

Estructura de la Materia 2

Clase 2 - Teoría

Docentes

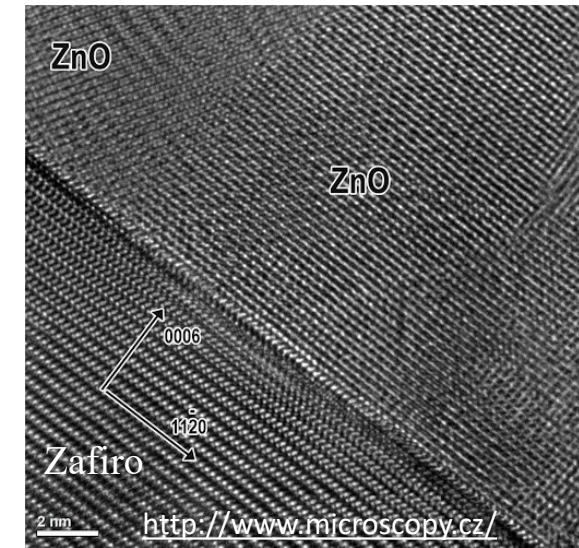
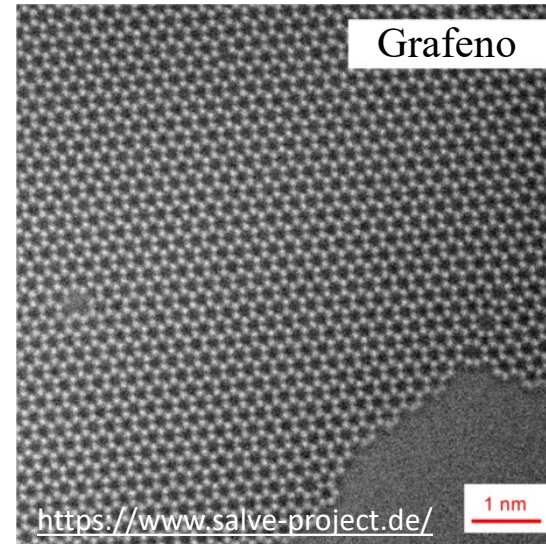
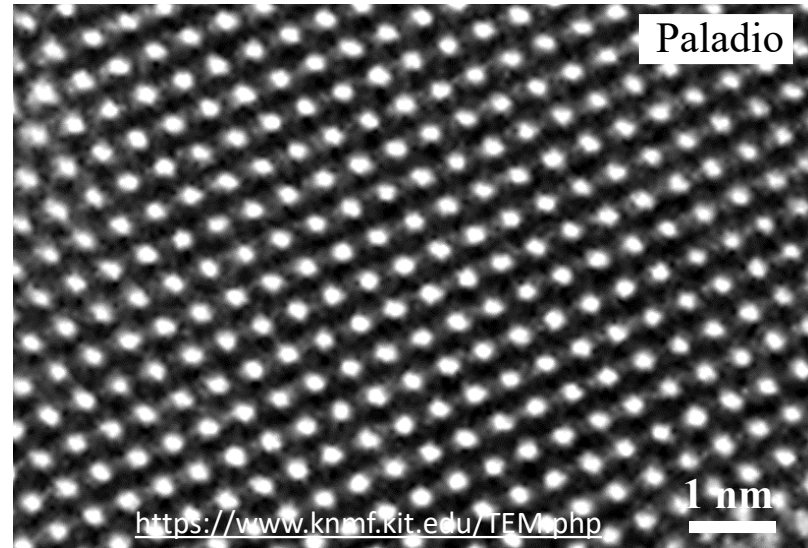
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Juan Herrera Mateos

