

Estructura de la Materia 2

Clase 3 - Teoría

Docentes

Gustavo Grinblat, Mariano Marziali Bermúdez, Tomás Bortolin

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

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

Repaso

Definición de Red recíproca (RR)

El conjunto de vectores de onda \bar{K} que generan ondas planas con la periodicidad de una RB determinan su red recíproca (RR).

$$\bar{R} = n_1 \bar{a}_1 + n_2 \bar{a}_2 + n_3 \bar{a}_3 \quad \forall n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}; \bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3 \text{ VP}$$

Todos los \bar{K} tal que: $e^{i\bar{K}\bar{R}} = 1 \quad \forall \bar{R} \in \text{RB}$

La RR es una RB

Conjunto de VP.

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{b}_1 &= 2\pi \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \\ \bar{b}_2 &= 2\pi \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \\ \bar{b}_3 &= 2\pi \frac{\bar{a}_1 \times \bar{a}_2}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \end{aligned} \right.$$

$$\longrightarrow \bar{b}_i \cdot \bar{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

Nomenclatura: Red directa (RD) es la RB a partir de la cual se determina su RR.

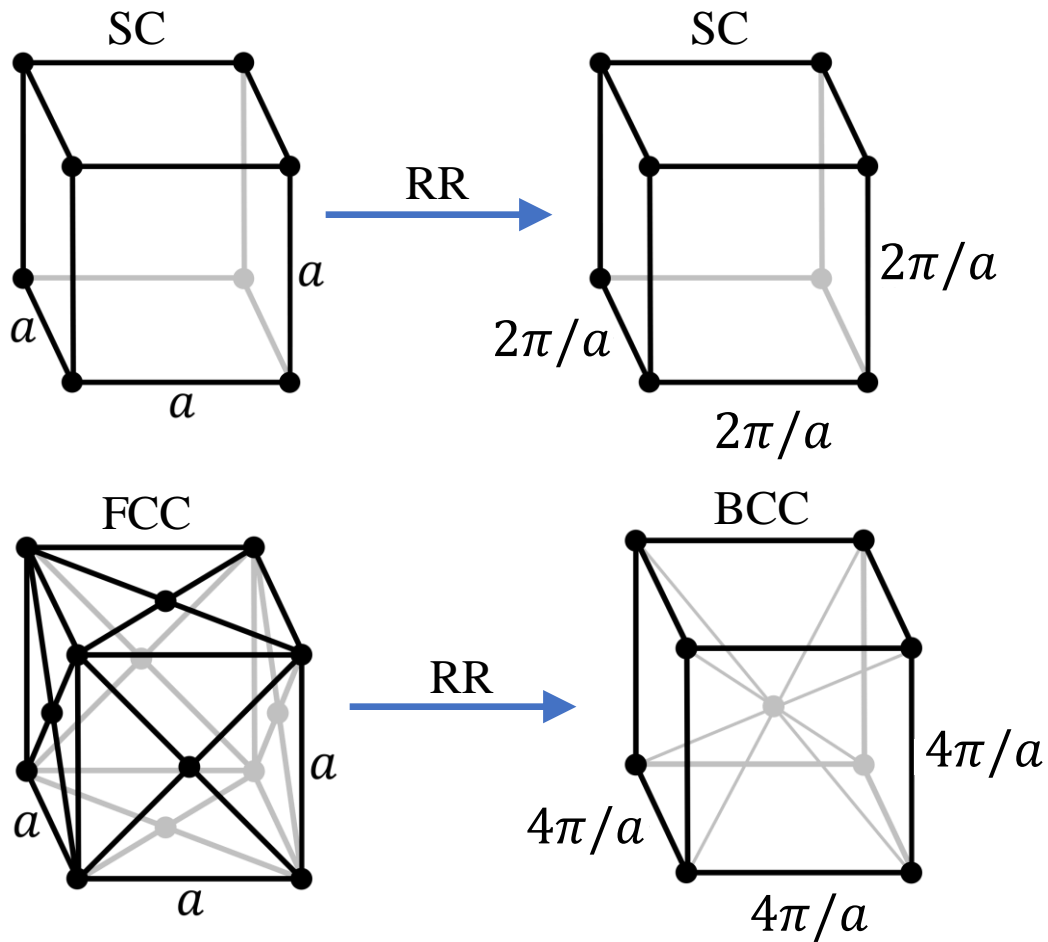
La RR de la RR es la RD.

$$|\bar{b}_1 \cdot (\bar{b}_2 \times \bar{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{v}$$

→ Volumen de la CP de la RD

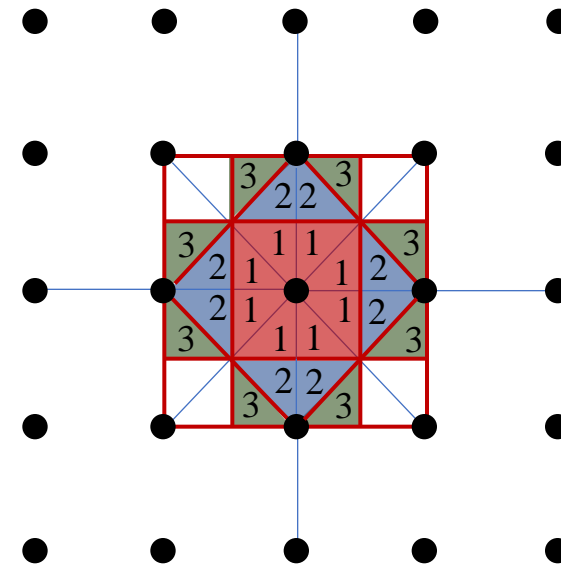
Repaso

Ejemplos de RR: SC, FCC, BCC.



Zonas de Brillouin (espacio k)

La n -ésima ZB es el conjunto de puntos a los que se llega desde el origen luego de cruzar $n-1$ planos bisectores.



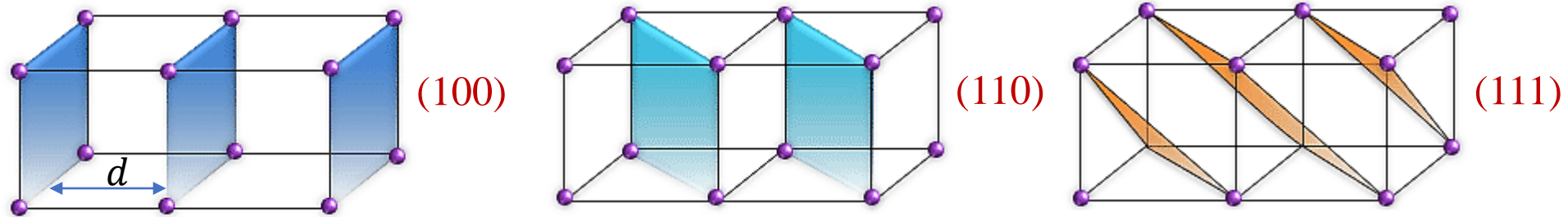
Todas las ZB tienen el mismo volumen, que es el de la CP.

→ La RR de una BCC es una FCC.

Repaso

Teorema

- 1) Para cualquier familia de planos de la red separados en una distancia d , existen vectores de la RR perpendiculares a ellos, el más corto de los cuales tiene una longitud $2\pi/d$.
- 2) De igual manera, para cualquier vector \bar{K} de la RR existe una familia de planos de la red normales a \bar{K} separados una distancia d , donde $2\pi/d$ es la longitud del vector de la RR más corto paralelo a \bar{K} .

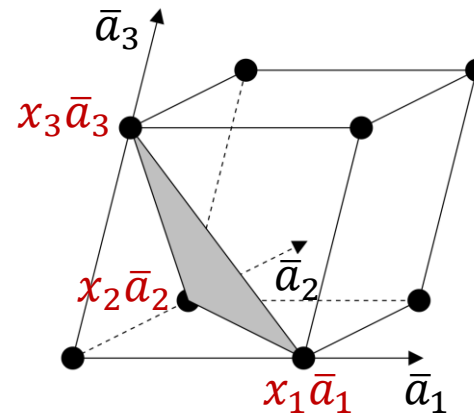


Índices de Miller

Un plano con índices h, k, l es normal al vector de la RR $h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + l\bar{b}_3$; $h, k, l \in \mathbb{Z}$ y no tienen factor común.

Para la SC, BCC y FCC se suelen tomar CU cúbicas.
Familias de planos de igual simetría: $\{hkl\}$.

Para especificar direcciones en la RD: $[n_1 n_2 n_3]$.

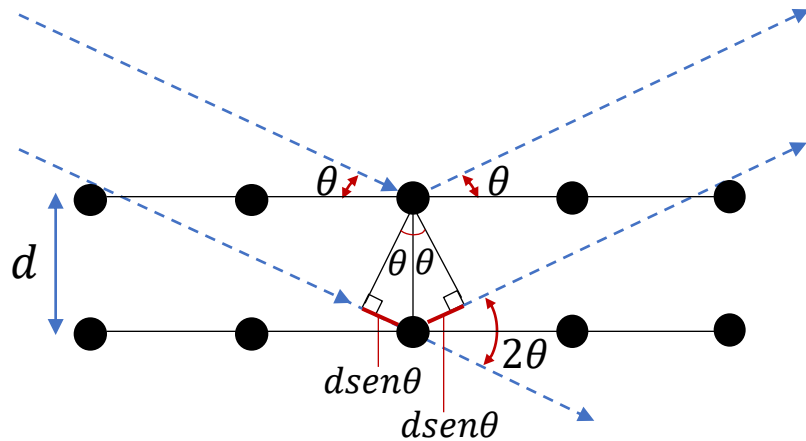


$$h:k:l = \frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3}$$

Repaso

Formulación de Bragg

Rayos reflejados especularmente por planos cristalinos.

