

Cristales y redes

Prof. Alberto Camjaya

Introducción

¿Qué es la Física de la Materia Condensada?

Es el campo de la Física que se ocupa de las propiedades macro y microscópicas de la materia. En particular, se interesa en las fases “*condensadas*”. Algunos ejemplos familiares son los sólidos y líquidos.

Es por lejos el área de la física más grande. Los temas que incluye van desde lo absolutamente práctico hasta lo absurdamente abstracto, desde ingeniería aplicada hasta desarrollos matemáticos cercanos a teoría de cuerdas.

En todos los casos, estudiando las propiedades de la materia.

Introducción

¿Por qué estudiamos Materia Condensada?

- *El mundo que nos rodea está hecho de materia condensada.*

Casi todas las preguntas que podríamos hacernos acerca del mundo a nuestro alrededor están relacionadas de alguna manera con Materia Condensada.

- *Porque es útil.*

En el último siglo nuestro conocimiento de la Materia Condensada nos ha permitido llevar a cabo grandes logros. Los nuevos materiales y sus propiedades han cambiado nuestra sociedad completamente.

Quizá el ejemplo más evidente sea el desarrollo de la electrónica.

Introducción

¿Por qué estudiamos Materia Condensada?

- Porque sus preguntas son profundas.

De hecho, muchas de las ideas que se usan en otras áreas tienen un origen que puede rastrearse hasta Materia Condensada:

- El mecanismo de “Anderson-Higgs”
- Renormalización de Wilson.
- Teorías de campo topológicas.
- Un largo etcétera.

Introducción

¿Por qué estudiamos Materia Condensada?

- Porque el reduccionismo no siempre funciona.

Entender física inevitablemente involucra entender **cómo muchos objetos interactúan entre sí**. Esto es extremadamente difícil (imposible) de resolver.

Todavía mejor, podemos entender muy bien la teoría microscópica de un sistema para luego descubrir que aparecen (**emergen**) propiedades macroscópicas inesperadas.

Ejemplo: a veces, después de juntar muchos electrones, ¡nuevas partículas emergen con carga fraccionaria!

Introducción

¿Por qué estudiamos Materia Condensada?

- Porque es un laboratorio.

Materia Condensada es quizá el mejor laboratorio para estudiar física cuántica y mecánica estadística. Es un patio de juegos variadísimo para testear efectos cuánticos-estadísticos de lo más extraños.

Introducción

Física del estado sólido

Dada la amplitud de temas incluidos en Materia Condensada, es imposible abarcarlos todos en un solo curso (¡y con un solo profesor!).

En este curso veremos una ***introducción a la Física de los sólidos***.

Cristales y redes

Cristales [Kittel, Ashcoft, Marder]

Un cristal es un arreglo regular de elementos. Un grupo pequeño de átomos que se repite siguiendo un patrón regular.

En el curso consideraremos las estructuras cristalinas encontradas experimentalmente, no trataremos de obtenerlas a partir de primeros principios.