Departamento de Física, FCEN, UBA – Curso de Verano, 2022

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2022v>

Repaso

Sólidos cristalinos



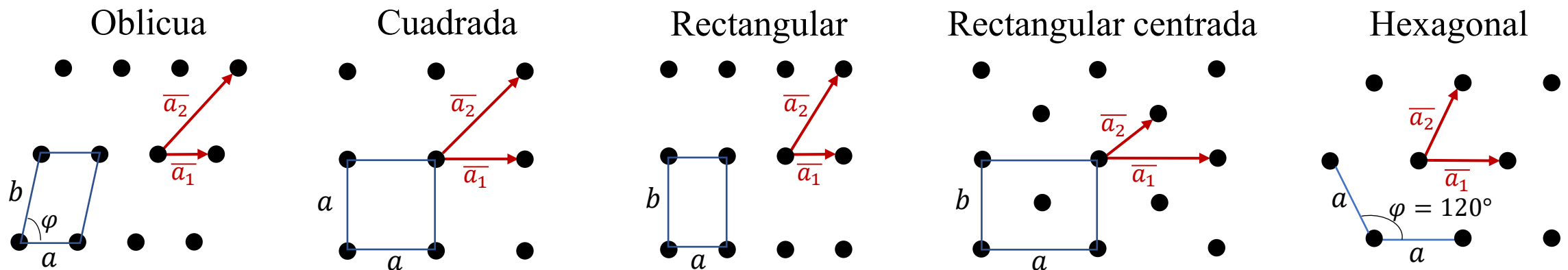
Red de Bravais (RB)

- 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.

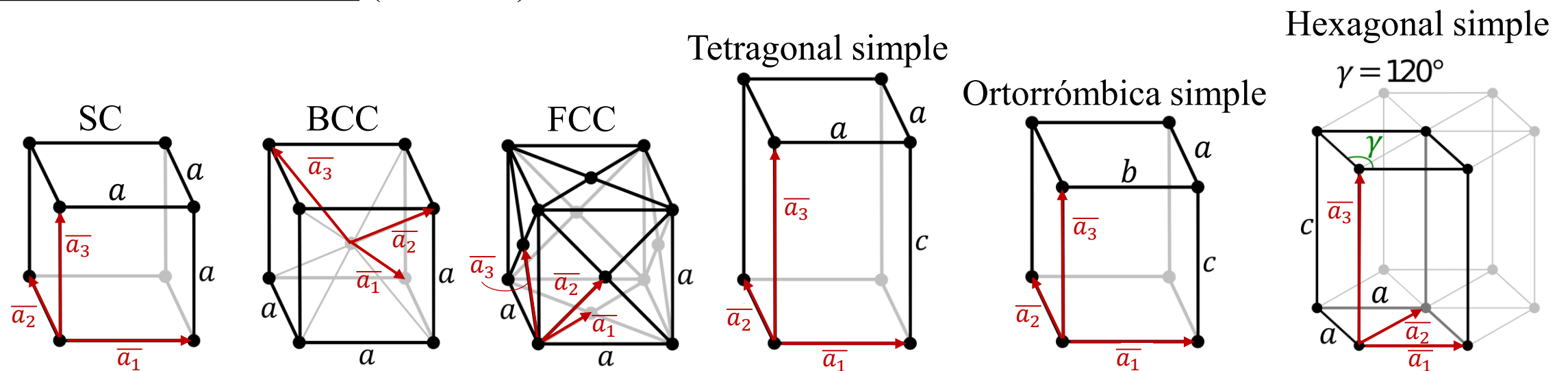
Número de coordinación (NC): Es el número de primeros vecinos de un punto de la red.

Repaso

Redes de Bravais en 2D



Redes de Bravais en 3D (selección)



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.

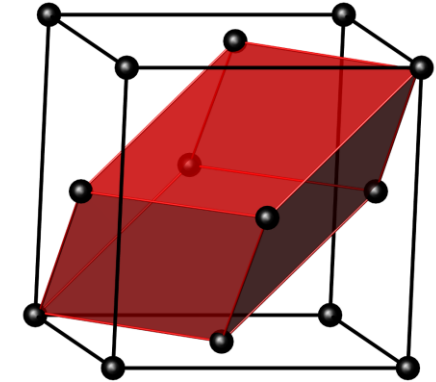
Celda de Wigner-Seitz (WZ)

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.

