

# Estructura de la Materia 2

Clase 1 - Teoría

## Docentes

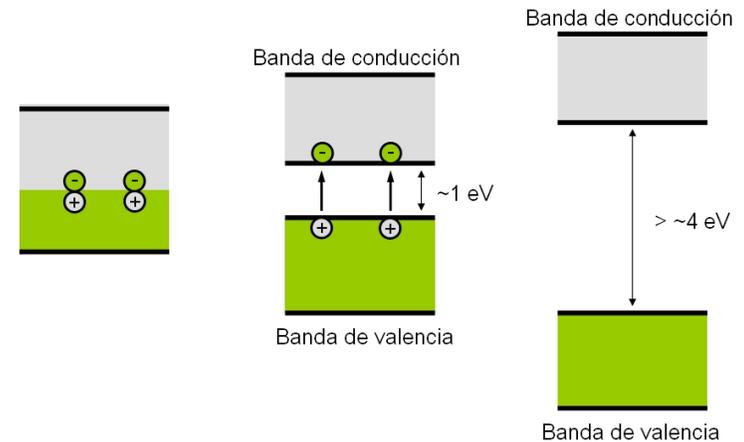
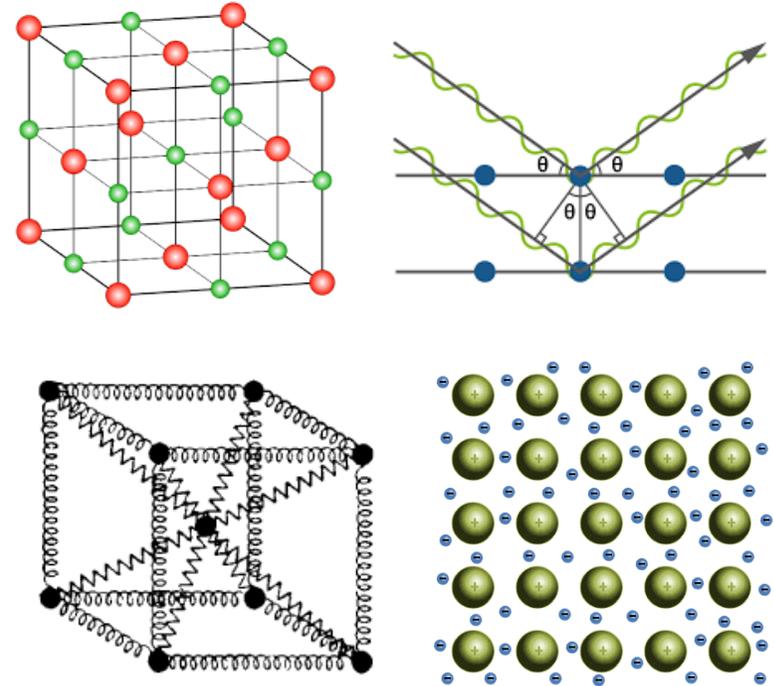
Gustavo Grinblat, Mariano Marziali Bermúdez, Tomás Bortolin

Departamento de Física, FCEN, UBA - 1er Cuatrimestre, 2020

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2020c1>

# Programa de la materia

- Red cristalina y red recíproca
- Difracción de rayos X
- Cohesión en sólidos
- Vibraciones y fonones
- Electrones en sólidos
- Semiconductores
- Magnetismo (a definir)



# Cronograma de la materia

Semana	Teórica	Práctica
1 (13/04)	Red cristalina y red recíproca	-
2 (20/04)	Difracción de rayos X	Guía 1
3 (27/04)	Cohesión en sólidos	Guía 1
4 (04/05)	Vibraciones y fonones	Guía 2
5 (11/05)	Vibraciones y fonones	Guía 2
6 (18/05)	Propiedades térmicas	Guía 3
7 (25/05)	Electrones en sólidos	Guía 3
8 (01/06)	Primer parcial (04/06)	-
9 (08/06)	Electrones en un potencial débil	Guía 4
10 (15/06)	Electrones en un potencial débil	Guía 4
11 (22/06)	Modelo de enlaces fuertes	Guía 5
12 (29/06)	Modelo de enlaces fuertes	Guía 5
13 (06/07)	Semiconductores	Guía 6
14 (13/07)	Semiconductores	Guía 6
15 (20/07)	Segundo Parcial (23/07)	-
16 (27/07)	Primer Recuperatorio (30/07)	-
- (03/08)	Segundo Recuperatorio (06/08)	-

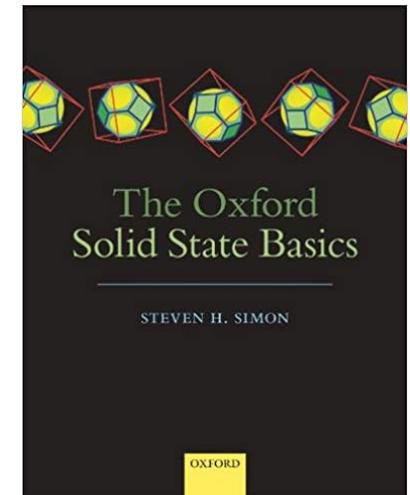
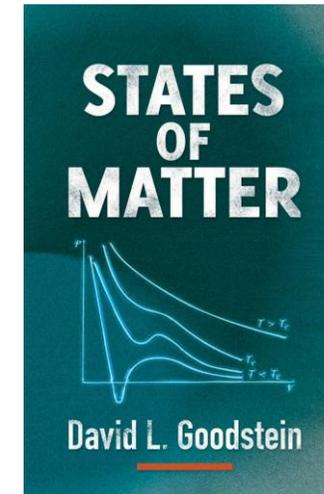
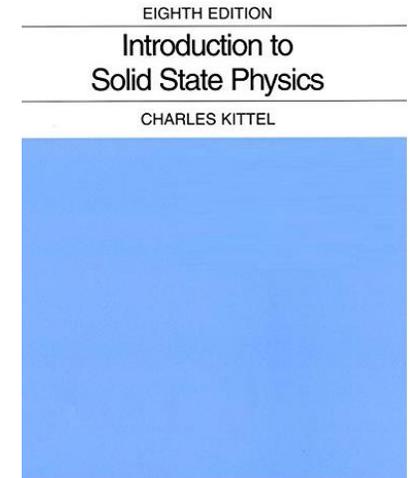
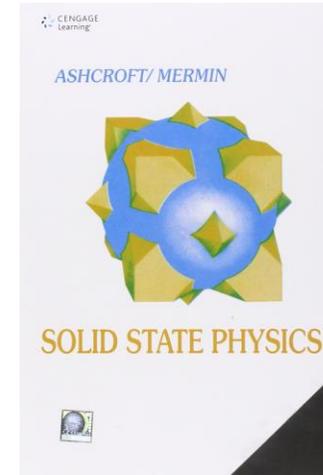
## Régimen de promoción:

Dos parciales con un recuperatorio c/u al final del cuatrimestre. Examen final.

# Literatura

---

- *Solid State Physics*, N. Ashcroft & N. Mermin
- *Introduction to solid state physics*, C. Kittel
- *The Oxford Solid State Basics*, S. Simon
- *State of Matter*, D. Goodstein
- *Solid State Physics*, Ibach & Luth
- ...