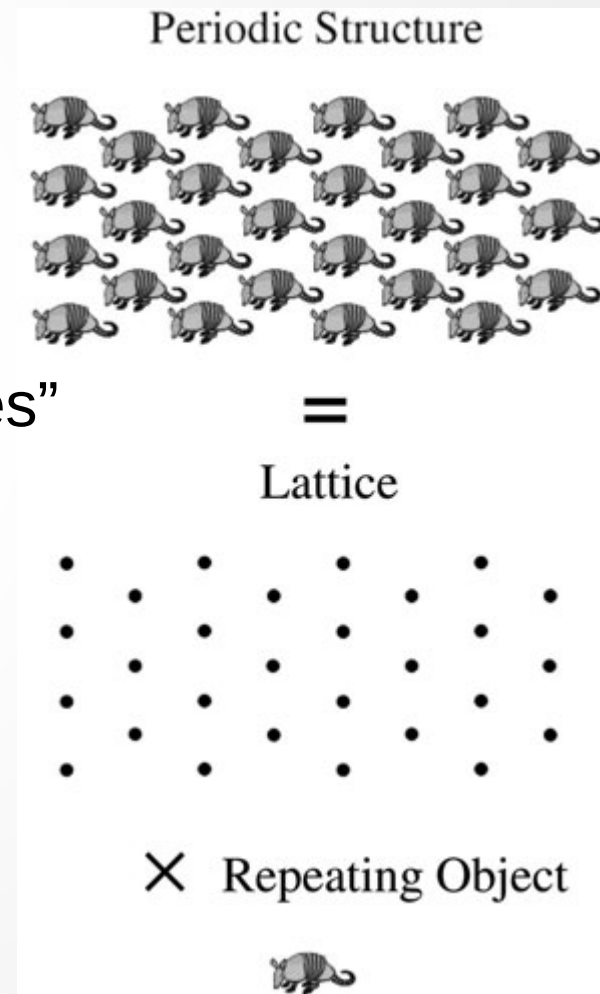
Cristales y Redes

Cristales [Kittel, Ashcoft, Marder]

Para describir un cristal perfecto (sin defectos e ilimitado) se necesitan dos cosas:

“Estructura cristalina = red de Bravais + base”

La red de Bravais da la posición de las “unidades” y la base la ubicación de los elementos que componen esas unidades.



Redes de Bravais

Redes de Bravais [Kittel, Ashcoft, Marder]

Definiciones equivalentes:

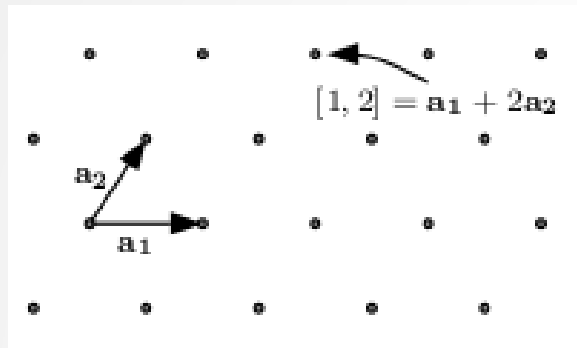
- a) Es un arreglo infinito y discreto de puntos con una estructura y orientación que es *idéntica* para cualquiera de los puntos de la red.
- b) Es un conjunto discreto de vectores, no todos coplanares, cuya suma es cerrada.
- c) Es el conjunto de puntos con vector posición:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3; \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

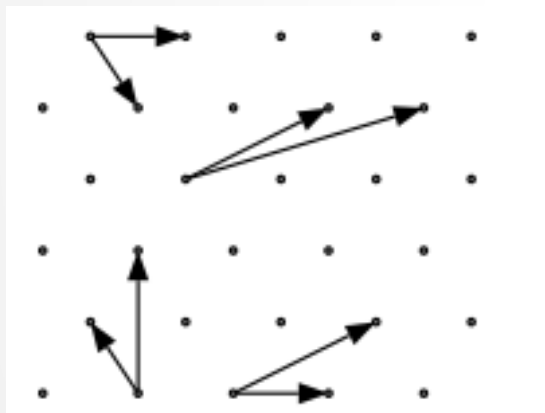
donde los vectores \mathbf{a}_i son linealmente independientes.
Se los denomina “*vectores primitivos*”.

Redes de Bravais

Redes de Bravais [Kittel, Ashcoft, Marder]

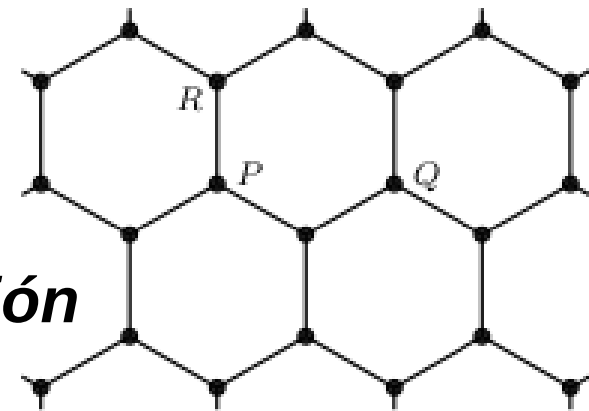


La red se define como combinación lineal entera de los vectores primitivos.



