

Materia Condensada. Sistemas Complejos

<http://www.fisica.unlp.edu.ar/magnet/FisicaMCSC.htm>

**Sistemas Complejos
(Física de no-equilibrio):**

Complejidad intrínseca (fundamental)

aplicaciones

dificultades

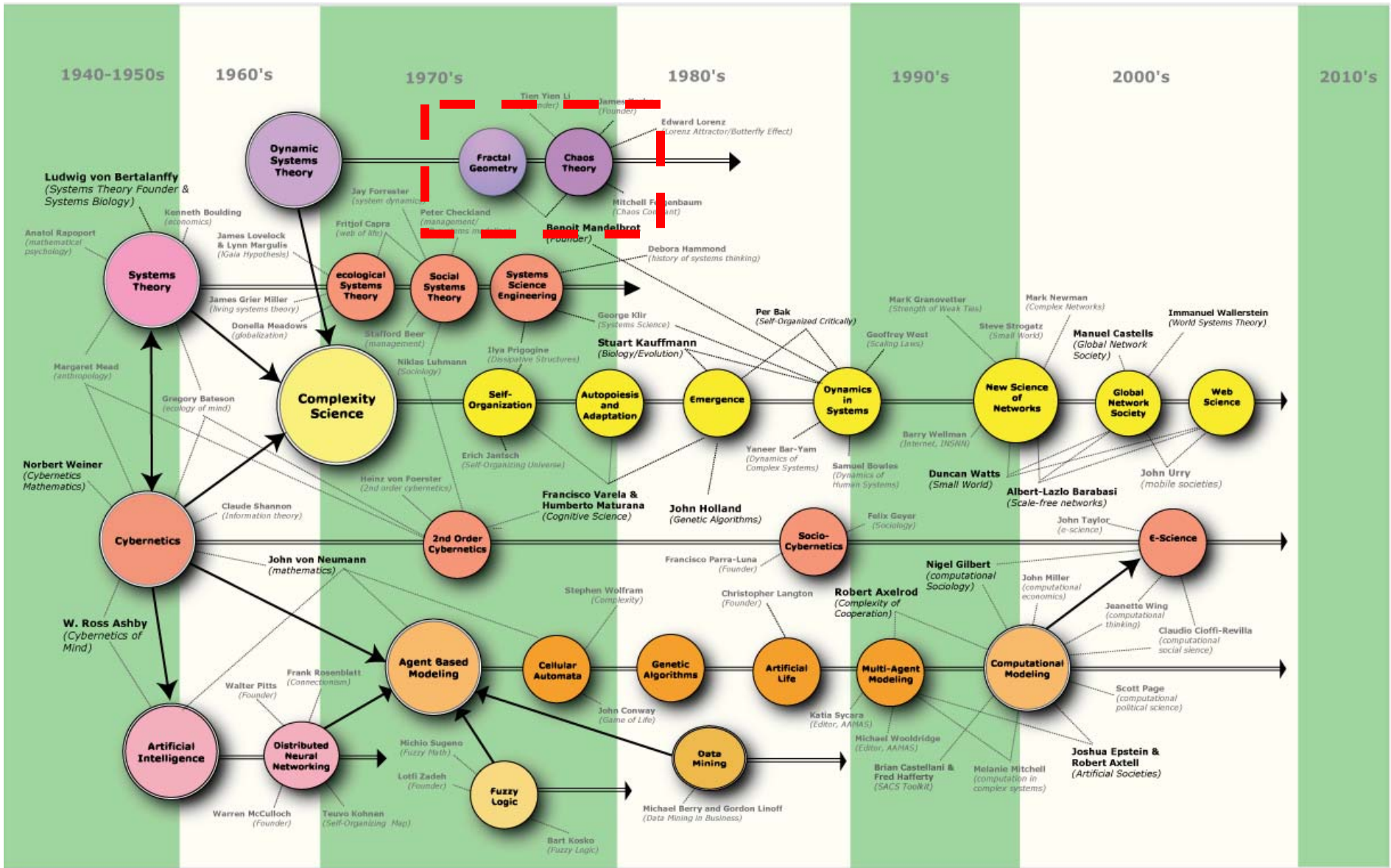
derivaciones

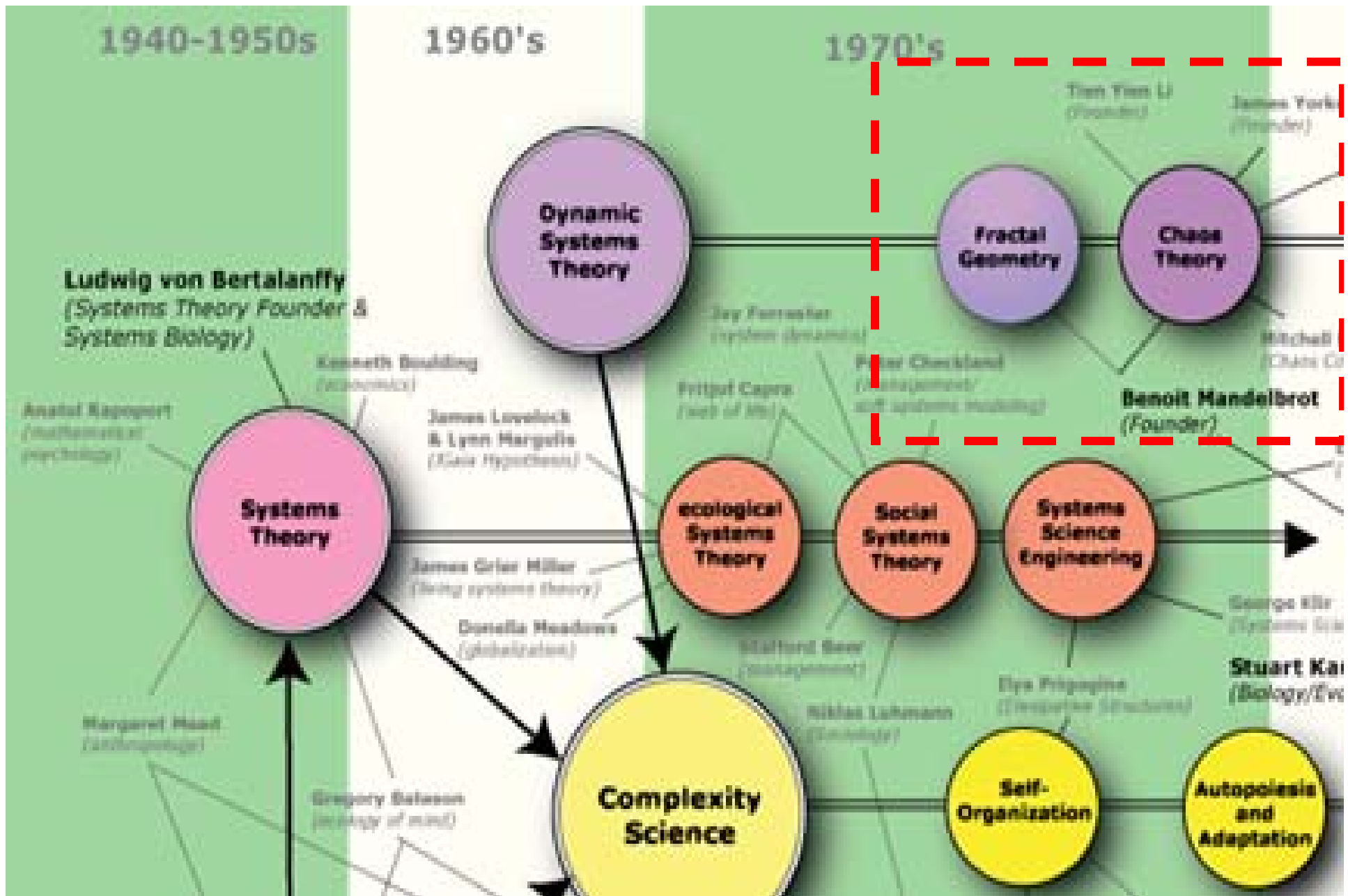
Modelado formal, simulaciones

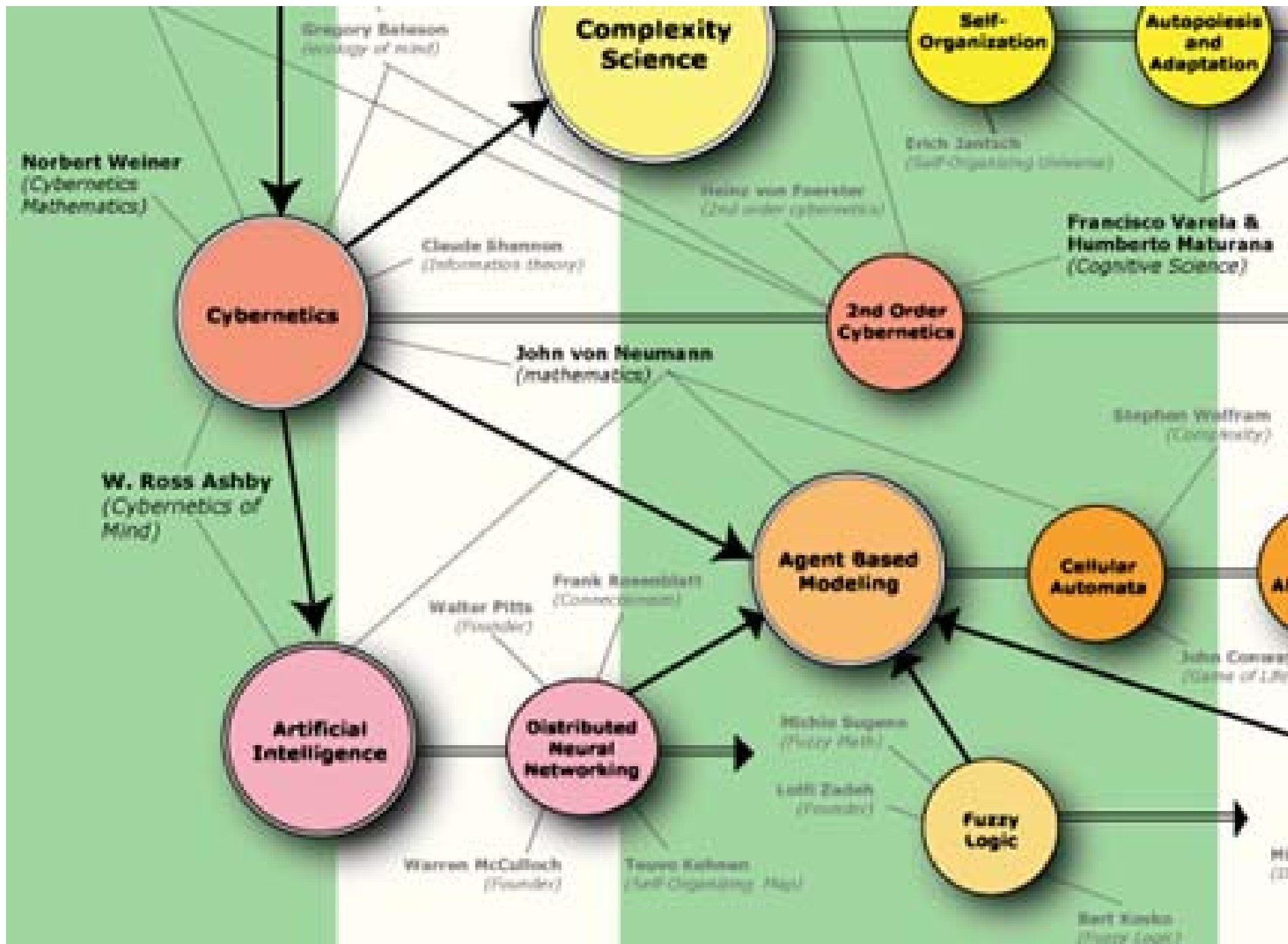
Física, biología, economía,
antropología, vida artificial, química,
ciencia computacional, economía,
meteorología, neurociencia,
sociología

Ciencia de redes

No existe aún consenso para una
definición universal de los **Sistemas
Complejos.**

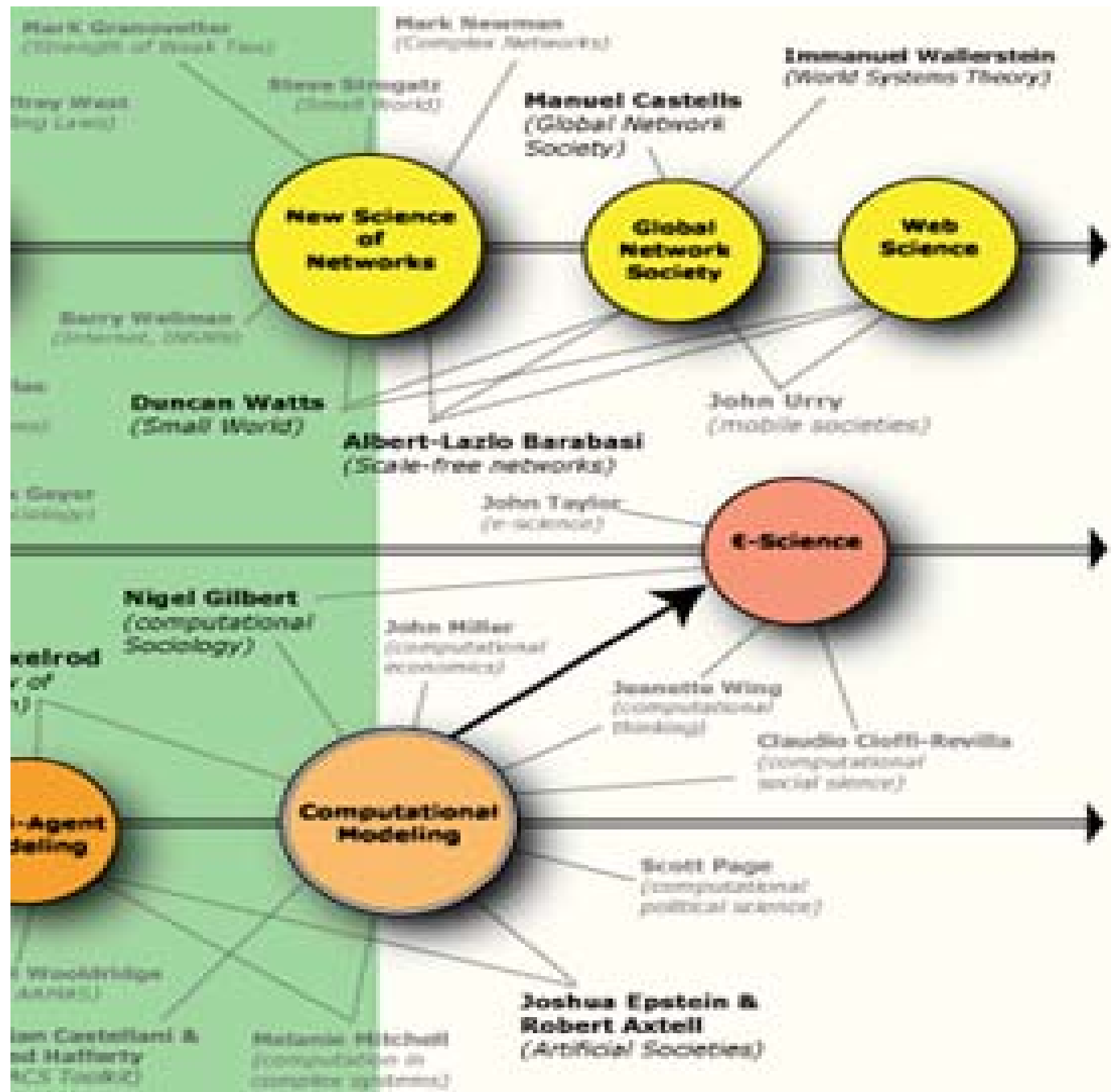






1990's

2000's



Enfoques

Los científicos a menudo buscan reglas simples de acoplamiento no-lineal que conduzcan a fenómenos complejos.

