

# Estructura de la Materia 2

Clase 2 - Teoría

## Docentes

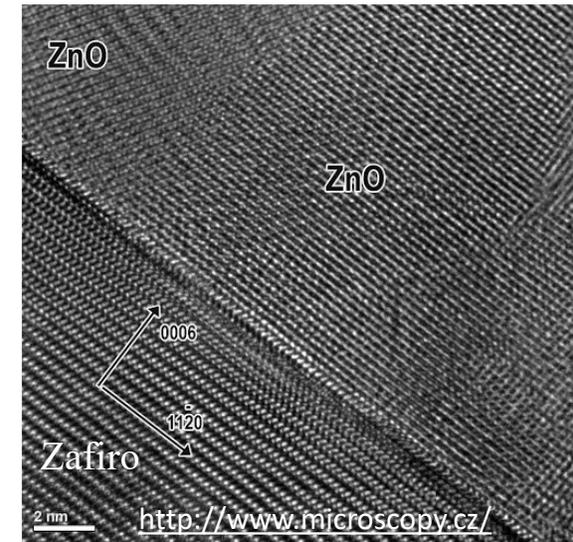
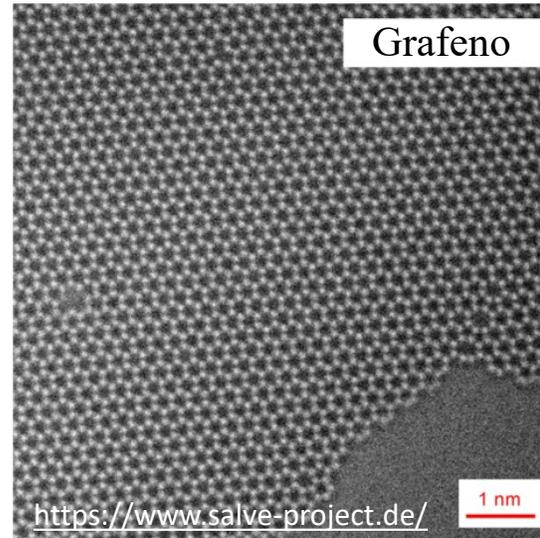
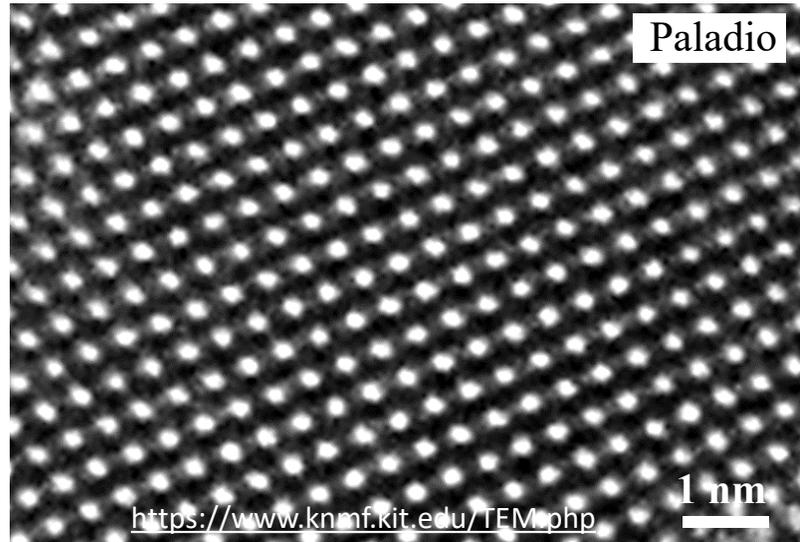
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Juan Herrera Mateos

