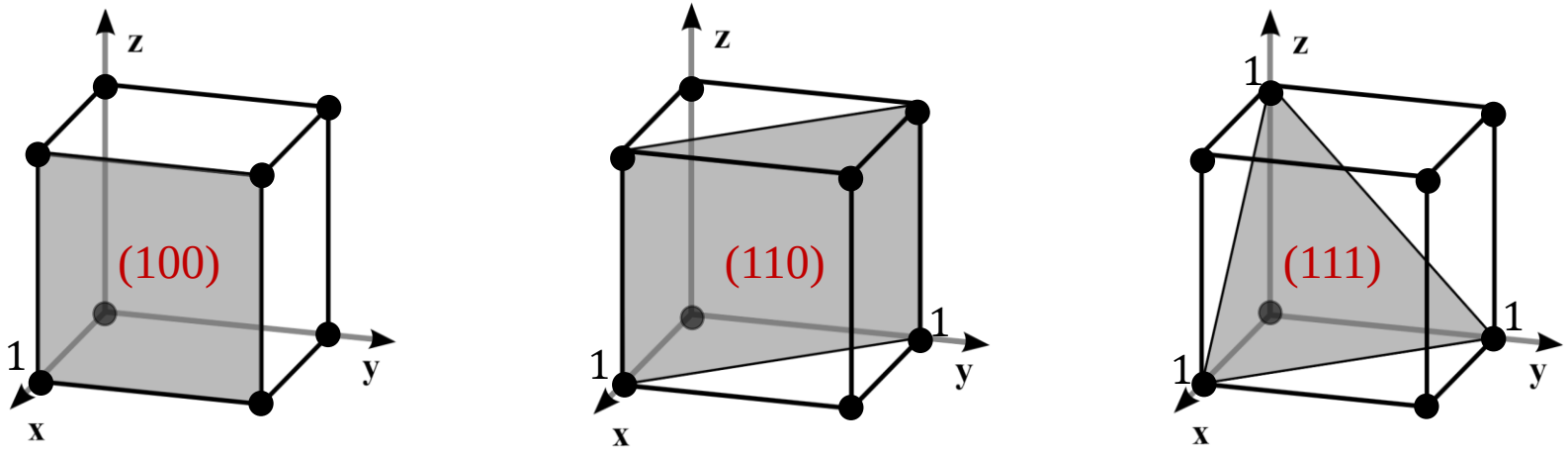
Red recíproca: Relación con planos de la red directa

Planos de la red



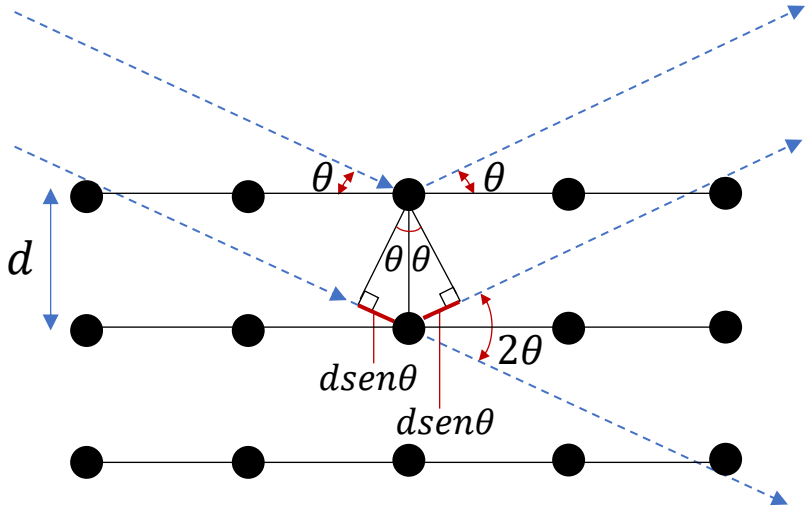
Ejemplo: Planos en una SC

$$\begin{cases} h \propto 1/x_1 \\ k \propto 1/x_2 \\ l \propto 1/x_3 \end{cases}$$