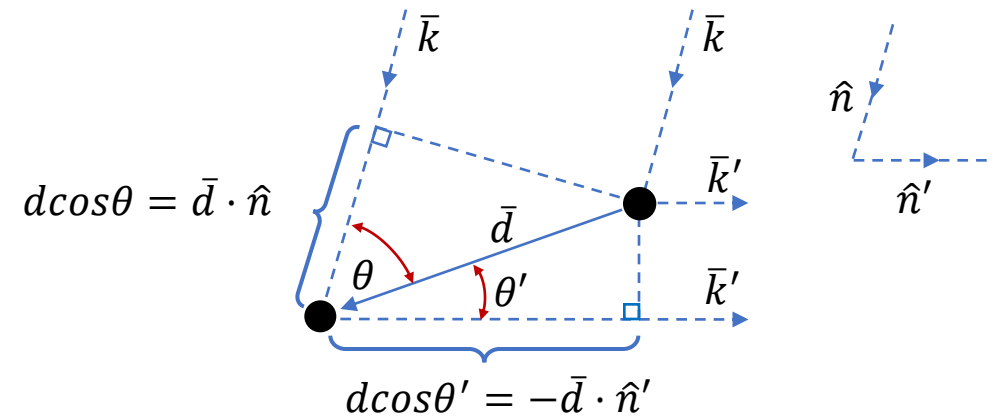


Interferencia constructiva: $2d \sin \theta = n\lambda, n \in \mathbb{Z}$

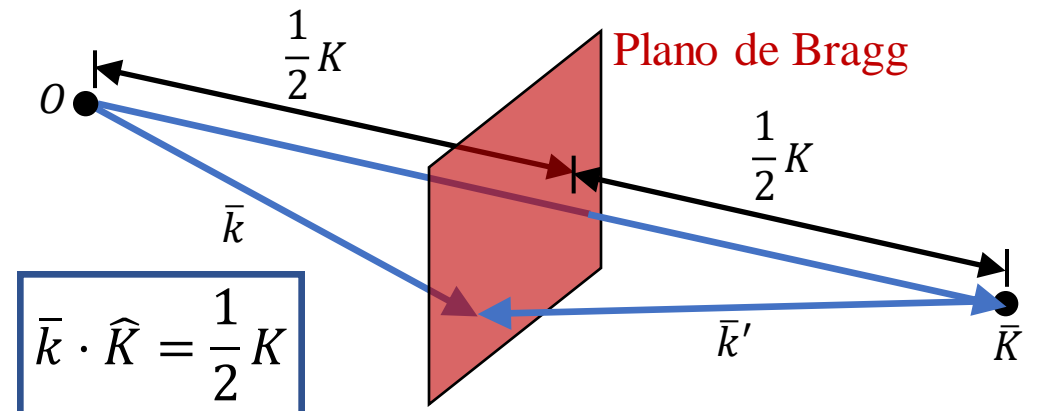
Un máximo de difracción de Laue corresponde a un cambio de vector de onda dado por $\bar{K} \in \mathbb{R}^3$, que equivale a una reflexión de Bragg por los planos de la RD perpendiculares a \bar{K} . El orden n es el cociente entre K y K_0 (vector de la RR más corto $\parallel \bar{K}$, $K_0 = 2\pi/d$).

Formulación de von Laue

Tratamos a cada átomo independientemente.



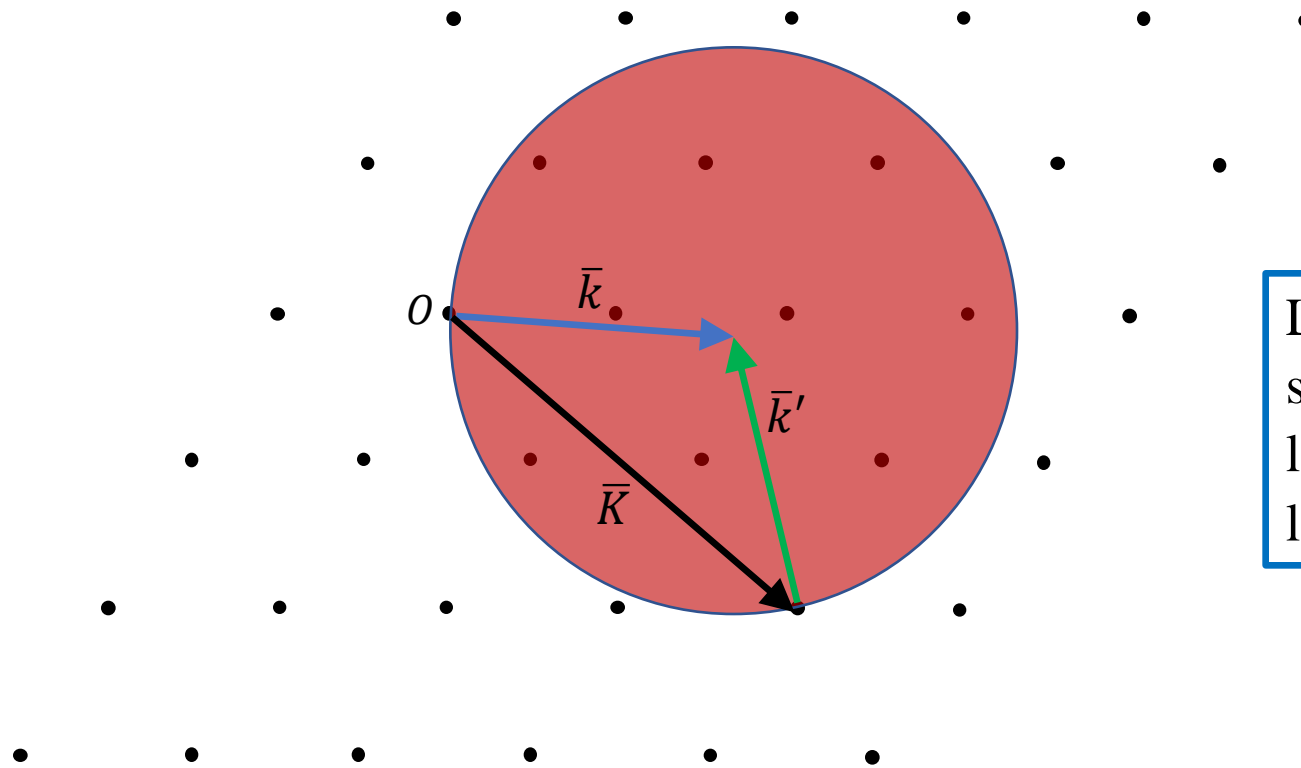
Interferencia constructiva: $\bar{K} = \bar{k} - \bar{k}' \in \mathbb{R}^3$



Difracción de Rayos X: Construcción de Ewald

Construcción de Ewald (espacio k)

Construimos una esfera centrada en la punta de \bar{k} (vector de onda incidente), de radio k .

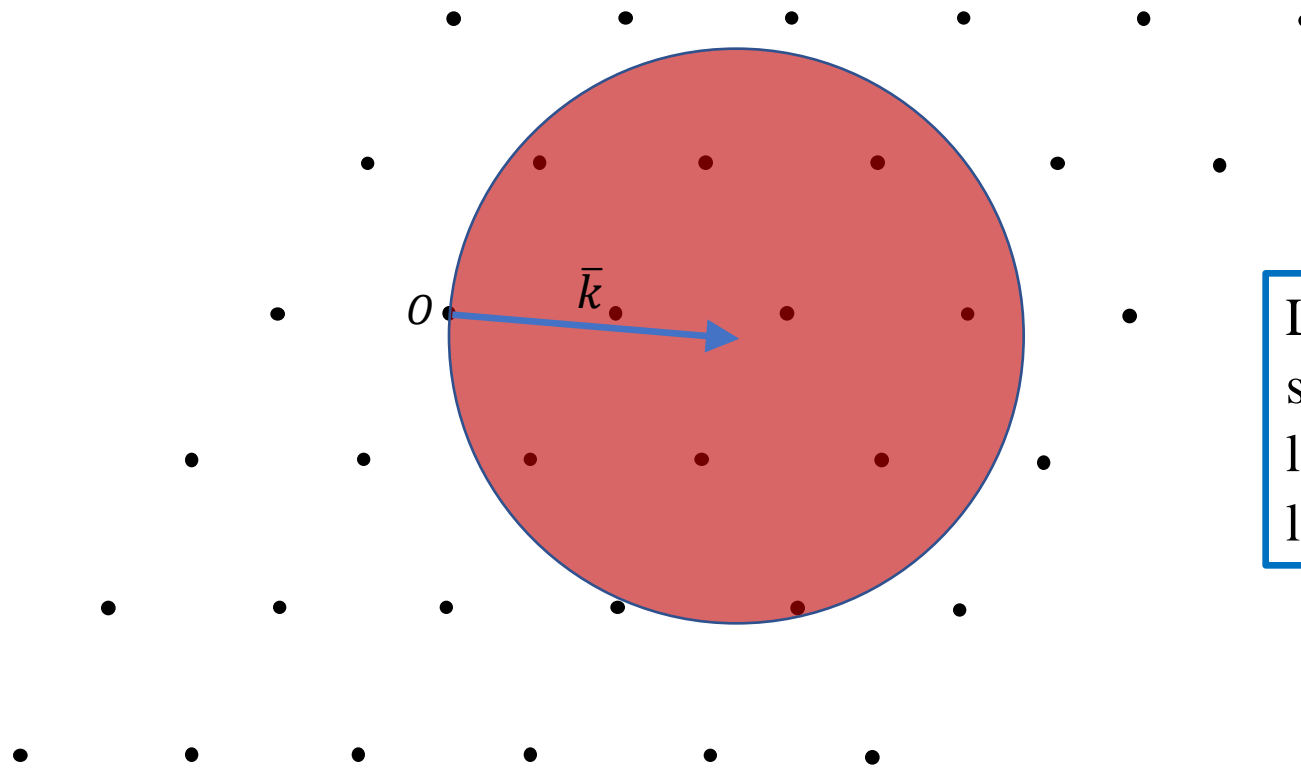


La condición de Laue se satisface sólo si la superficie de la esfera interseca a un punto de la RR (además del origen).

Difracción de Rayos X: Construcción de Ewald

Construcción de Ewald (espacio k)

Construimos una esfera centrada en la punta de \bar{k} (vector de onda incidente), de radio k .



La condición de Laue se satisface sólo si la superficie de la esfera interseca a un punto de la RR (además del origen).