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

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

# Repaso

## Sólidos cristalinos



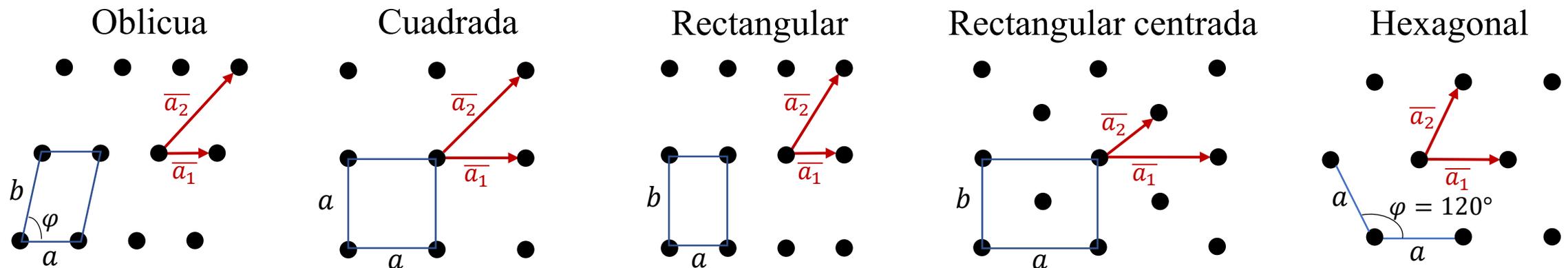
## Red de Bravais (RB)

- 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.

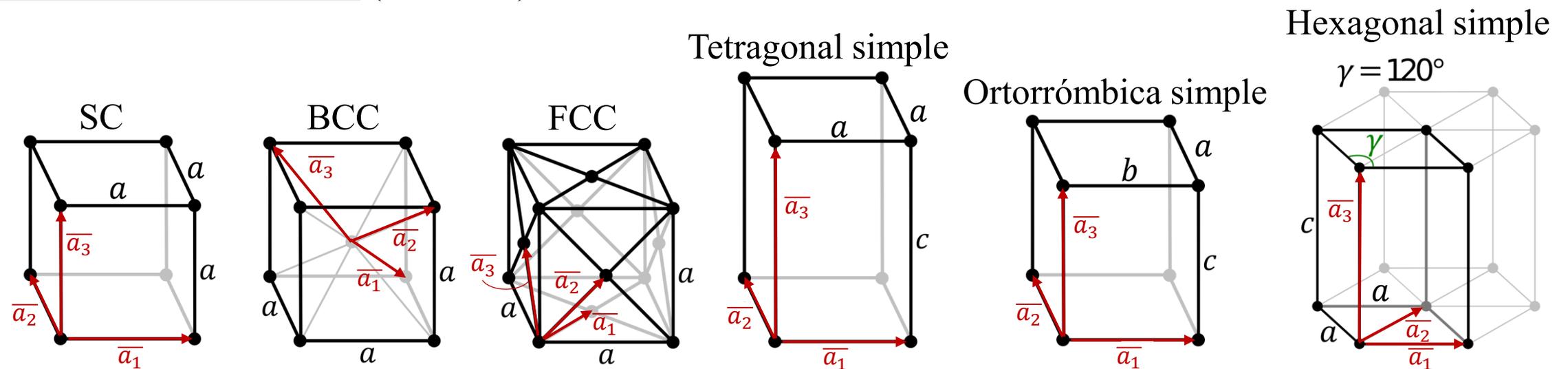
Número de coordinación (NC): Es el número de primeros vecinos de un punto de la red.

# Repaso

## Redes de Bravais en 2D



## Redes de Bravais en 3D (selección)

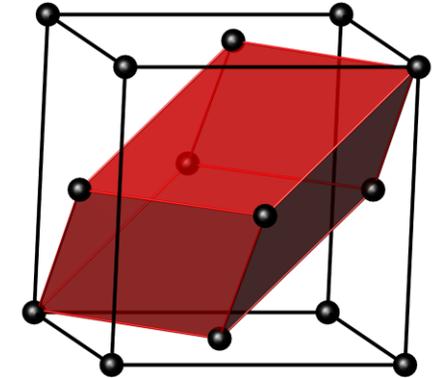


# Repaso

## 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.

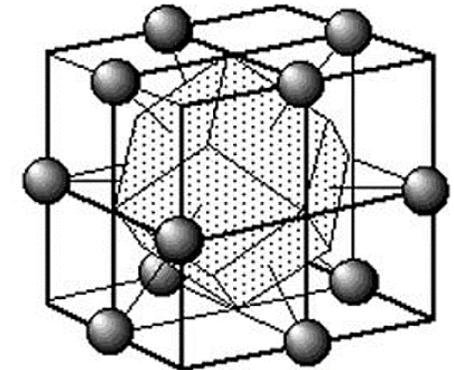
CP  
(FCC)