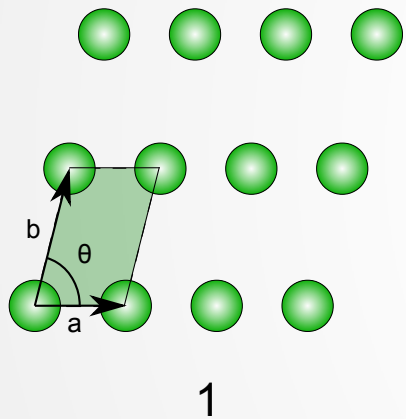
La elección de los vectores primitivos **no es única.**

La red “panel de abejas” no es una red de Bravais, P y Q no son iguales a R : **¡la orientación importa!**



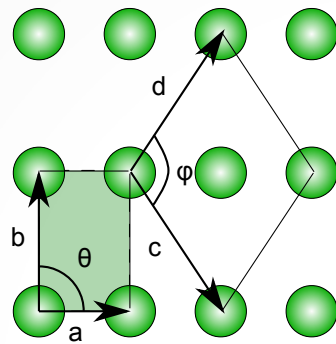
Redes de Bravais

Redes de Bravais en 2D [Kittel, Ashcoft, Marder]

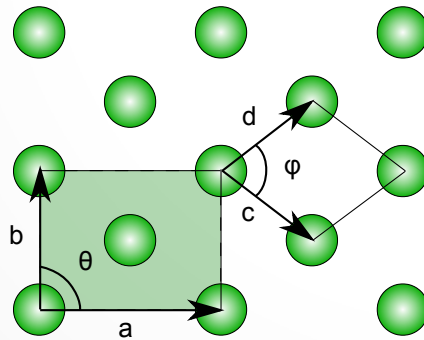


Oblicua

$$|a| \neq |b|, \theta \neq 90^\circ$$

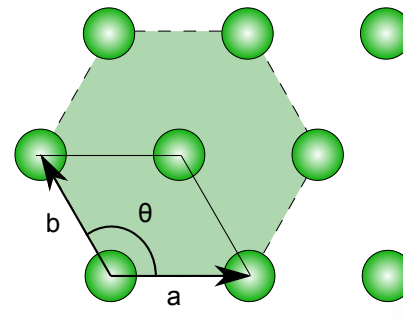


Rectangular



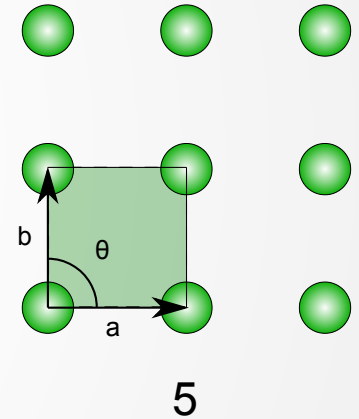
Rectangular centrada

$$|a| \neq |b|, \theta = 90^\circ \\ |c| = |d|, \phi \neq 90^\circ$$



Hexagonal

$$|a| = |b|, \theta = 120^\circ$$

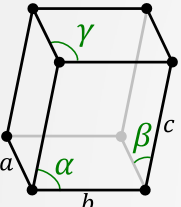
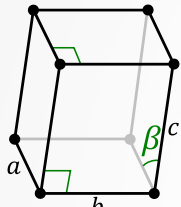
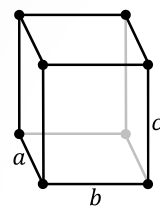
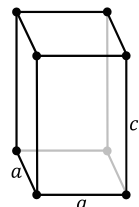
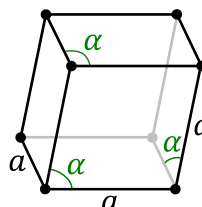
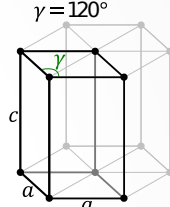
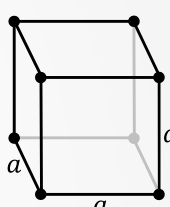
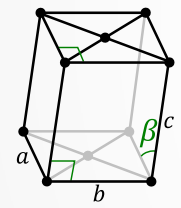
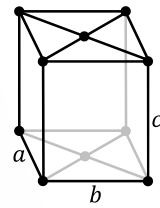
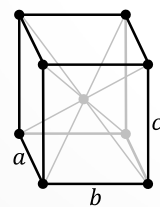
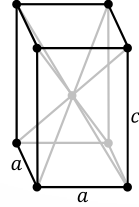
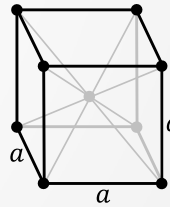
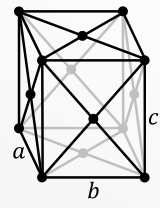
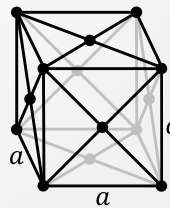