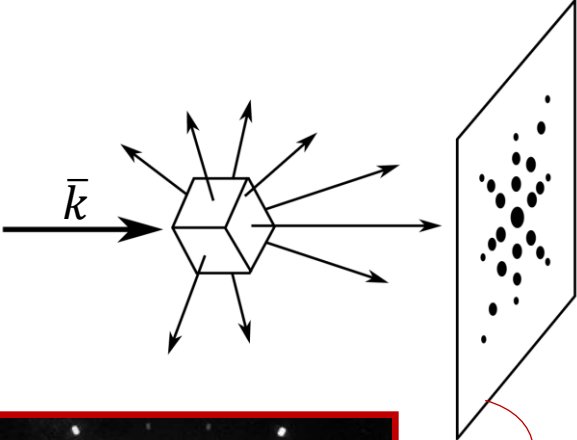
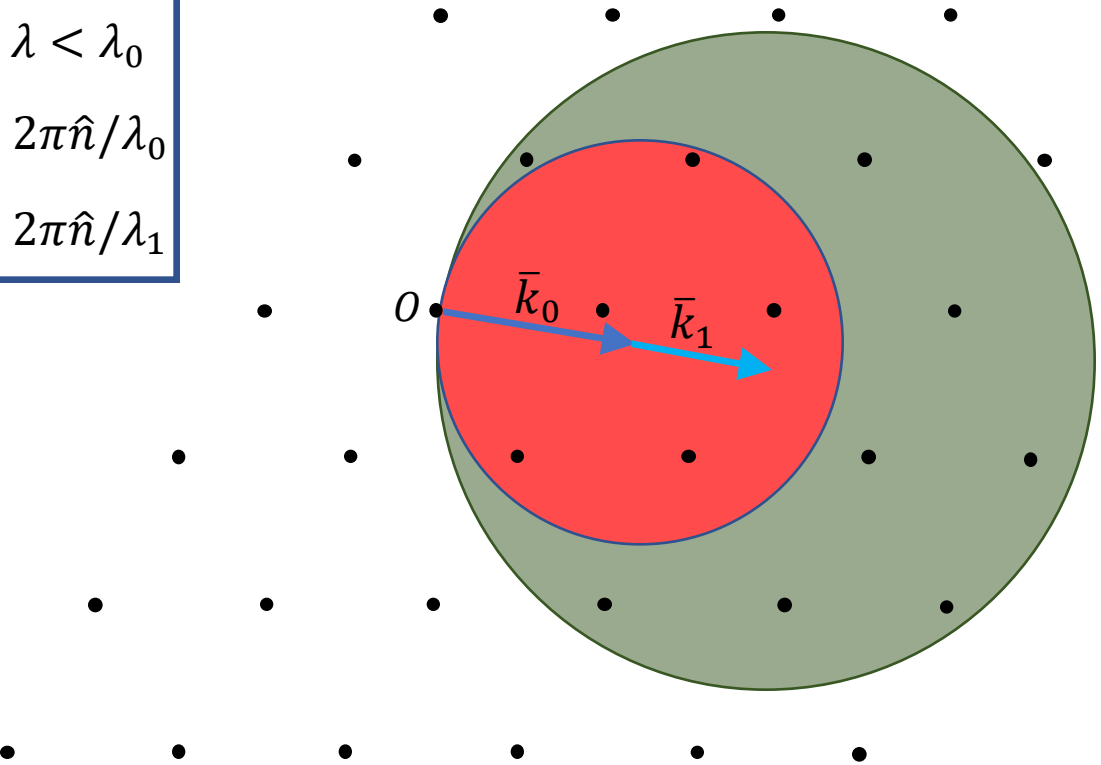
En general no habrá un punto de la RR intersecando a la superficie de la esfera de Ewald.

Difracción de Rayos X: Método de Laue

Método de Laue

Se utiliza un haz de rayos X no monocromático para asegurar la ocurrencia de máximos de Bragg.

$$\lambda_1 < \lambda < \lambda_0$$
$$\bar{k}_0 = 2\pi\hat{n}/\lambda_0$$
$$\bar{k}_1 = 2\pi\hat{n}/\lambda_1$$



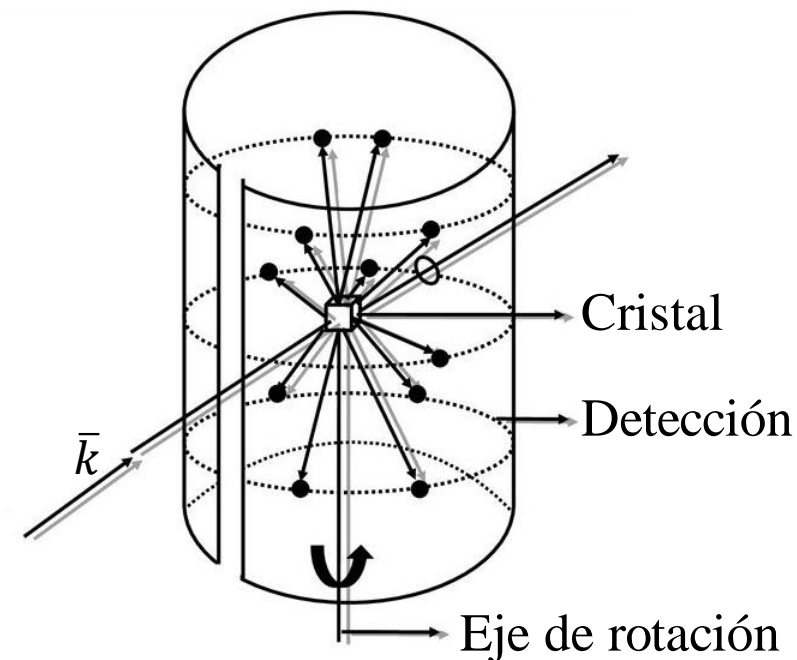
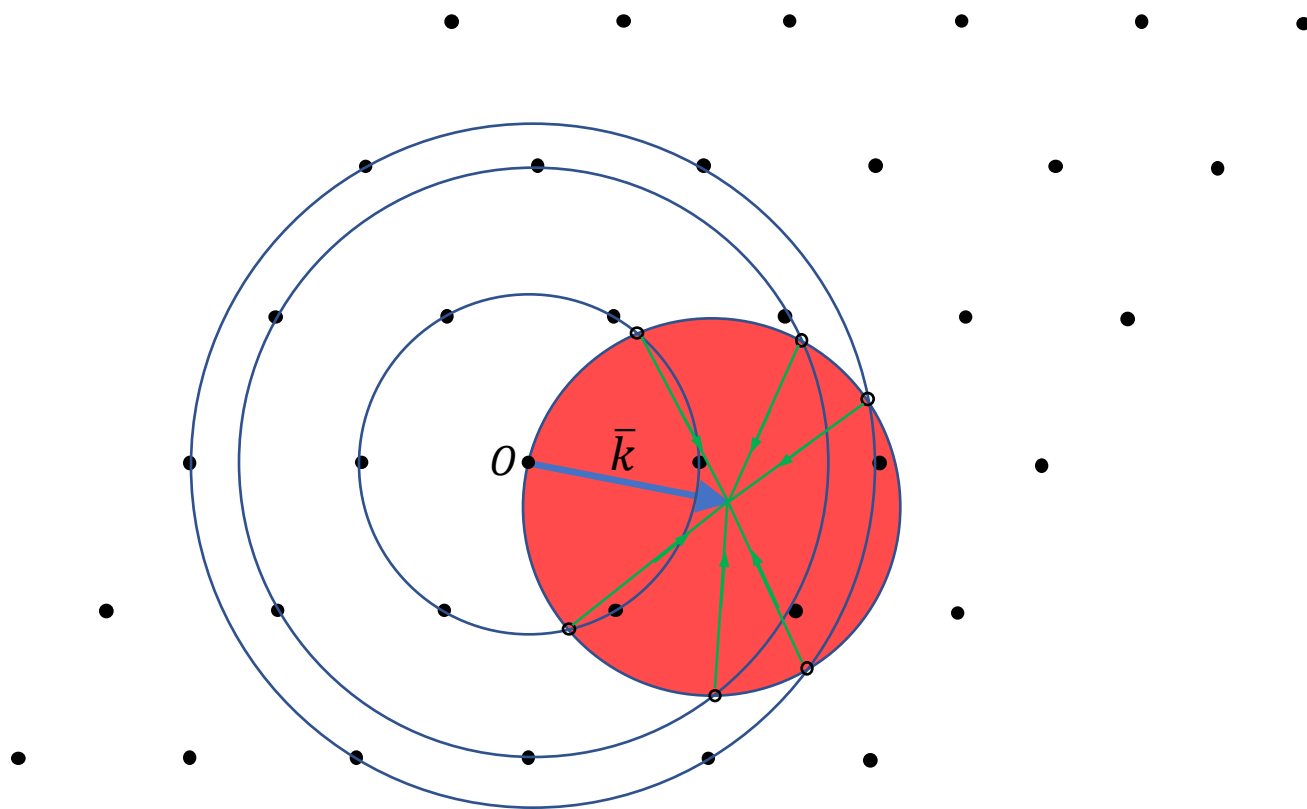
<https://www.xtal.iqfr.csic.es/>

Se observan máximos de Bragg para los puntos ubicados entre las dos esferas.