## 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.

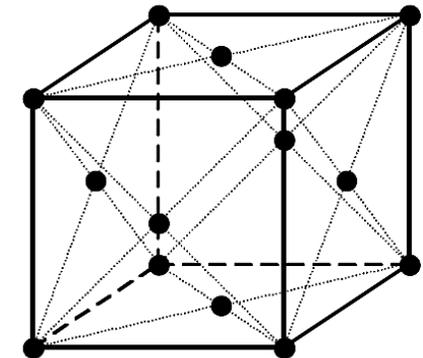
Celda WZ  
(FCC)



## 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.

CU cúbica  
(FCC)



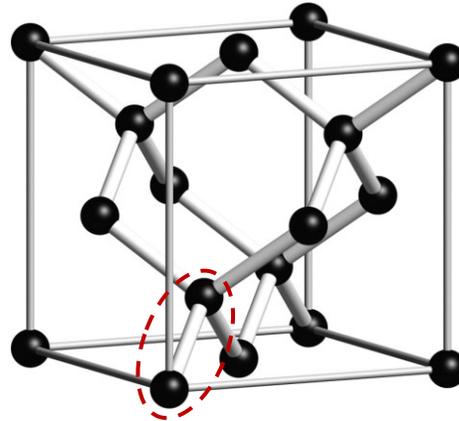
# Repaso

## Estructura cristalina; Red con una base

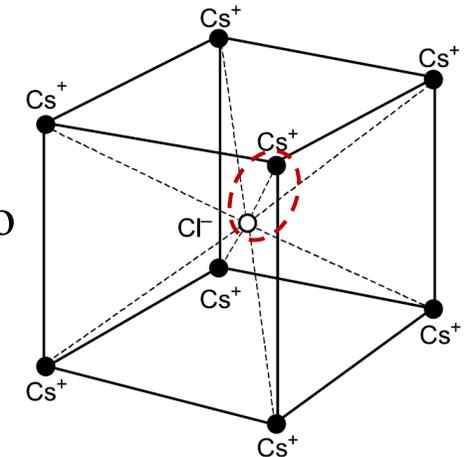
Todos los puntos  $\bar{R}$  tal que  $\bar{R} = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3 + \bar{d}_i$ ,  $\forall n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$ ,  $\{\bar{d}_i\} = \{\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_N\}$ .