# Material digital

---

- Clases Prof. P. Tamborenea, DF-UBA (Argentina)

<https://www.df.uba.ar/en/cursos-online/6629-estructura-de-la-materia-2-2do-cuatrimestre-2012>



- Clases Prof. S. Scandolo, ICTP (Italia)

<https://www.youtube.com/watch?v=XLmUITUIeNs&list=PL9lhHpozZhOEtPqQ8K-mhXrwmmXG0CdPw>



- Clases Prof. G. Rangarajan, IIT Madras (India)

<https://www.youtube.com/watch?v=Ckh-60B6LY&list=PLbMVogVj5nJRjLrXp3kMtrIO8kZl1D1Jp&index=1>



- Apunte digital de red recíproca y zonas de Brillouin (Cambridge, UK)

[https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin\\_zones/index.php](https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/index.php)

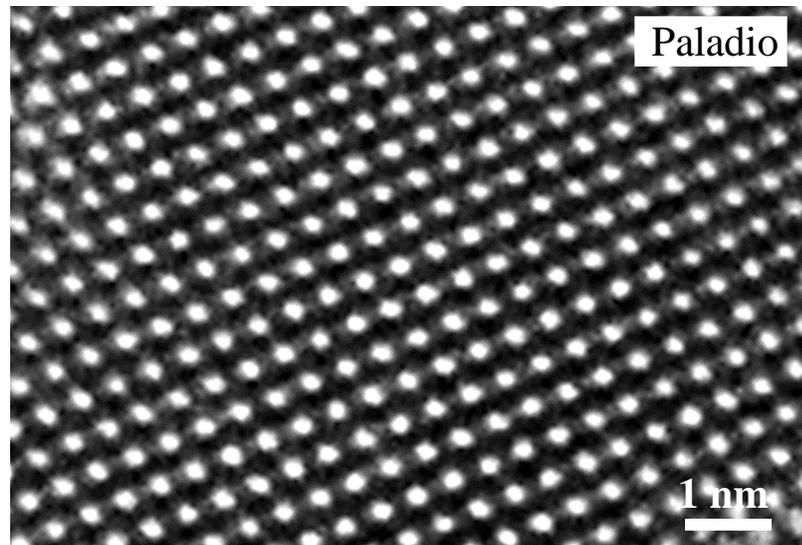
- ...

# Redes cristalinas

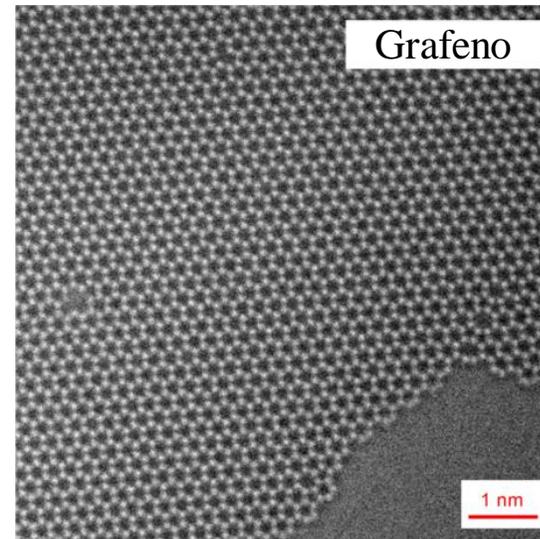
## Cristales

- Un sólido cristalino se forma agrupando átomos en un entorno constante.
- Las propiedades del material dependen fuertemente de cómo sea el ordenamiento cristalino.

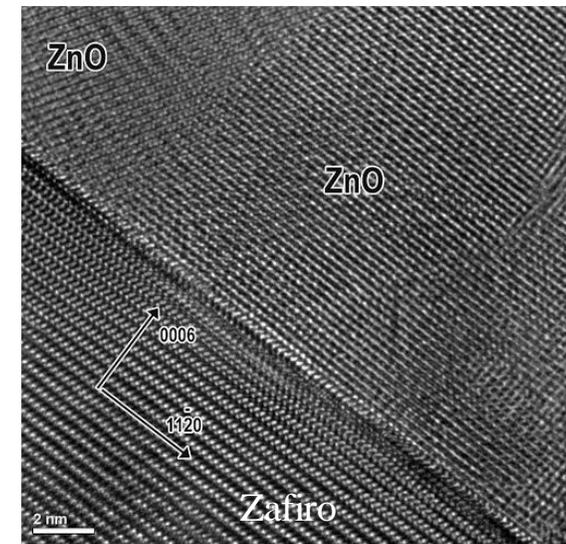
## Imágenes de microscopía electrónica de alta resolución



<https://www.knmf.kit.edu/TEM.php>



<https://www.salve-project.de/>



<http://www.microscopy.cz/>

Necesitamos de una serie de definiciones geométricas para trabajar con estructuras cristalinas.