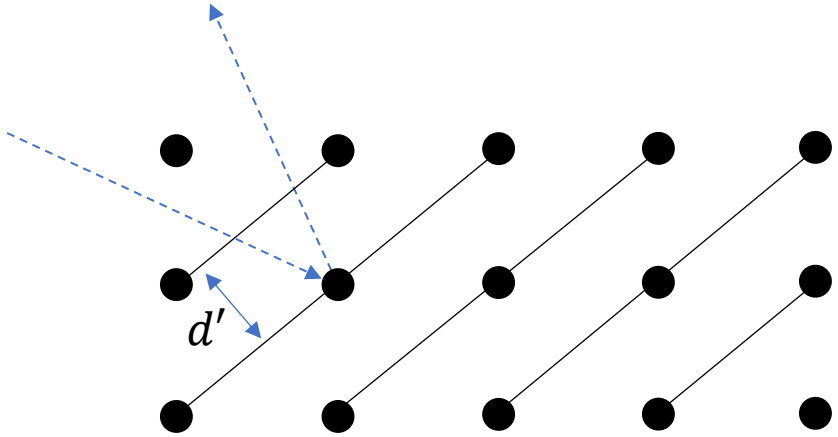


Difracción de rayos X

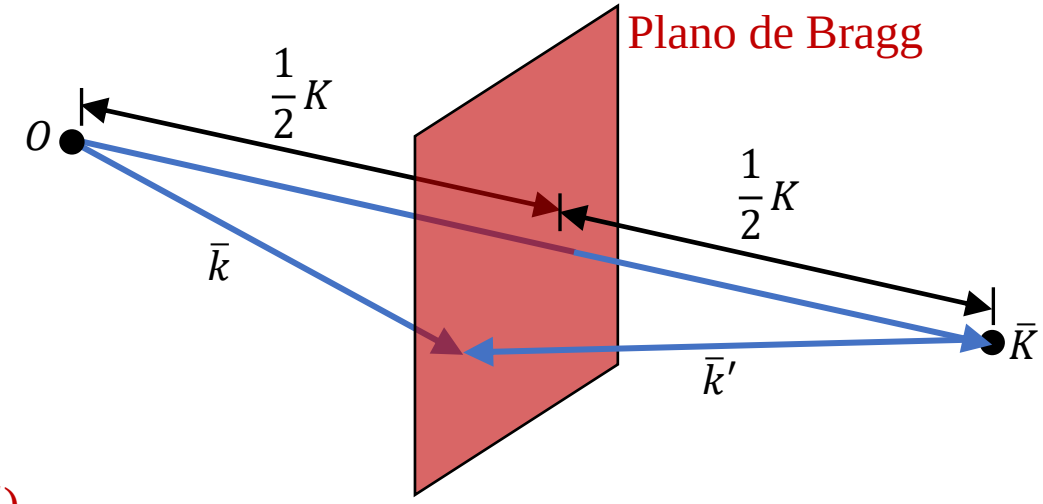
Formulación de Bragg



Interferencia constructiva: $2dsen\theta = n\lambda, n \in \mathbb{Z}$ $(\lambda \leq 2d)$