Difracción de Rayos X: Cristal rotante

Método del cristal rotante

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

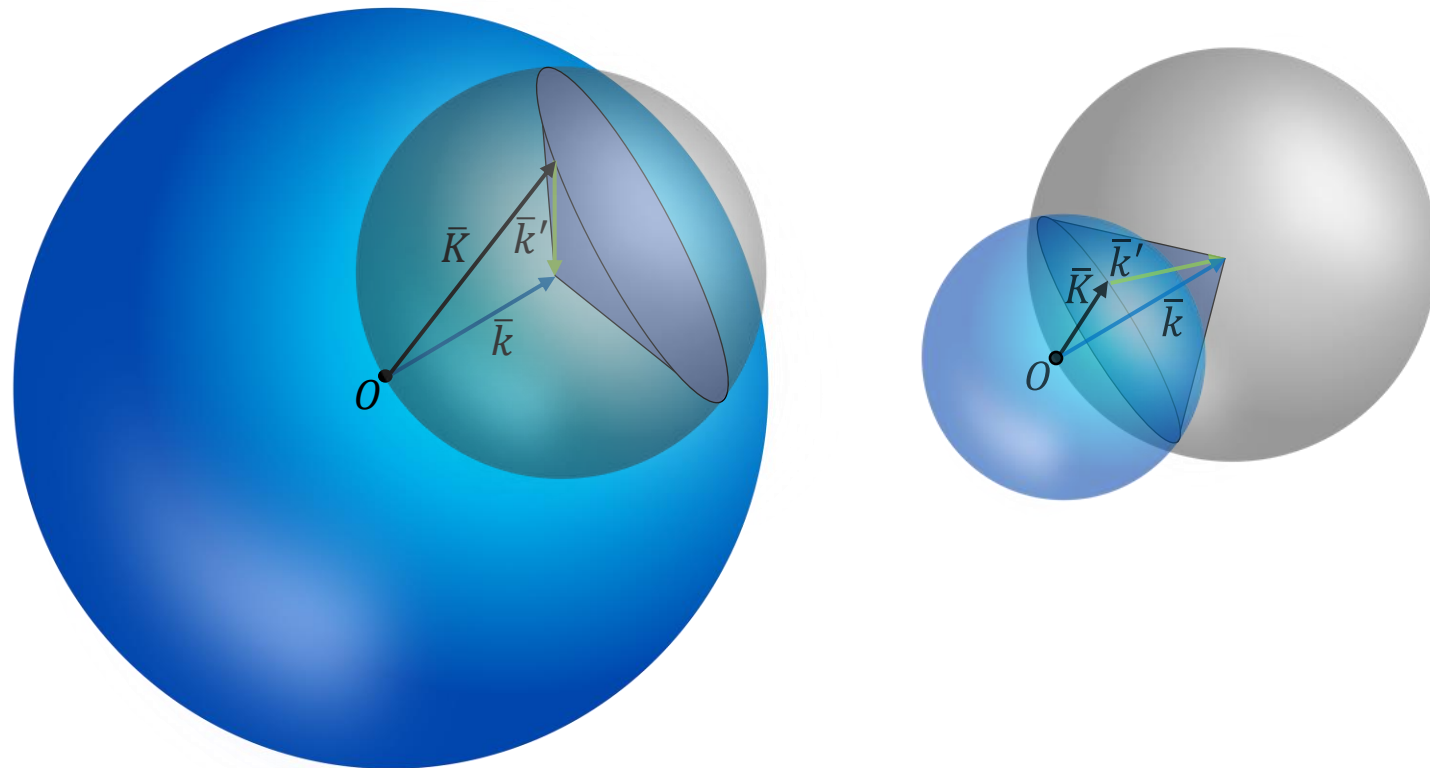
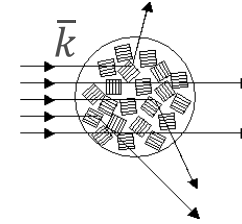


Se producen reflexiones de Bragg cuando puntos de la RR intersecan la superficie de la esfera.

Difracción de Rayos X: Método de polvo

Método de polvo o de Debye-Scherrer

Se realiza un promedio isotrópico utilizando una muestra policristalina o de polvo.



Cada partícula de polvo presenta una orientación al azar frente al haz incidente. Se combinan todos los patrones de difracción para todas las orientaciones posibles de un cristal.

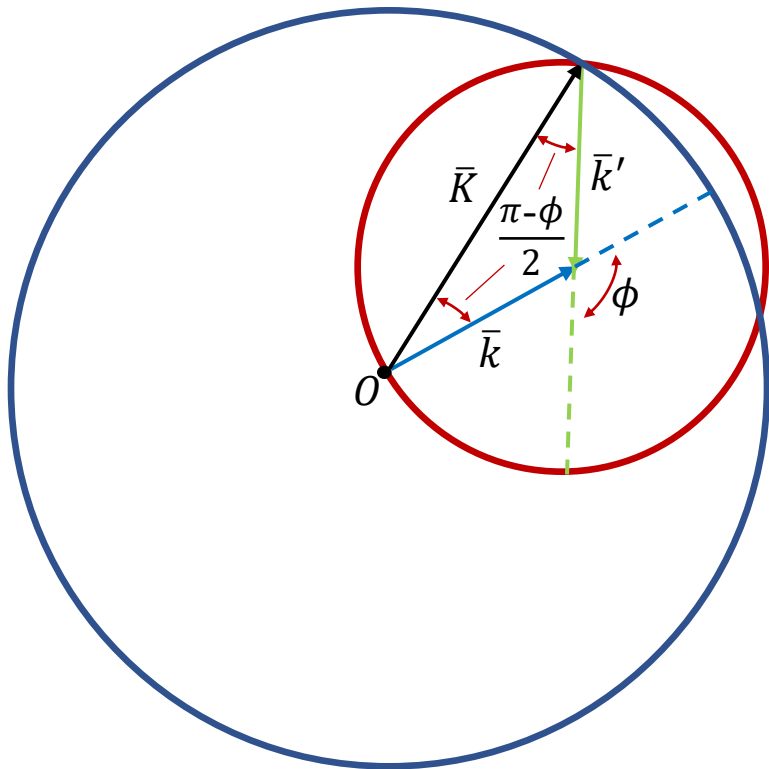
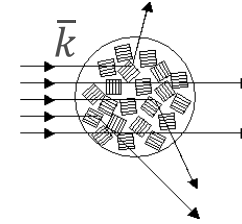
Es equivalente al método del cristal rotante, agregando todas las posibles variaciones para el eje de rotación.

Se observan anillos de difracción provenientes de la intersección entre las dos esferas ($K < 2k$).

Difracción de Rayos X: Método de polvo

Método de polvo o de Debye-Scherrer

Se realiza un promedio isotrópico utilizando una muestra policristalina o de polvo.



Interferencia constructiva:

$$K = 2k \sin \frac{\phi}{2}$$

$$\phi = 2\theta$$

(notación de Bragg)



Cada vector \bar{K} de la RR de longitud menor a $2k$ genera un cono de radiación en un ángulo ϕ (2θ).

Cada partícula de polvo presenta una orientación al azar frente al haz incidente. Se combinan todos los patrones de difracción para todas las orientaciones posibles de un cristal.

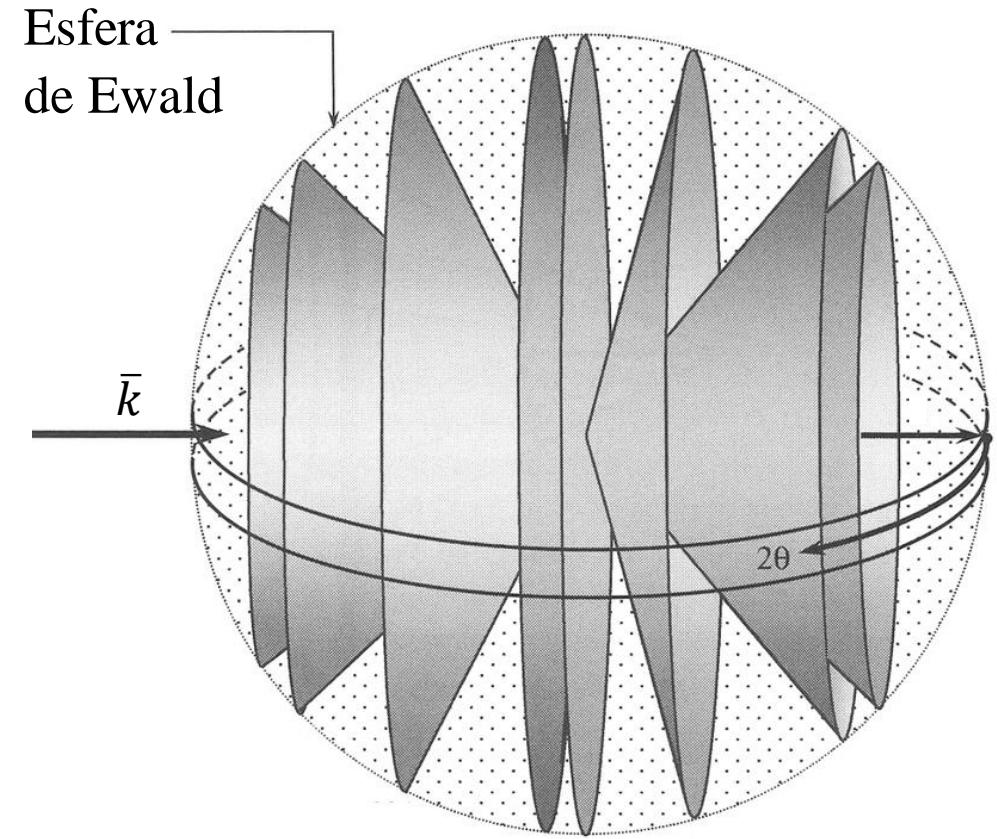
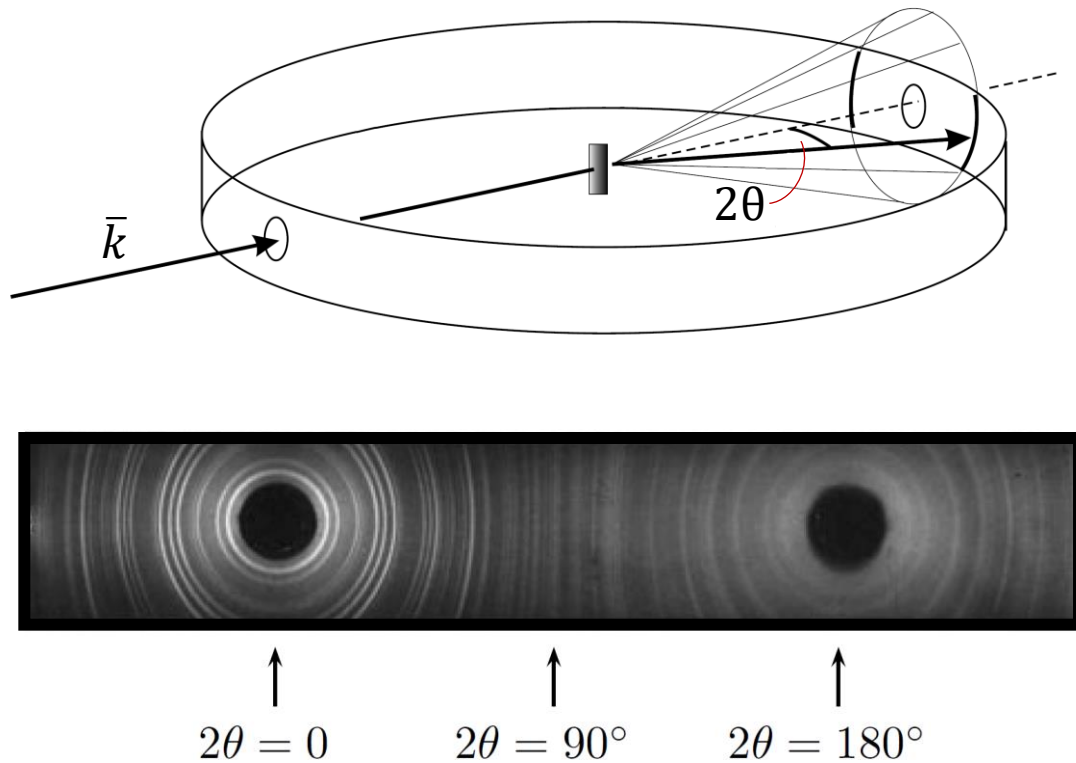
Es equivalente al método del cristal rotante, agregando todas las posibles variaciones para el eje de rotación.