Cuadrada

$$|a| = |b|, \theta = 90^\circ$$

Redes de Bravais

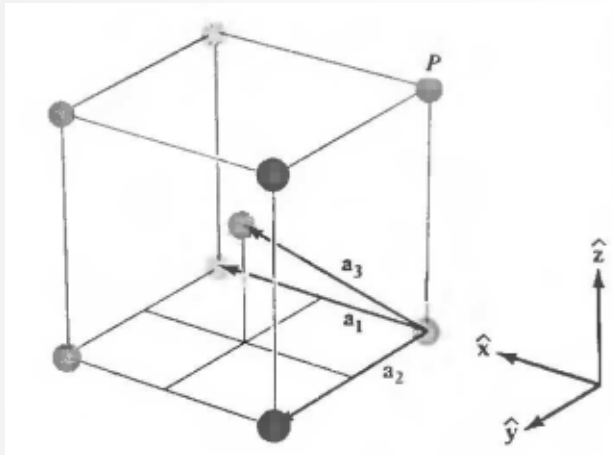
Redes de Bravais en 3D [Kittel, Ashcoft, Marder]

Triclínico	Monoclínico	Ortorrómico	Tetragonal	Romboédrico	Hexagonal	Cúbico	
							S
							C
							BC
							FC

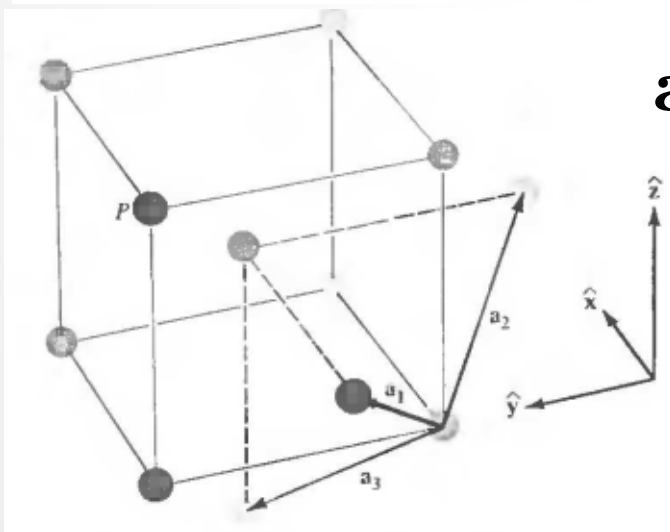
Redes de Bravais

Redes de Bravais en 3D [Kittel, Ashcoft, Marder]

Ejemplos: cúbica centrada en el cuerpo (body center cubic BCC)



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



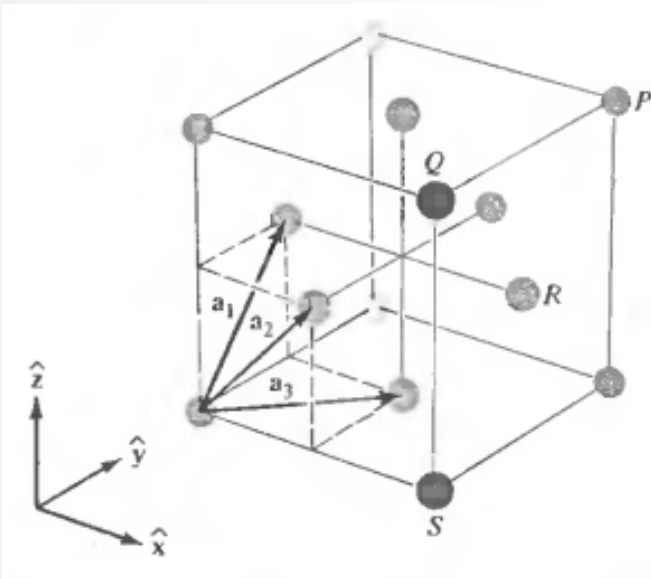
$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y})$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

Redes de Bravais

Redes de Bravais en 3D [Kittel, Ashcoft, Marder]

Ejemplos: cúbica centrada en la cara (face center cubic FCC)



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

Redes de Bravais

Redes de Bravais en 3D [Kittel, Ashcoft, Marder]

Coordinación

Es el número de sitios vecinos más cercanos a un dado sitio. Como es una red de Bravais, todos los sitios tienen el mismo número de “*primeros vecinos*”. A este número se lo denomina “coordinación”.