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

Diamante

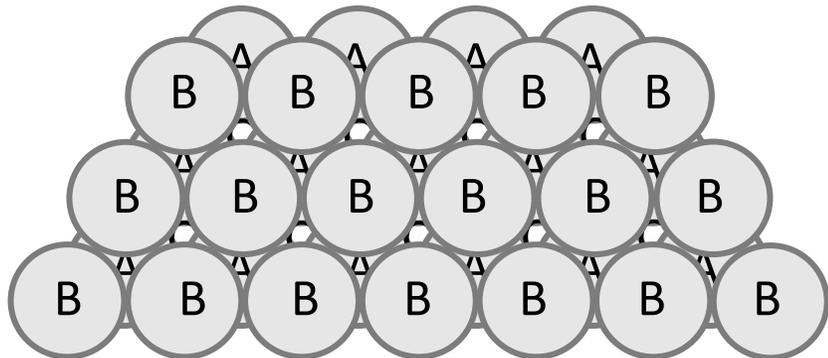


Cloruro de Cesio

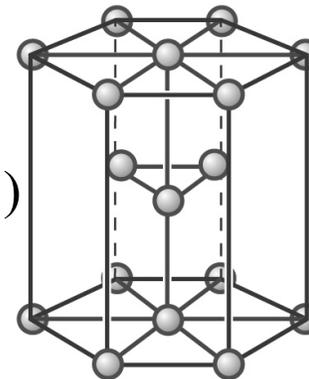


## Empaquetamiento compacto

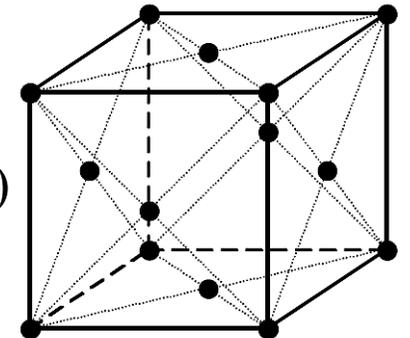
Apilamos pequeñas esferas rígidas (“átomos”) que se atraen e intentan acercarse lo máximo posible.



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.

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

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

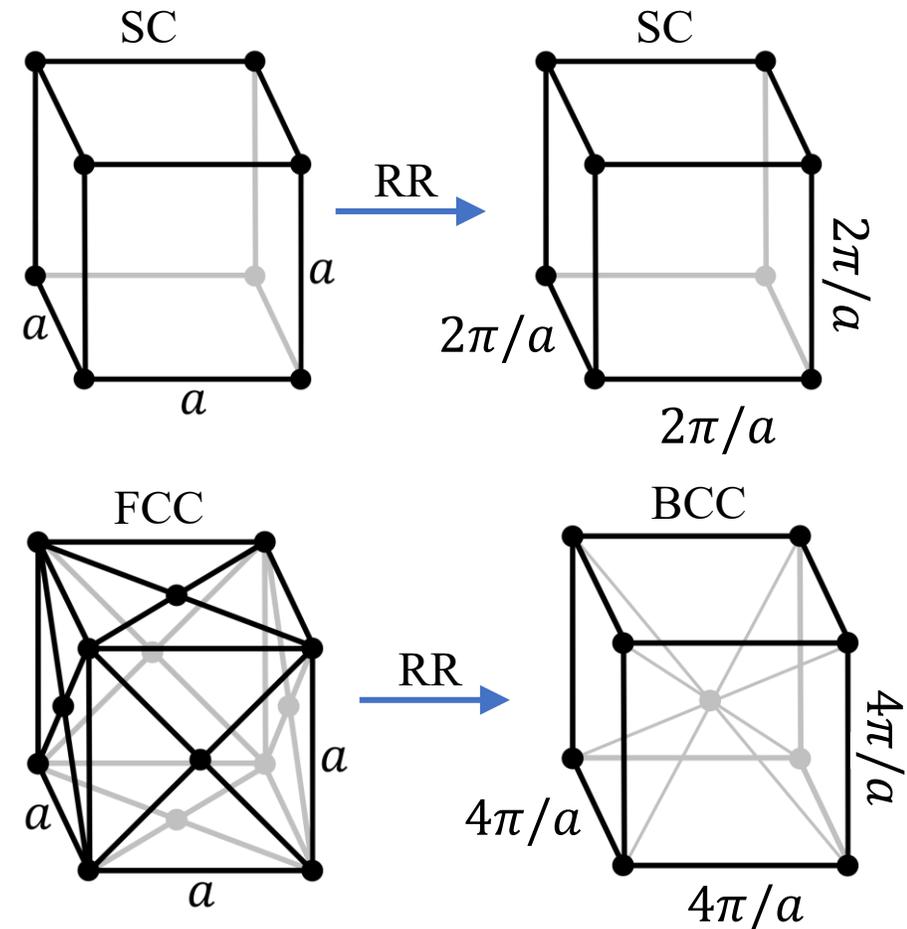
Nomenclatura: Red directa (RD) es la RB a partir de la cual se determina su RR.