Se observan anillos de difracción provenientes de la intersección entre las dos esferas ($K < 2k$).

Difracción de Rayos X: Método de polvo

Método de polvo o de Debye-Scherrer

Se realiza un promedio isotrópico utilizando una muestra policristalina o de polvo.

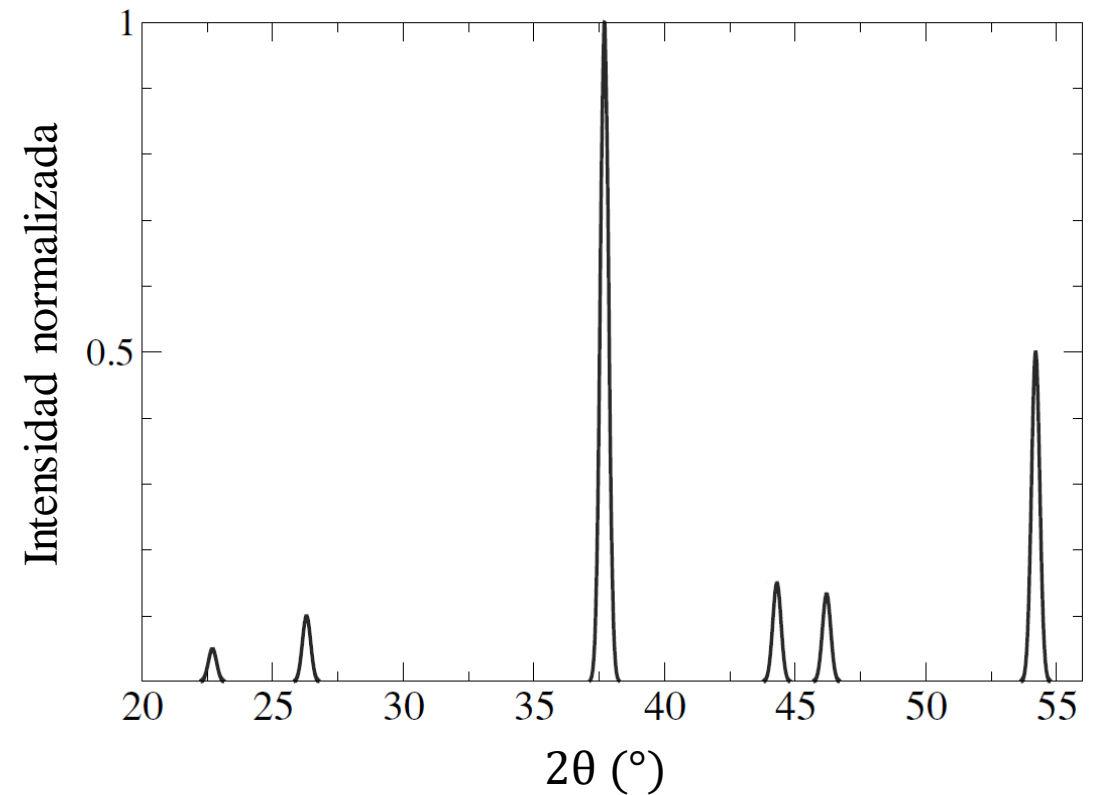
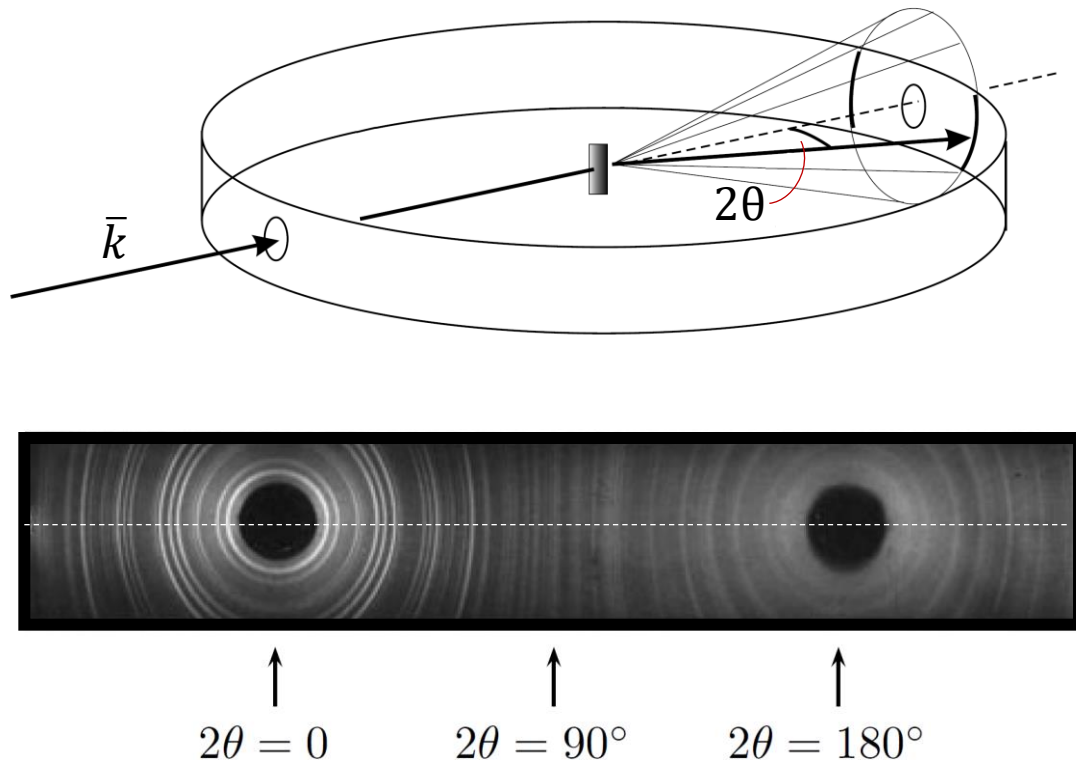


Se observan anillos de difracción provenientes de la intersección entre las dos esferas ($K < 2k$).

Difracción de Rayos X: Método de polvo

Método de polvo o de Debye-Scherrer

Se realiza un promedio isotrópico utilizando una muestra policristalina o de polvo.



Se observan anillos de difracción provenientes de la intersección entre las dos esferas ($K < 2k$).

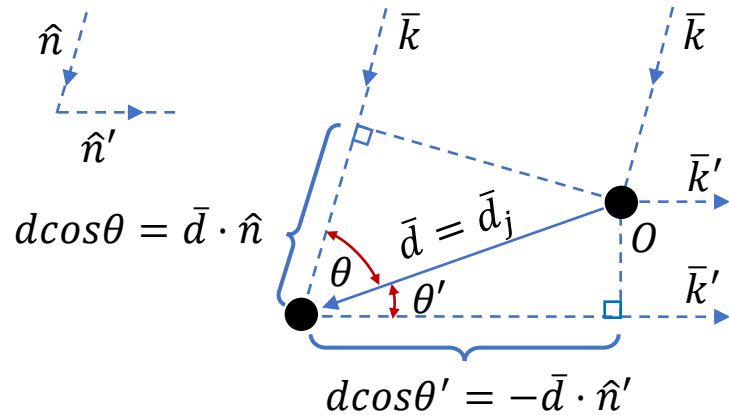
Difracción de Rayos X: Factor de estructura

Factor de estructura

Si se tiene un cristal con una base de más de un átomo, con posiciones $\bar{d}_1, \dots, \bar{d}_n$ en la celda primitiva, debe analizarse cómo interfieren entre sí.



En general lo tomamos como el origen



Diferencia de fase entre haces dispersados en $\bar{d}_1 = \bar{0}$ y \bar{d}_j

$$\bar{K} \cdot (\bar{d}_j - \bar{0}) = \bar{K} \cdot \bar{d}_j$$

↓
 $\bar{k} - \bar{k}'$

Onda proveniente de una CP de átomos idénticos

$$e^{i\bar{k}' \cdot \bar{r}} + e^{i(\bar{k}' \cdot \bar{r} + \bar{K} \cdot \bar{d}_2)} + \dots + e^{i(\bar{k}' \cdot \bar{r} + \bar{K} \cdot \bar{d}_n)}$$

$$= e^{i\bar{k}' \cdot \bar{r}} \underbrace{(e^{i\bar{K} \cdot \bar{d}_1} + e^{i\bar{K} \cdot \bar{d}_2} + \dots + e^{i\bar{K} \cdot \bar{d}_n})}_{S_K}$$



$$S_K = \sum_{j=1}^n e^{i\bar{K} \cdot \bar{d}_j}$$

$S_K \rightarrow$ Intensidad del máximo de Bragg $\propto |S_K|^2$

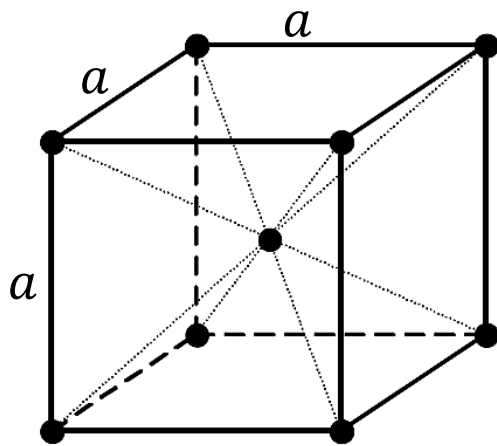
El factor de estructura determina la influencia de la interferencia entre átomos idénticos en una base sobre la intensidad del máximo de Bragg asociado a \bar{K} .

Difracción de Rayos X: Factor de estructura

Factor de estructura

Si bien no es la única fuente de dependencia en \bar{K} en la intensidad (por ejemplo, la estructura interna del átomo puede dar una dependencia), es de utilidad para determinar extinciones por interferencia destructiva.