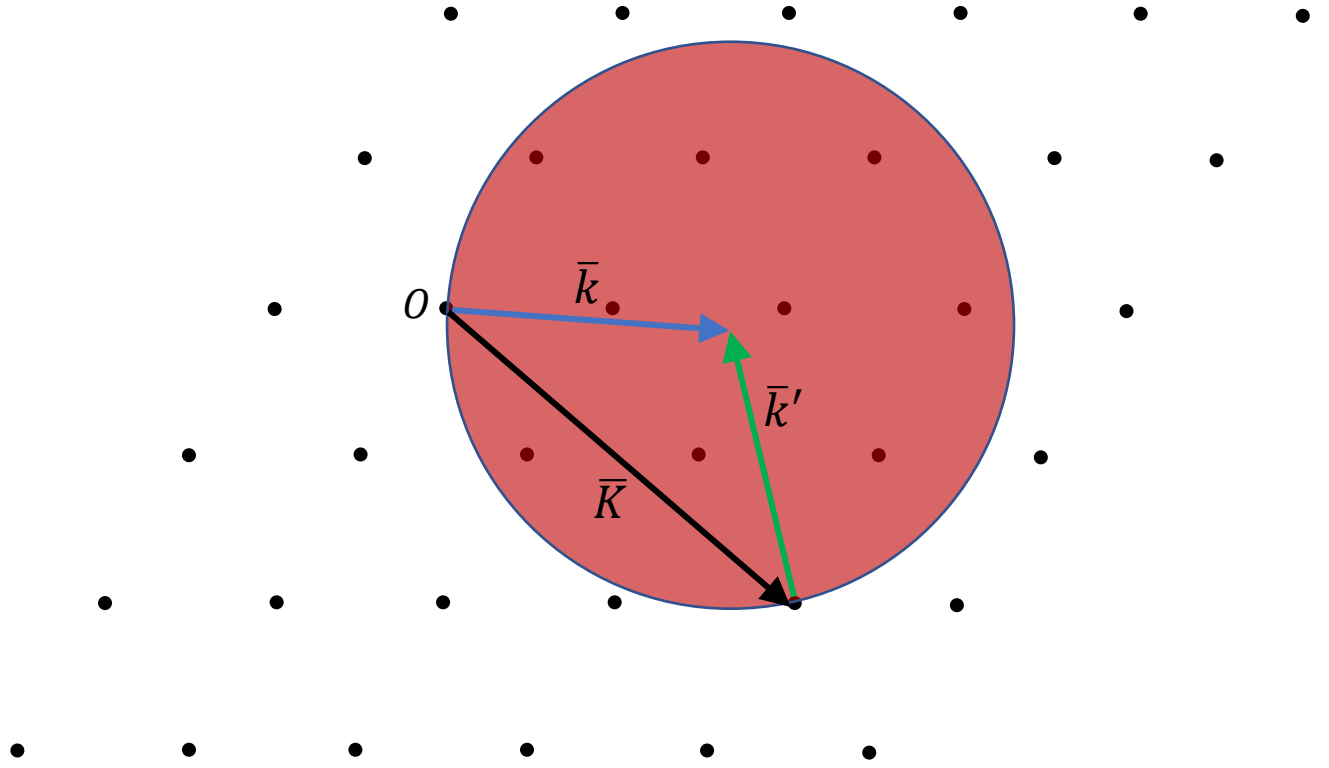
Formulación de von Laue



Un haz que contenga un rango de longitudes de onda daría lugar a múltiples reflexiones.

