Estructura de la Materia 2

Clase 3 - Teoría

Docentes

Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Franco Mayo, Alejandra Fernández

Departamento de Física, FCEN, UBA – Segundo Cuatrimestre, 2022

Web: http://materias.df.uba.ar/edlm2a2022c2

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).

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

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

La RR es una RB

Conjunto de VP.

$$\begin{cases} \bar{b}_1 = 2\pi \dfrac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \\ \bar{b}_2 = 2\pi \dfrac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \\ \bar{b}_3 = 2\pi \dfrac{\bar{a}_1 \times \bar{a}_2}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \end{cases}$$

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

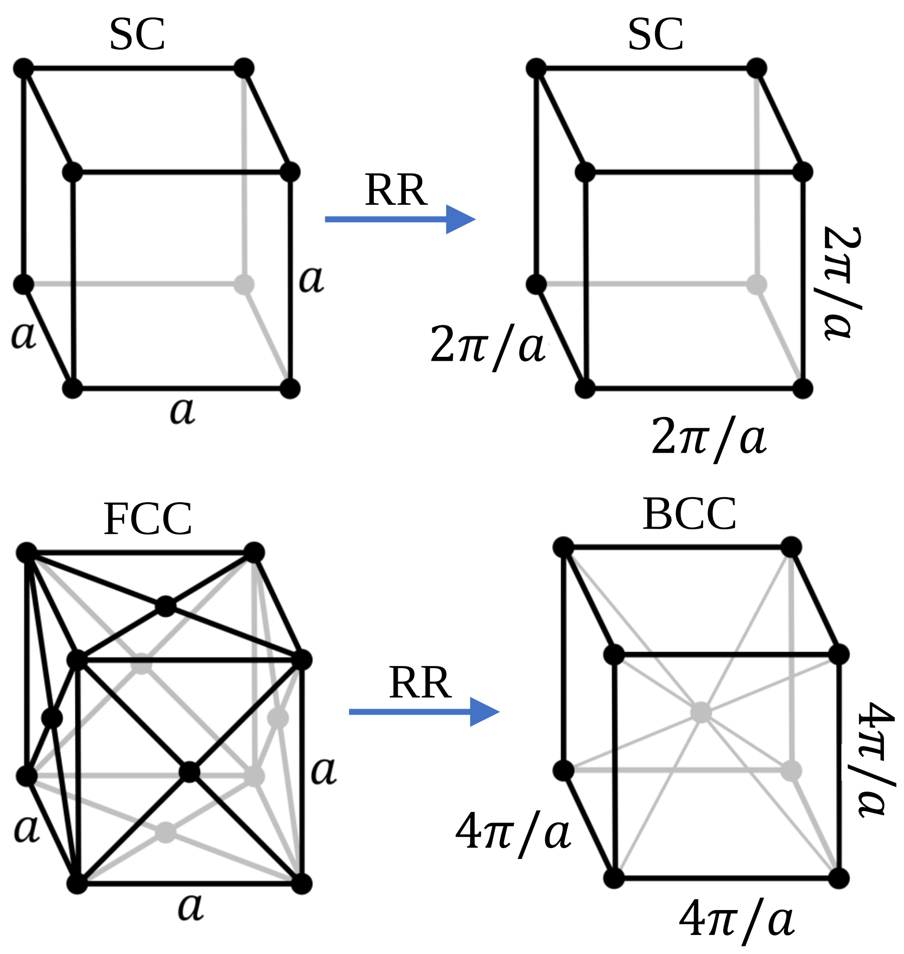
Nomenclatura: Red directa (RD) es la RB a partir de la cual se determina su RR.

La RR de la RR es la RD.

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

v : volumen de la CP de la RD

Ejemplos de RR: SC, FCC, BCC.

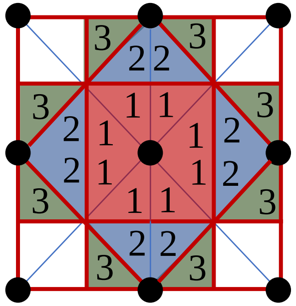


$\longrightarrow$ La RR de una BCC es una FCC.