Ejemplo: BCC como SC con una base



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

RR

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

$$\begin{cases} \bar{d}_1 = \bar{0} \\ \bar{d}_2 = (a/2)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \bar{K} &= h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + l\bar{b}_3 \\ &= (2\pi/a)(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z}) \end{aligned}$$

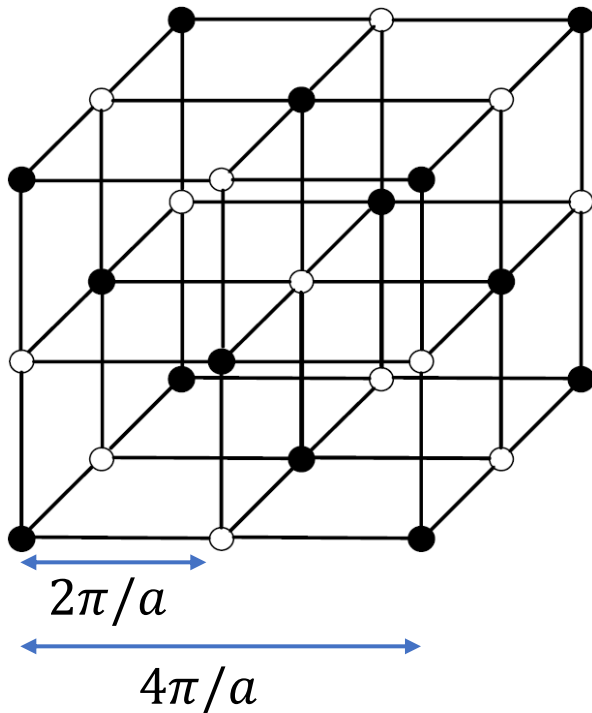
$$\rightarrow S_K = \sum_{j=1}^n e^{i\bar{K} \cdot \bar{d}_j} = 1 + e^{i\bar{K} \cdot \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})} = 1 + e^{i\pi(h+k+l)} = 1 + (-1)^{h+k+l} = \begin{cases} 2, & h+k+l \text{ par} \\ 0, & h+k+l \text{ impar} \end{cases}$$

Difracción de Rayos X: Factor de estructura

Ejemplo: BCC como SC con una base

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

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

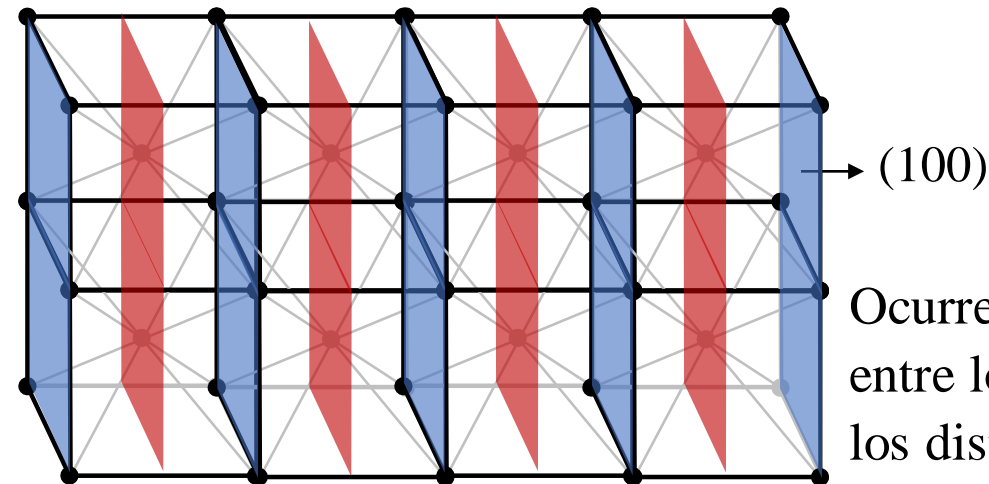


Los puntos de la RR SC con suma de coordenadas impar no presentan reflexiones de Bragg.

—————> ¡Se obtiene una FCC! (RR de una BCC)

La descripción de difracción de rayos X es correcta ya sea tratando a la red como una BCC, o como una SC + base.

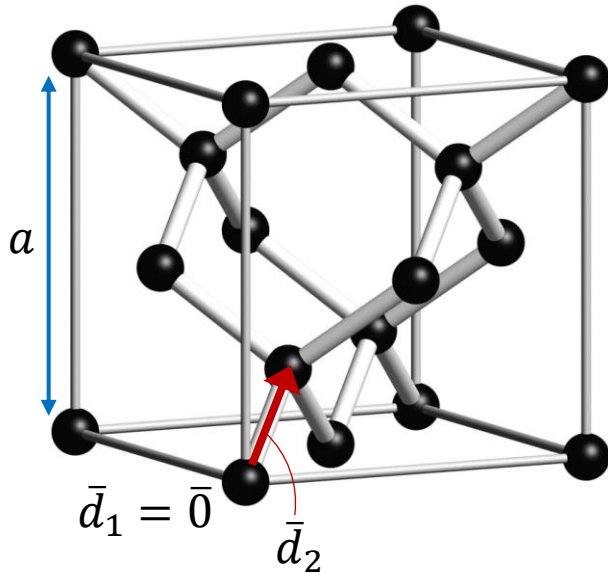
¿Cómo se entiende en el espacio real?



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



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

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

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

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

Difracción de Rayos X: Factor de forma

Factor de forma atómico

Si los átomos de la base no son idénticos:

$$S_K = \sum_{j=1}^n f_j(\bar{K}) e^{i\bar{K} \cdot \bar{d}_j} \quad f_j: \text{Factor de forma atómico. Determinado por la estructura interna del átomo en } \bar{d}_j.$$

Si los átomos son idénticos se recupera la expresión anterior, multiplicado por un factor común.

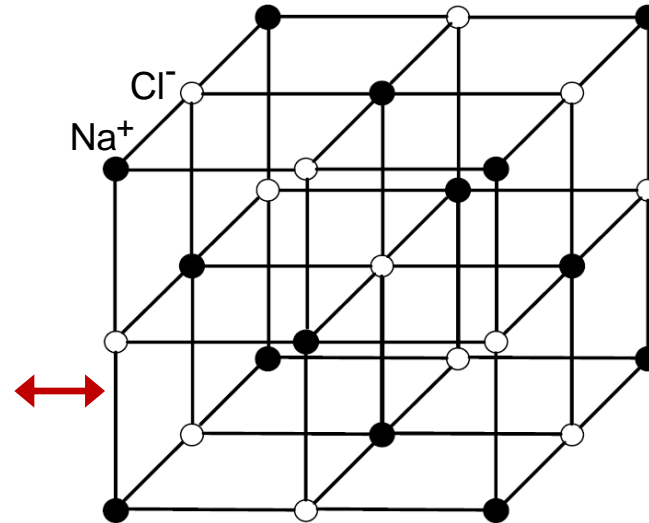
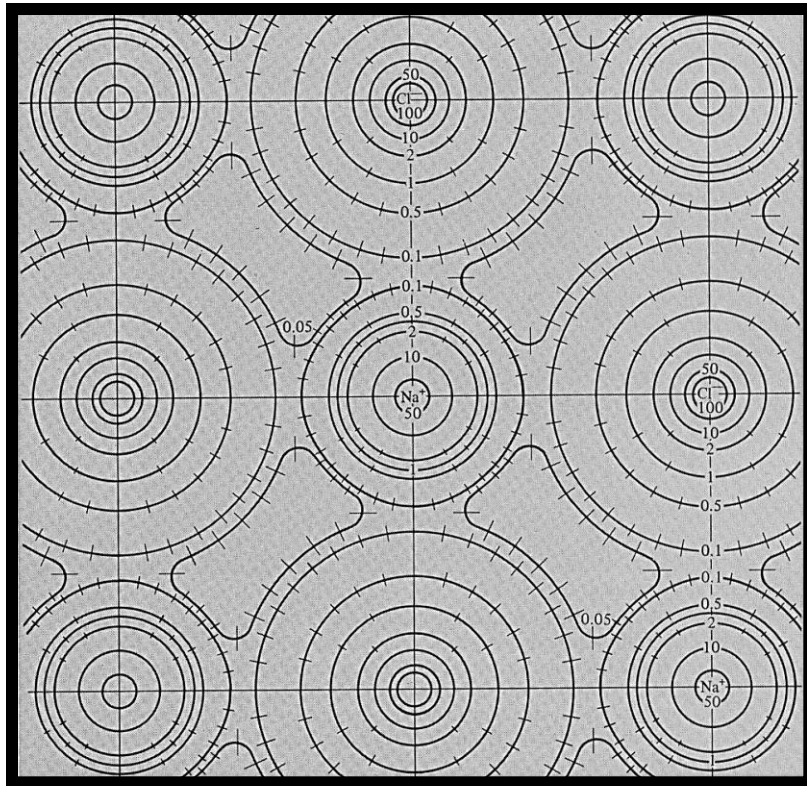
f_j está dado por la transformada de Fourier de la distribución de carga electrónica $\rho_j(\bar{r})$.

$$f_j(\bar{K}) = -\frac{1}{e} \int \rho_j(\bar{r}) e^{i\bar{K} \cdot \bar{r}} d\bar{r}$$

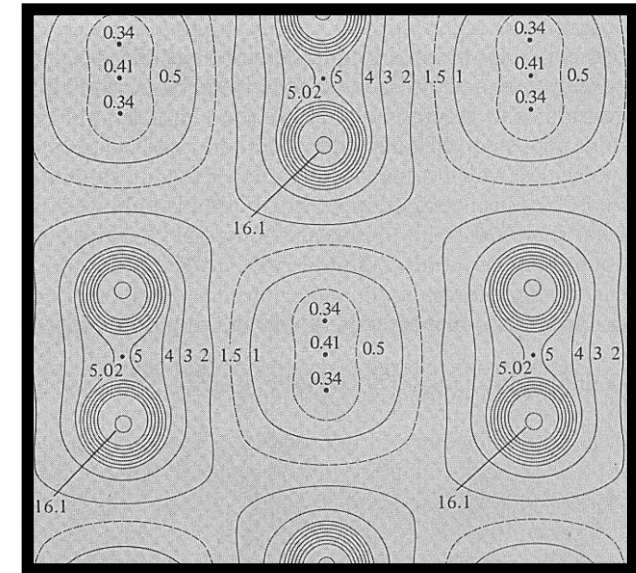
En general $S_K \neq 0$, a menos que ocurra una extinción casual.