Las sociedades humanas (y probablemente el cerebro humano) son sistemas complejos donde ni los componentes ni los acoplamientos son simples.

Tradicionalmente la Ingeniería ha podido resolver problemas de sistemas no lineales reconociendo que para perturbaciones pequeñas la mayoría de los sistemas no lineales puede aproximarse por sistemas lineales, lo que simplifica su análisis significativamente

La ciencia y la ingeniería deben incluir ahora a los elementos del estudio de los sistemas complejos.

Física de la materia Condensada

Física de la materia Condensada

Estudia las propiedades físicas macroscópicas
y microscópicas de la materia

Fases “condensadas” son las que surgen cuando el número de
de constituyentes del sistema es extremadamente grande y las
interacciones entre ellos son fuertes

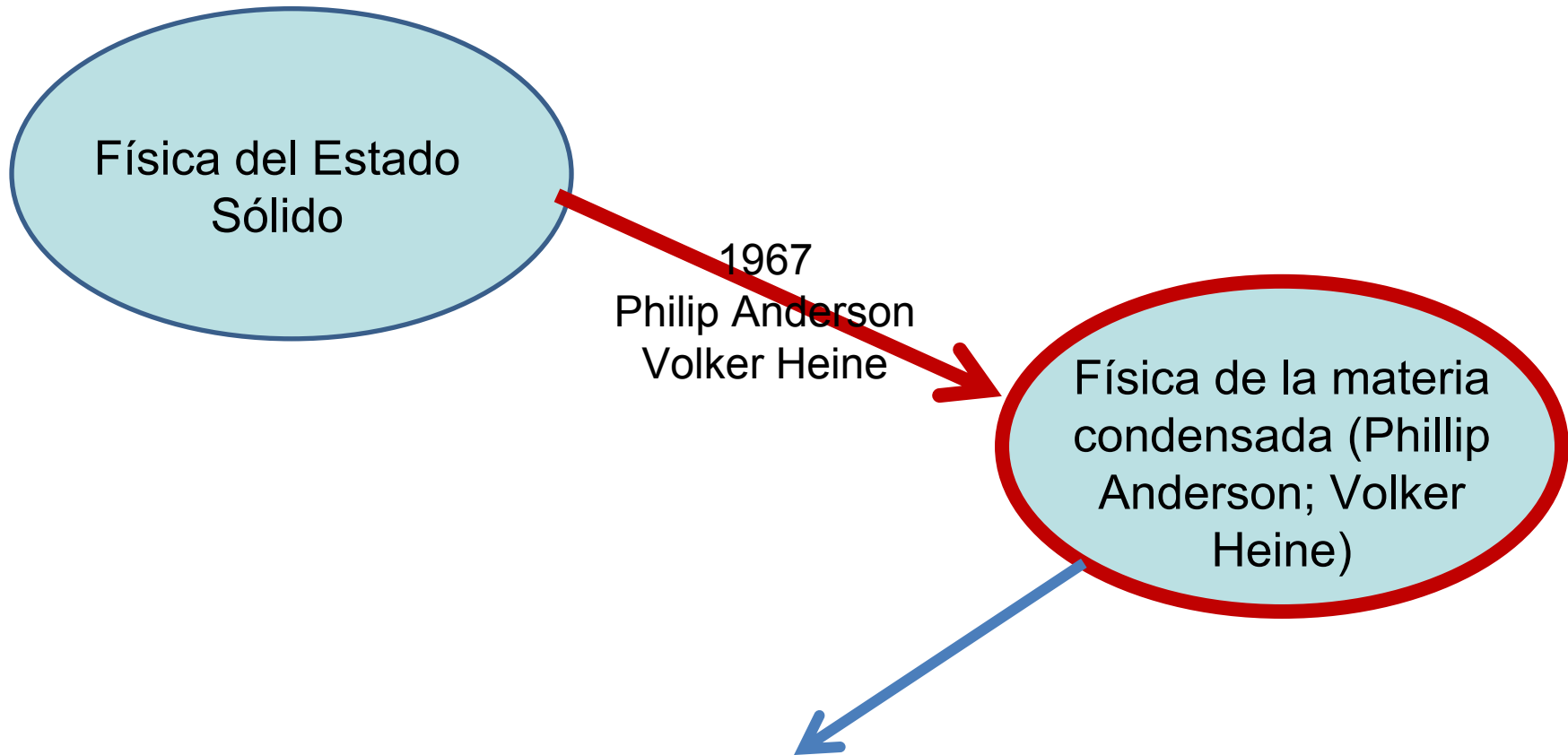
Fases condensadas más conocidas: líquidos y sólidos

Fases condensadas “exóticas”:

Condensados de Bose Einstein – Superfluidos

Superconductores

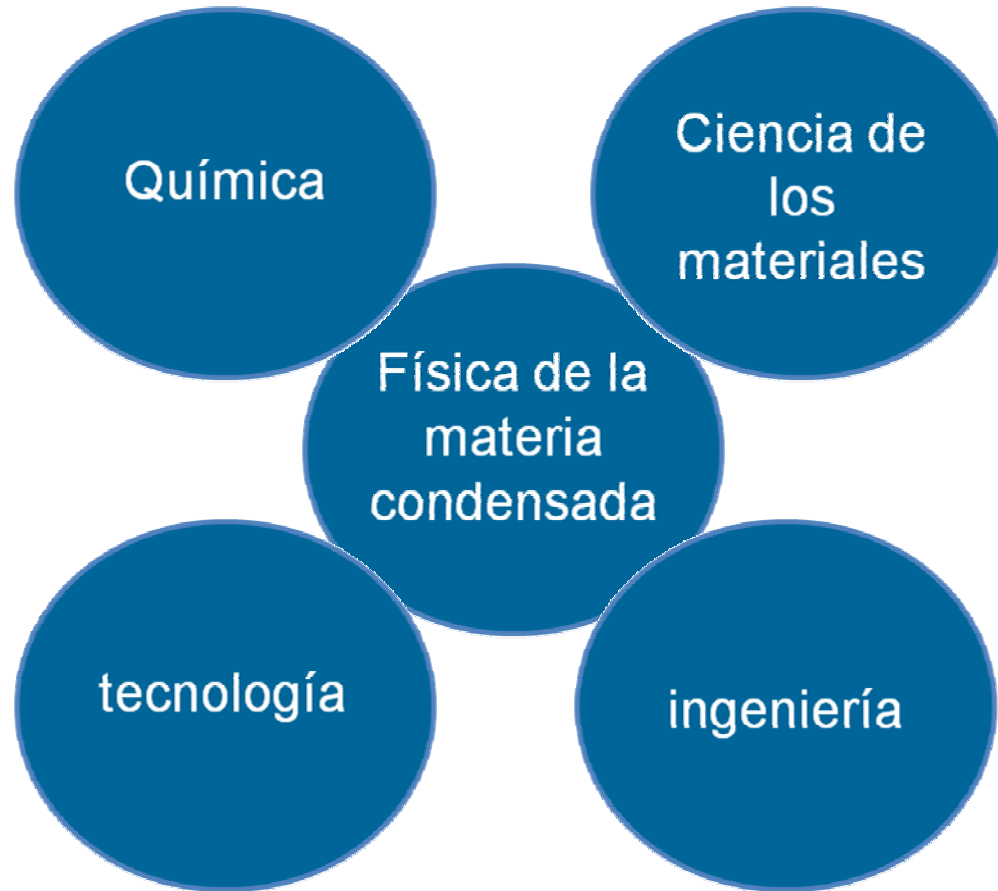
Fases de espines magnéticamente ordenados (Ferro, Ferri, Antiferro-
magnetos, etc.)



Es el mayor campo de la Física Contemporánea

1/3 de los físicos de USA se identifican como físicos de la Materia Condensada. Estado Sólido es la mayor área dentro de la MC

Superposición con otras disciplinas



Contenidos

Cristales

Simetría traslacional, sistemas cristalinos y celdas unitarias. Redes de Bravais. Direcciones, coordenadas y planos. Estructura cristalina. Sistemas desordenados. Líquidos (Duan 3.2)

Clasificación de los sólidos

Tipos de ligaduras. Energía potencial.

Unión molecular.

Unión iónica.

Unión covalente.

Unión metálica.

Teoría de bandas.

Funciones de onda y niveles de energía. Semiconductores y bandas reales.

Vibraciones de red. Fonones

Caos

Bibliografía

Gerald Burns

Solid State Physics
Academic Press. 1990
ISBN: 0-12-146070-3

Feng Duan, Jin Guojun

Introduction to Condensed Matter Physics
World Scientific. 2005
ISBN 981-238-711-0

Charles Kittel

Introduction to Solid State Physics
John Wiley & Sons. 2005
ISBN 0-471-41526-X

R.J. Elliot, A.F. Gibson

An introduction to Solid State Physics and its applications
MacMillan. 1974
SBN 333 11023 4

Franco Bassani, Gerald Liedl, Peter Wyder

Encyclopedia of Condensed Matter Physics
Elsevier. 2005

Bibliografía

P. M. Chaikin, T. C. Lubensky (A)

Principles of condensed matter physics

Cambridge. 1995

ISBN 0-521-43224-3

Michael Marder

Condensed Matter Physics

John Wiley & Sons. 2000

ISBN 0-471-17779-2

CHARLES P. POOLE JR.

ENCYCLOPEDIA OF CONDENSED MATTER PHYSICS

Elsevier. 2004

ISBN 0-12-561465-9

Lui Lam

Nonlinear Physics for Beginners. Fractals, Chaos, Solitons, Pattern
Formation, Cellular Automata and Complex Systems

World Scientific. 1998

ISBN 9810201400

Bibliografía

PAUL HALPERN

What's Science Ever Done for Us? What The Simpsons Can Teach Us
about Physics, Robots, Life, and the Universe