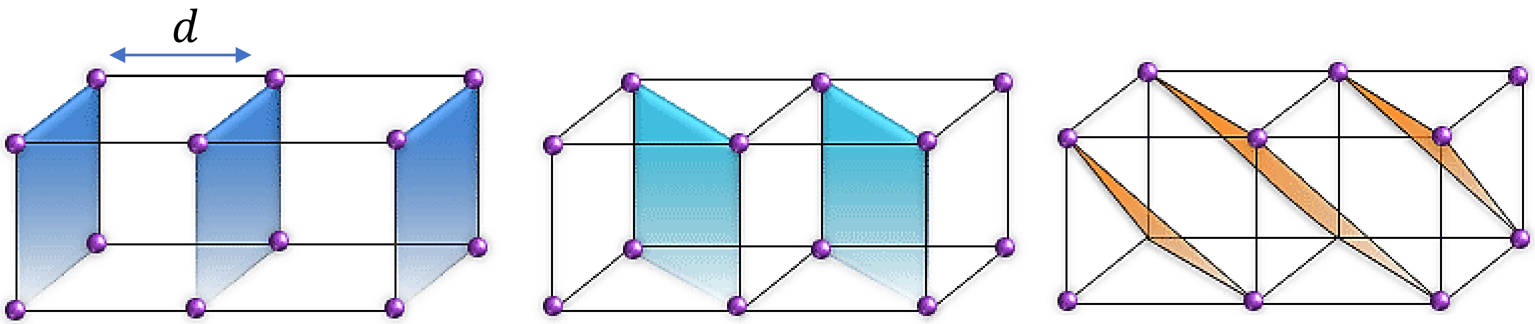
Repaso

Zonas de Brillouin (ZB)

La n-ésima ZB es el conjunto de puntos a los que se llega desde el origen luego de cruzar n-1 planos bisectores. También es el conjunto de puntos que tienen al origen como su n-ésimo vecino más cercano. Todas las ZB tienen el mismo volumen, que es el de la CP.



Planos de la red: Un "plano de la red" es aquel que contiene al menos tres puntos no colineales de la red.



Una familia de planos es un conjunto de planos paralelos e igualmente espaciados, que contienen todos los puntos de la RB.

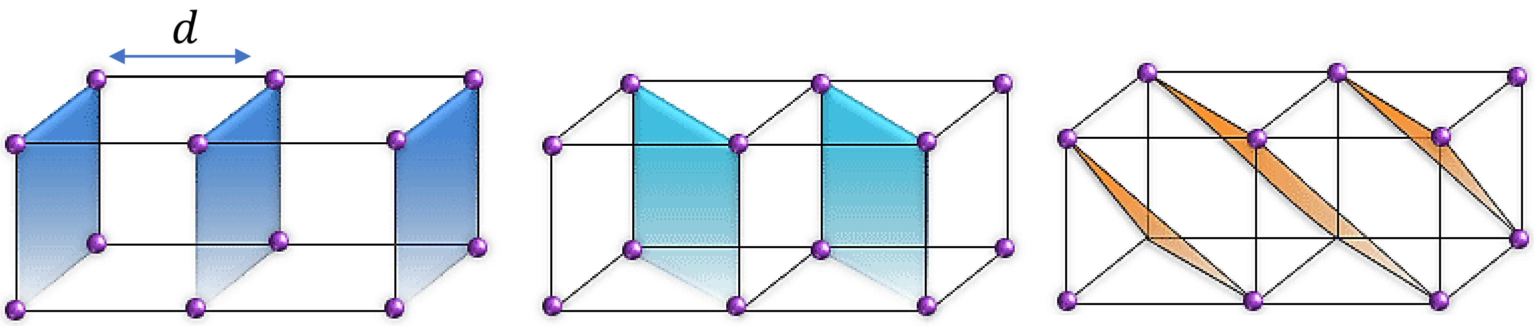
Teorema

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 $\overline{K}$ de la RR existe una familia de planos de la red normales a $\overline{K}$ separados una distancia *d*, donde $2\pi/d$ es la longitud del vector de la RR más corto paralelo a $\overline{K}$.