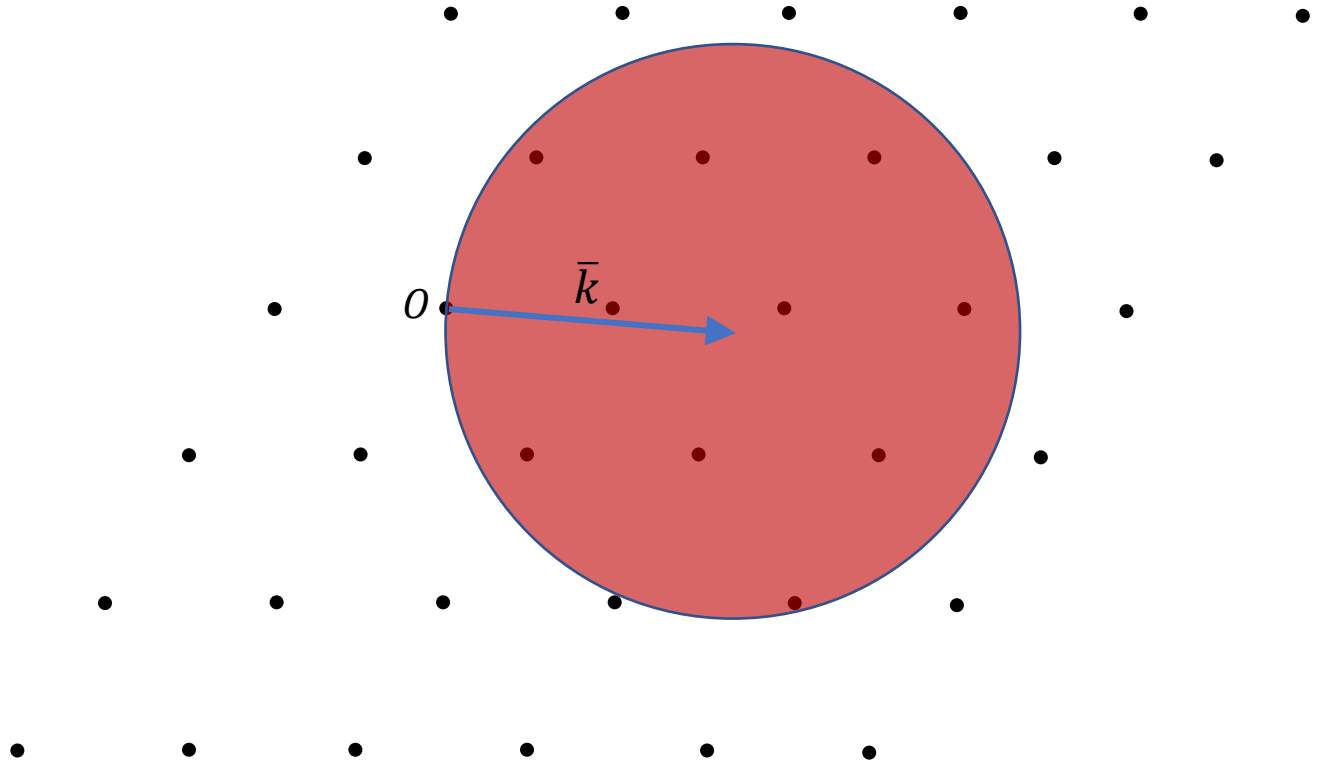
Difracción de Rayos X: Construcción de Ewald

Construcción de Ewald (espacio *k*)



Difracción de Rayos X: Construcción de Ewald

Construcción de Ewald (espacio *k*)