John Wiley & Sons. 2007

ISBN 978-0-470-11460-5

<https://ssl.gigapedia.com/login>

Tópicos

Estructura Cristalina

Difracción

Sistemas desordenados

Tipos de Sólidos

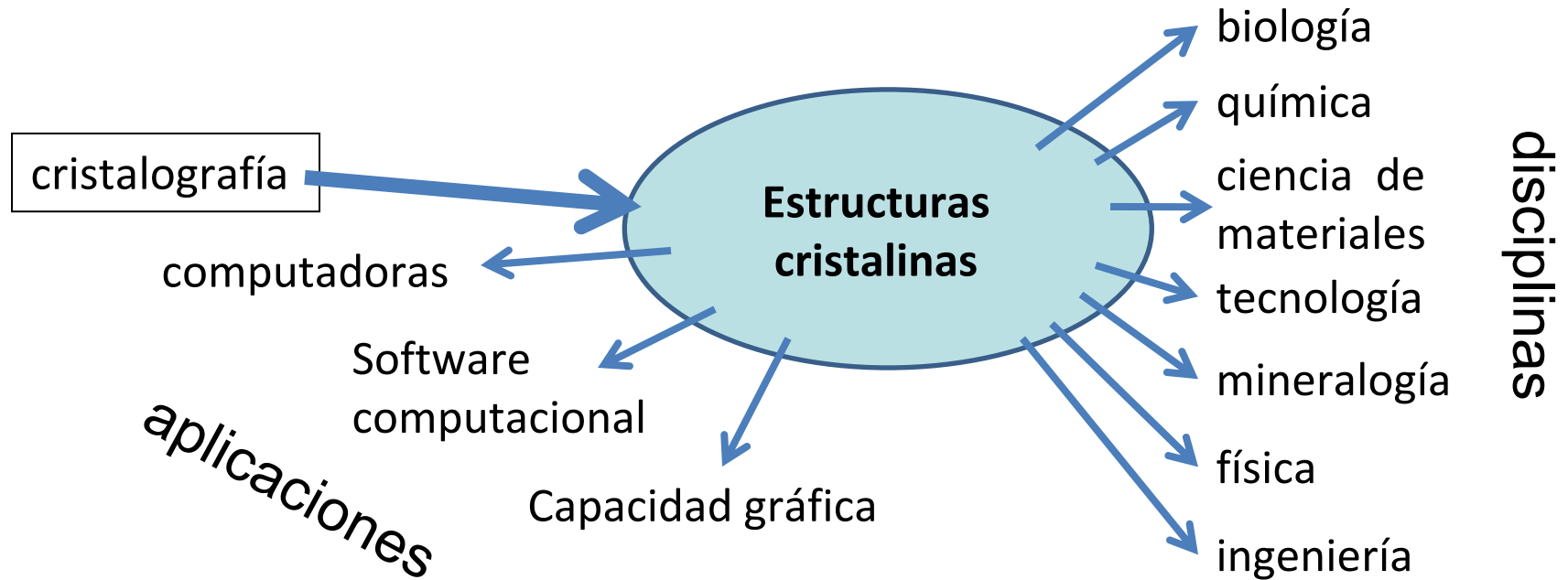
Electrones en Cristales

Fonones

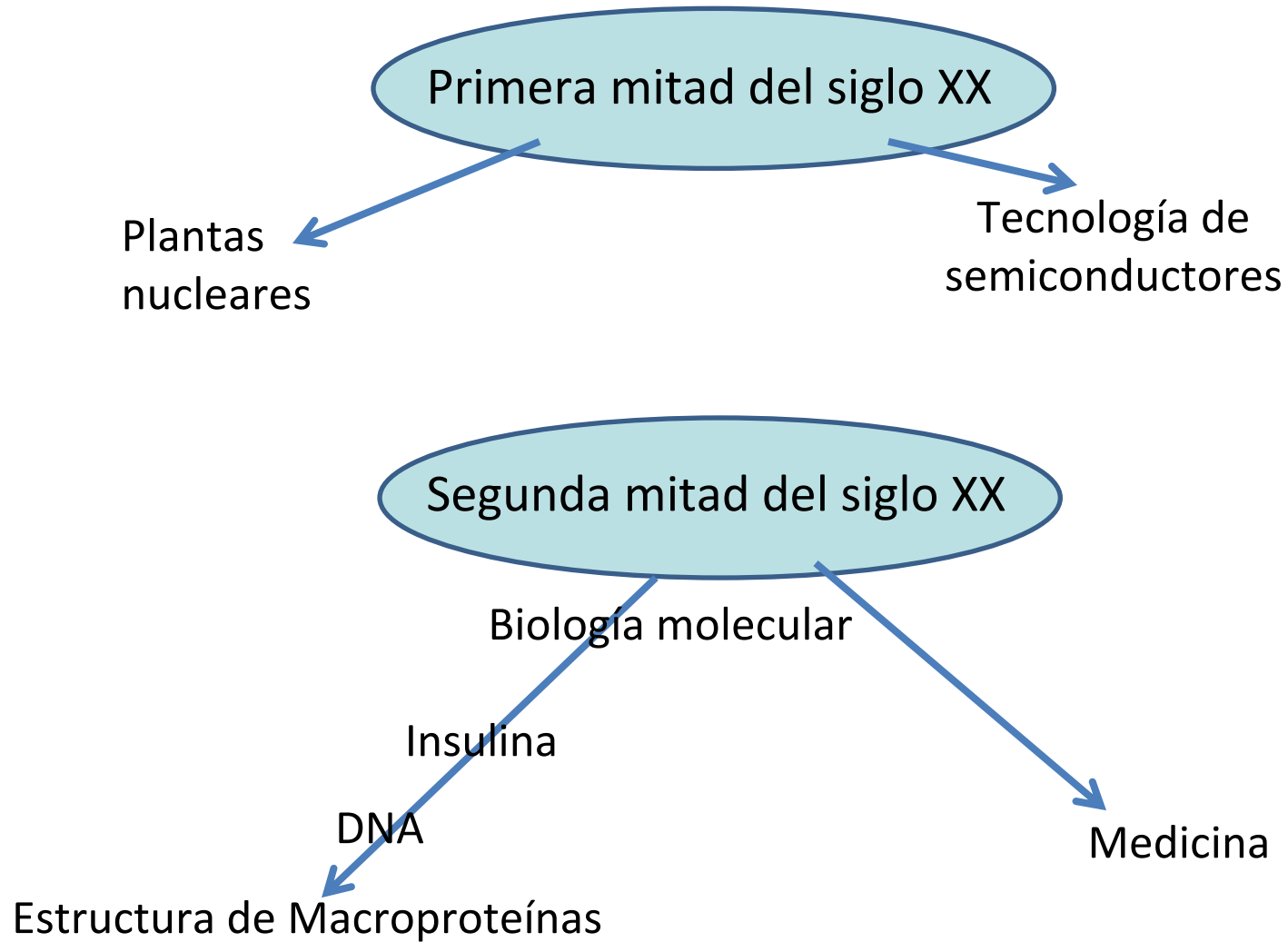
Caos

Estructura Cristalina

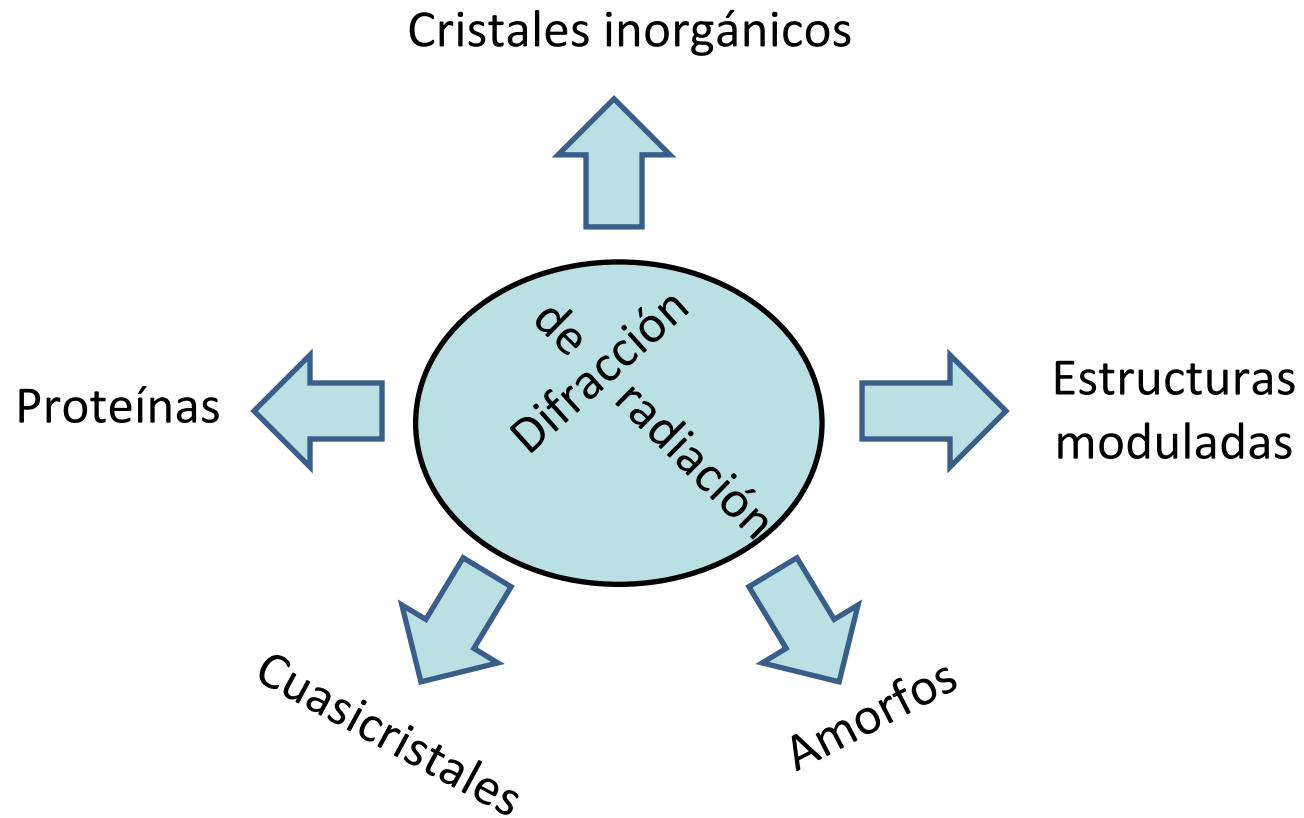
INTRO



Avances tecnológicos que requirieron del conocimiento de la estructura cristalina



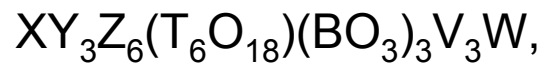
Observación de la estructura de la materia



Evidencias externas de la estructura cristalina



turmalina



where:^[6]

X = Ca, Na, K, vacancy

Y = Li, Mg, Fe²⁺, Mn²⁺, Zn, Al, Cr³⁺, V³⁺,
Fe³⁺, Ti⁴⁺, vacancy

Z = Mg, Al, Fe³⁺, Cr³⁺, V³⁺

T = Si, Al, B

B = B, vacancy

V = OH, O

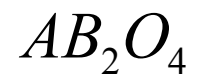
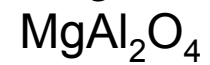
W = OH, F, O

Evidencias externas de la estructura cristalina



espinela

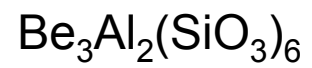
magnesium aluminium oxide



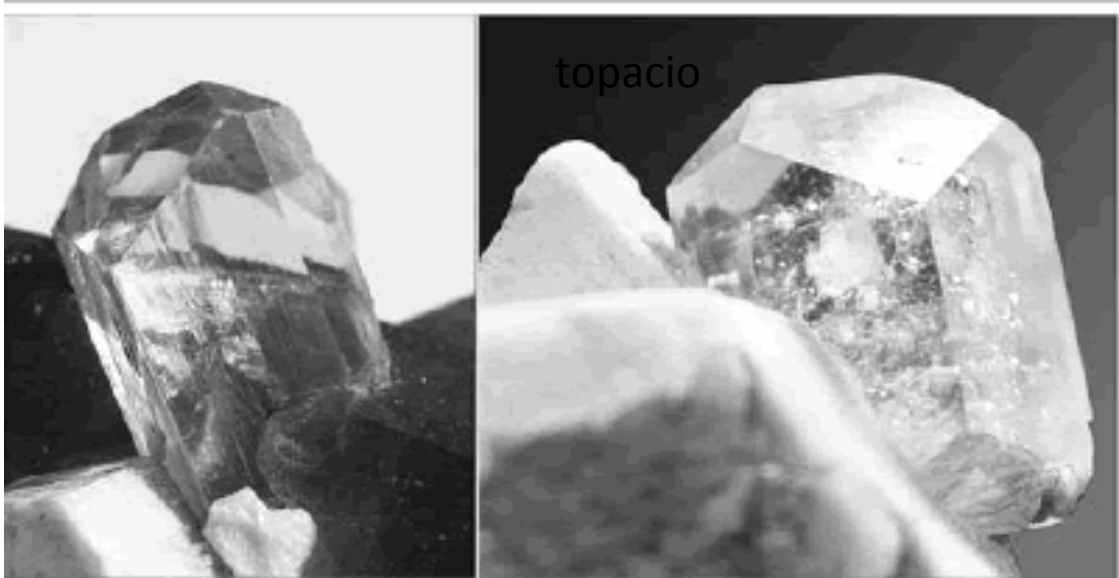
Evidencias externas de la estructura cristalina



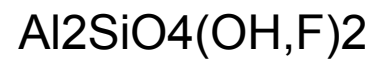
esmeralda



Evidencias externas de la estructura cristalina



topacio



Cristales y estructuras

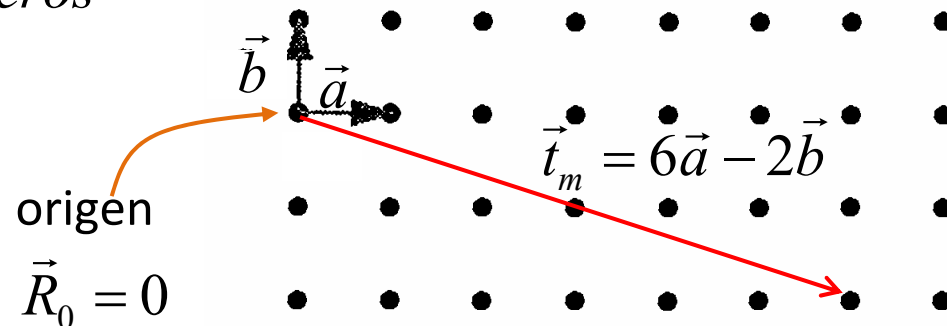
Simetría Traslacional

Red: Arreglo periódico de puntos

los entornos de cada punto son idénticos

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \quad \text{Vectores primitivos de traslación} \\ \vec{R}_m = \vec{R}_0 + \vec{t}_m \quad \text{Red} \\ \vec{t}_m = m_1 \vec{a} + m_2 \vec{b} + m_3 \vec{c} \quad \text{Simetría traslacional} \\ m_1, m_2, m_3 \text{ enteros} \end{array} \right.$$

ejemplo
Red cuadrada



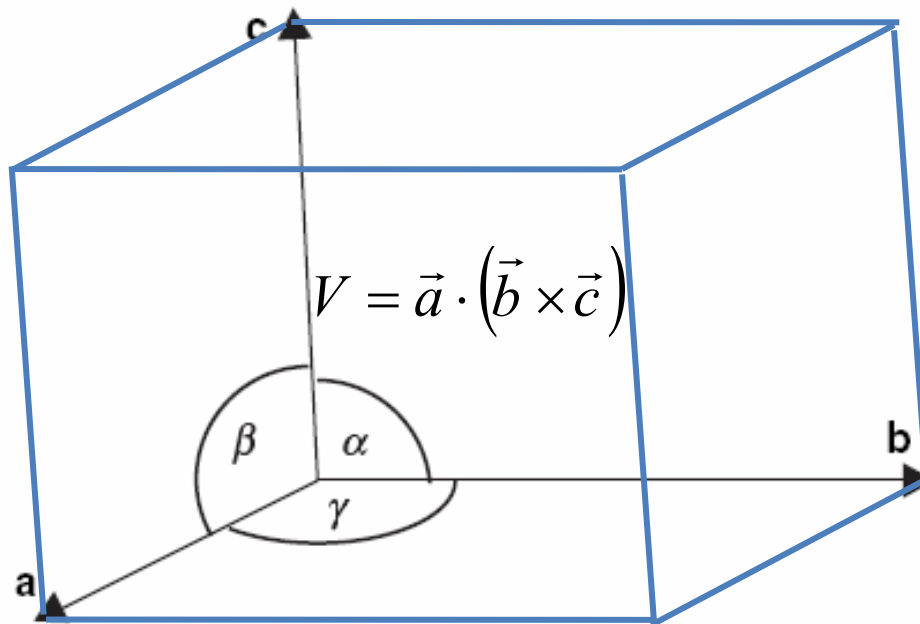
Cristales y estructuras

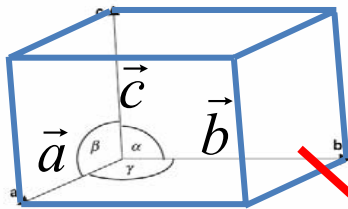
Simetría Traslacional

Celdad unidad: Es el paralelepípedo determinado por los vectores primitivos

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

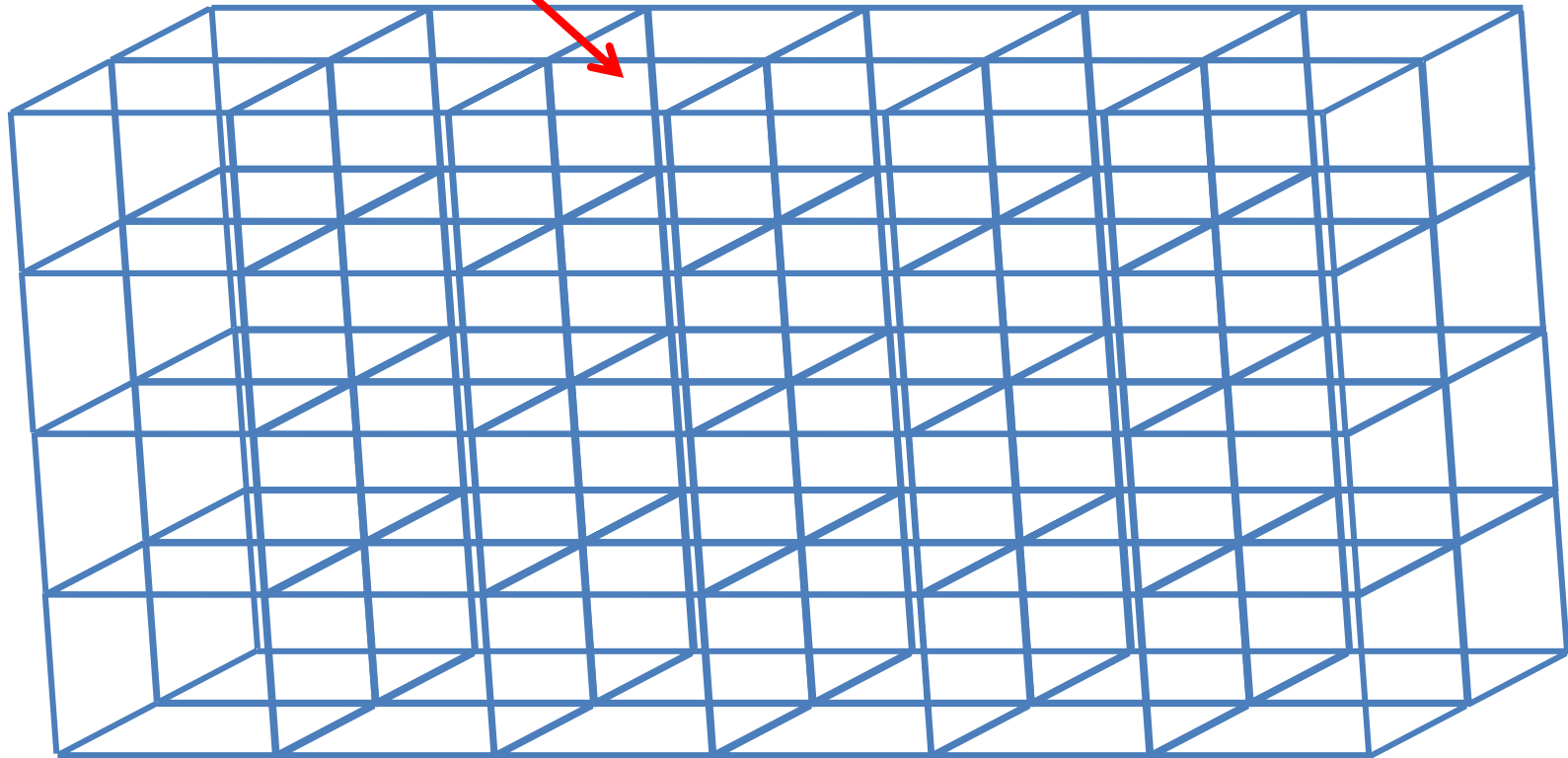
$$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \rightarrow (a, b, c; \alpha, \beta, \gamma)$$





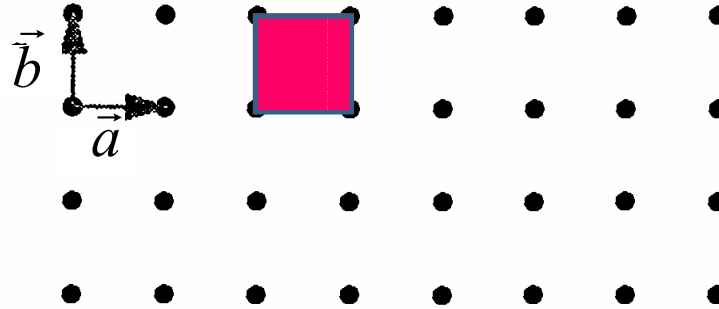
Si la celda unidad se traslada \vec{t}_m (simetría traslacional), se llena todo el espacio.