Red recíproca: Relación con planos de la red directa

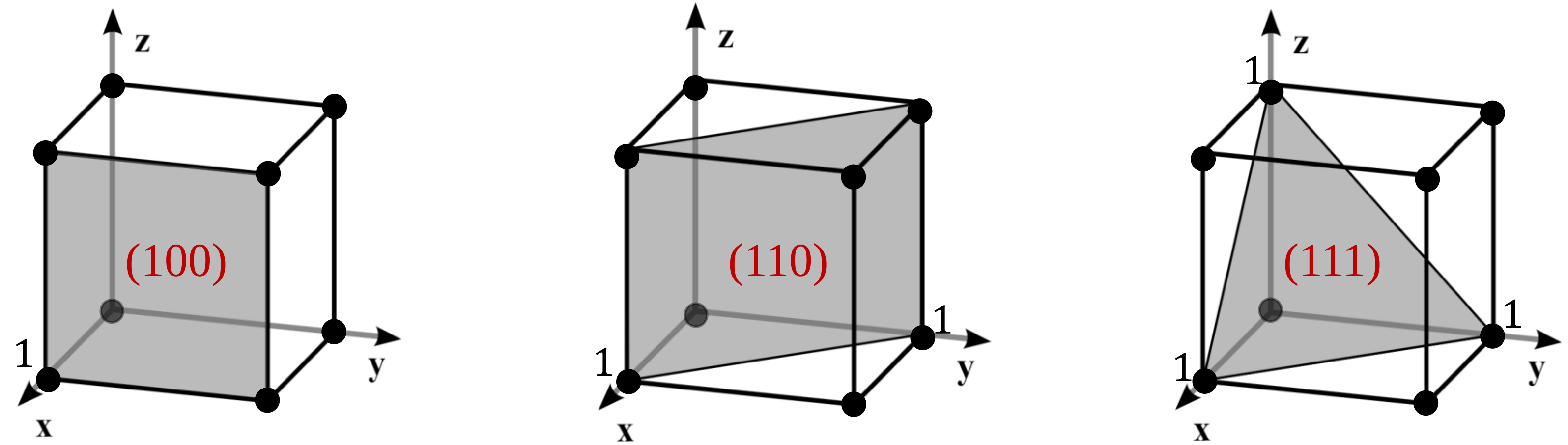
<u>Planos de la red:</u> Un "plano de la red" es aquel que contiene al menos tres puntos no colineales de la red.



Una familia de planos es un conjunto de planos paralelos e igualmente espaciados, que contienen todos los puntos de la RB.