Clasificación de los sólidos

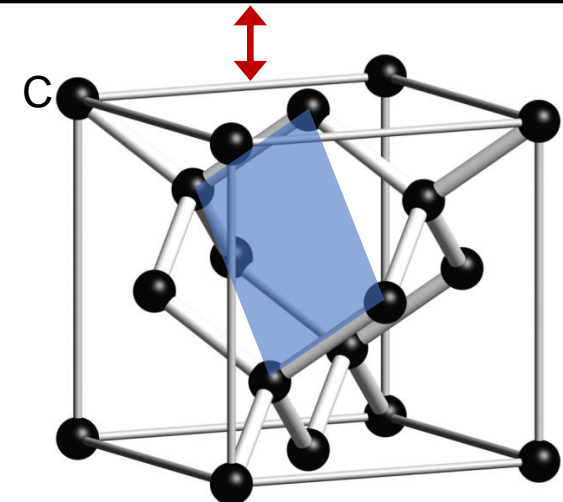
Evidencia experimental por rayos X de la distribución electrónica en sólidos



Cristal iónico



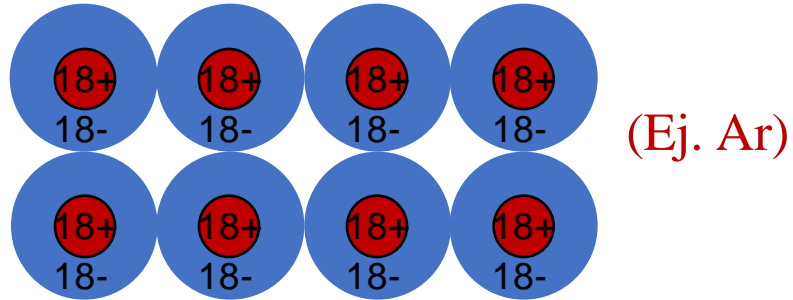
Cristal covalente



Los números indican densidad electrónica en $e/\text{Å}^3$.

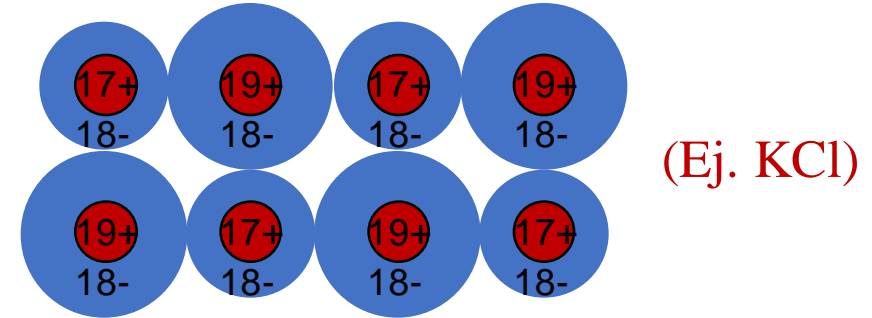
Clasificación de los sólidos

Cristal molecular (aislante)



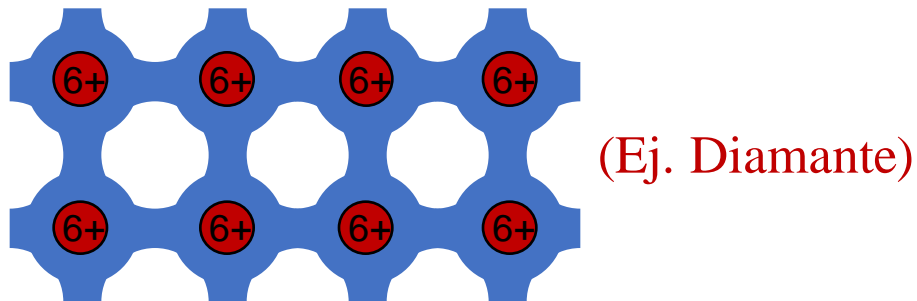
La densidad electrónica es esencialmente nula entre átomos. La atracción es débil.

Cristal iónico (aislante)



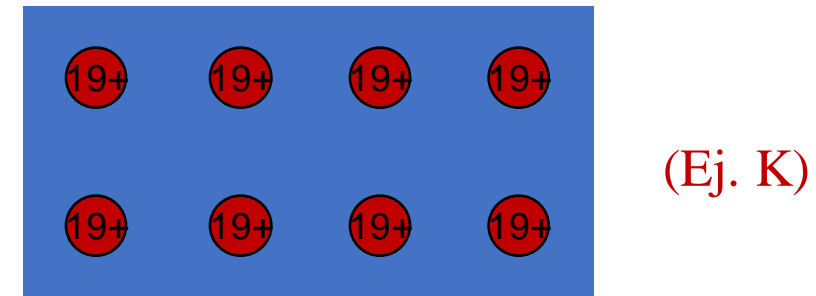
Compuesto de dos elementos diferentes, con e^- de una clase de átomo que se ligan al átomo opuesto. La atracción es más fuerte que en el cristal molecular.

Cristal covalente (aislante/semiconductor)



Los e^- no se encuentran fuertemente localizados en torno a los núcleos, y se acomodan a lo largo de direcciones preferenciales entre ellos.

Metal (conductor)



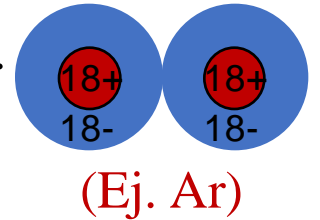
Los e^- se encuentran totalmente deslocalizados y se comportan como libres.

Clasificación de los sólidos

Cristales moleculares

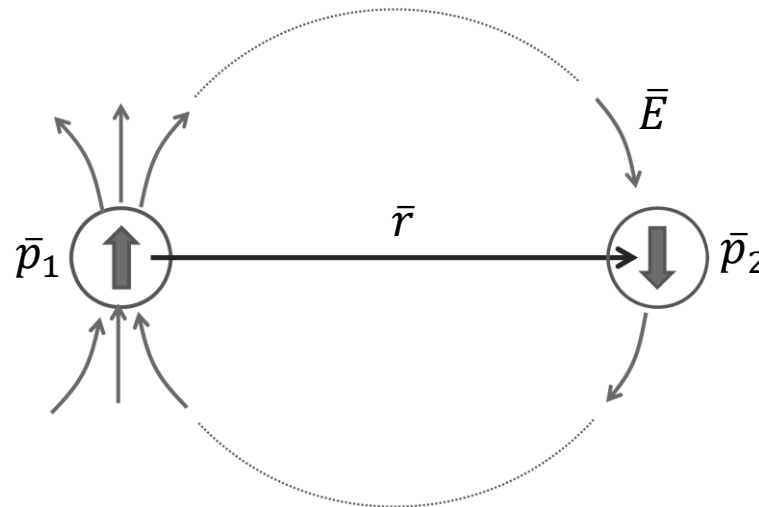
La atracción es débil (*fuerzas de van der Waals*) porque ocurre entre átomos neutros. La estructura del átomo en el sólido no difiere notablemente del átomo aislado. Suelen acomodarse en la estructura FCC.

Ejemplos por excelencia son Ne, Ar, Kr, Xe (gases nobles). Tienen un punto de fusión bajo. Otros ejemplos son O₂ y N₂ (cada entidad en el cristal es una molécula unida covalentemente).



¿Cómo ocurre la atracción?

El momento dipolar de un átomo de gas noble es nulo promediado en el tiempo. Sin embargo, se producen momentos instantáneos transitorios que polarizan átomos vecinos.



Campo eléctrico inducido: $E \propto \frac{p_1}{r^3}$

Momento dipolar inducido: $p_2 \propto E \propto \frac{p_1}{r^3}$

Energía de interacción: $\frac{p_2 p_1}{r^3} \propto \frac{p_1^2}{r^6}$

Repulsión: La impenetrabilidad entre átomos surge del principio de exclusión de Pauli y de la alta energía requerida para que un e⁻ pase de un átomo a un nivel excitado del otro átomo.

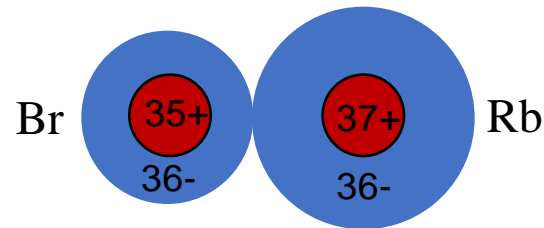
Clasificación de los sólidos

Cristales iónicos

Formados por un elemento metálico y uno no metálico. Suelen acomodarse en la estructura del NaCl y CsCl. Ocurre una transferencia electrónica de un elemento al otro, formando iones positivos y negativos que se atraen por fuerza coulombiana.

Ejemplo

Cuando se forma un cristal de RbBr, cada átomo de Br “toma” un e^- de un átomo vecino de Rb, produciendo iones Rb^+ y Br^- (formando ambas capas electrónicas cerradas).