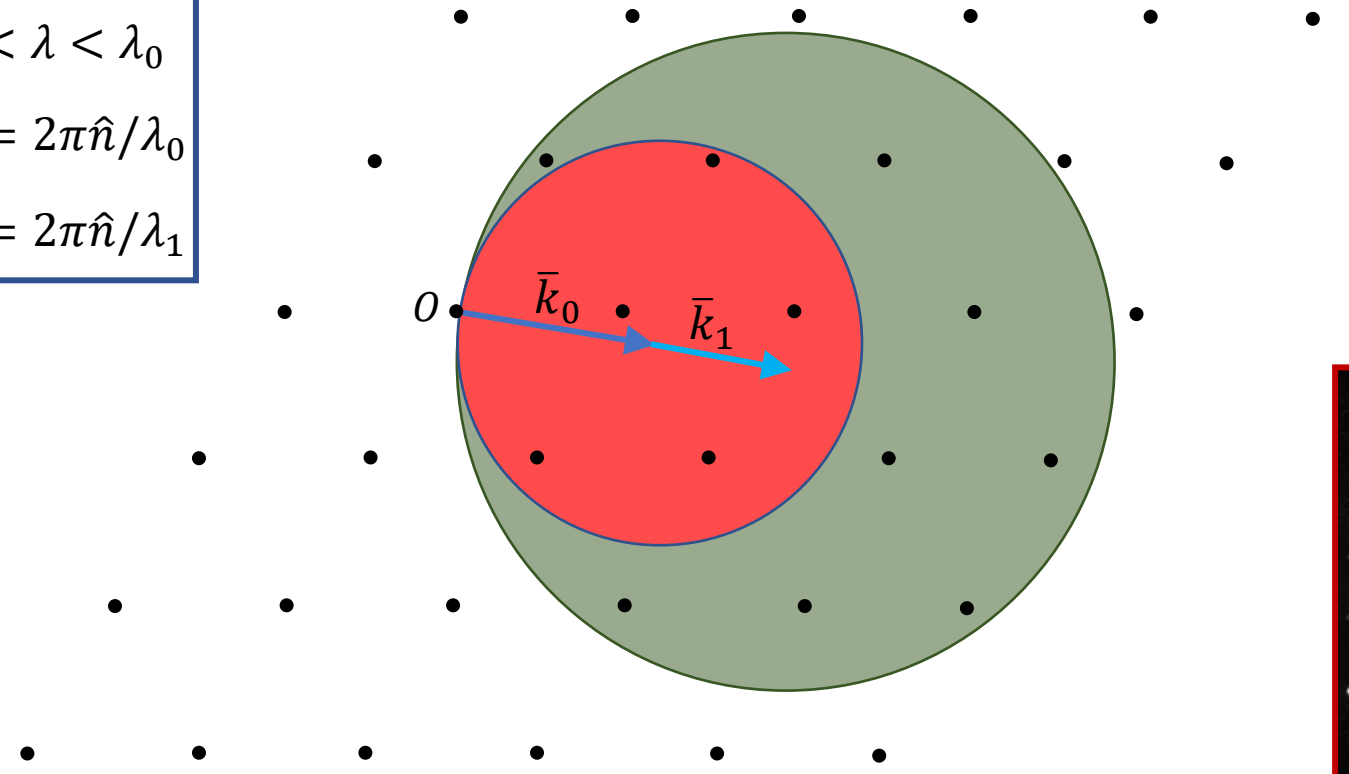
Difracción de Rayos X: Método de Laue

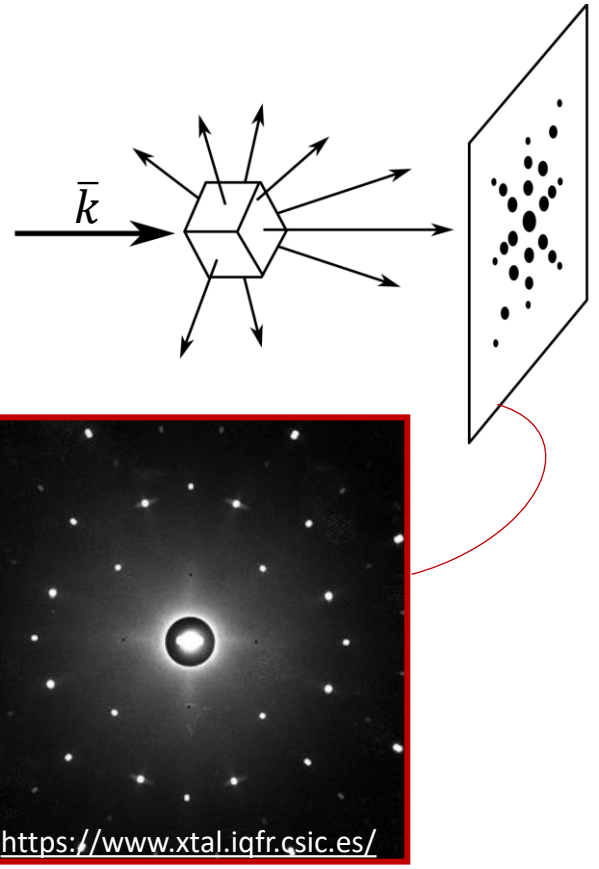
Método de Laue

$$\lambda_1 < \lambda < \lambda_0$$

$$\bar{k}_0 = 2\pi\hat{n}/\lambda_0$$