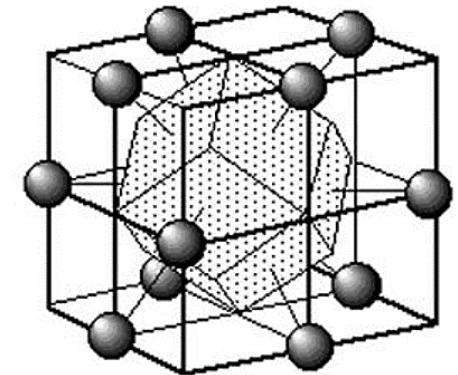
Celda unidad (CU)

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.

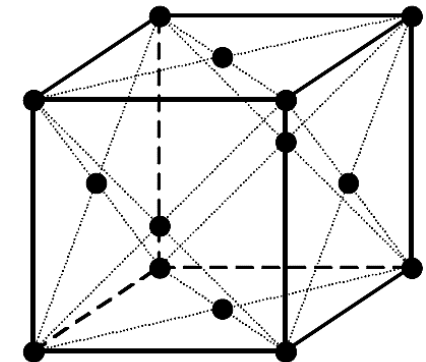
CP
(FCC)



Celda WZ
(FCC)



CU cúbica
(FCC)



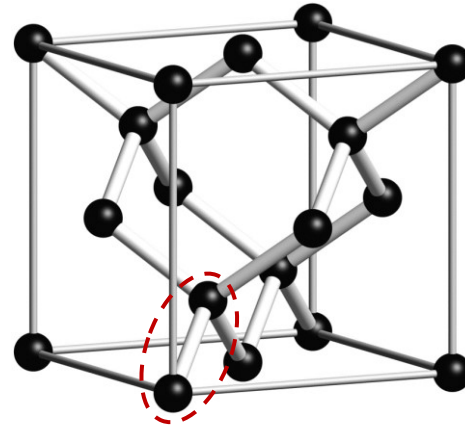
Repaso

Estructura cristalina; Red con una base

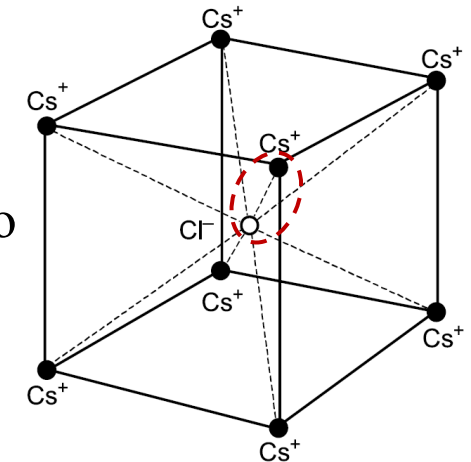
Todos los puntos \bar{R} tal que $\bar{R} = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3 + \bar{d}_i$, $\forall n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$, $\{\bar{d}_i\} = \{\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_N\}$.