Por ejemplo,

- SC: 6
- BCC: 8
- FCC: 12

Redes de Bravais

Redes de Bravais en 3D [Kittel, Ashcoft, Marder]

Celda unidad o Celda unidad convencional

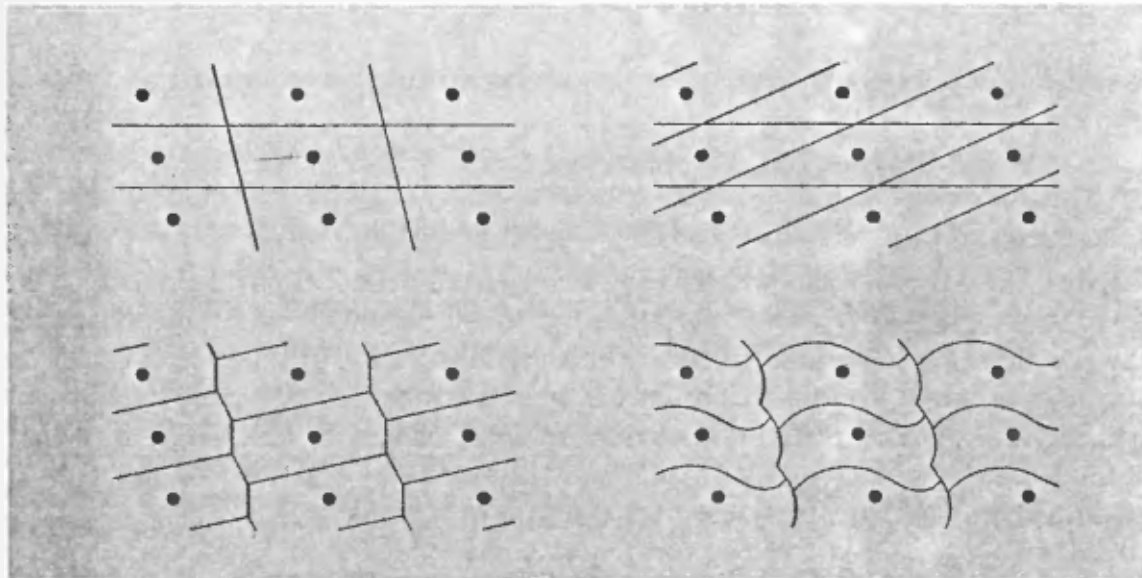
Una celda unidad es un volumen tal que cuando es trasladado en algún **subconjunto** de los vectores de Bravais llena todo el espacio, sin solapamientos.

Celda unidad primitiva o Celda primitiva

Una celda primitiva es un volumen tal que cuando es trasladado por **todos** de los vectores de Bravais llena todo el espacio, sin solapamientos. La celda primitiva contiene exactamente un punto de la red y por lo tanto su volumen es: $v = 1/n$, donde n es la densidad de puntos de la red.

Redes de Bravais

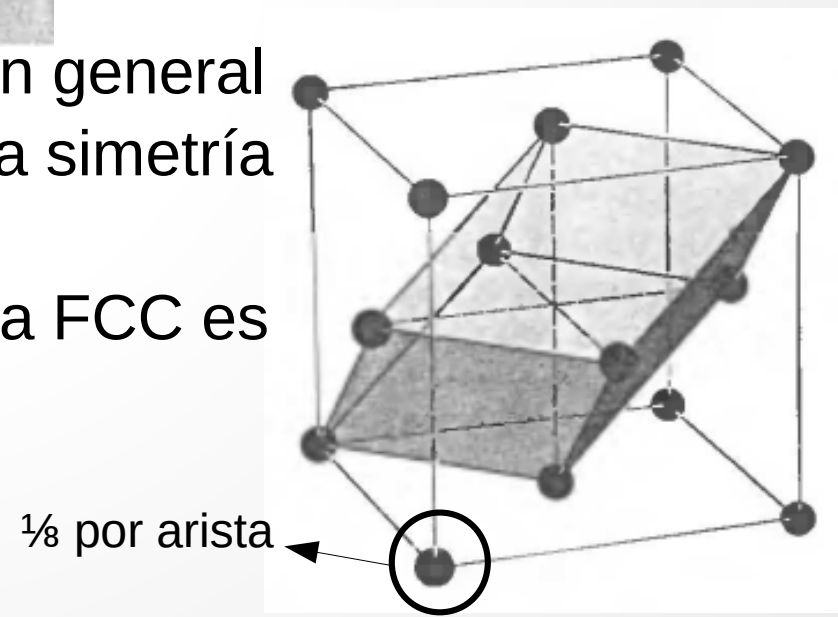
Redes de Bravais en 3D [Kittel, Ashcoft, Marder]