- Afinidad electrónica del Br: 3.5 eV
 - Energía de ionización del Rb: 4.2 eV
 - Atracción coulombiana: $-e^2/3.4\text{\AA} = -4.2\text{ eV}$
- $4.2\text{ eV} - 3.5\text{ eV} - 4.2\text{ eV} = -3.5\text{ eV}$
 (Energía al formar el par)

Cristales iónicos (I-VII; II-VI)

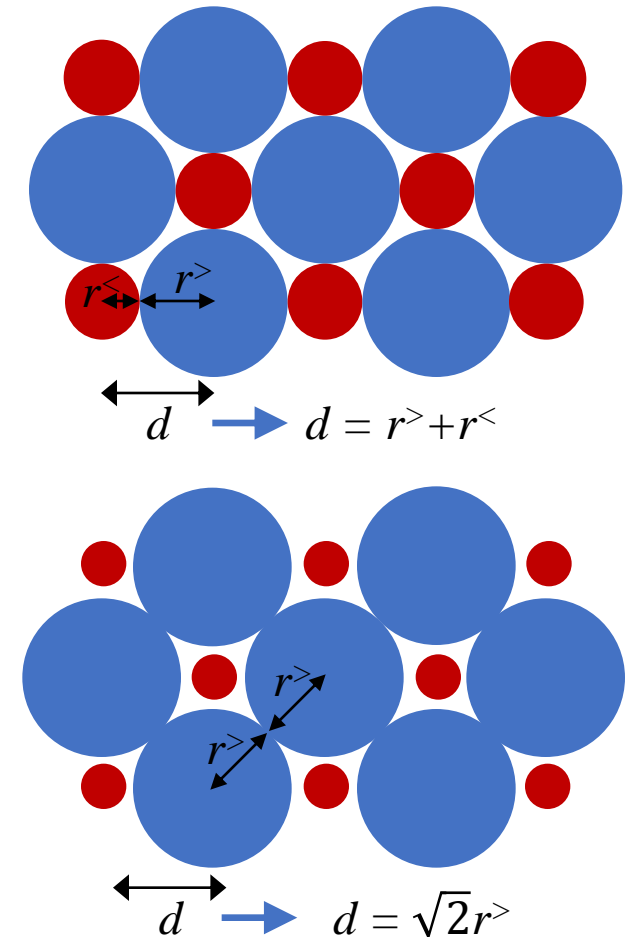
| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|----|----|-----------|----|-----|----|--------|--------|-------|-----|-----|-----|----|-----|-----|-----|------|-----|-------|-----|----|-----|----|-----|----|-----|----|-----|----|-----|----|-----|----|-----|----|-----|----|-----|----|
| 1 | IA | 1 | 1.008 | 2 | IIA | 2 | 4.0026 | 13 | IIIA | 14 | IVA | 15 | VA | 16 | VIA | 17 | VIIA | 18 | VIIIA | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 1 | H | 1 | HIDRÓGENO | 2 | He | 2 | HELIO | 13 | B | 14 | C | 15 | N | 16 | O | 17 | F | 18 | Ne | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 3 | Li | 3 | 6.94 | 4 | Be | 4 | 9.0122 | 5 | B | 6 | C | 7 | N | 8 | O | 9 | F | 10 | Ne | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 11 | Na | 11 | 22.990 | 12 | Mg | 12 | 24.305 | 13 | Al | 14 | Si | 15 | P | 16 | S | 17 | Cl | 18 | Ar | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 19 | K | 19 | 39.098 | 20 | Ca | 20 | 40.078 | 21 | Sc | 21 | Ti | 22 | V | 23 | Cr | 24 | Mn | 25 | Fe | 26 | Co | 27 | Ni | 28 | Cu | 29 | Zn | 30 | Ga | 31 | Ge | 32 | As | 33 | Se | 34 | Br | 35 | Kr |
| 37 | Rb | 37 | 85.468 | 38 | Sr | 38 | 87.62 | 39 | Y | 39 | Zr | 40 | Nb | 41 | Mo | 42 | Tc | 43 | Ru | 44 | Rh | 45 | Pd | 46 | Ag | 47 | Cd | 48 | In | 49 | Sn | 50 | Sb | 51 | Te | 52 | I | 53 | Xe |
| 55 | Cs | 55 | 132.91 | 56 | Ba | 56 | 137.33 | 57-71 | La-Lu | 72 | Hf | 73 | Ta | 74 | W | 75 | Re | 76 | Os | 77 | Ir | 78 | Pt | 79 | Au | 80 | Hg | 81 | Tl | 82 | Pb | 83 | Bi | 84 | Po | 85 | At | 86 | Rn |
| 87 | Fr | 87 | (223) | 88 | Ra | 88 | (226) | 89-103 | Ac-Lr | 104 | Rf | 105 | Db | 106 | Sg | 107 | Bh | 108 | Hs | 109 | Mt | 110 | Ds | 111 | Rg | 112 | Cn | 113 | Nh | 114 | Fl | 115 | Mc | 116 | Lv | 117 | Ts | 118 | Og |

Clasificación de los sólidos

Cristales iónicos: Modelo de esferas rígidas (cristales I-VII)

| | Li ⁺ (0.60) | Na ⁺ (0.95) | K ⁺ (1.33) | Rb ⁺ (1.48) | Cs ⁺ (1.69) |
|------------------------------|------------------------|------------------------|-----------------------|------------------------|------------------------|
| <u>F⁻ (1.36)</u> | | | | | |
| d (exp.) | 2.01 | 2.31 | 2.67 | 2.82 | 3.00 |
| $r^+ + r^-$ | 1.96 | 2.31 | 2.69 | 2.84 | 3.05 |
| <u>Cl⁻ (1.81)</u> | | | | | |
| d (exp.) | 2.57 | 2.82 | 3.15 | 3.29 | 3.57 |
| $r^+ + r^-$ | 2.41 [2.56] | 2.76 | 3.14 | 3.29 | 3.50 |
| <u>Br⁻ (1.95)</u> | | | | | |
| d (exp.) | 2.75 | 2.99 | 3.30 | 3.43 | 3.71 |
| $r^+ + r^-$ | 2.55 [2.76] | 2.90 | 3.28 | 3.43 | 3.64 |
| <u>I⁻ (2.16)</u> | | | | | |
| d (exp.) | 3.00 | 3.24 | 3.53 | 3.67 | 3.95 |
| $r^+ + r^-$ | 2.76 [3.05] | 3.11 | 3.49 | 3.64 | 3.85 |

Los números se encuentran en Å. Entre () se especifican los radios iónicos propuestos. Entre [] se especifica el valor de $\sqrt{2}r^>$.

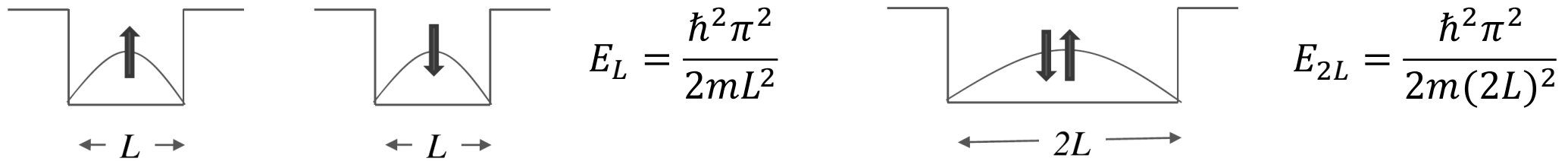


Clasificación de los sólidos

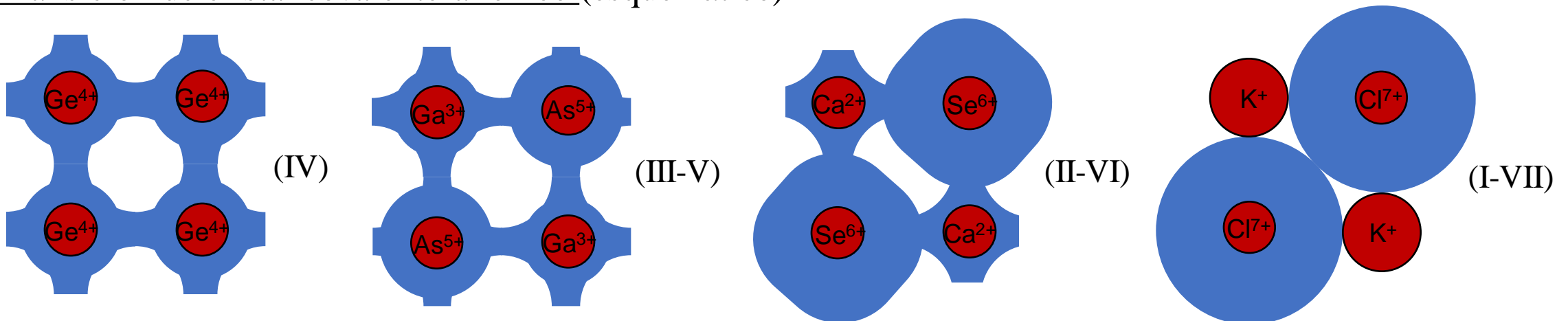
Cristales covalentes

Los electrones se encuentran parcialmente deslocalizados y se comparten entre átomos. No hay una barrera de impenetrabilidad entre nubes electrónicas como en el cristal molecular en donde las capas electrónicas están cerradas. Suelen acomodarse en la estructura de diamante (IV) o blenda de zinc (III-V).

Cualitativamente: Un esquema simple es el de un e^- en una caja. Su energía baja si la caja es de mayor tamaño.



Transición de cristal covalente a iónico (esquemático)



Clasificación de los sólidos

Metales

Los metales se caracterizan por su elevada conductividad eléctrica. Los metales alcalinos de la columna I son los que se describen adecuadamente por el modelo de Sommerfeld de electrones libres, en consistencia con la presente clasificación.

Para otros metales, como los nobles (Ag, Au, Cu), se requiere de un estudio más profundo del comportamiento electrónico, como veremos más adelante.

The diagram shows the periodic table with four classification brackets:

- Cristales iónicos:** A blue bracket spanning from Hydrogen (H) to Helium (He).
- Cristales covalentes:** A yellow bracket spanning from Boron (B) to Fluorine (F).
- Metales de transición:** A blue bracket spanning from Scandium (Sc) to Zinc (Zn).
- Cristales moleculares:** A red bracket spanning from Helium (He) to Xenon (Xe).

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|---|----|----------------------|-----------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|------|----|-----|----|----|-------|-----|----|------|----|-------|
| 1 | IA | Cristales iónicos | | | | | | | | | | | | | | | | 18 | VIIIA | | | | | |
| 1 | H | Cristales covalentes | | | | | | | | | | | | | | | | 2 | He | | | | | |
| 2 | Li | IIA | Metales de transición | | | | | | | | | | 13 | IIIA | 14 | IVA | 15 | VA | 16 | VIA | 17 | VIIA | 18 | VIIIA |
| 3 | Na | Mg | | | | | | | | | | | 5 | B | 6 | C | 7 | N | 8 | O | 9 | F | 10 | Ne |
| 4 | K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr | | | | | | |
| 5 | Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe | | | | | | |
| 6 | Cs | Ba | La-Lu | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn | | | | | | |
| 7 | Fr | Ra | Ac-Lr | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Nh | Fl | Mc | Lv | Ts | Og | | | | | | |

Resumen

- Construcción de Ewald para difracción de rayos X
- Métodos de difracción de Laue, del cristal rotante, y de polvo
- Factor de estructura y de forma
- Clasificación de los sólidos según distribución electrónica
- Cristal molecular, iónico, covalente, metal