$$\vec{t}_m = m_1 \vec{a} + m_2 \vec{b} + m_3 \vec{c}$$

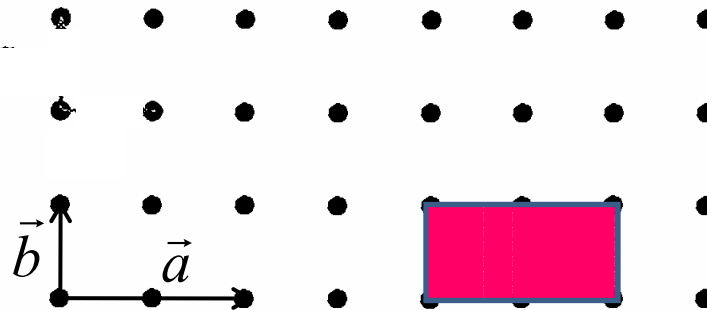


Celdas unidad primitivas y no primitivas

Celda primitiva: Contiene un solo punto de red



Celda no primitiva: Contiene más de un punto de red

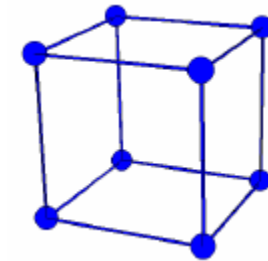


Notación

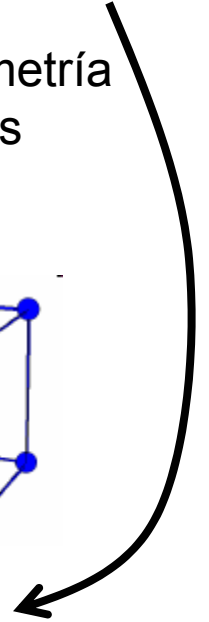
Strukturbericht

Símbolo de Pearson

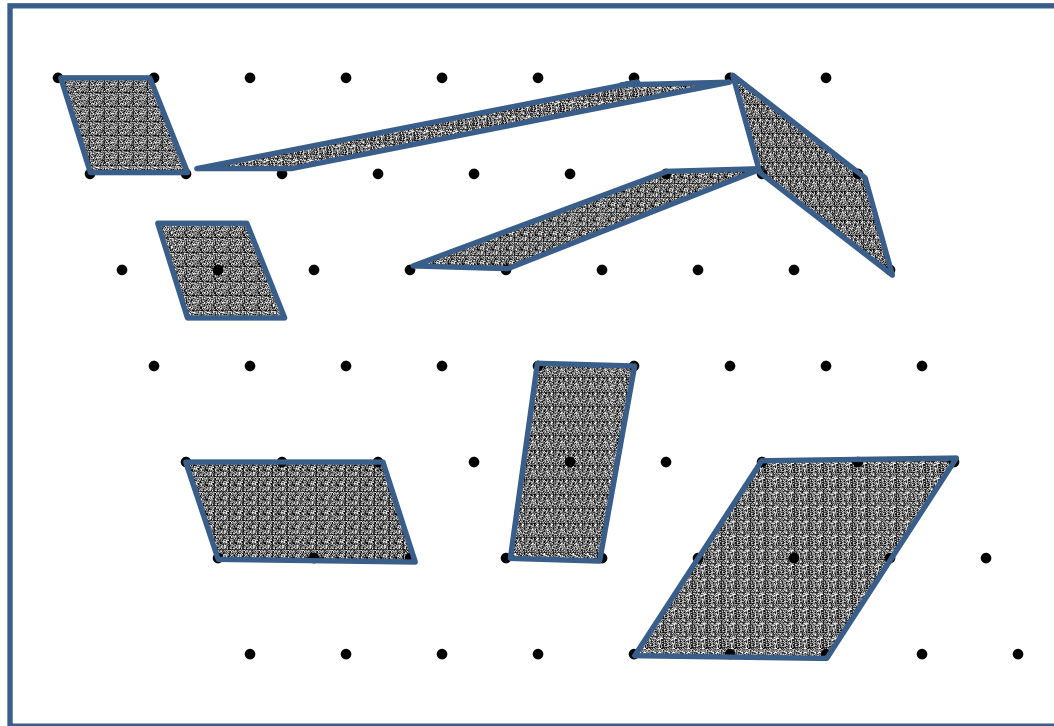
Grupos de simetría
espaciales



cP1



Celdas unidad primitivas y no primitivas



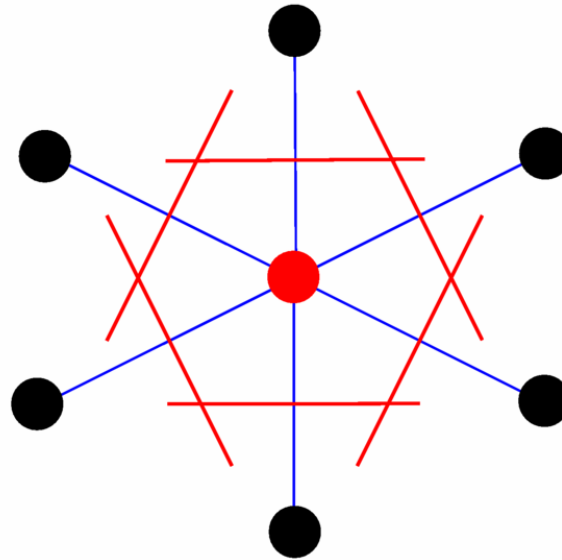
Celdas Primitivas

Celdas no Primitivas

Celdas unidad primitivas y no primitivas

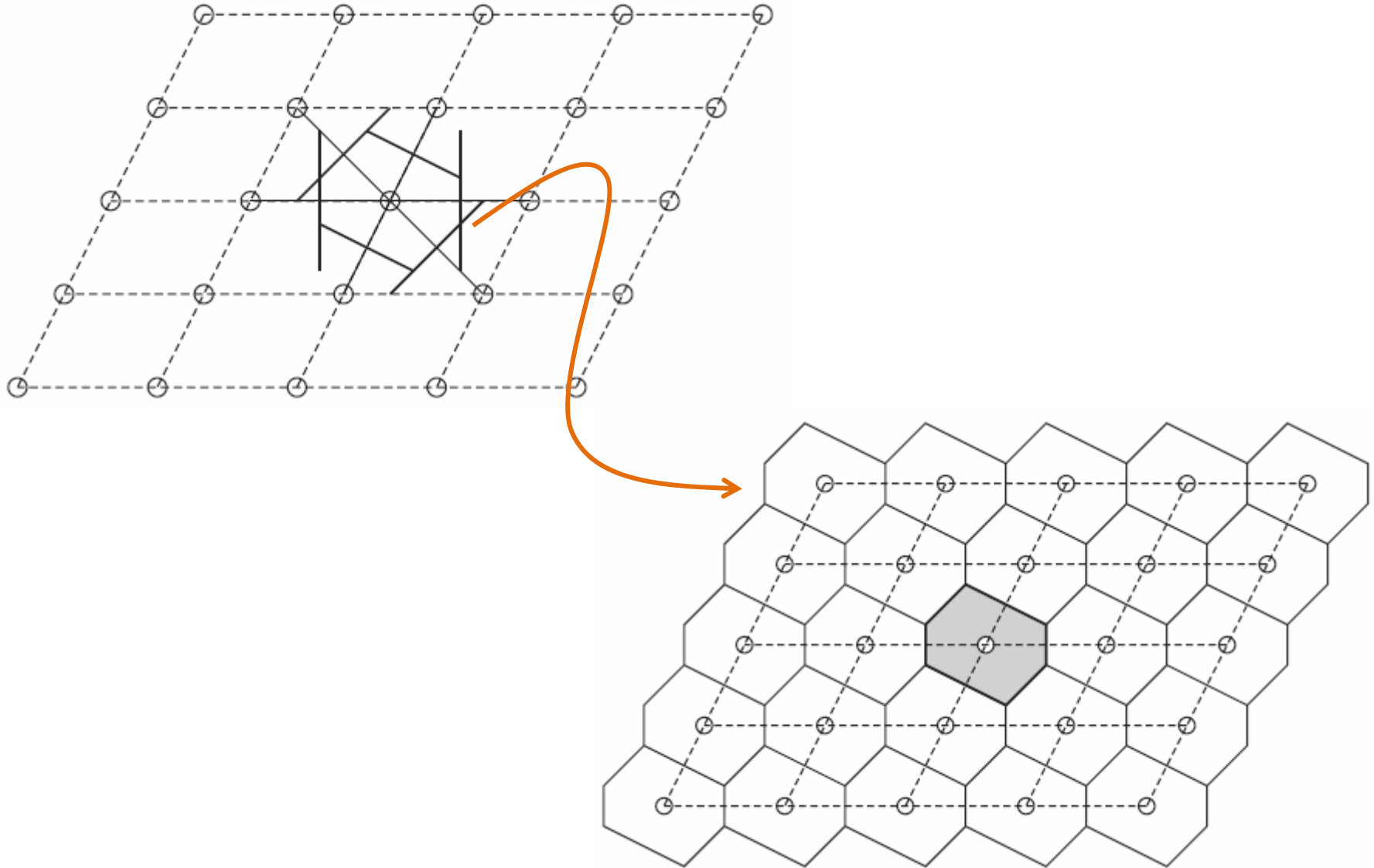
Celda de Wigner-Seitz (generalización: poliedro de Voronoi)

Contiene todos los puntos del espacio (x, y, z) más próximos al punto de red \vec{R}_m . Es una celda unidad.



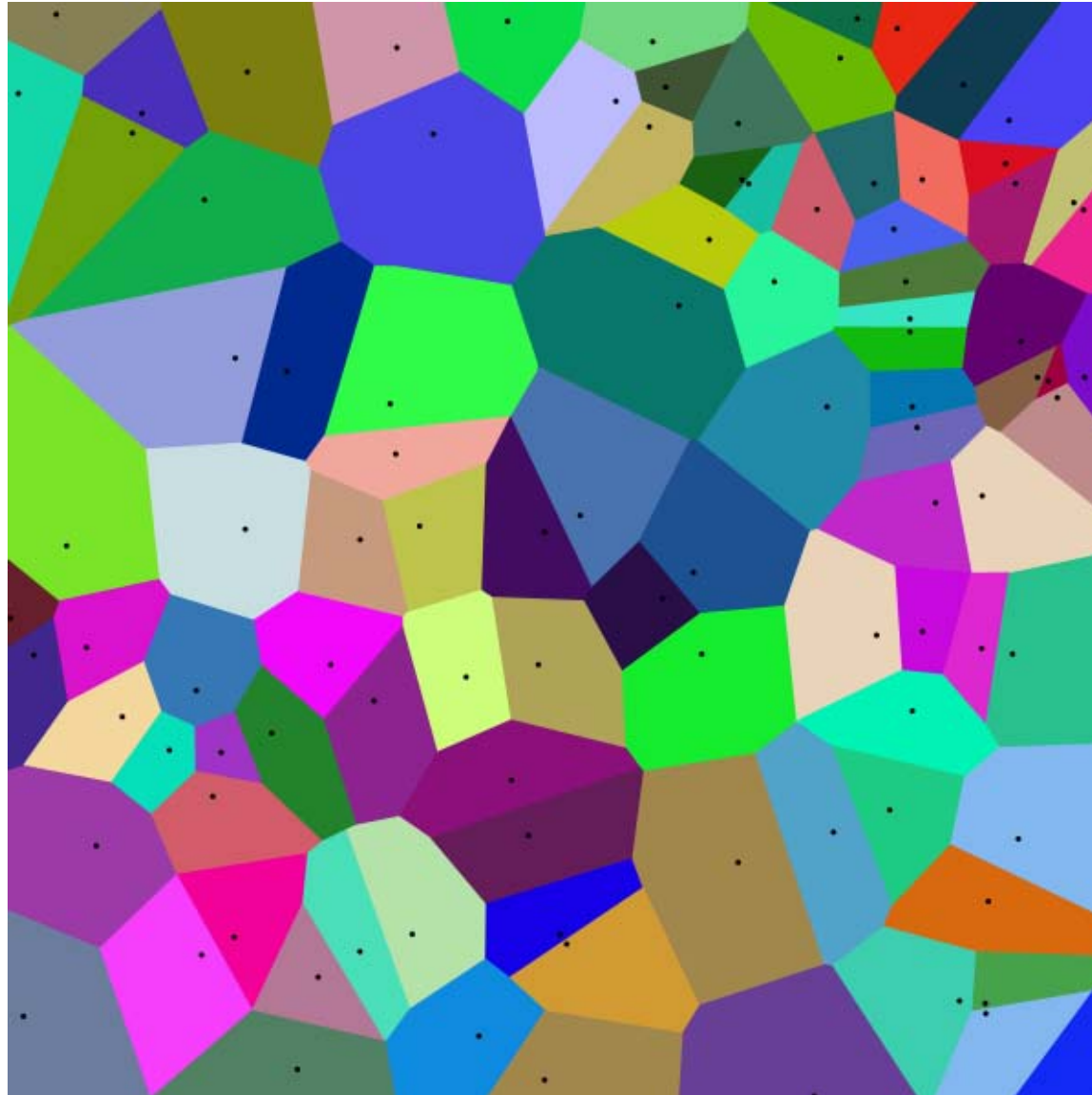
Celdas unidad primitivas y no primitivas

Celda de Wigner-Seitz



Celdas unidad primitivas y no primitivas

Poliedros de Voronoi (puntos desordenados)



amorfo

Cristales y estructuras

Sistemas cristalinos

3d

operaciones de simetría

Red: está determinada por la operación de simetría traslacional $\vec{t}_m = m_1\vec{a} + m_2\vec{b} + m_3\vec{c}$.

Posee además la **simetría de inversión**: si \vec{R} pertenece a la red, también pertenece $-\vec{R}$. La red permanece invariante bajo la aplicación de esta operación de simetría.

$$\vec{R} = \vec{t}_m = m_1\vec{a} + m_2\vec{b} + m_3\vec{c} \in a \text{ la red}$$

$$-\vec{R} = \vec{t}_{-m} = -m_1\vec{a} - m_2\vec{b} - m_3\vec{c} \in a \text{ la red}$$

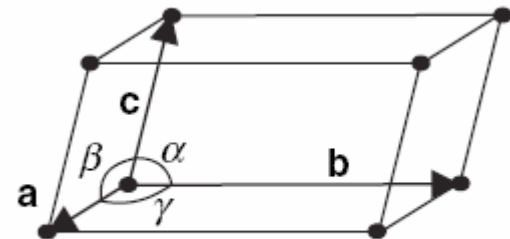
por definición de la operación de simetría traslacional.

Notación para la simetría de inversión: $i(\bar{1})$

Sistema Cristalino **Triclínico**

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$

$$a \neq b \neq c$$



Primitive triclinic (*aP*)

Cristales y estructuras

Sistemas cristalinos

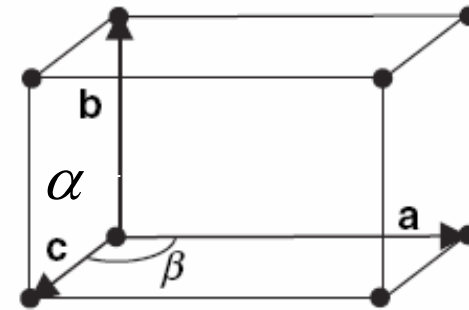
3d

1 Eje doble de simetría rotacional: la red permanece invariante cuando se realiza una rotación de 180° alrededor de este eje.

Supongamos que el eje \vec{c} tiene esta simetría. En tal caso:

$$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$$

$$a \neq b \neq c$$



Primitive monoclinic (*mP*)

Notación para la simetría de eje doble: $C_2(2)$

Sistema Cristalino **Monoclínico**

Cristales y estructuras

Sistemas cristalinos

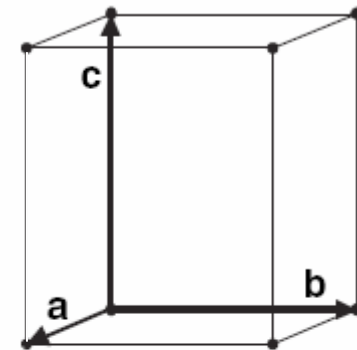
3d

2 Ejes dobles de simetría rotacional: la red permanece invariante cuando se realiza una rotación de 180° alrededor de cada uno de estos ejes.