# Redes cristalinas: Red de Bravais

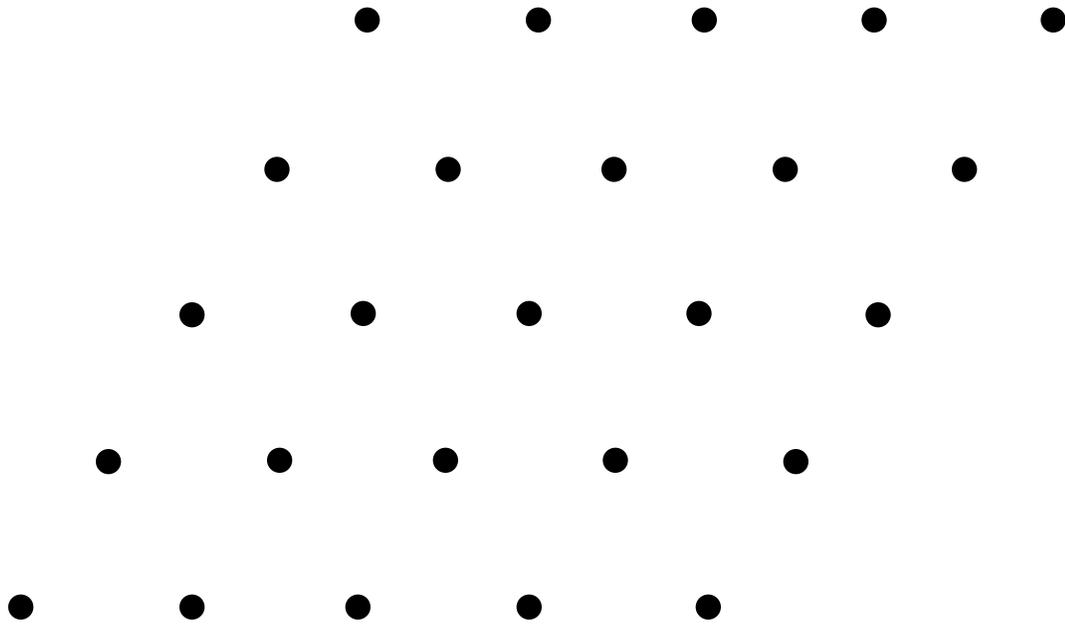
---

**Red de Bravais** (August Bravais, Francés, año 1850)

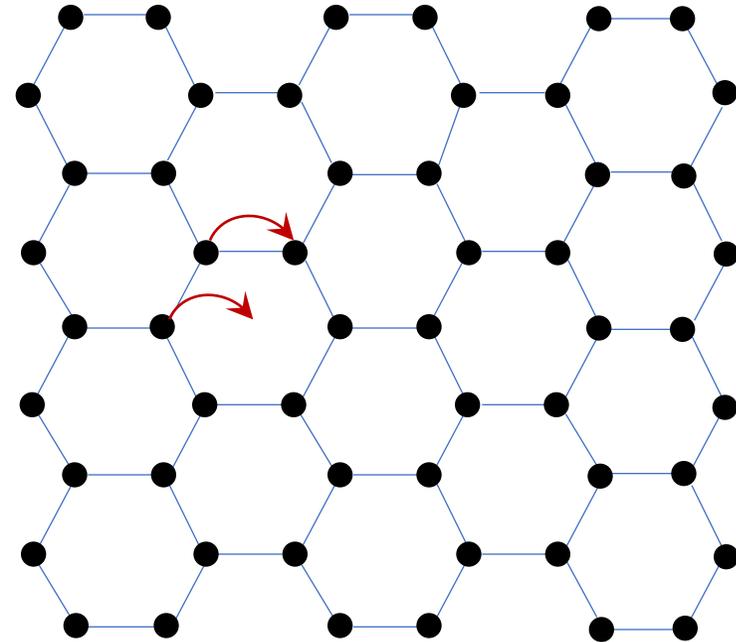
Arreglo periódico de unidades que se repiten. Unidades  $\rightarrow$  Átomos, grupos de átomos, moléculas, etc.

**Definiciones de Red de Bravais (RB)**

1) Arreglo infinito de puntos discretos que se ve exactamente igual desde cualquiera de los puntos de la red.



Es RB (Red oblicua)

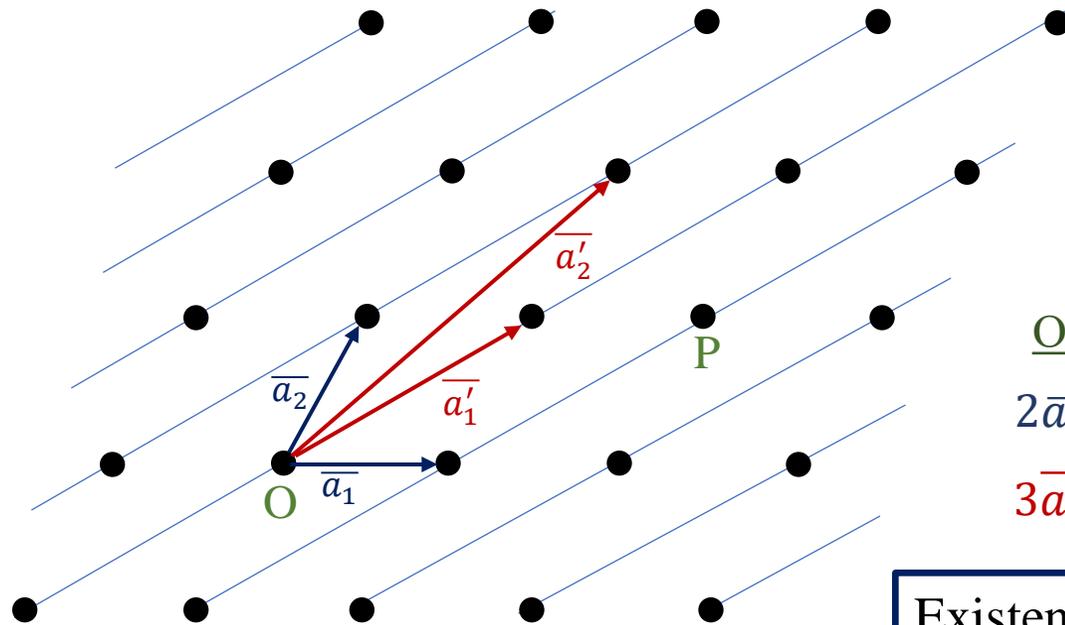


No es RB (Red de panal de abejas)

# Redes cristalinas: Red de Bravais

## Definiciones de Red de Bravais (RB)

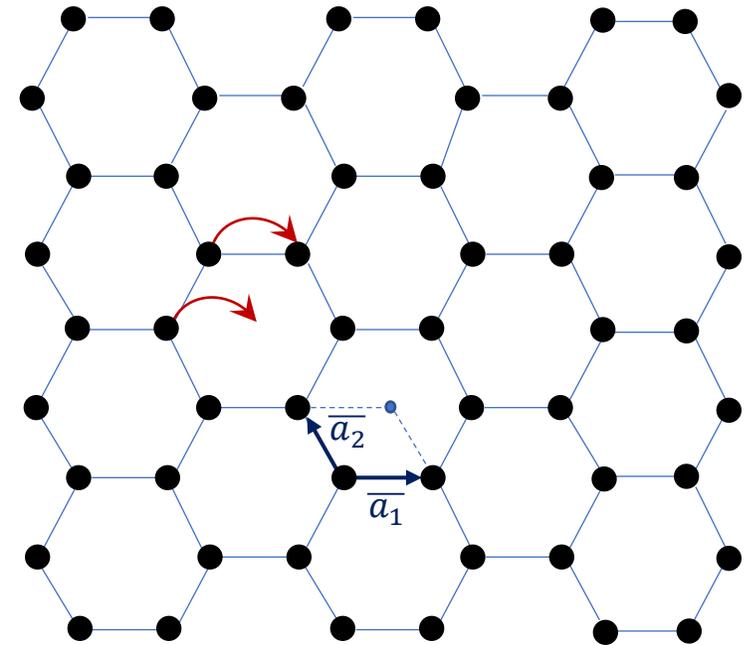
1) Arreglo infinito de puntos discretos que se ve exactamente igual desde cualquiera de los puntos de la red.



Es RB (Red oblicua)

$$\begin{aligned} \underline{O \rightarrow P}: \\ 2\bar{a}_1 + \bar{a}_2 \\ 3\bar{a}'_1 - \bar{a}'_2 \end{aligned}$$

Existen infinitos conjuntos de VP.



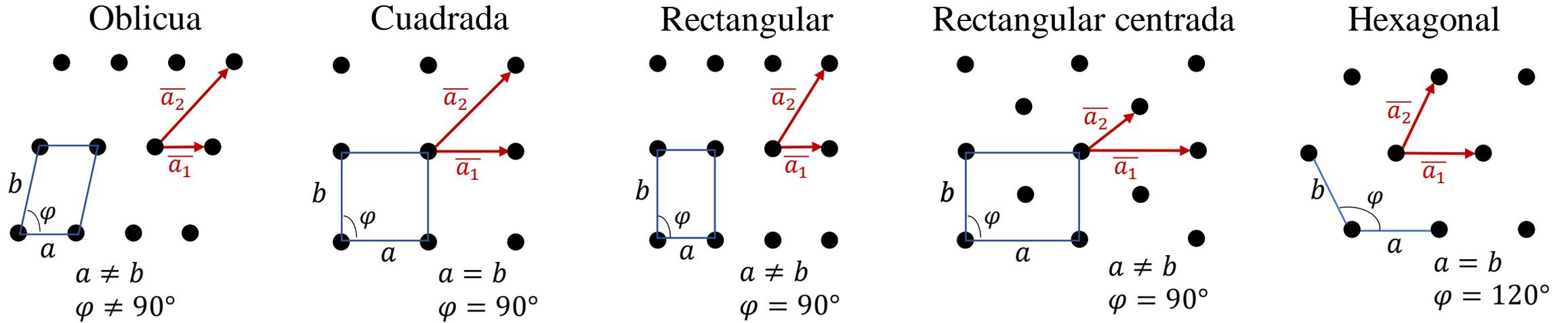
No es RB (Red de panal de abejas)