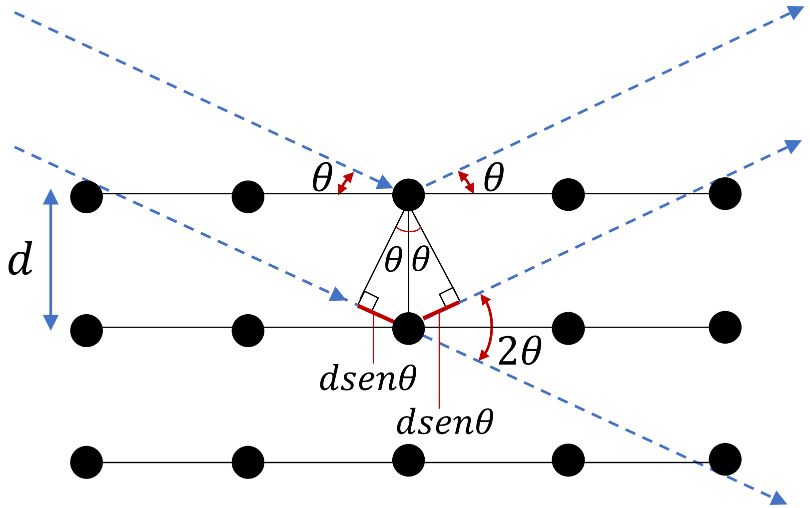
<u>Ejemplo</u>: Planos en una SC

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

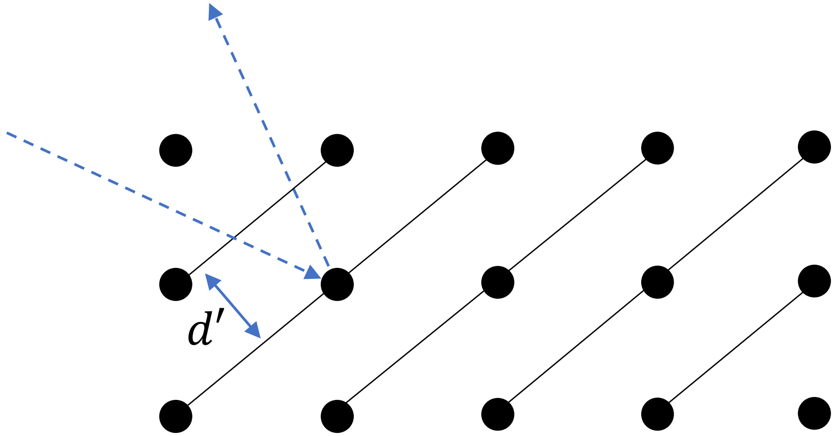


Difracción de rayos X

Formulación de Bragg

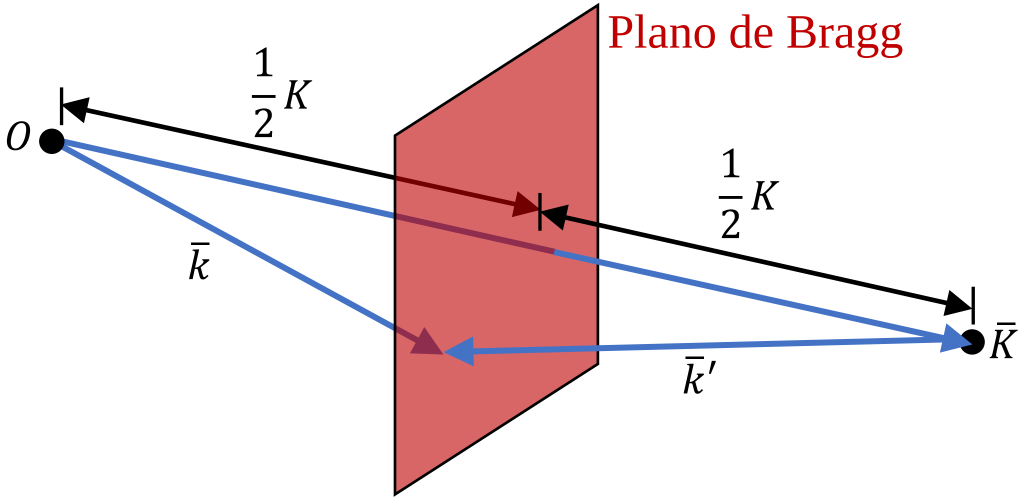


Interferencia constructiva: $2dsen\theta = n\lambda, n \in \mathbb{Z}$ $(\lambda \leq 2d)$



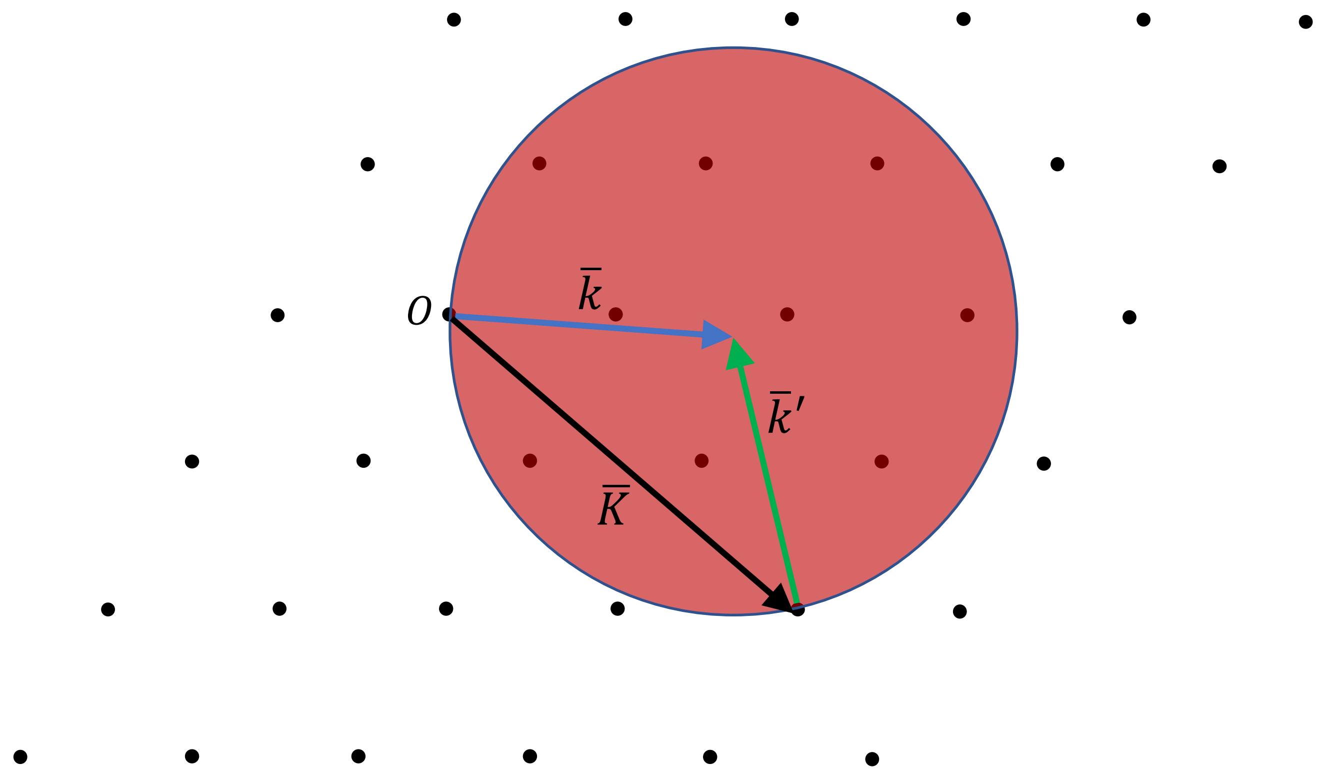
Un haz que contenga un rango de longitudes de onda daría lugar a múltiples reflexiones.