$$\bar{k}_1 = 2\pi\hat{n}/\lambda_1$$

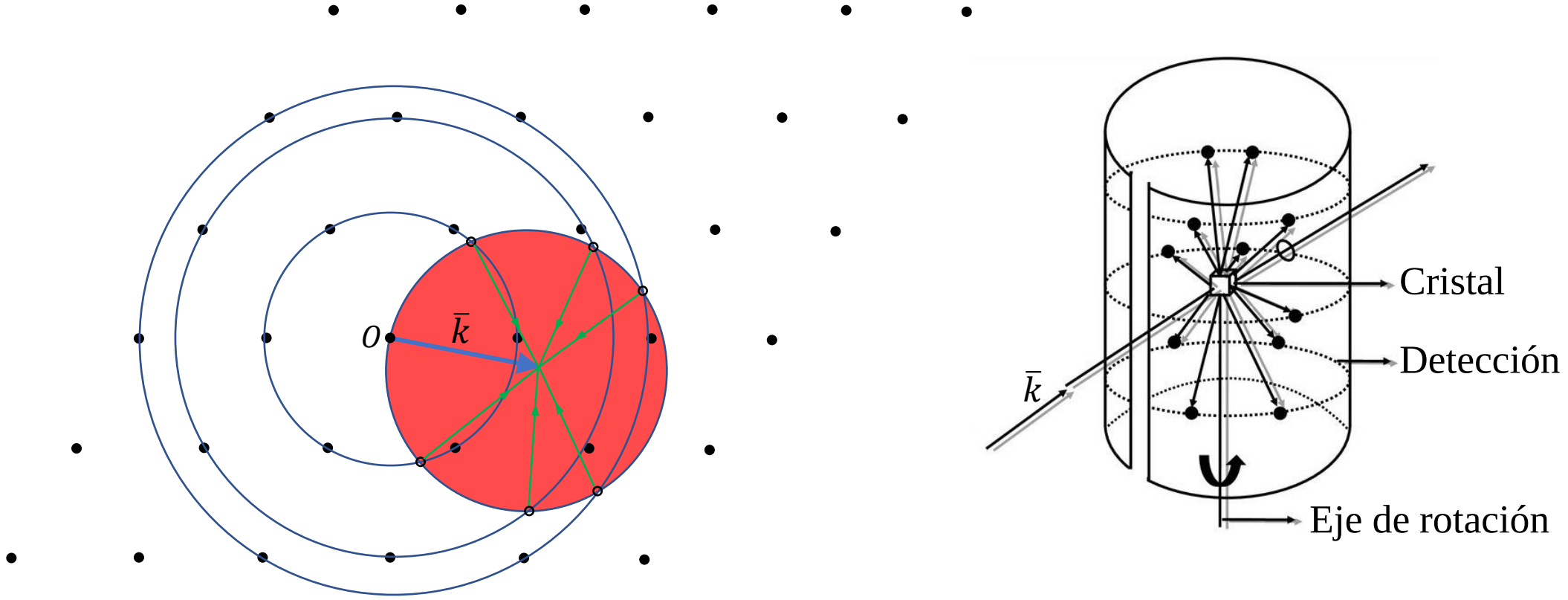




Difracción de Rayos X: Cristal rotante

Método del cristal rotante

Se utiliza un haz de rayos X monocromático y se rota continuamente al cristal.