La celda primitiva puede elegirse de diferentes maneras.

Las celdas convencionales se eligen en general más grandes que las primitivas y con la simetría básica de la red.

En la figura, la celda convencional de la FCC es el cubo que encierra la celda unidad.



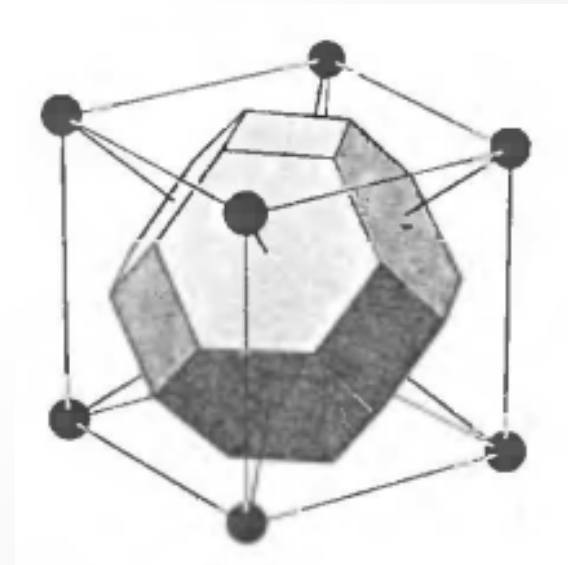
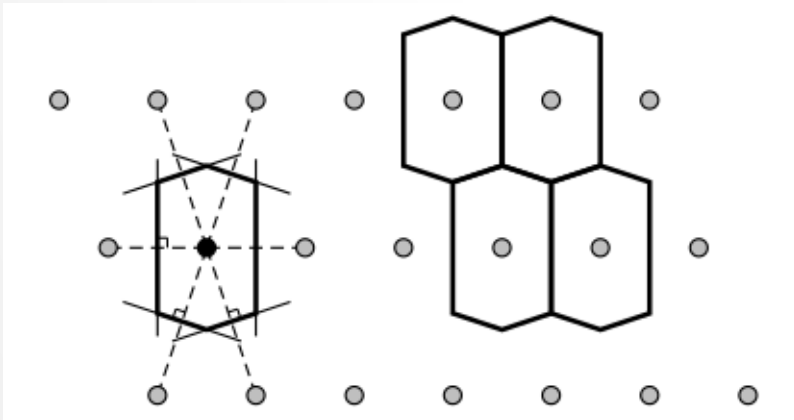
Redes de Bravais

Redes de Bravais en 3D [Kittel, Ashcoft, Marder]

Celda primitiva de Wigner-Seitz

Es la celda primitiva con la simetría completa de la red de Bravais.

Dado un punto de la red, el conjunto de puntos del espacio más cercanos al mismo que a cualquier otro punto de la red, constituyen su celda de Wigner-Seitz.