2) Todos los puntos  $\bar{R}$  tal que  $\bar{R} = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3$  ( $\forall n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$ )

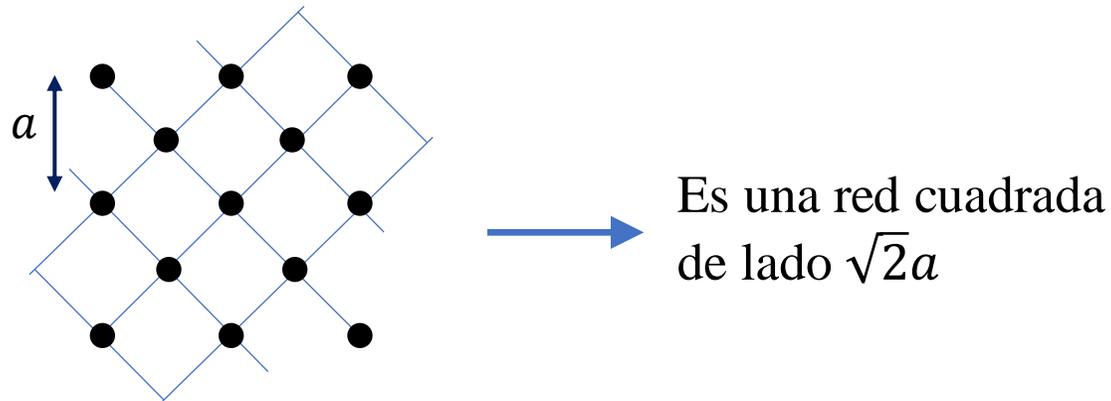
$\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3 \rightarrow$  Vectores linealmente independientes (*vectores primitivos* -VP-) que generan la red.

# Redes cristalinas: Redes en 2D

## Redes de Bravais en 2D



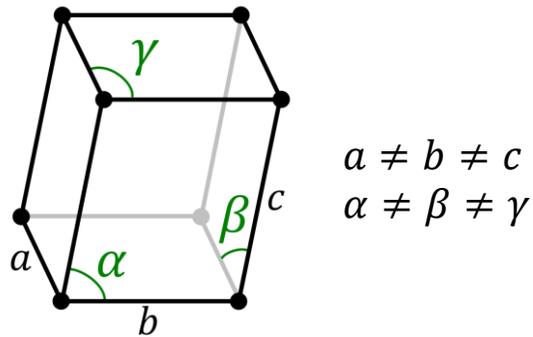
¿Qué sucede con la red cuadrada centrada?



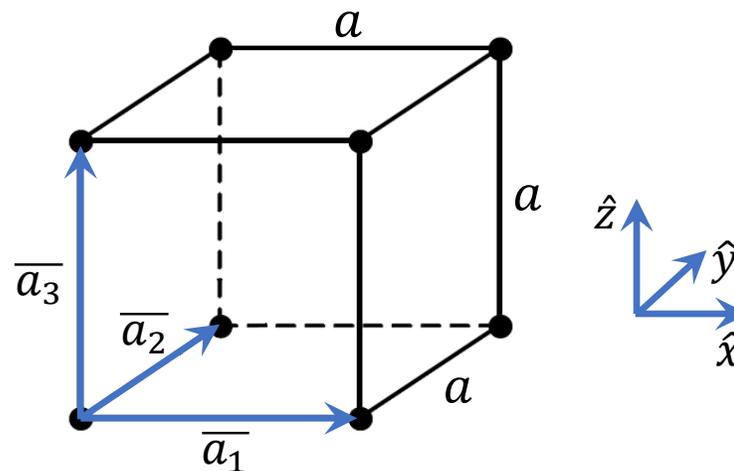
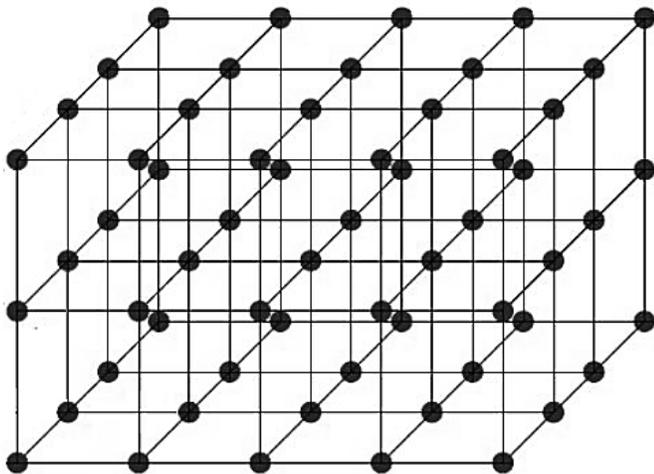
# Redes cristalinas: Redes en 3D

## Redes de Bravais en 3D

La red general es la triclínica. Hay 13 casos especiales.



## Red cúbica simple (SC, simple cubic)

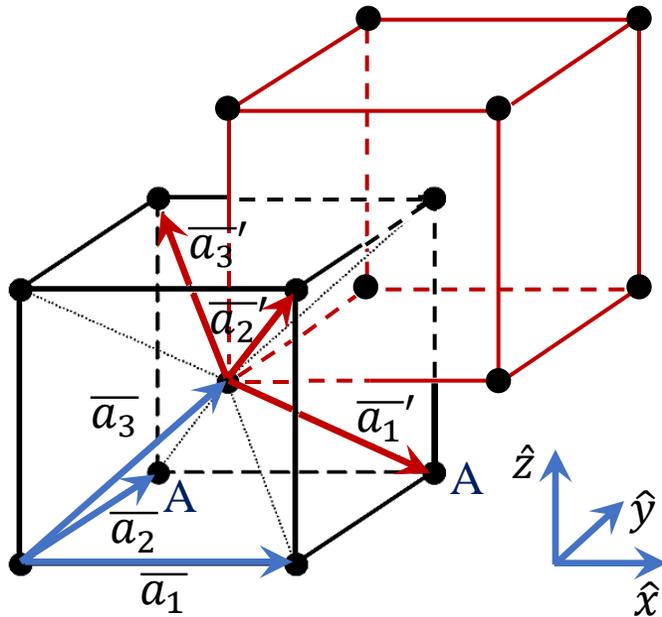


VP

$$\bar{a}_1 = a\hat{x}$$
$$\bar{a}_2 = a\hat{y}$$
$$\bar{a}_3 = a\hat{z}$$

# Redes cristalinas: Redes en 3D

## Otras RB de simetría cúbica

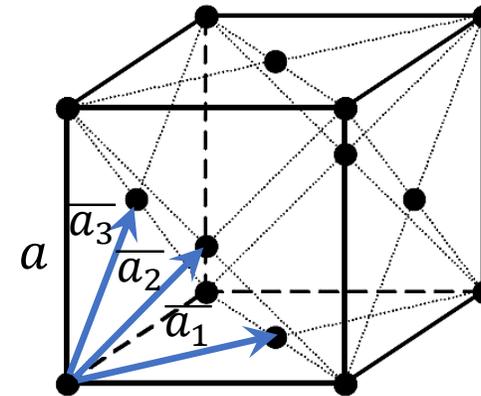


$$\begin{aligned}\bar{a}_1' &= (a/2)(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \\ \bar{a}_2' &= (a/2)(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y}) \\ \bar{a}_3' &= (a/2)(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x})\end{aligned}$$

Cúbica centrada en el cuerpo  
(BCC, *body-centered cubic*)

$$\begin{aligned}\bar{a}_1 &= a\hat{x} \\ \bar{a}_2 &= a\hat{y} \\ \bar{a}_3 &= (a/2)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\end{aligned}$$

(14 elementos pueden cristalizar en esta estructura: Cr, Fe, K, Li, Na, etc.)