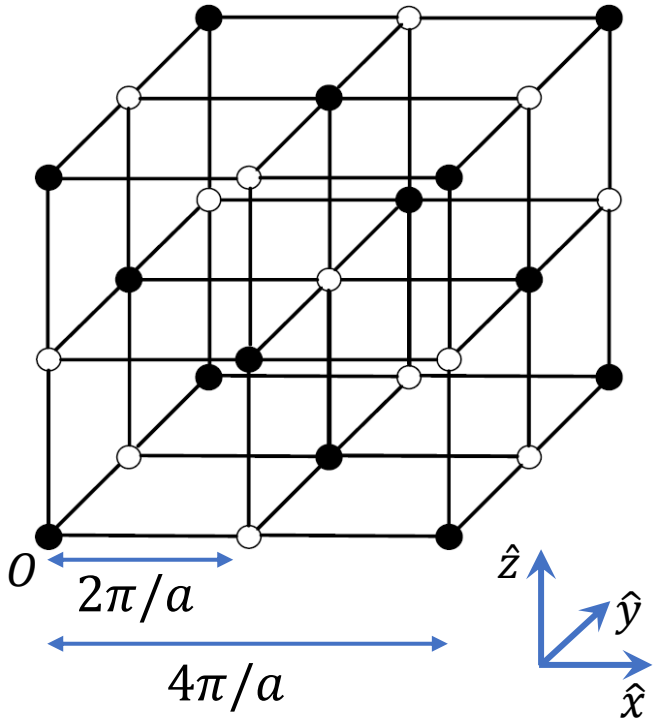
Se producen reflexiones de Bragg cuando puntos de la RR intersecan la superficie de la esfera.

Difracción de Rayos X: Factor de estructura

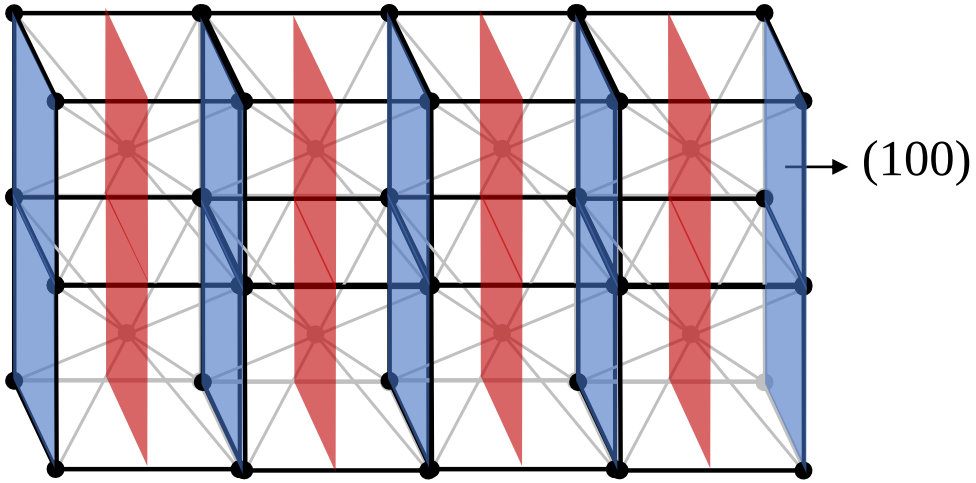
Ejemplo: BCC como SC con una base

$$S_K = \begin{cases} 2, & h+k+l \text{ par} \\ 0, & h+k+l \text{ impar} \end{cases}$$