En este caso:

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$a \neq b \neq c$$



Primitive orthorhombic
(oP)

Notación para la simetría de eje doble: $C_2(2)$

Sistema Cristalino **Ortorrómbico**

Cristales y estructuras

Sistemas cristalinos

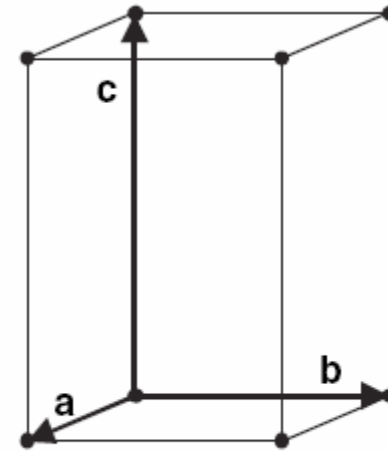
3d

1 Eje cuádruple de simetría rotacional: la red permanece invariante cuando se realiza una rotación de 90° alrededor de este eje.

Si se dá este caso para el eje \vec{c} :

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$a = b \neq c$$



Primitive tetragonal (*tP*)

Notación para la simetría de eje cuádruple: $C_4(4)$

Sistema Cristalino **Tetragonal**

Cristales y estructuras

Sistemas cristalinos

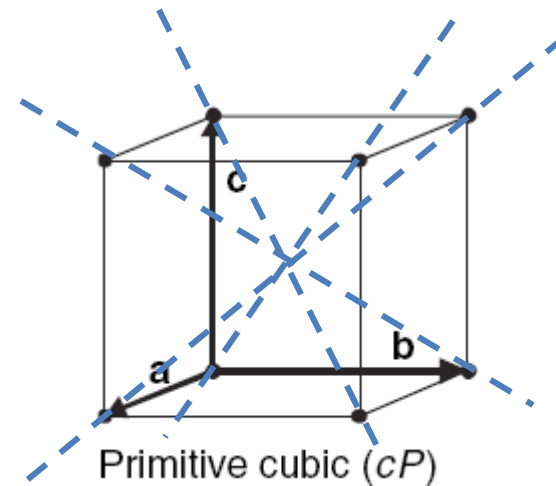
3d

4 Ejes triples de simetría rotacional: la red permanece invariante cuando se realiza una rotación de 120° alrededor de cada uno de estos ejes.

Si se dá este caso:

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$a = b = c$$



Notación para la simetría de eje triple: $C_3(3)$

Sistema Cristalino **Cúbico**

Cristales y estructuras

Sistemas cristalinos

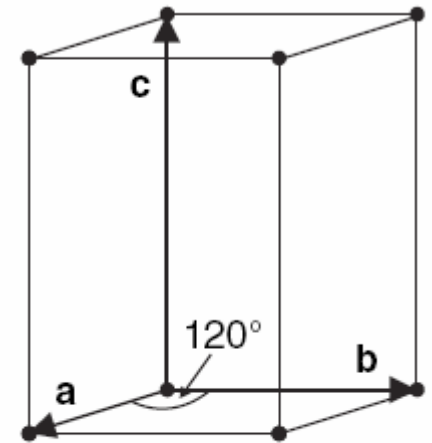
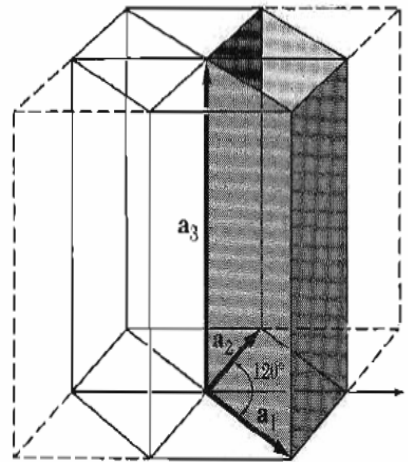
3d

1 Eje séxtuple de simetría rotacional: la red permanece invariante cuando se realiza una rotación de 60° alrededor de este eje.

Si se dá este caso para el eje \vec{c} :

$$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$$

$$a = b \neq c$$



Primitive hexagonal (hP)

Notación para la simetría de eje séxtuple: $C_6(6)$

Sistema Cristalino Hexagonal

Cristales y estructuras

Sistemas cristalinos

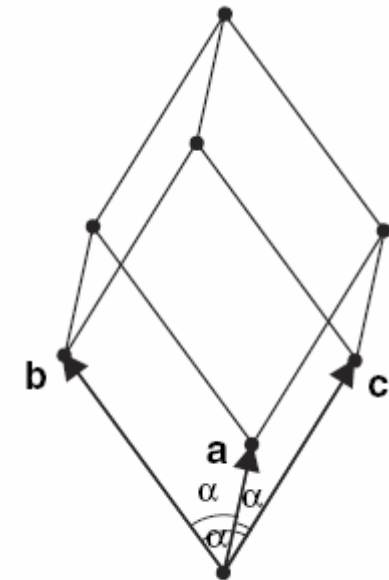
3d

1 Eje triple de simetría rotacional: la red permanece invariante cuando se realiza una rotación de 120° alrededor de este eje.

Si se da este caso para el eje \vec{c} :

$$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ \quad \text{Trigonal} \\ a = b \quad \text{(Hexagonal)}$$

$$\alpha = \beta = \gamma \\ a = b = c \quad \text{Romboédrico}$$



Notación para la simetría de eje triple: $C_3(3)$

Rhombohedral (*hR*)

Los 7 sistemas cristalinos (3d)

relaciones entre ejes y ángulos

Table 1.1 The seven crystal systems


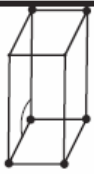


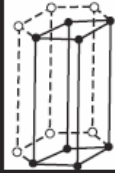
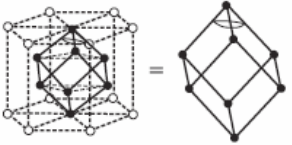

Crystal family	Crystal system	Axial relationships
Isometric	Cubic	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ;$
Tetragonal	Tetragonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ;$
Orthorhombic	Orthorhombic	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ;$
Monoclinic	Monoclinic	$a \neq b \neq c, \alpha = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma = 90^\circ;$
Anorthic	Triclinic	$a \neq b \neq c, \alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ;$
Hexagonal	Hexagonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ;$
	Trigonal or Rhombohedral	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma;$ or $a' = b' \neq c', \alpha' = \beta' = 90^\circ, \gamma' = 120^\circ;$ (hexagonal axes)

Los 7 sistemas cristalinos (3d)

Parámetros que definen la red

Crystal system	Shape of unit cell	Metric parameters
Triclinic	Oblique-angled parallelepiped	$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$
Monoclinic	Straight prism with parallelogram in base	a, b, c, β
Orthorhombic	Right-angle parallelepiped	a, b, c
Tetragonal	Right-angle parallelepiped with square in base	a, c
Hexagonal	Prism with base in rhombic shape, $\gamma = 120^\circ$	a, c
Trigonal	Rhombohedron	a, α
Cubic	Cube	a

Los 7 sistemas cristalinos (3d)

Crystal System	Type of Lattices					Operación de
	P	I	C	F	R	
Triclinic $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$						$E(1)$ $i(\bar{1})$
Monoclinic $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90$ $\beta \neq 90$						$C_2(2)$ $\sigma(\bar{2})$
Orthorhombic $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$						dos $C_2(2)$ $\sigma(\bar{2})$
Tetragonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$						$C_4(4)$ $S_4(\bar{4})$
Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90$ $\gamma = 120$						$C_6(6)$ $S_3(\bar{6})$
Rhombohedral $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90$						$C_3(3)$ $S_6(\bar{3})$
Cubic $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$						cuatro $C_3(3)$

$E \equiv$ identidad

$i \equiv$ inversión

$C_n \equiv n \equiv$ rotación orden n

$\sigma \equiv m \equiv$ reflexión en un plano

$\bar{n} \equiv iC_n$

(rotación de orden n seguida de inversión)

$S_n \equiv$ rotación impropia

(rotación de orden n seguida de reflexión en plano perpendicular)

Las redes de Bravais

¿Hay más redes 3d?

Nos hacemos ahora dos preguntas:

1. Podemos agregar puntos a la red de alguno de los siete sistemas cristalinos y seguir teniendo una red?
2. Si es así ¿se trata de una red nueva en el mismo sistema cristalino o es una de las conocidas pero orientada de diferente manera?

Al considerar estas dos preguntas, en varios de los sistemas no encontramos nada nuevo, pero...

... en otros se encuentran redes nuevas dentro del mismo sistema cristalino.

Las 14 redes de Bravais

¿Hay más redes 3d?

1. Las posiciones de los puntos que pueden agregarse de modo de seguir teniendo una red son los siguientes:

a. En el centro de la celda (posición I):

$$\vec{R}_{I_2} = \vec{a}/2 + \vec{b}/2 + \vec{c}/2$$

b. En el centro de las caras (posición F):

$$\vec{R}_{F_2} = \vec{a}/2 + \vec{b}/2; \vec{R}_{F_3} = \vec{b}/2 + \vec{c}/2; \vec{R}_{F_4} = \vec{c}/2 + \vec{a}/2$$

c. En el centro de una de las caras (posición C):

$$\vec{R}_{C_2} = \vec{a}/2 + \vec{b}/2$$

d. En la posición romboédrica (R):

$$\vec{R}_{R_2} = 2\vec{a}/3 + \vec{b}/3 + \vec{c}/3; \vec{R}_{R_3} = \vec{a}/3 + 2\vec{b}/3 + 2\vec{c}/3$$

Las redes de Bravais

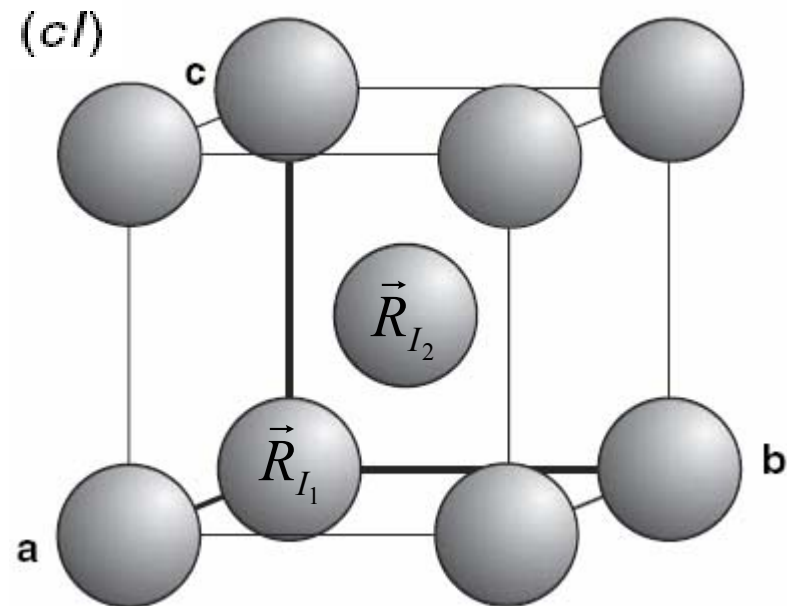
¿Hay más redes 3d?

a. Centrada en el cuerpo (I):

$$\vec{R}_{I_1} = (0,0,0)$$

$$\vec{R}_{I_2} = \vec{a}/2 + \vec{b}/2 + \vec{c}/2$$

Ejemplo: red cúbica entrada en el cuerpo (bcc o ci, nueva red)



Las redes de Bravais

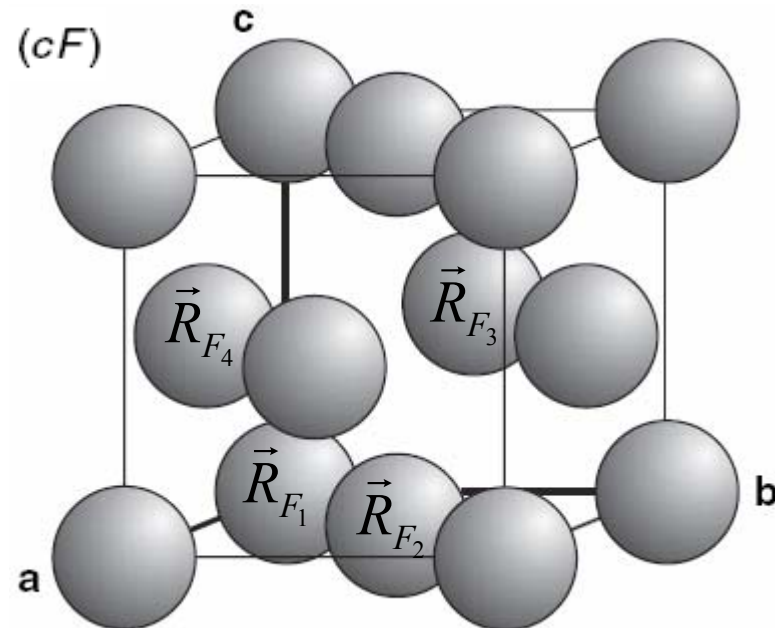
¿Hay más redes 3d?

b. Centrada en las caras (F):

$$\vec{R}_{F_1} = (0,0,0)$$

$$\vec{R}_{F_2} = \vec{a}/2 + \vec{b}/2; \vec{R}_{F_3} = \vec{b}/2 + \vec{c}/2; \vec{R}_{F_4} = \vec{c}/2 + \vec{a}/2$$

Ejemplo: red cúbica entrada en las caras (fcc o cF, nueva red)



Las redes de Bravais

¿Hay más redes 3d?

b. Centrada en una cara (C):