Cúbica centrada en las caras  
(FCC, *face-centered cubic*)

$$\begin{aligned}\bar{a}_1 &= (a/2)(\hat{x} + \hat{y}) \\ \bar{a}_2 &= (a/2)(\hat{x} + \hat{z}) \\ \bar{a}_3 &= (a/2)(\hat{y} + \hat{z})\end{aligned}$$

(24 elementos pueden cristalizar en esta estructura: Ag, Al, Au, Ca, Cu, Ni, Pb, etc.)

# Redes cristalinas: Redes en 3D

	<p>Cúbica</p> $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<p>Tetragonal</p> $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<p>Ortorrómbica</p> $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<p>Hexagonal</p> $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	<p>Monoclínica</p> $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	<p>Trigonal</p> $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$
Simple						
Centrada en el cuerpo						
Centrada en las caras		<i>Equivale a una tetragonal centrada en el cuerpo</i>				
Centrada en las bases	<i>Equivale a una tetragonal simple</i>	<i>Equivale a una tetragonal simple</i>				

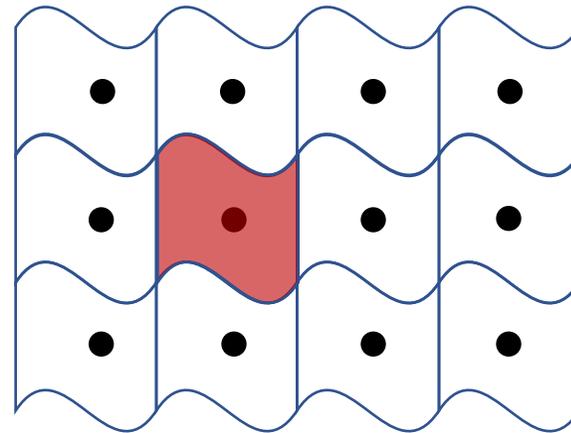
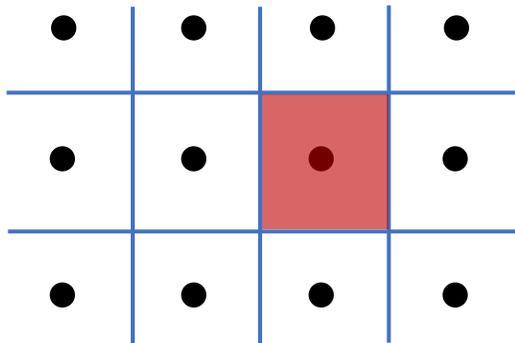
# Redes cristalinas: Celda primitiva

## Número de coordinación (NC)

Es el número de primeros vecinos de un punto de la red. → Ejemplos: SC: 6; BCC: 8; FCC: 12.

## 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.



Existen infinitas  
CP posibles

$n$ : densidad de puntos de la red,  $v$ : volumen de la celda primitiva →  $nv = 1$  →  $v = 1/n$ .

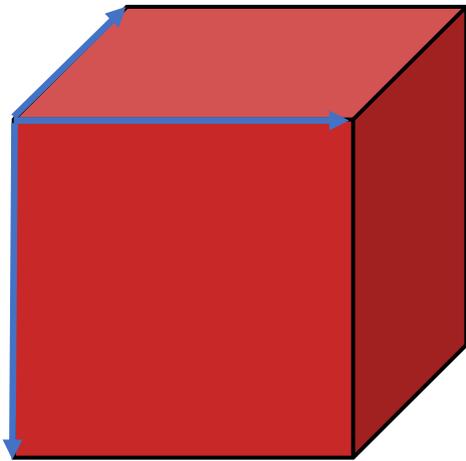
El volumen de una celda primitiva es independiente de la elección de la celda.

# Redes cristalinas: Celda primitiva

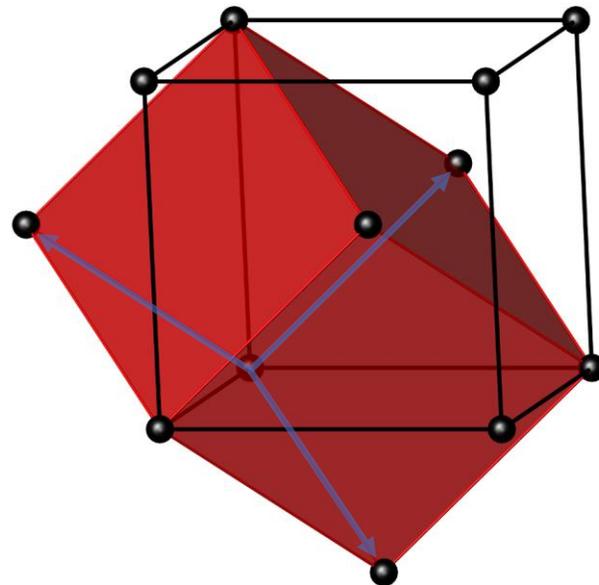
## Celda primitiva (CP)

Una elección trivial de la CP consiste en el paralelepípedo definido por los VP  $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ .

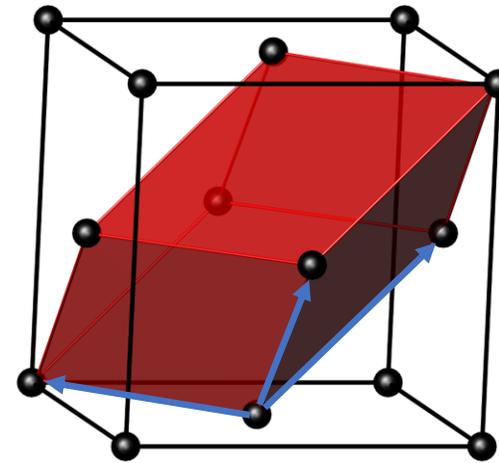
→ Todos los puntos  $\bar{r}$ , tal que  $\bar{r} = x_1\bar{a}_1 + x_2\bar{a}_2 + x_3\bar{a}_3$ ,  $x_i \in [0, 1)$ .



CP de una SC



CP de una BCC



CP de una FCC

Desventaja → No siempre presenta la simetría deseada de la RB y depende del conjunto de VP.