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

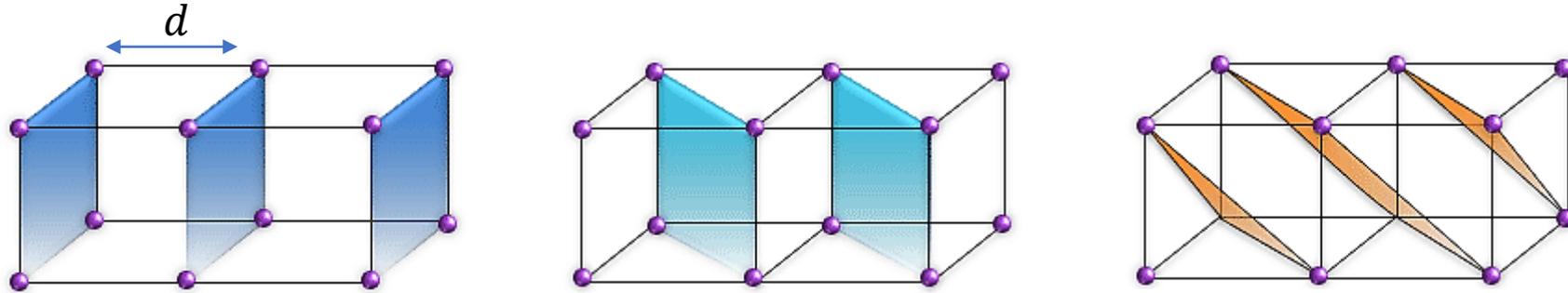
## Ejemplos de RR: SC, FCC, BCC.



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

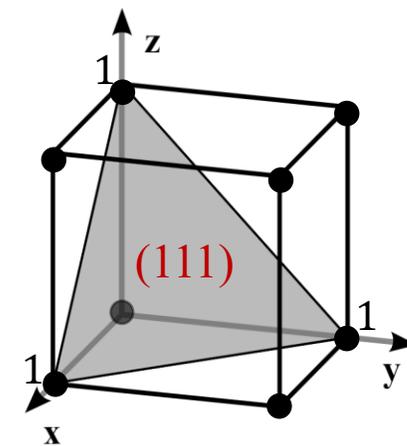
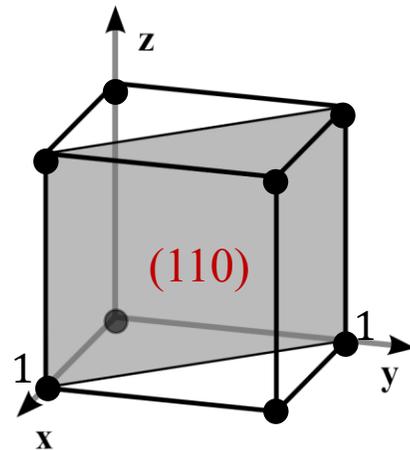
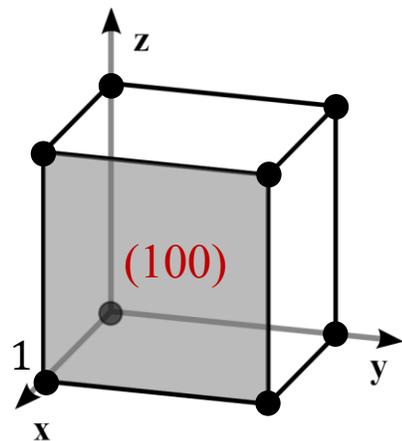
# Red recíproca: Relación con planos de la red directa