$$\bar{K} = (2\pi/a)(h\hat{x} + k\hat{y} + \hat{l}z)$$



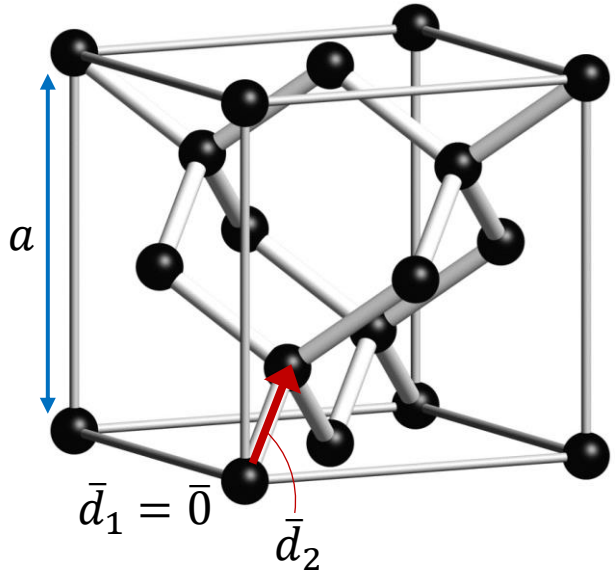
¿Cómo se entiende en el espacio real?



Ocurre interferencia destructiva entre los planos determinados por los distintos elementos de la base.

Difracción de Rayos X: Factor de estructura

Ejemplo: Estructura de diamante

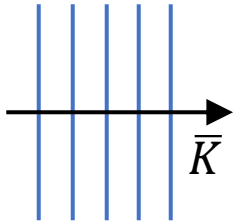
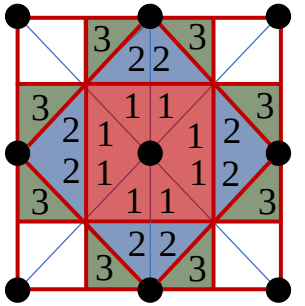
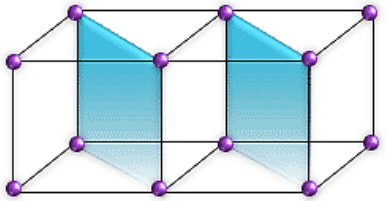
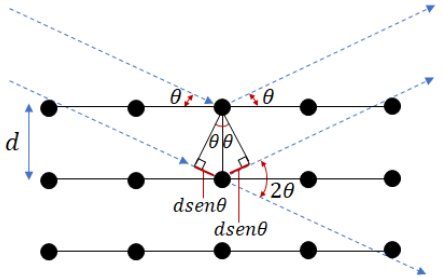


$$\begin{cases} \bar{a}_1 = (a/2)(\hat{x}+\hat{y}) \\ \bar{a}_2 = (a/2)(\hat{x}+\hat{z}) \\ \bar{a}_3 = (a/2)(\hat{y}+\hat{z}) \end{cases} \xrightarrow{\text{RR}} \begin{cases} \bar{b}_1 = (2\pi/a)(\hat{y}+\hat{z}-\hat{x}) \\ \bar{b}_2 = (2\pi/a)(\hat{z}+\hat{x}-\hat{y}) \\ \bar{b}_3 = (2\pi/a)(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \bar{d}_1 = \bar{0} \\ \bar{d}_2 = (a/4)(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \end{cases}$$

$$\rightarrow \bar{K} = h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + l\bar{b}_3 = (2\pi/a)[(k+l-h)\hat{x} + (h+l-k)\hat{y} + (h+k-l)\hat{z}]$$

$$S_K = \sum_{j=1}^{n} e^{i\bar{K}\cdot\bar{d}_j} = 1 + e^{i\bar{K}\cdot\frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})} = 1 + e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} = 1 + i^{h+k+l} = \begin{cases} 2, & h+k+l \text{ doble de n° par} \\ 1 \pm i, & h+k+l \text{ impar} \\ 0, & h+k+l \text{ doble de n° impar} \end{cases}$$

Resumen

- Definición de red recíproca (RR). La RR es una RB.
- Propiedades de la RR (VP, volumen de la CP, RR de la RR)
- Zonas de Brillouin
- Relación entre RR y planos de la RD (teorema, índices de Miller)
- Difracción de rayos X (formulaciones de Bragg y von Laue)
- Construcción de Ewald y algunos métodos de DRX
- Factor de estructura y de forma