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

Diamante

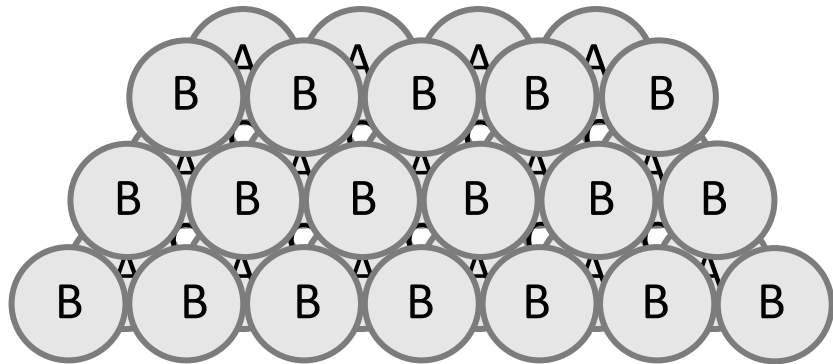


Cloruro de Cesio

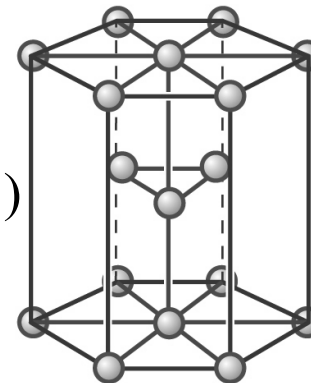


Empaquetamiento compacto

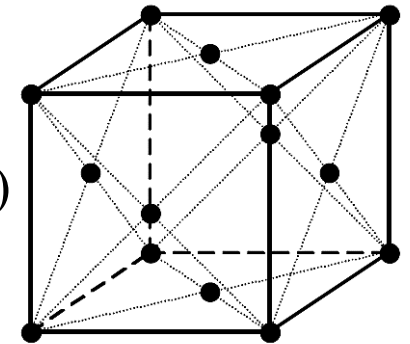
Apilamos pequeñas esferas rígidas (“átomos”) que se atraen e intentan acercarse lo máximo posible.



HCP
(...ABABAB...)



FCC
(...ABCABC...)



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.

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

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

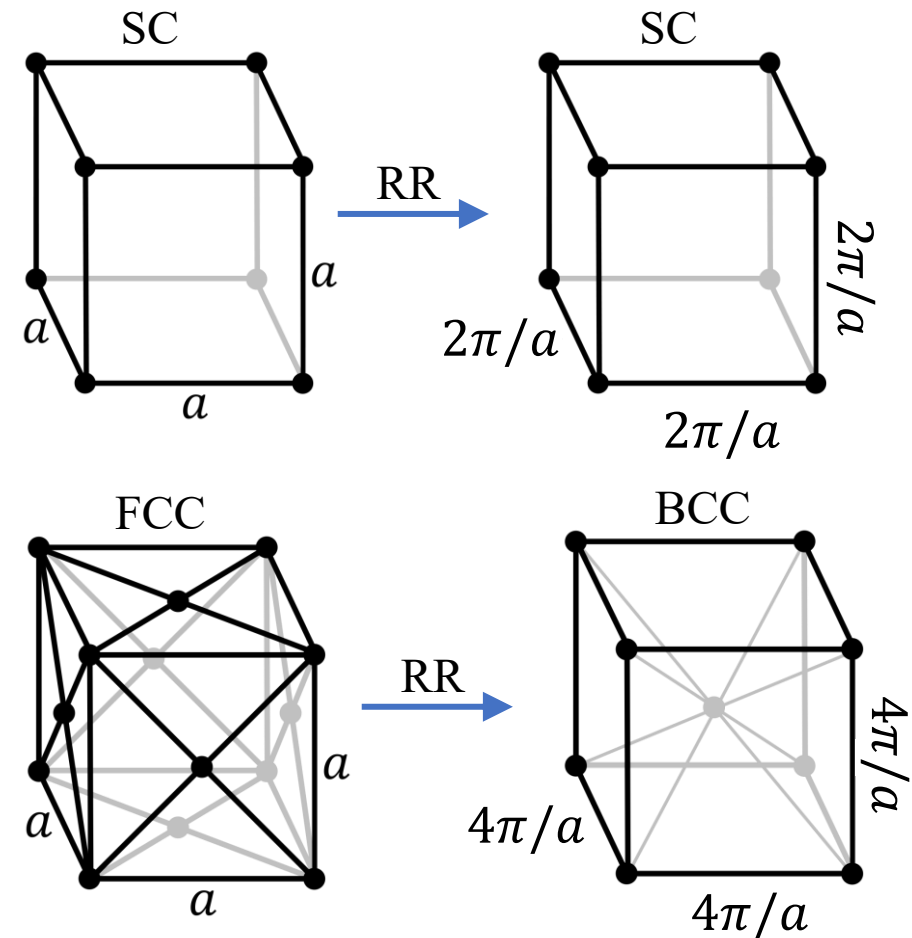
Nomenclatura: Red directa (RD) es la RB a partir de la cual se determina su RR.

La RR de la RR es la RD.