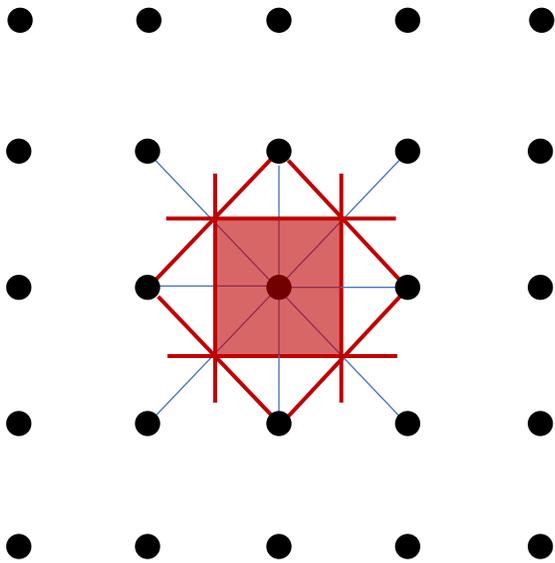
# Redes cristalinas: Celda primitiva

---

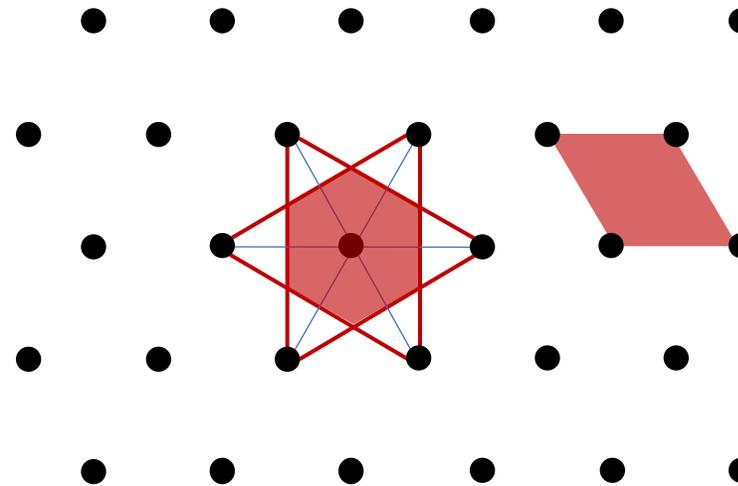
## Celda de Wigner-Seitz (WZ)

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.

Se construye trazando líneas que conectan al punto con los de su alrededor, bisecando cada línea con un plano, y tomando al poliedro más pequeño.



Celda de WZ de una red cuadrada

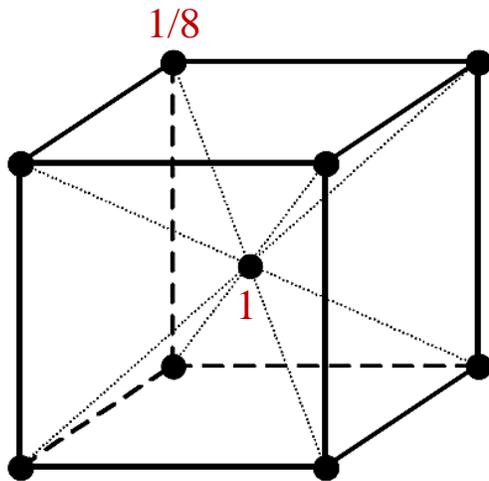


Celda de WZ de una red hexagonal

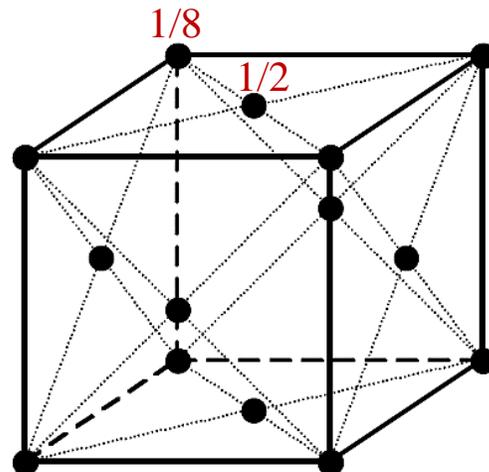
# Redes cristalinas: Celda unidad

## Celda unidad no-primitiva

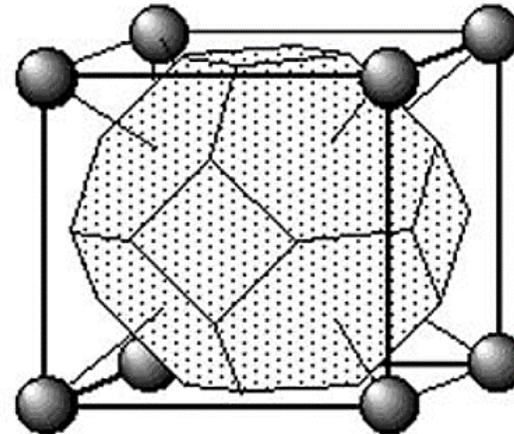
Celda unidad convencional o celda unidad (CU): Volumen del espacio que al ser trasladado a través de un subconjunto de vectores de la RB llena el espacio sin que haya ni superposiciones ni vacíos.



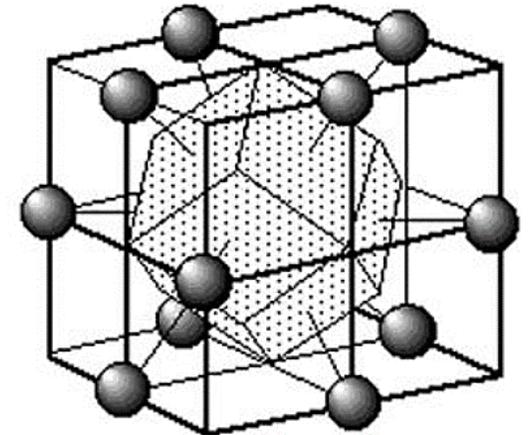
CU cúbica de una BCC



CU cúbica de una FCC



Celda de WZ de una BCC



Celda de WZ de una FCC

Una CU es en general más grande que una CP

BCC: CU cúbica  $\rightarrow$  volumen de 2 veces la CP.

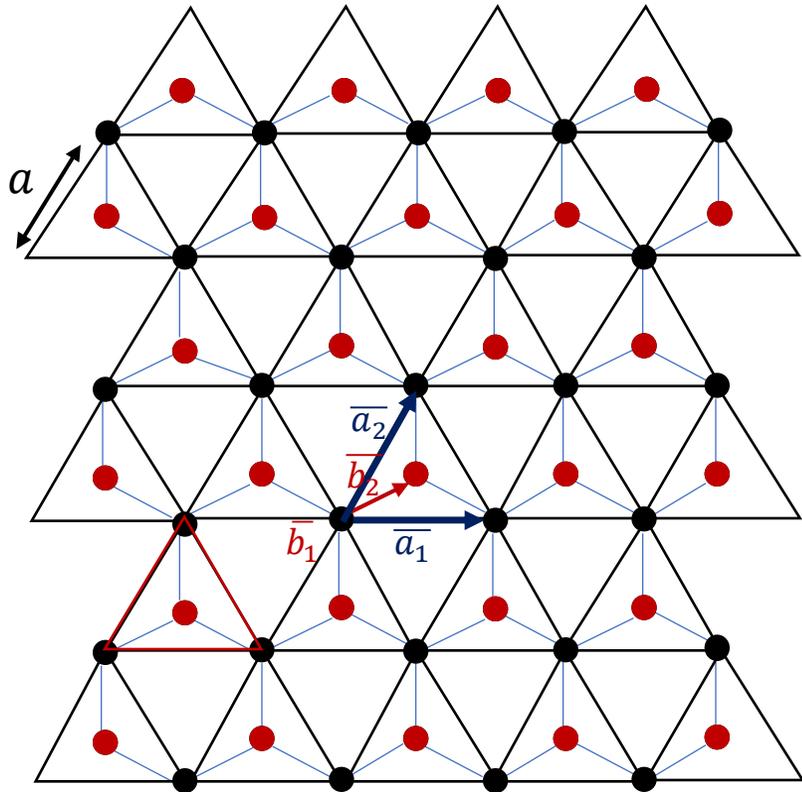
FCC: CU cúbica  $\rightarrow$  volumen de 4 veces la CP.