## Planos de la red



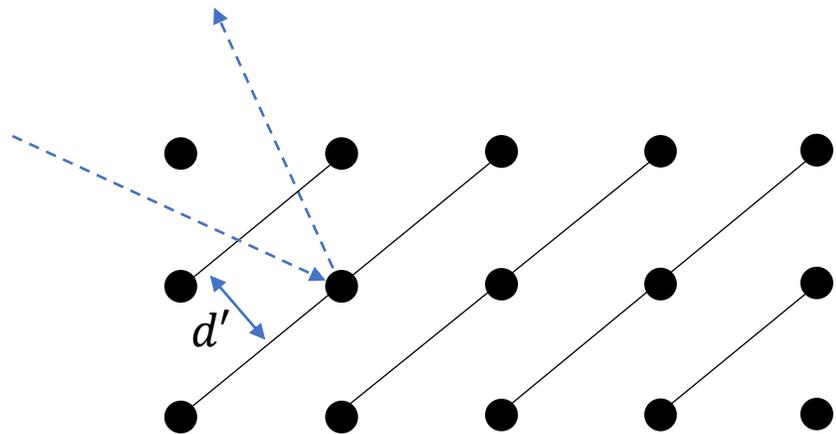
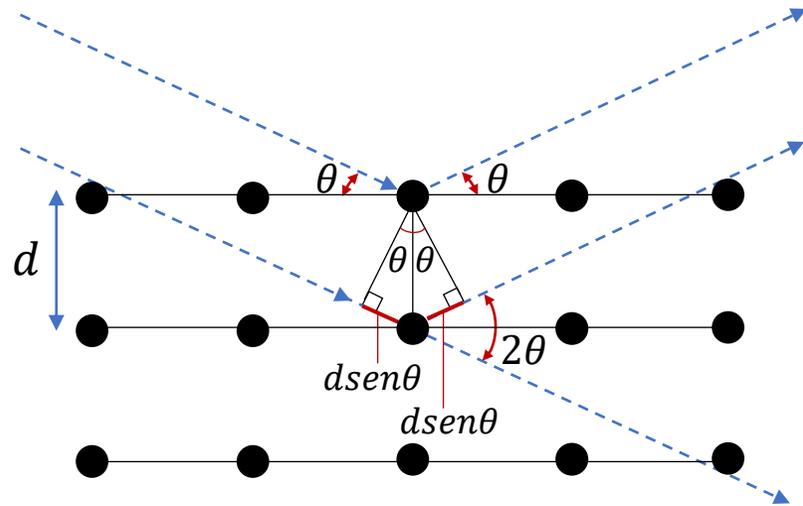
## Ejemplo: Planos en una SC

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

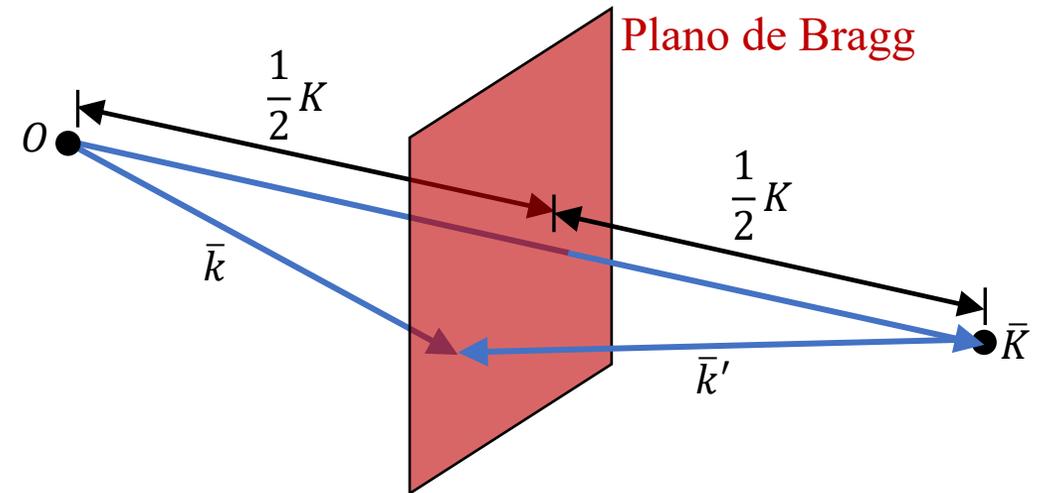


# Difracción de rayos X

## 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)