Formulación de von Laue



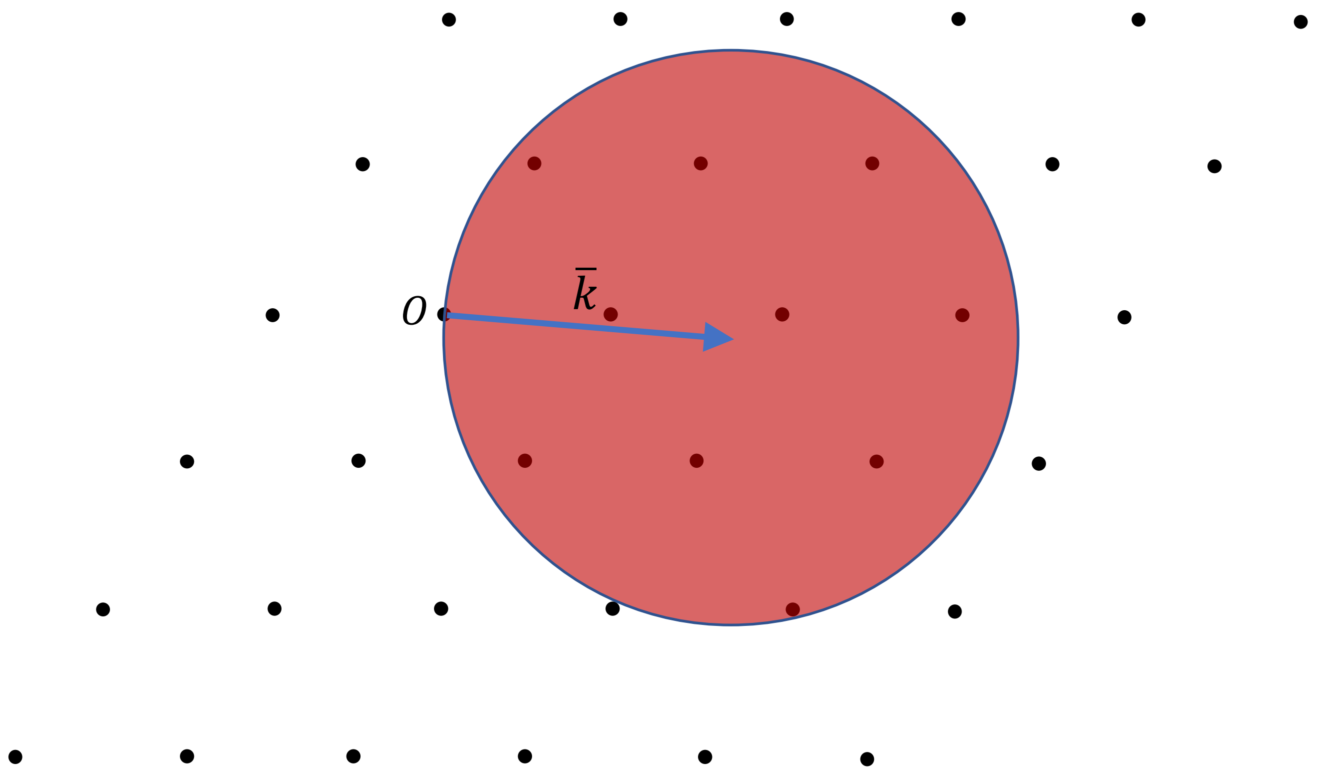
Difracción de Rayos X: Construcción de Ewald

Construcción de Ewald (espacio *k*)



Difracción de Rayos X: Construcción de Ewald

<u>Construcción de Ewald</u> (espacio k)