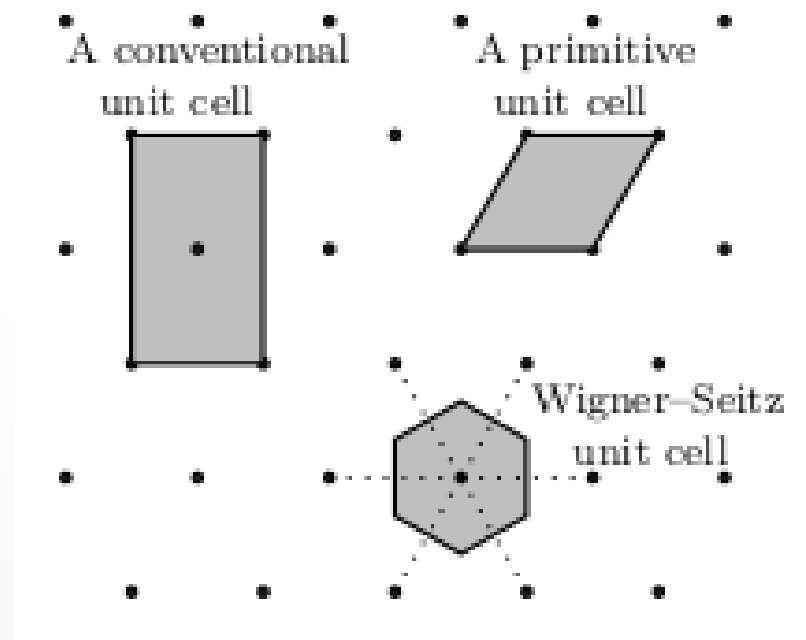
Redes de Bravais

Redes de Bravais en 3D [Kittel, Ashcoft, Marder]

Celda unidad: simetría fundamental de la red, más de un sitio.

Celda primitiva: incluye exactamente 1 punto de la red.

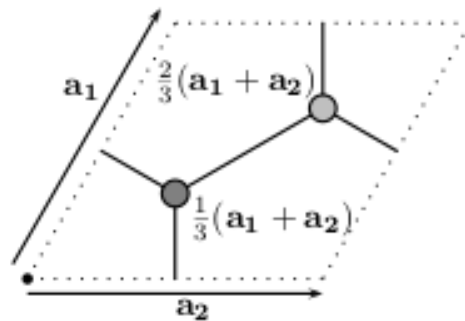
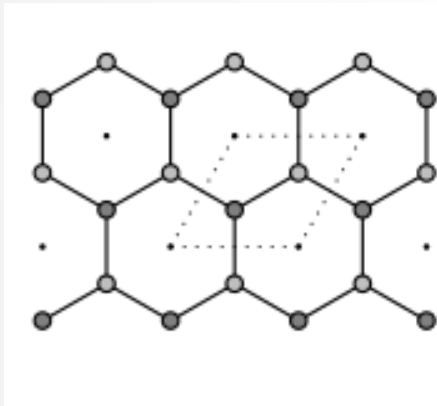
Celda de Wigner-Seitz: es primitiva y con la simetría completa de la red de Bravais.



Estructura cristalina

Redes de Bravais con base [Kittel, Ashcoft, Marder]

Una estructura cristalina esta dada por la red de Bravais subyacente junto a la descripción del arreglo de átomos en la celda primitiva.



Vectores primitivos

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}$$

Base

$$\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\} = \left\{ \frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2), \frac{2}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \right\}$$

Estructura cristalina

Redes de Bravais con base [Kittel, Ashcoft, Marder]

También puede describirse una red de Bravais como otra de mayor simetría más una base. Esto se hace a menudo para enfatizar la simetría cúbica de las redes BCC y FCC.

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

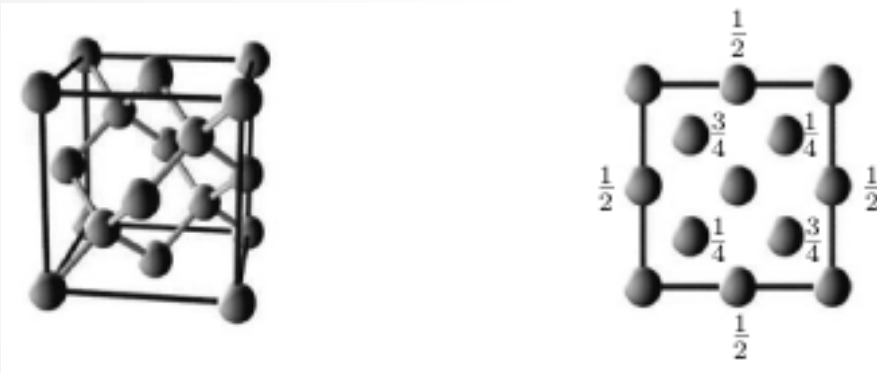
$$\text{FCC: SC} + \left\{ \mathbf{0}, \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}), \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}) \right\}$$

Estructura cristalina

Redes de Bravais con base [Kittel, Ashcoft, Marder]

Ejemplos:

Estructura diamante (dos FCC interpenetradas).