# Redes cristalinas: Red con una base

## Estructura cristalina; Red con una base

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

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



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

$$\bar{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{x} + \sqrt{3}\frac{a}{2}\hat{y}$$

$$\bar{b}_1 = \mathbf{0}$$

$$\bar{b}_2 = \frac{a}{2}\hat{x} + \sqrt{3}\frac{a}{6}\hat{y}$$

Una “estructura cristalina” consiste en copias idénticas de la misma unidad física (base), que se ubica en cada punto de la RB.

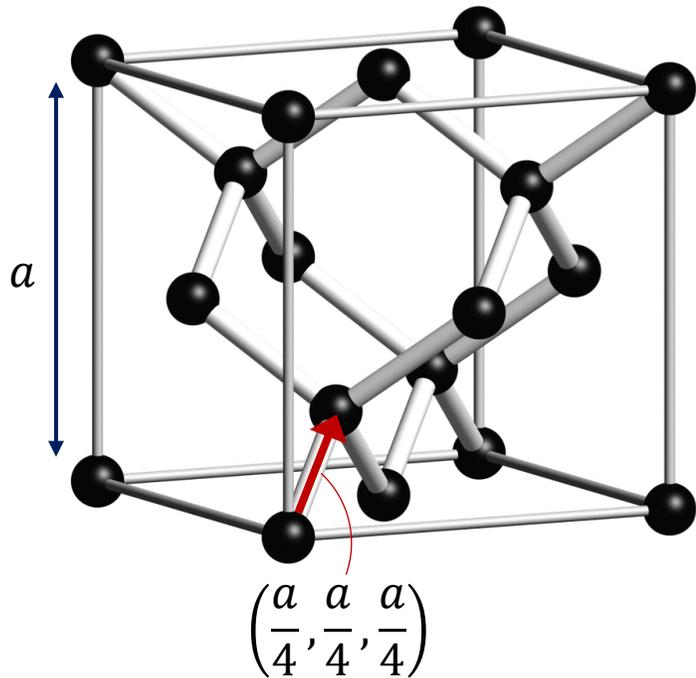
El término “red con una base” es más general y no requiere de la existencia de una unidad física asociada.

La red de panal de abejas se puede describir como una red hexagonal con una base de 2 elementos.

# Redes cristalinas: Red con una base

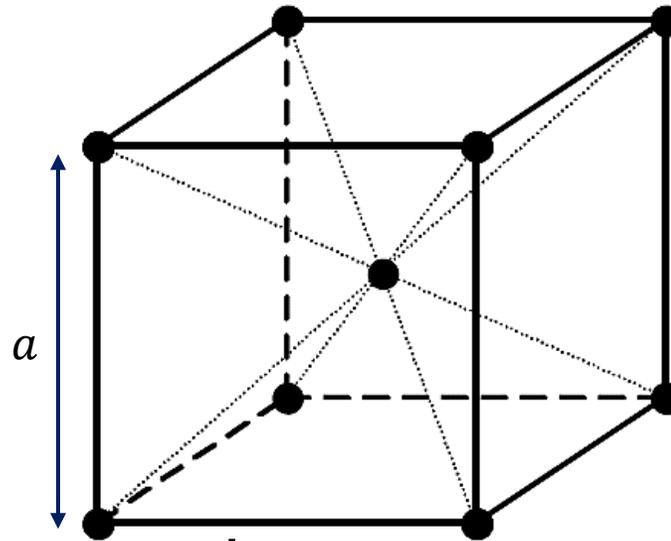
## Estructura cristalina; Red con una base

Ejemplos en 3D. El concepto se puede utilizar también para enfatizar la simetría de una RB.

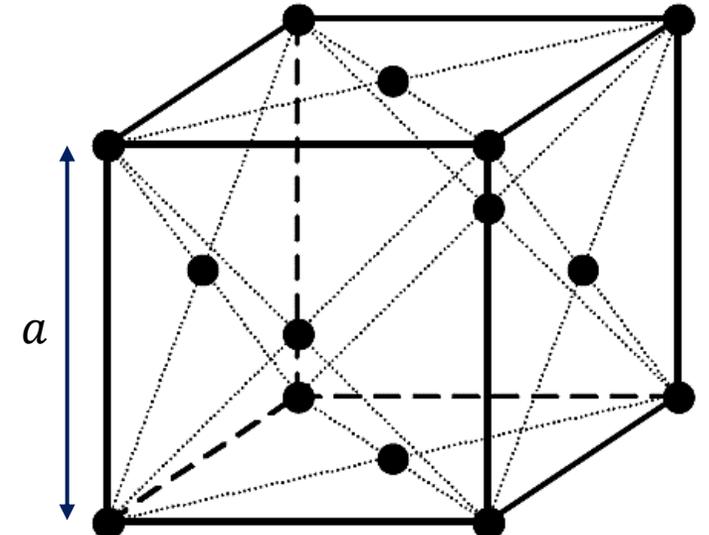


Diamante: 2 FCC interpenetradas.

$$\text{FCC} + \left\{ \mathbf{0}; \frac{a}{4} (\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \right\}$$



$$\text{BCC: SC} + \left\{ \mathbf{0}; \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \right\}$$

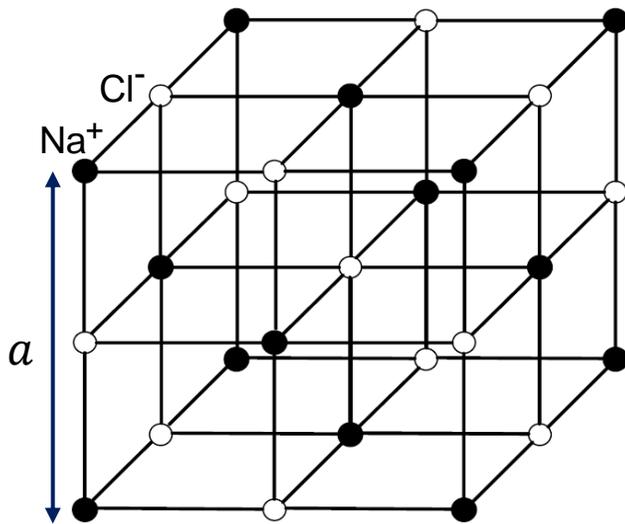


$$\text{FCC: SC} + \left\{ \mathbf{0}; \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y}); \frac{a}{2} (\hat{y} + \hat{z}); \frac{a}{2} (\hat{z} + \hat{x}) \right\}$$

# Redes cristalinas: Red con una base

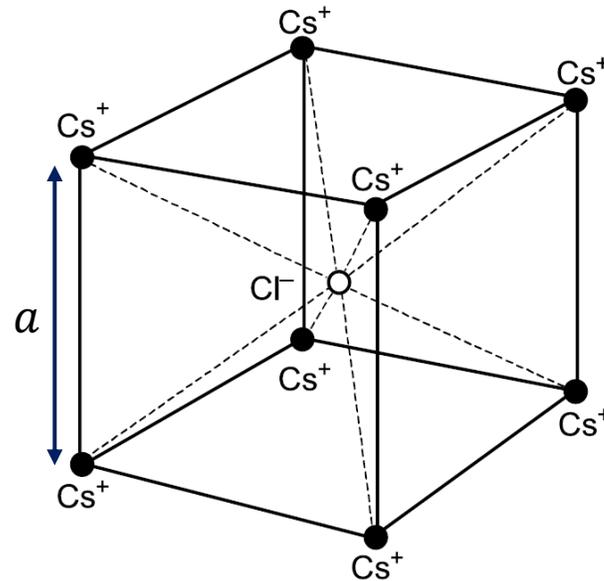
## Estructura cristalina; Red con una base

Ejemplos de estructuras diatómicas.