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

v : volumen de la CP de la RD

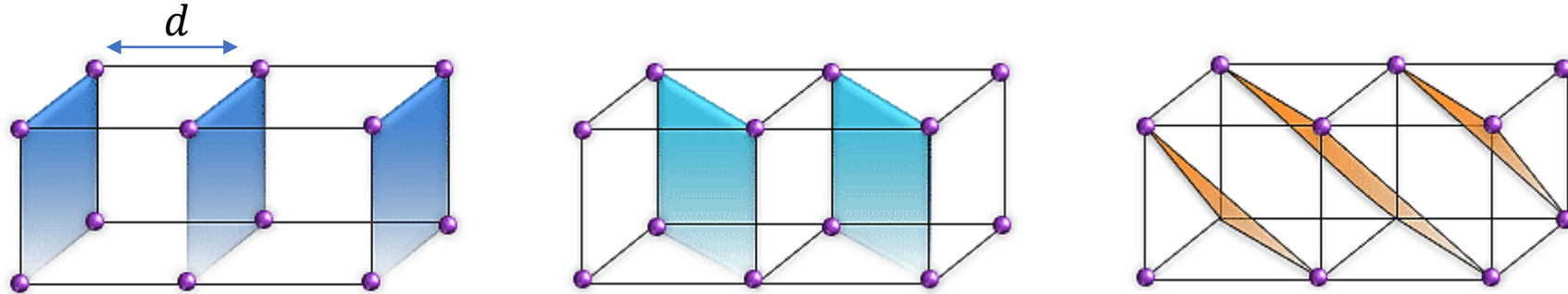
Ejemplos de RR: SC, FCC, BCC.



\longrightarrow La RR de una BCC es una FCC.

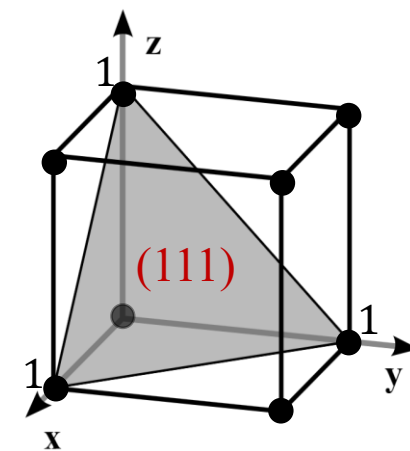
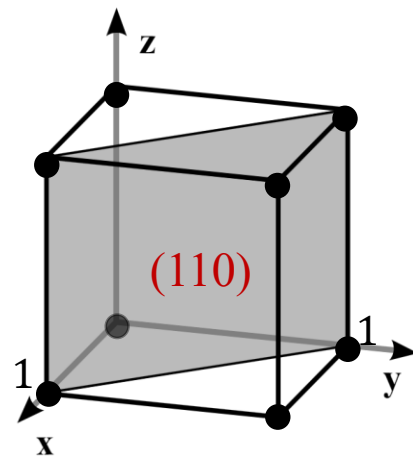
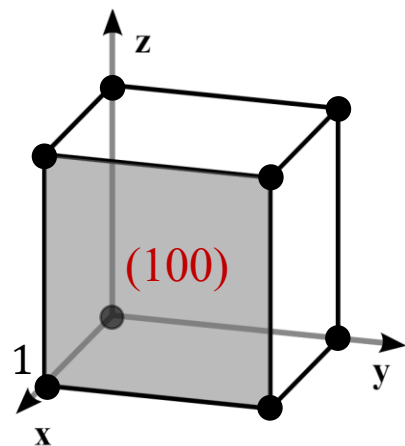
Red recíproca: Relación con planos de la red directa