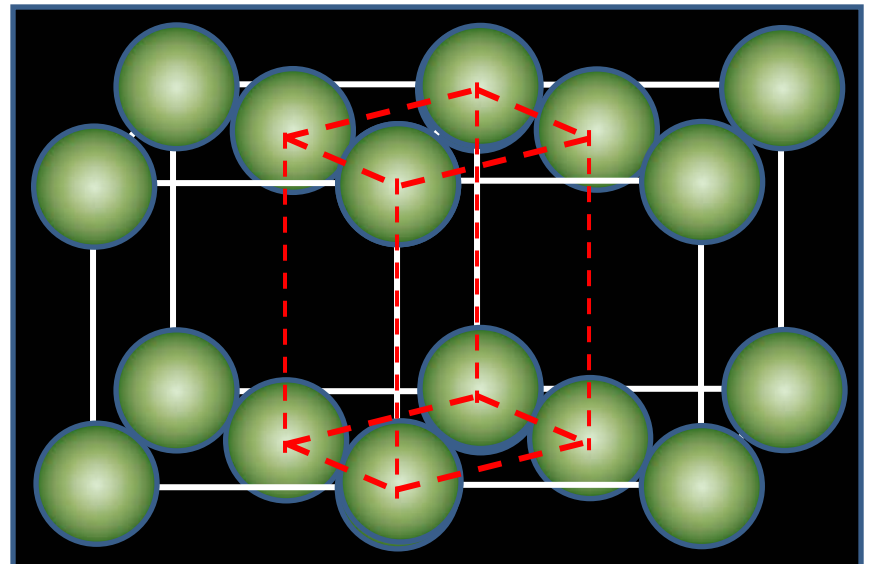
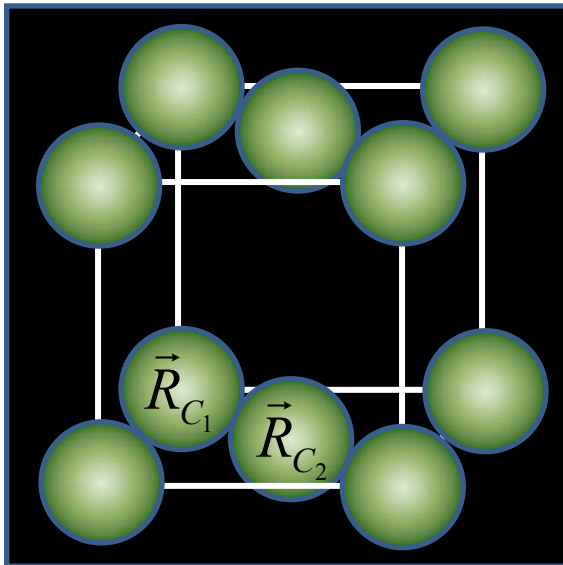
$$\vec{R}_{C_1} = (0,0,0)$$

$$\vec{R}_{C_2} = \vec{a}/2 + \vec{b}/2$$

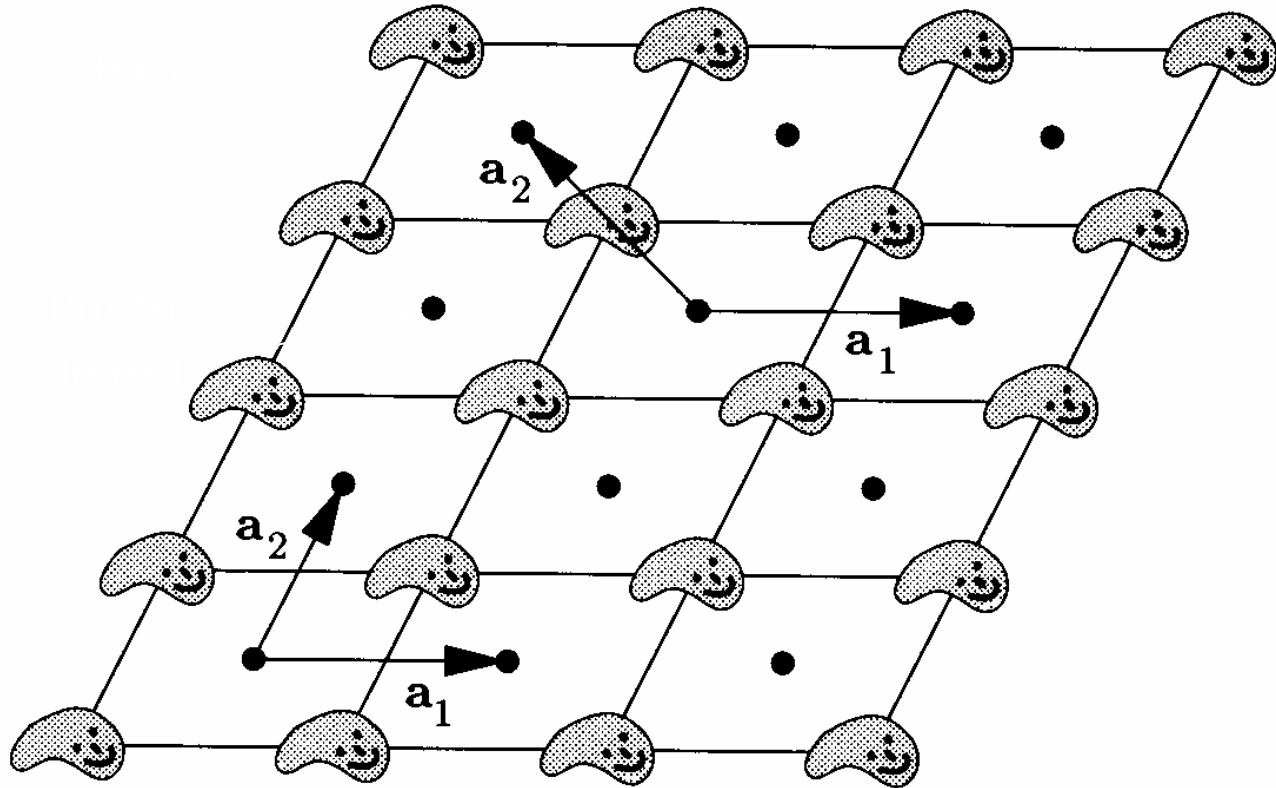
Ejemplo: red "cúbica"
centrada en la base



Primitiva tetragonal (nada nuevo)



Estructuras cristalinas más complejas: red + base



Estructuras cristalinas más complejas: red + base

Para mantener la definición de red:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \quad \text{Vectores primitivos} \\ \vec{R}_m = \vec{R}_0 + \vec{t}_m \quad \text{Red} \\ \vec{t}_m = m_1 \vec{a} + m_2 \vec{b} + m_3 \vec{c} \quad \text{Simetría traslacional} \\ m_1, m_2, m_3 \text{ enteros} \end{array} \right.$$

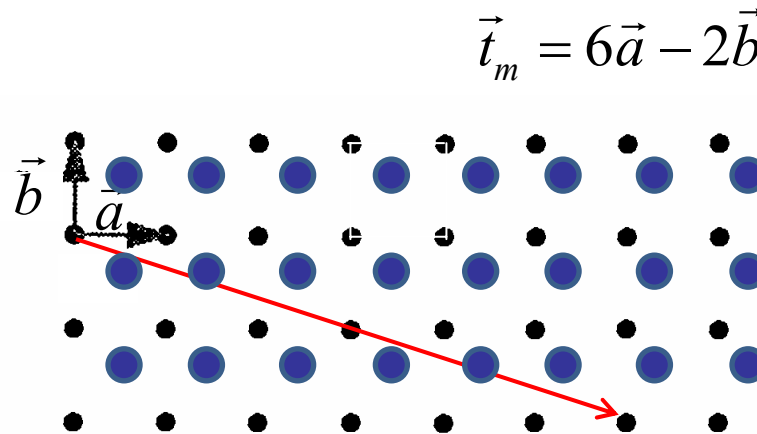
Introducimos el concepto de “base” o “motivo”

ejemplo

Red cuadrada
con base

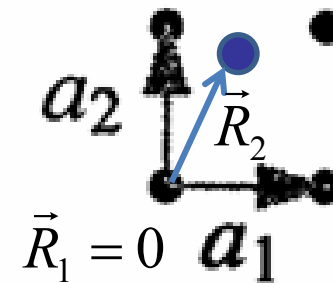
origen

$$\vec{R}_0 = 0$$



$$\vec{t}_m = 6\vec{a} - 2\vec{b}$$

Base (j)



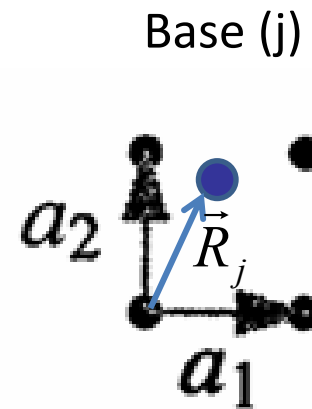
Estructuras cristalinas más complejas: red + base

Ampliamos a una definición de red más base:

$$\left. \begin{array}{l} \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \\ \vec{R}_m = \vec{R}_0 + \vec{t}_m \\ \vec{t}_m = m_1 \vec{a} + m_2 \vec{b} + m_3 \vec{c} \\ m_1, m_2, m_3 \text{ enteros} \end{array} \right\} \text{Red}$$

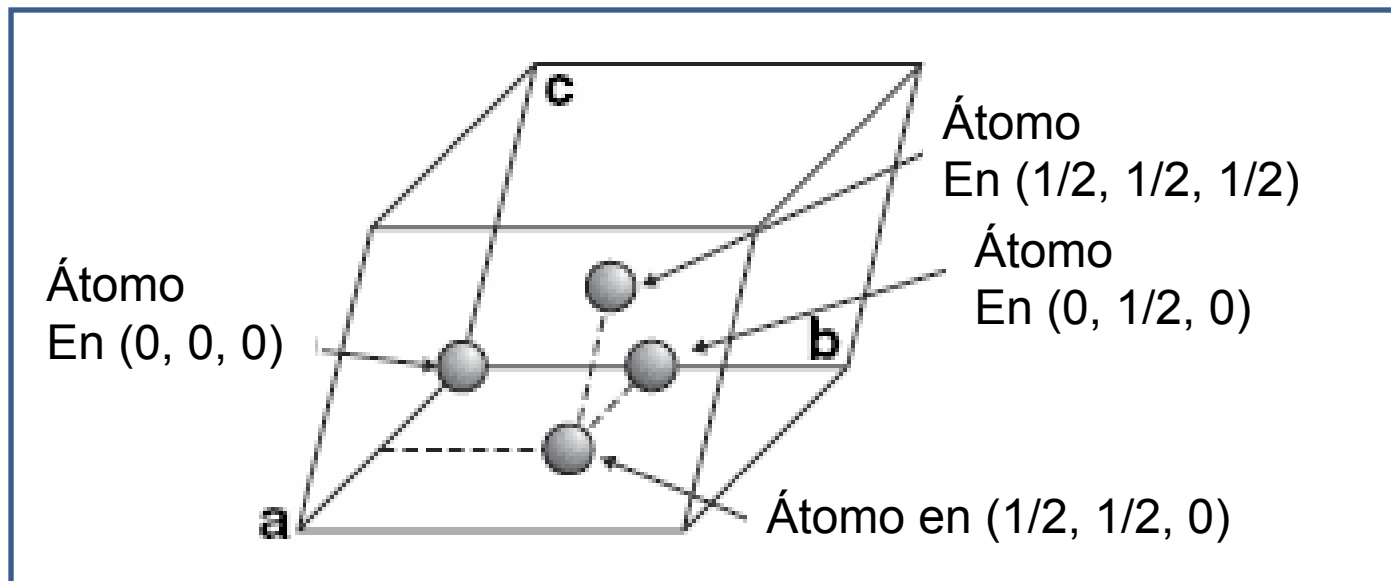
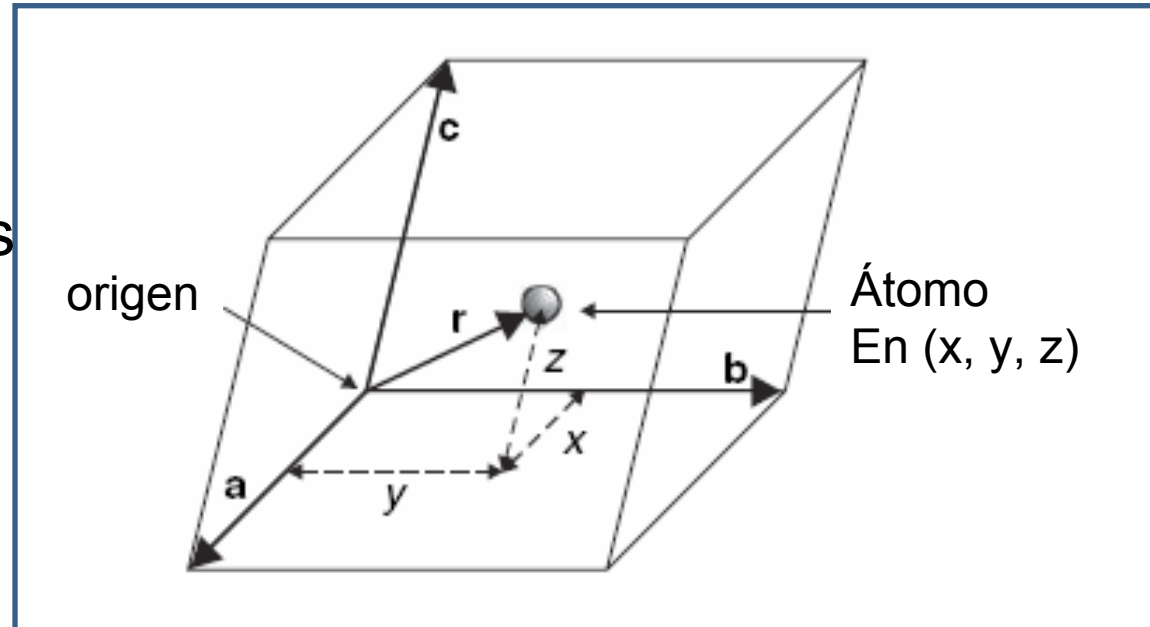
Coordenadas atómicas

$$\left. \begin{array}{l} \vec{R}_j = x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c} \\ j_{\text{máx}} = \text{nro. átomos base} \\ x_j, y_j, z_j < 1 \end{array} \right\} \text{Base}$$



Estructuras cristalinas más complejas: red + base

Coordenadas atómicas

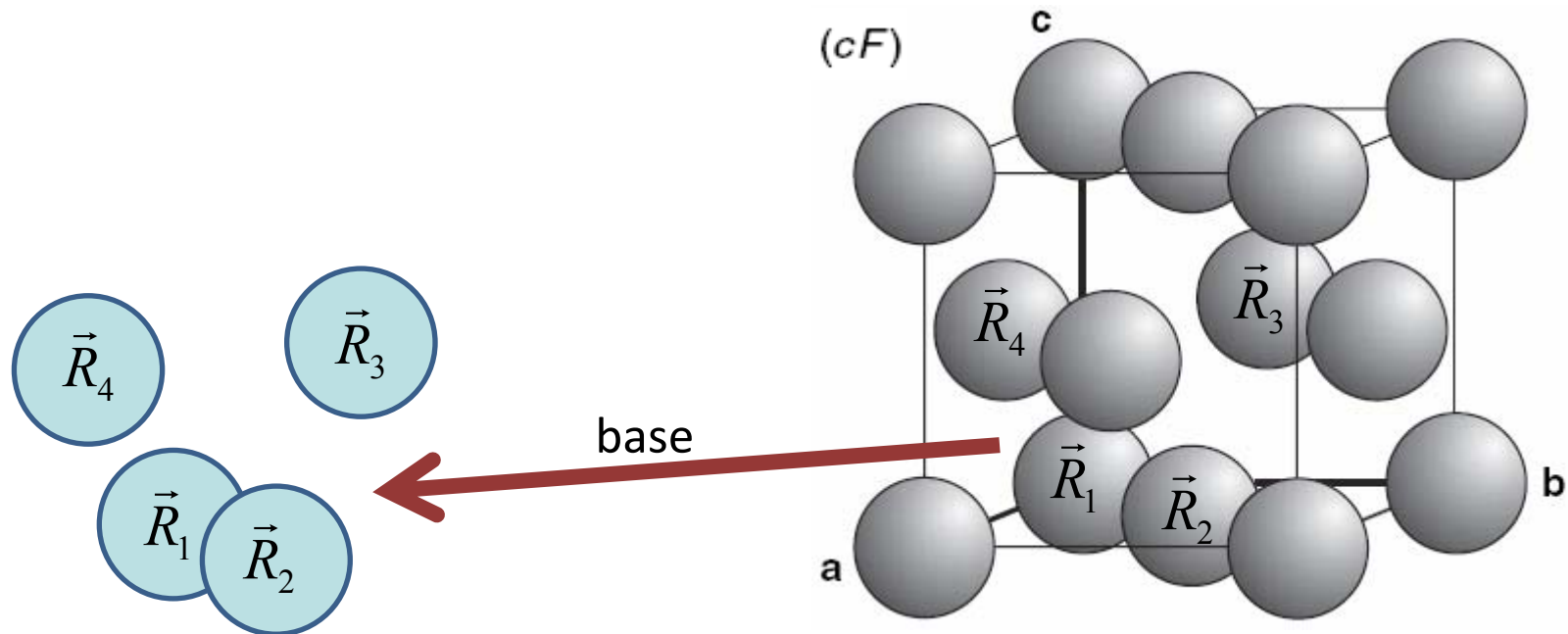


Estructuras cristalinas más complejas: red + base

En el caso de la red Cúbica Centrada en las Caras (FCC ó cF):

$$\vec{R}_1 = (0,0,0)$$

$$\vec{R}_2 = \vec{a}/2 + \vec{b}/2; \vec{R}_3 = \vec{b}/2 + \vec{c}/2; \vec{R}_4 = \vec{c}/2 + \vec{a}/2$$