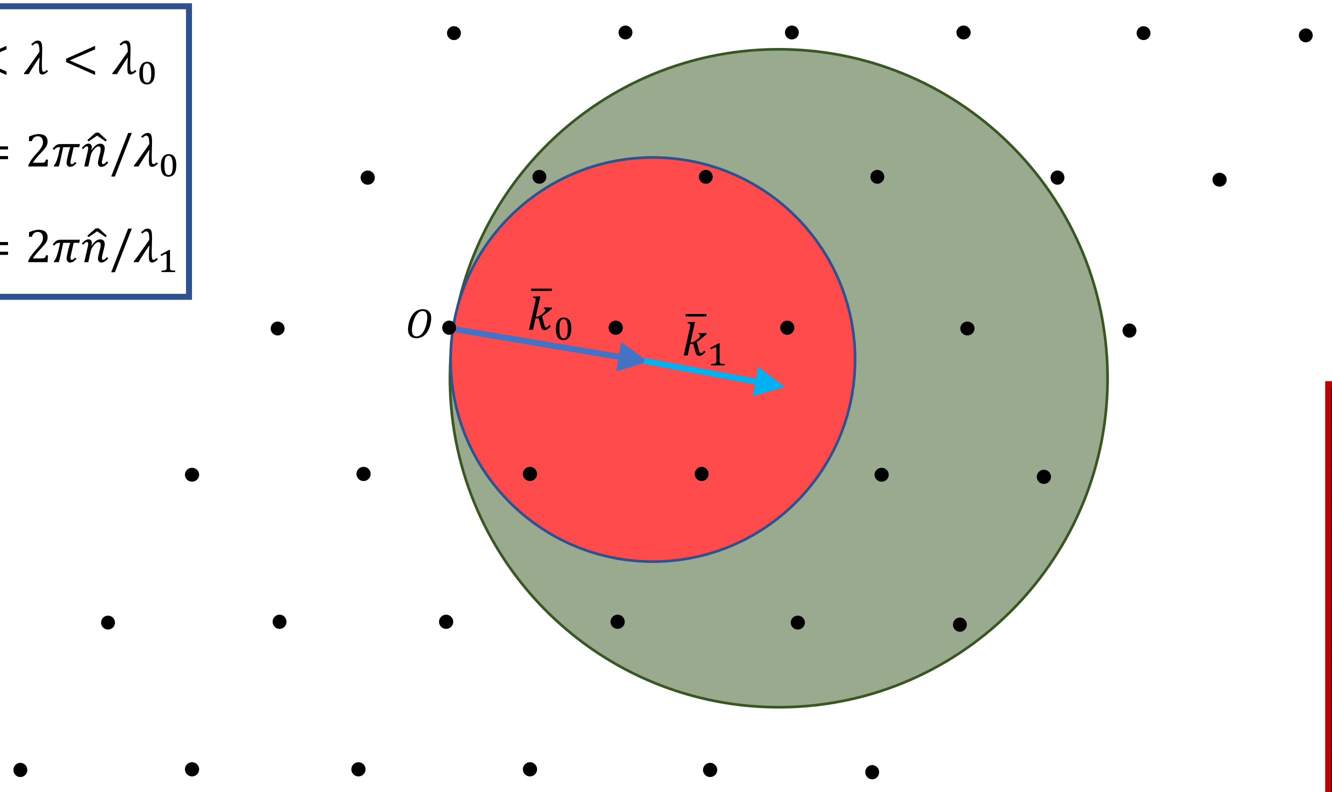
Difracción de Rayos X: Método de Laue

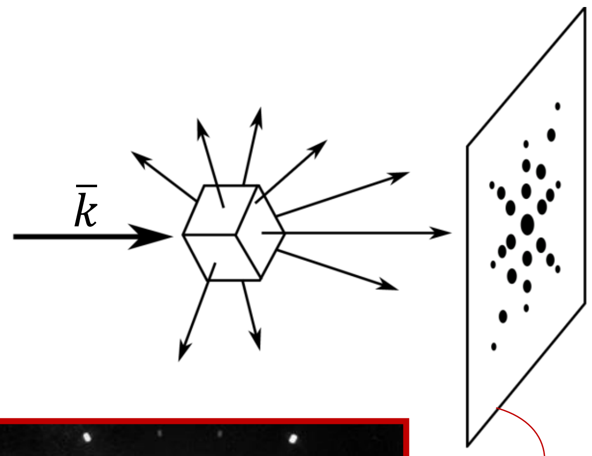
Método de Laue

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

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

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

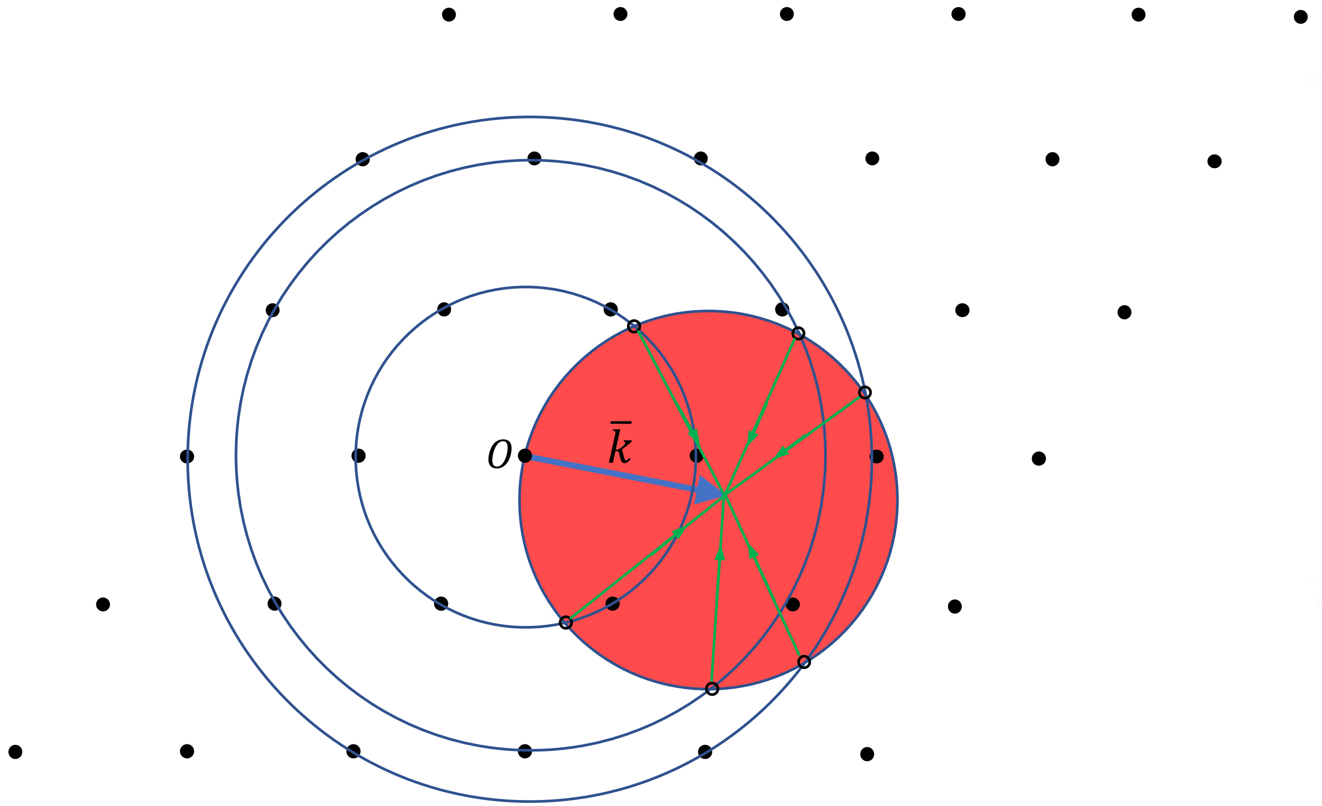


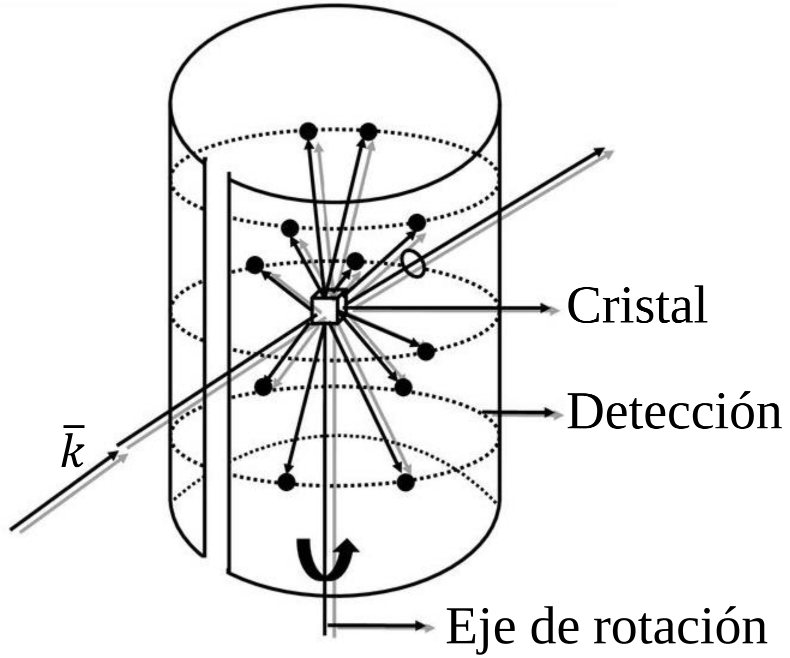


Difracción de Rayos X: Cristal rotante

Método del cristal rotante