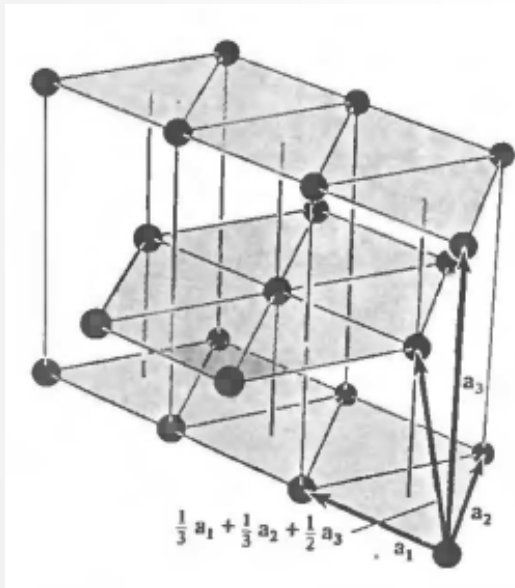
$$\text{FCC} + \left\{ \mathbf{0}, \frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \right\}$$

Estructura cristalina

Redes de Bravais con base [Kittel, Ashcoft, Marder]

Ejemplos:

Hexagonal empaquetada (HPC), son dos SH intercaladas.



$$\text{SH: } \mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}, \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{z}$$

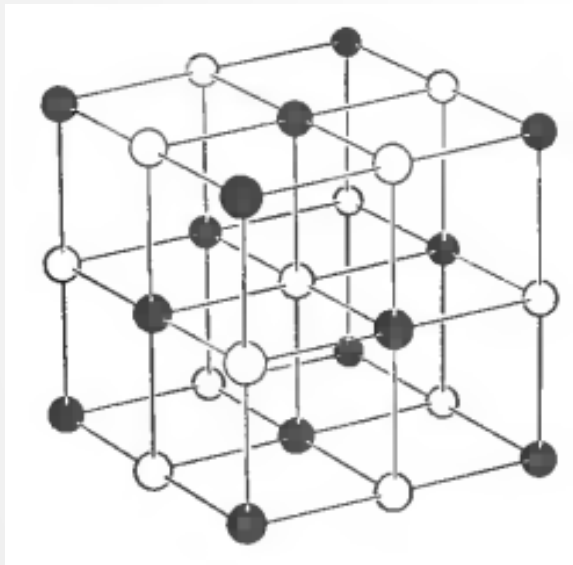
$$\text{HPC} = \text{SH} + \left\{ \mathbf{0}, \frac{\mathbf{a}_1}{3} + \frac{\mathbf{a}_2}{3} + \frac{\mathbf{a}_3}{2} \right\}$$

Estructura cristalina

Redes de Bravais con base [Kittel, Ashcoft, Marder]

Ejemplos:

Cloruro de sodio, más de un tipo de átomo.



$$\text{Estructura} = \text{FCC} + \left\{ \mathbf{0}, \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \right\}$$

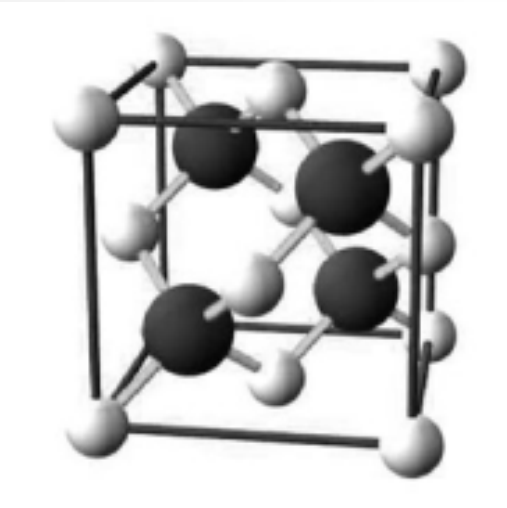
Na → $\mathbf{0}$ Cl → $\frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$

Estructura cristalina

Redes de Bravais con base [Kittel, Ashcoft, Marder]

Ejemplos:

Zincblenda, más de un tipo de átomo y no es red de Bravais.



Sulfuro de zinc

$$\text{Estructura} = \text{FCC} + \left\{ \underset{\text{Zn}}{\mathbf{0}}, \underset{\text{S}}{\frac{1}{4}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)} \right\}$$

Fin de la clase

¡Muchas gracias!