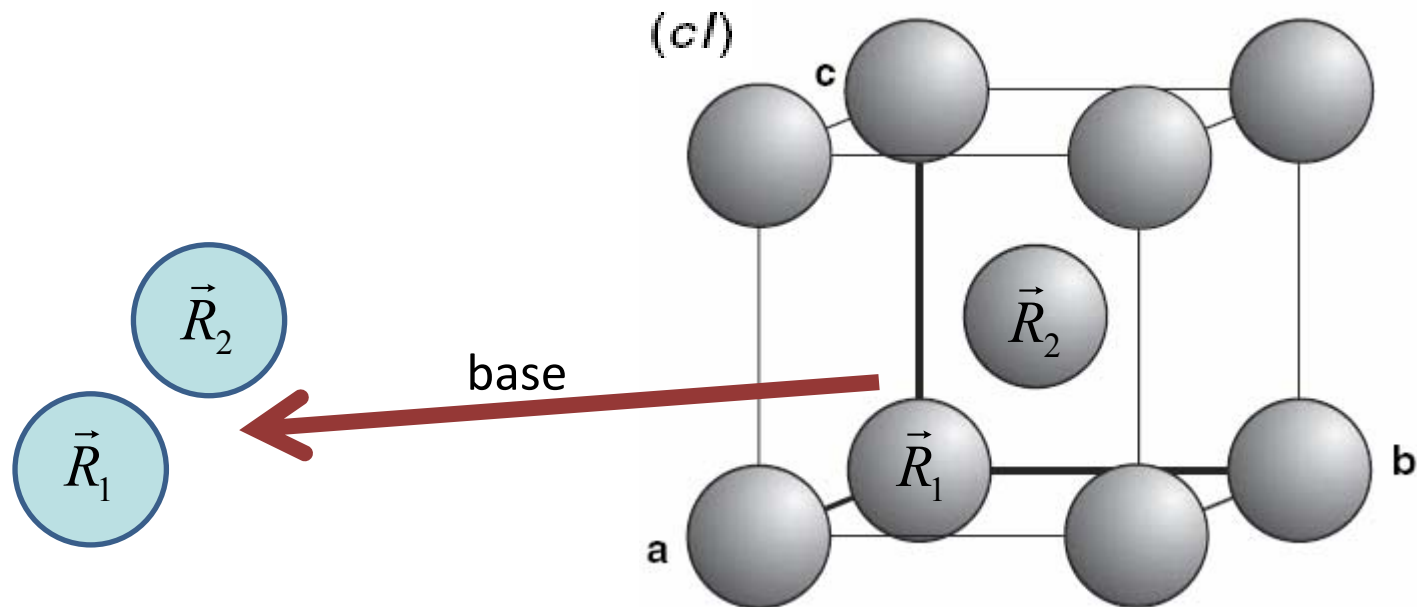


Estructuras cristalinas más complejas: red + base


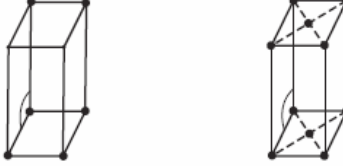
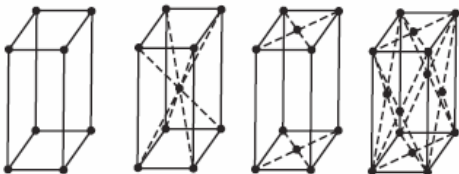
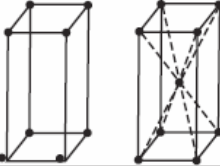
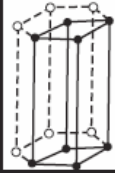
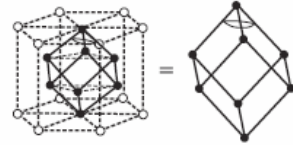
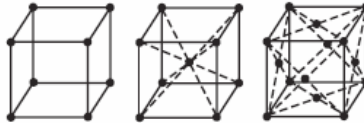
En el caso de la red Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC ó ci):

$$\vec{R}_1 = (0,0,0)$$

$$\vec{R}_2 = \vec{a}/2 + \vec{b}/2 + \vec{c}/2$$

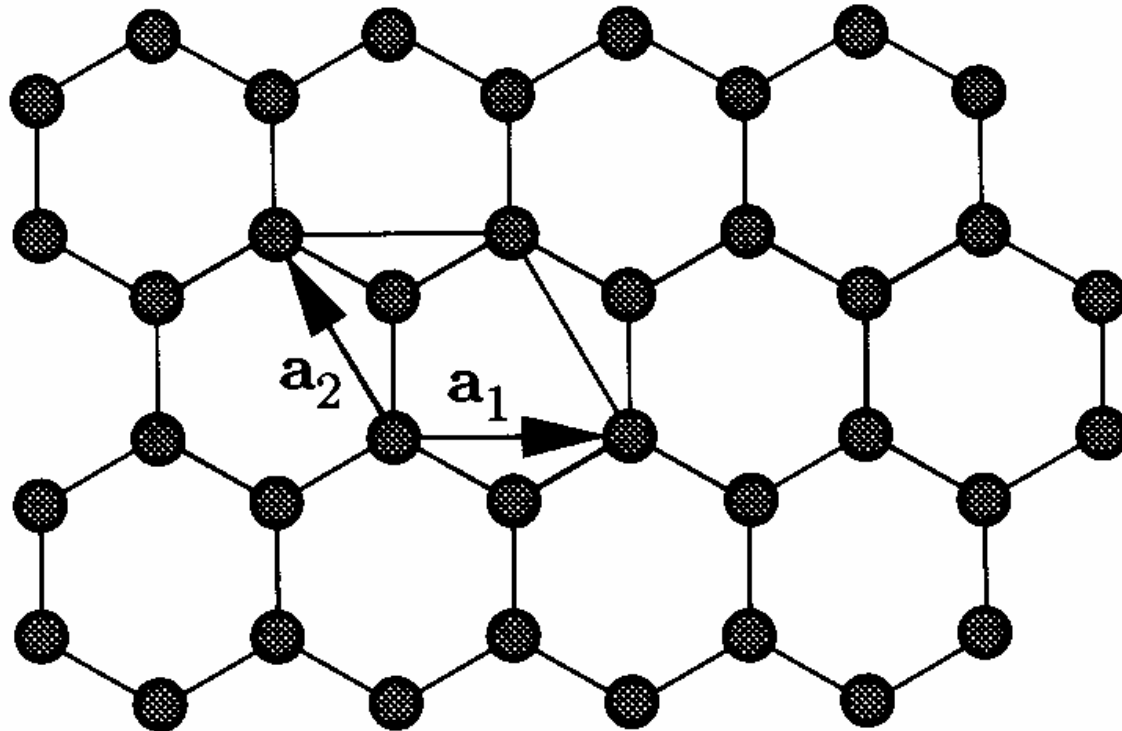


Las 14 redes de Bravais

Crystal System	Type of Lattices					Redes nuevas
	P	I	C	F	R	
Triclinic $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$						
Monoclinic $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90$ $\beta \neq 90$						(mB)
Orthorhombic $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$						(oI) (oC) (oF)
Tetragonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$						(tI)
Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90$ $\gamma = 120$						
Rhombohedral $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90$						
Cubic $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$						(cI) (cF)

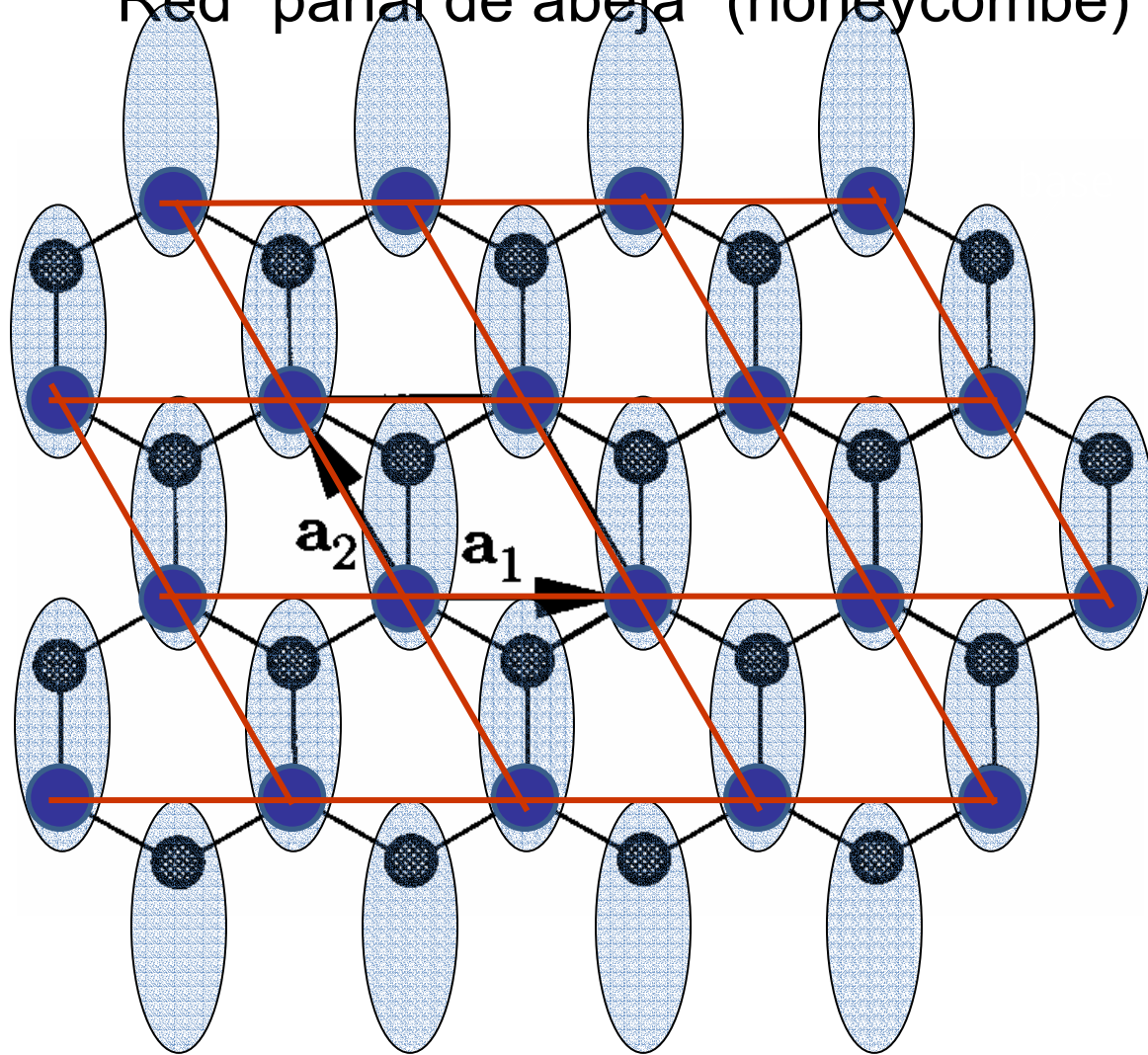
Otras estructuras red + base

Red “panal de abeja” (honeycombe)



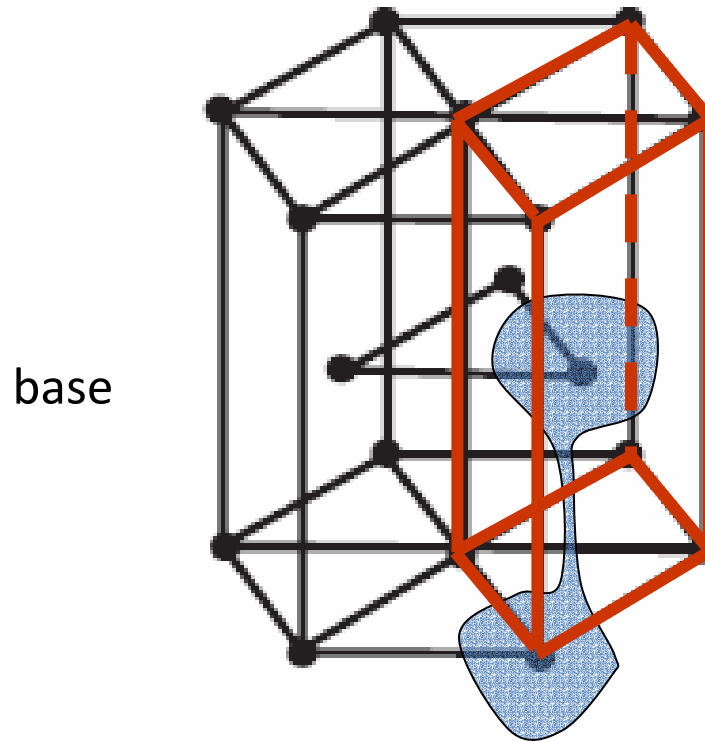
Otras estructuras red + base

Red "panal de abeja" (honeycombe)



Otras estructuras red + base

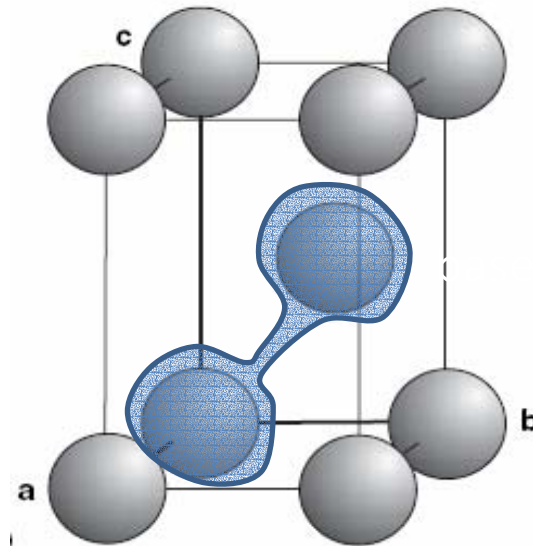
Red hexagonal compacta



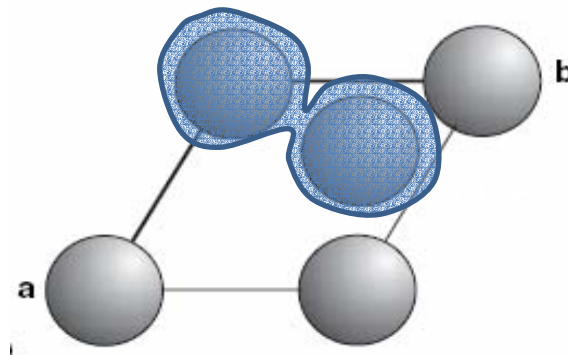
Otras estructuras red + base

Red hexagonal compacta

Vista en perspectiva

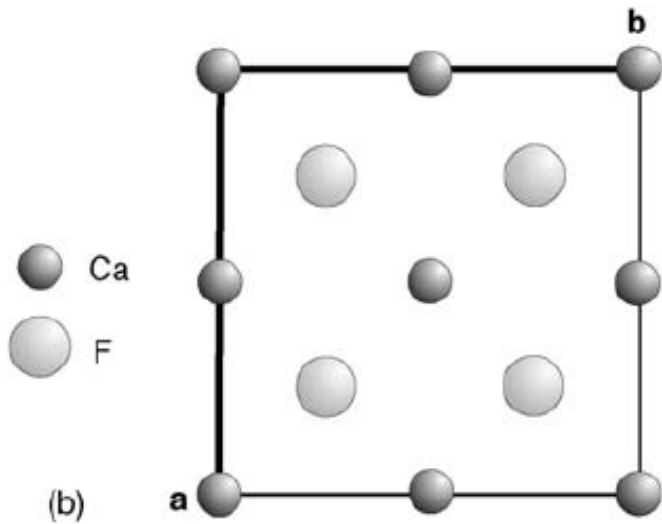
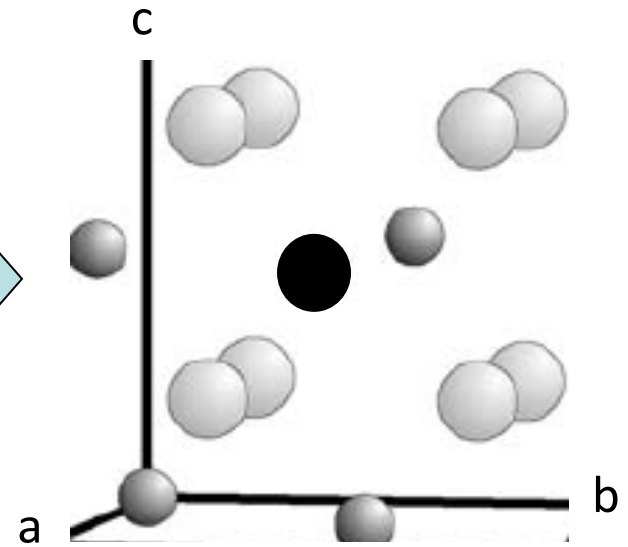
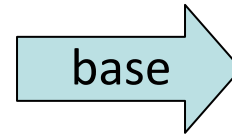
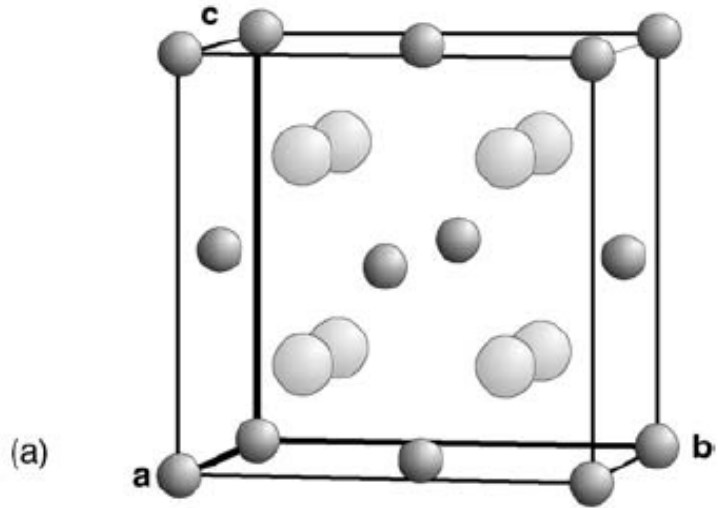