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





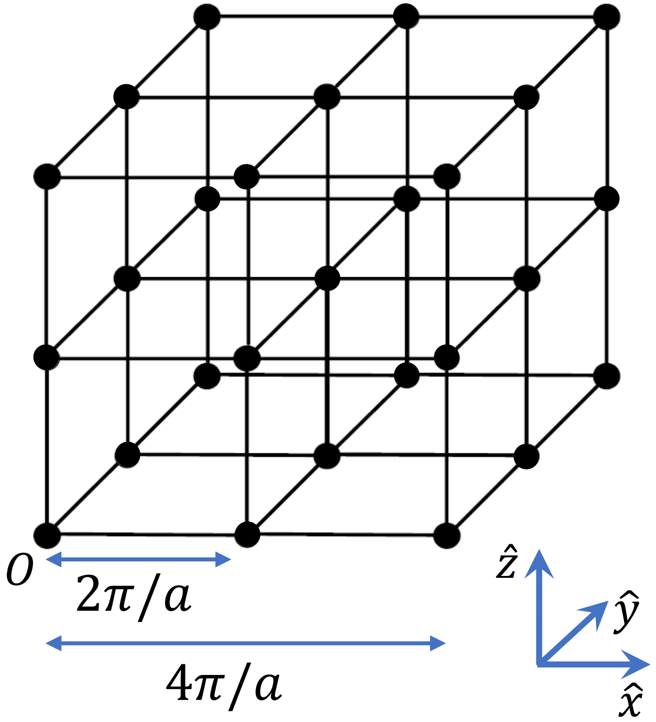
Se producen reflexiones de Bragg cuando puntos de la RR intersecan la superficie de la esfera.

Difracción de Rayos X: Factor de estructura

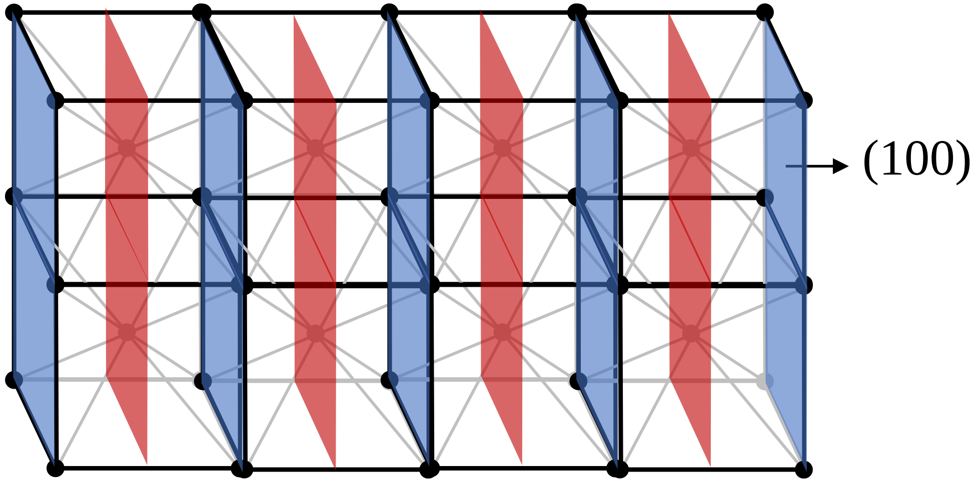
Ejemplo: BCC como SC con una base

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

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



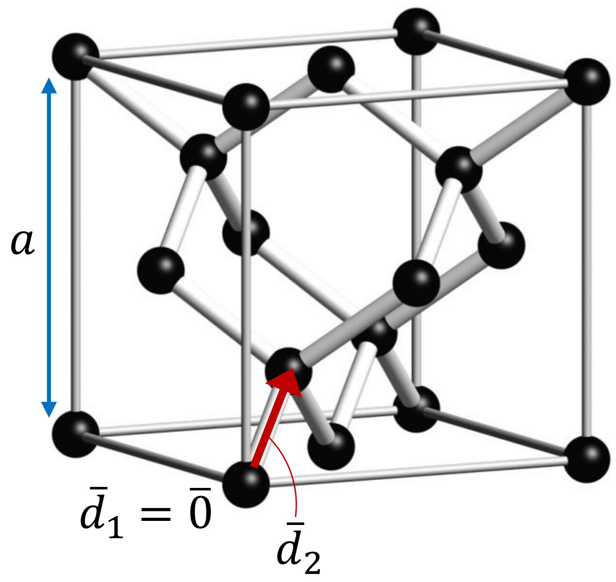
¿Cómo se entiende en el espacio real?



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



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

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

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

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

Resumen

- Índices de Miller
- Difracción de rayos X (formulaciones de Bragg y von Laue)
- Construcción de Ewald
- Métodos de DRX
- Factor de estructura
- Factor de forma