Planos de la red



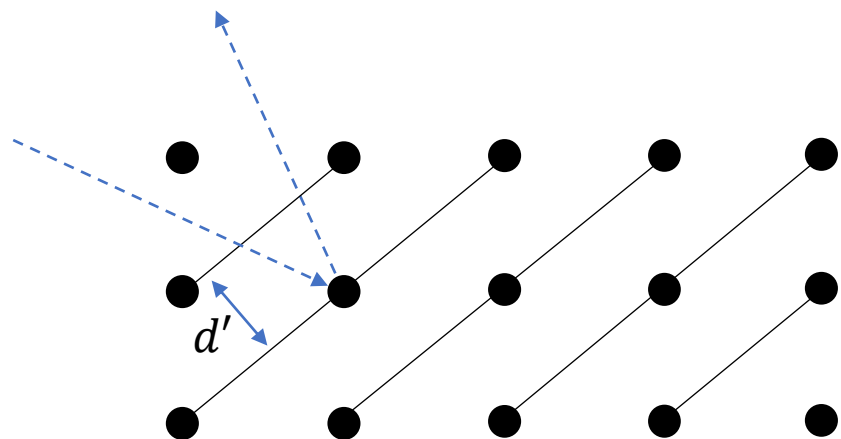
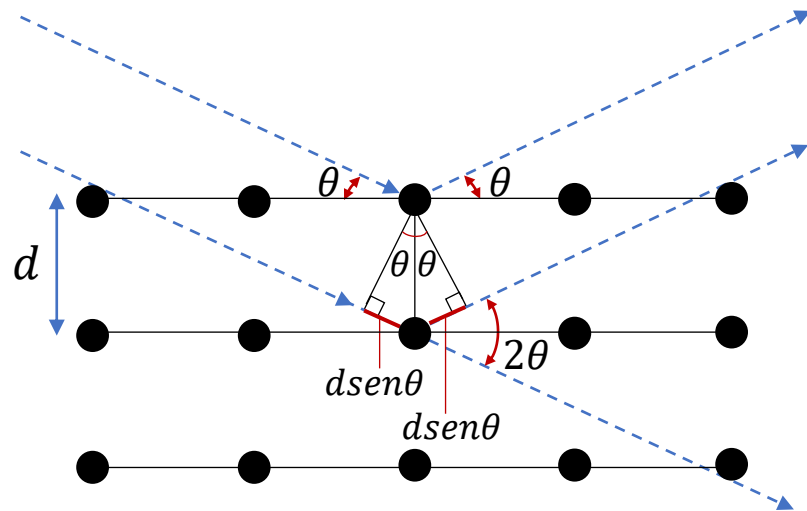
Ejemplo: Planos en una SC

$$\left\{ \begin{array}{l} h \propto 1/x_1 \\ k \propto 1/x_2 \\ l \propto 1/x_3 \end{array} \right.$$

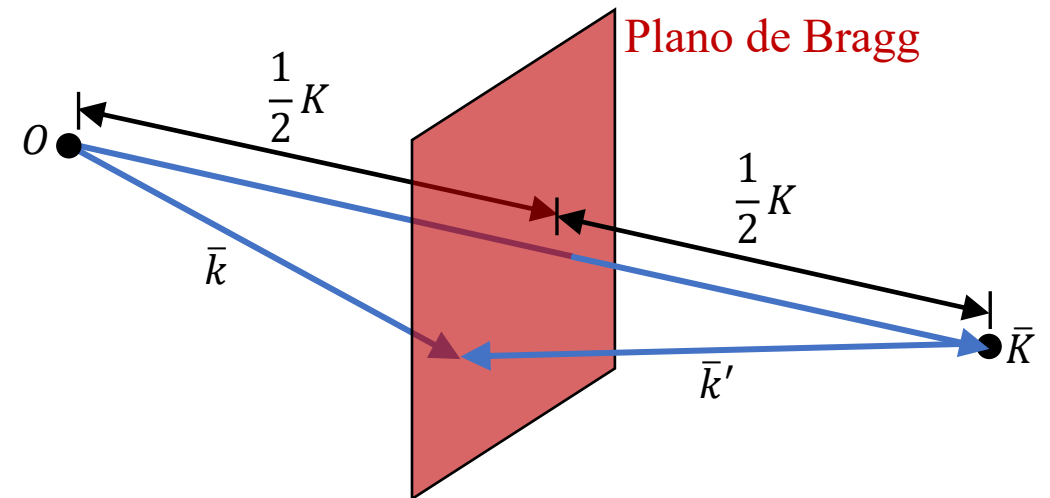


Difracción de rayos X

Formulación de Bragg



Formulación de von Laue



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

Resumen

- 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)