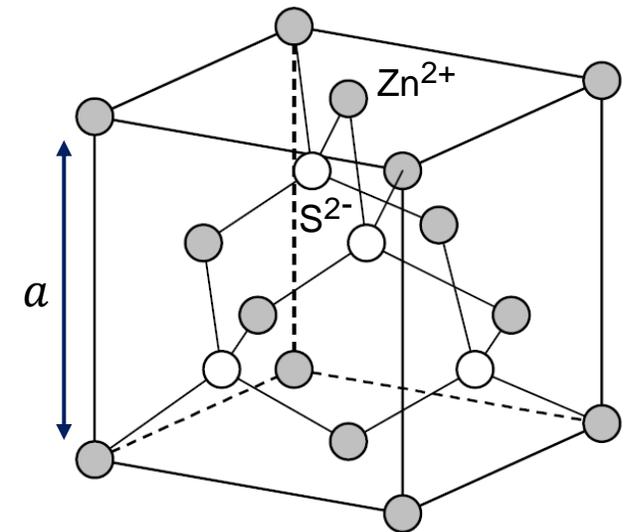
Cloruro de Sodio

$$\text{FCC} + \{\text{Na}^+: \mathbf{0}, \text{Cl}^-: \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\}$$



Cloruro de Cesio

$$\text{SC} + \{\text{Cs}^+: \mathbf{0}, \text{Cl}^-: \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\}$$



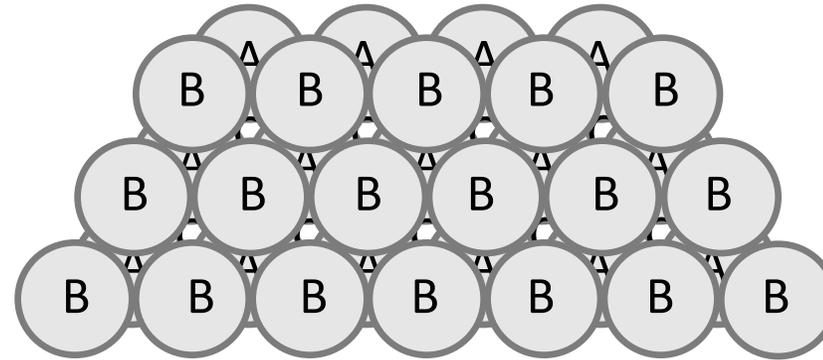
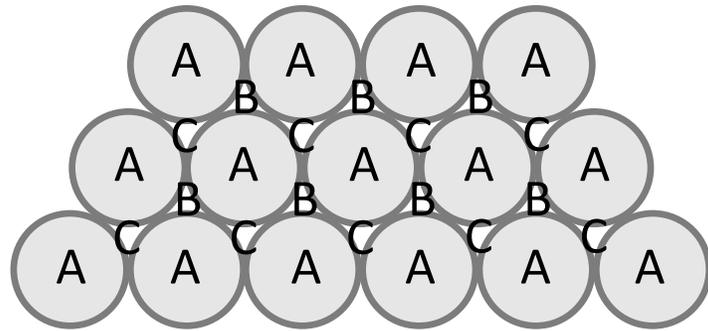
Sulfuro de Zinc (Zinc blenda)

$$\text{FCC} + \{\text{Zn}^{2+}: \mathbf{0}, \text{S}^{2-}: \frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\}$$

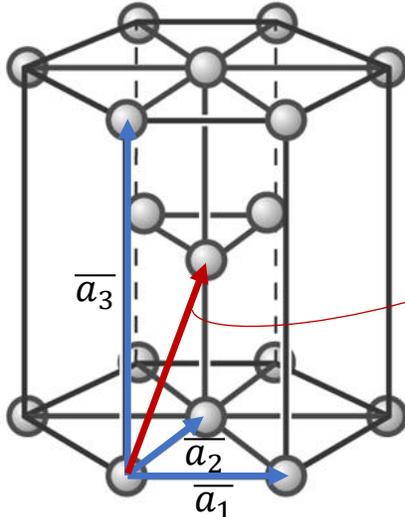
# Redes cristalinas: Empaquetamiento

## Empaquetamiento compacto

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



Continuamos apilando a las esferas  $\rightarrow$  ...ABCABC... (FCC) ó ...ABABAB... (HCP).



Hexagonal compacta (HCP, *hexagonal close-packed*)  
Hexagonal simple + base de 2 átomos.

$$\frac{1}{3}\overline{a_1} + \frac{1}{3}\overline{a_2} + \frac{1}{2}\overline{a_3}$$

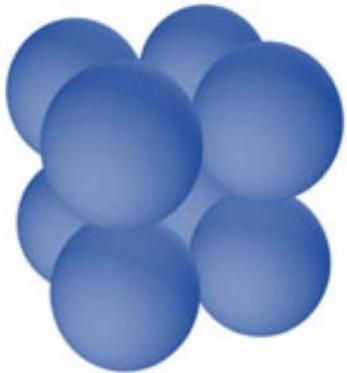
Unos 30 elementos cristalizan en esta estructura: Cd, Co, Mg, Nd, Ti, Zn, etc.

# Redes cristalinas: Empaquetamiento

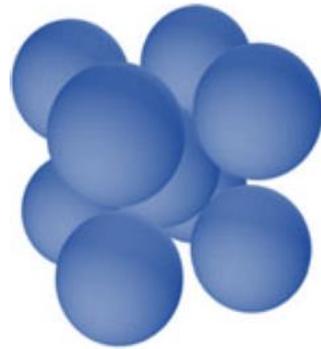
---

## Empaquetamiento compacto

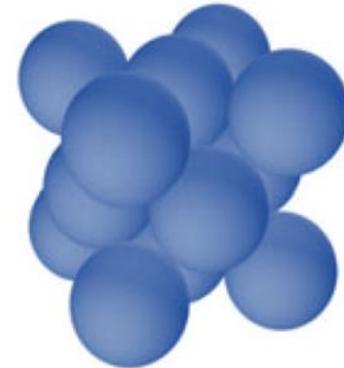
Comparemos el apilamiento de una SC, BCC, y FCC.



SC



BCC



FCC



→ ¡La SC es la menos compacta de las estructuras!

# Resumen

- Redes de Bravais en 2D y 3D
- Celda primitiva, celda de Wigner-Seitz
- Celda unidad o celda convencional
- Red con una base, estructura cristalina
- Empaquetamiento compacto