Proyección sobre el plano basal



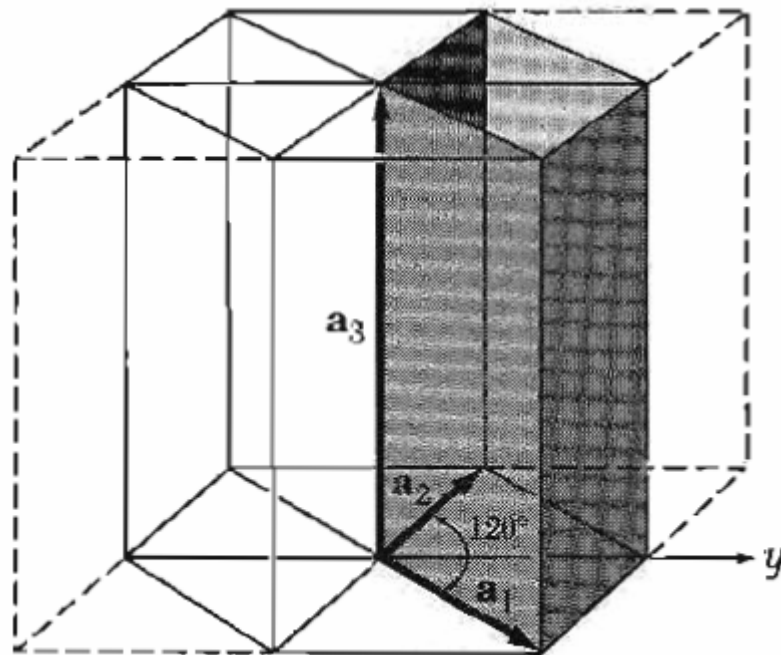
Otras estructuras red + base

Fluorita



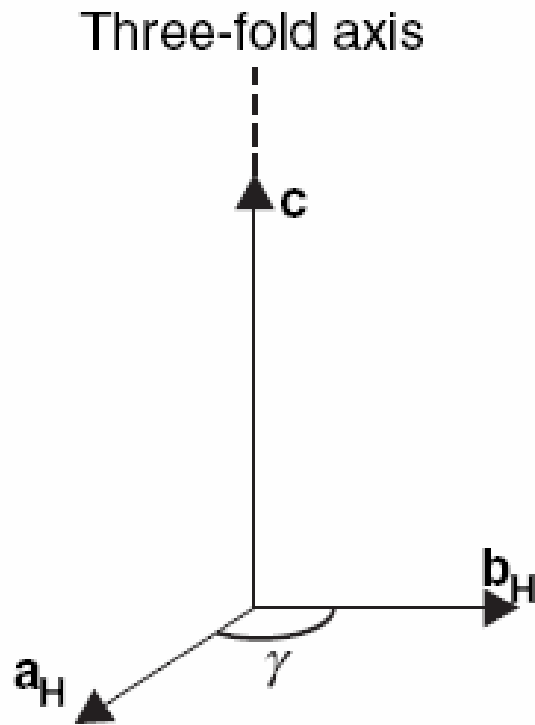
Proyección sobre el
plano basal

Comparación romboédrico - hexagonal

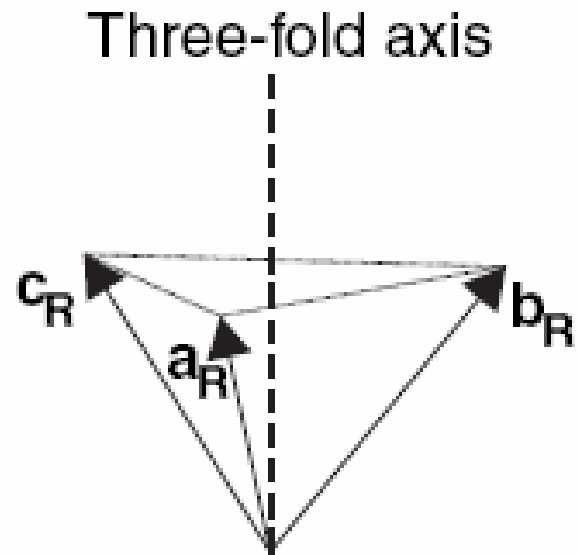


hexagonal

Comparación romboédrico - hexagonal

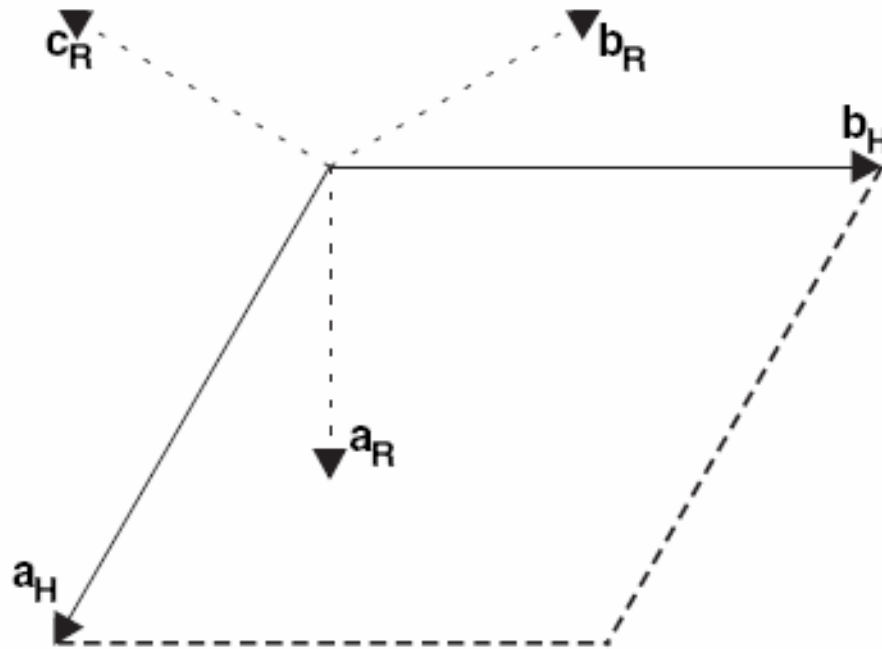


Hexagonal
Ejes hexagonales

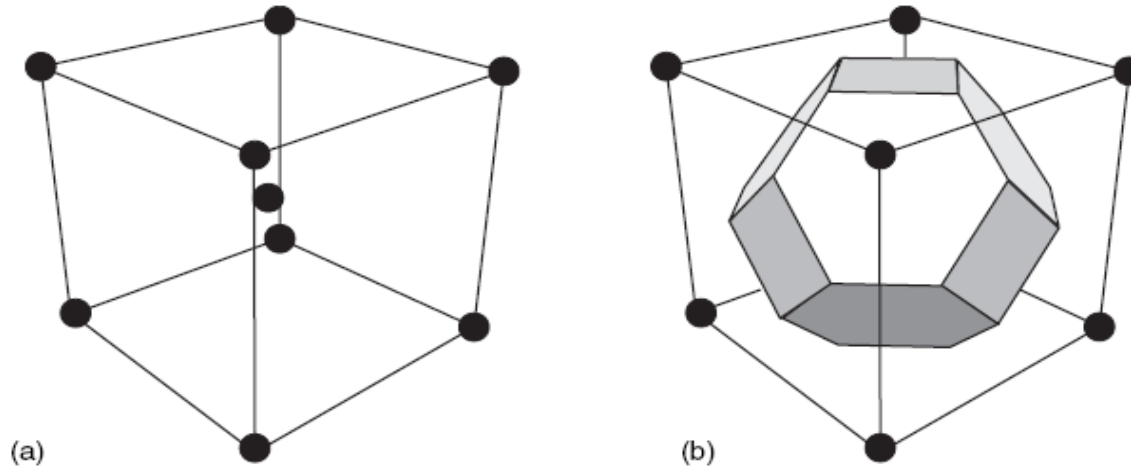


Rhombohedral
Ejes romboédricos

Comparación romboédrico - hexagonal



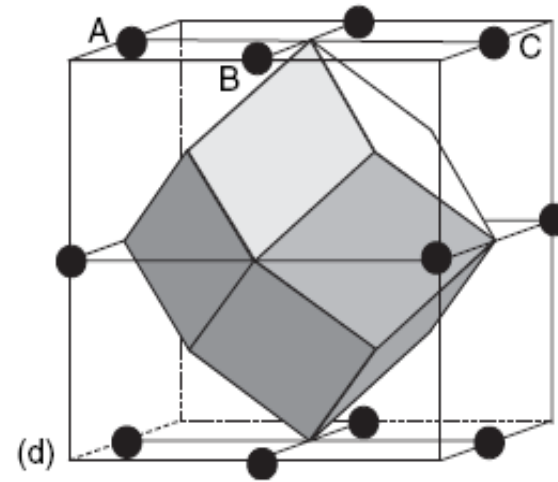
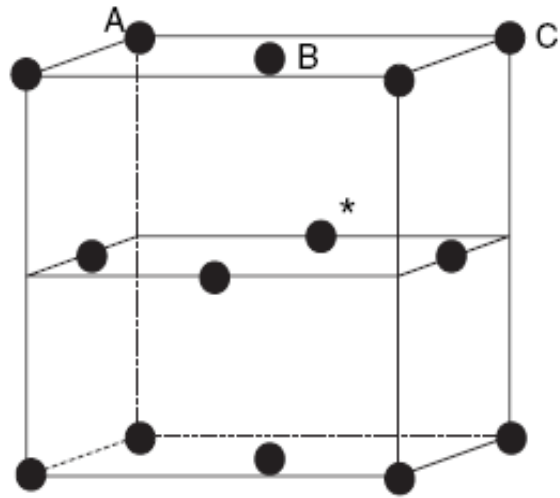
Celdas de Wigner – Seitz 3d



BCC ó cI

Las celdas de Wigner-Seitz de los sólidos elementales son siempre celdas unidad

Celdas de Wigner – Seitz 3d

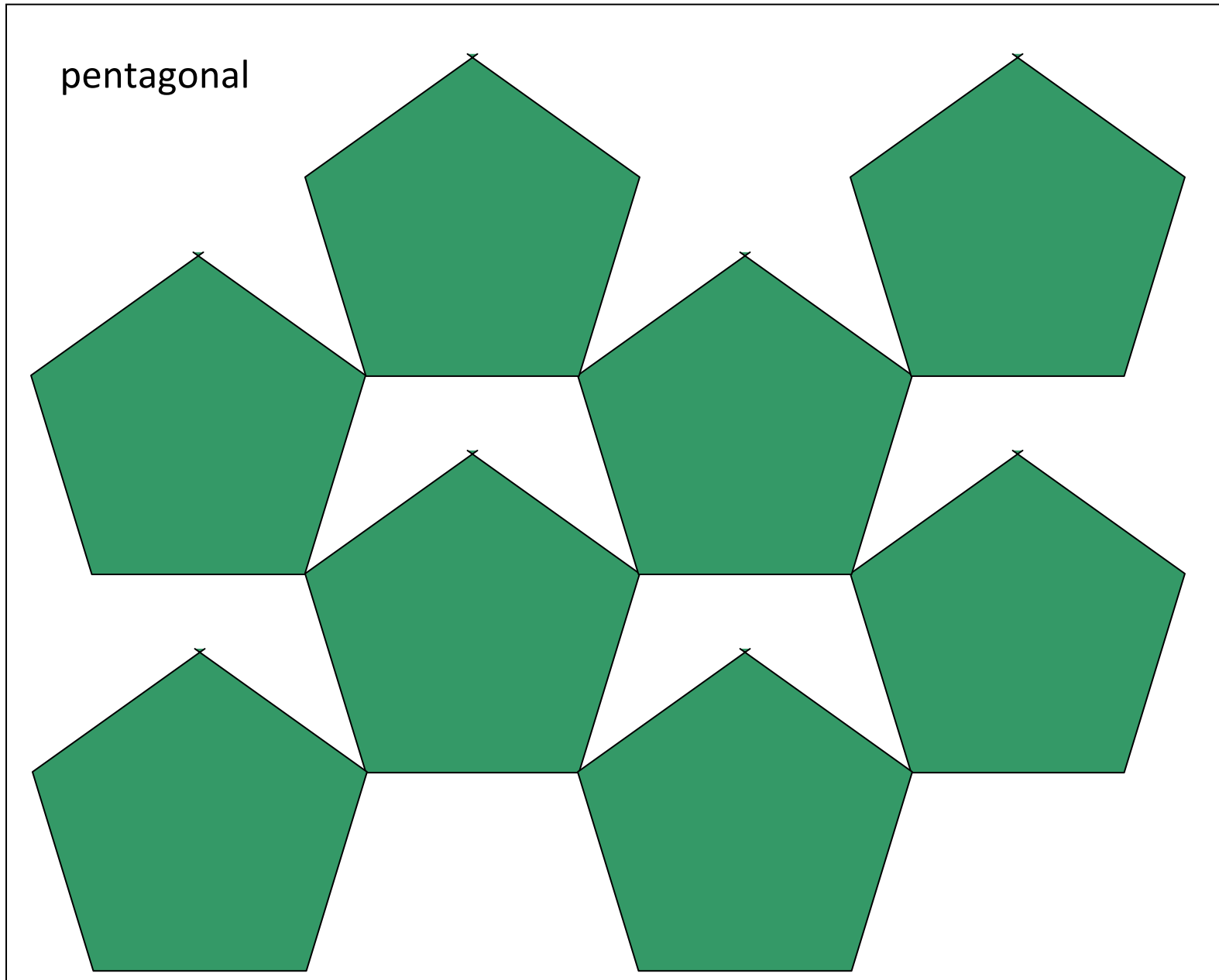


FCC ó cF

Una celda cristalina trasladada debe
llenar el espacio

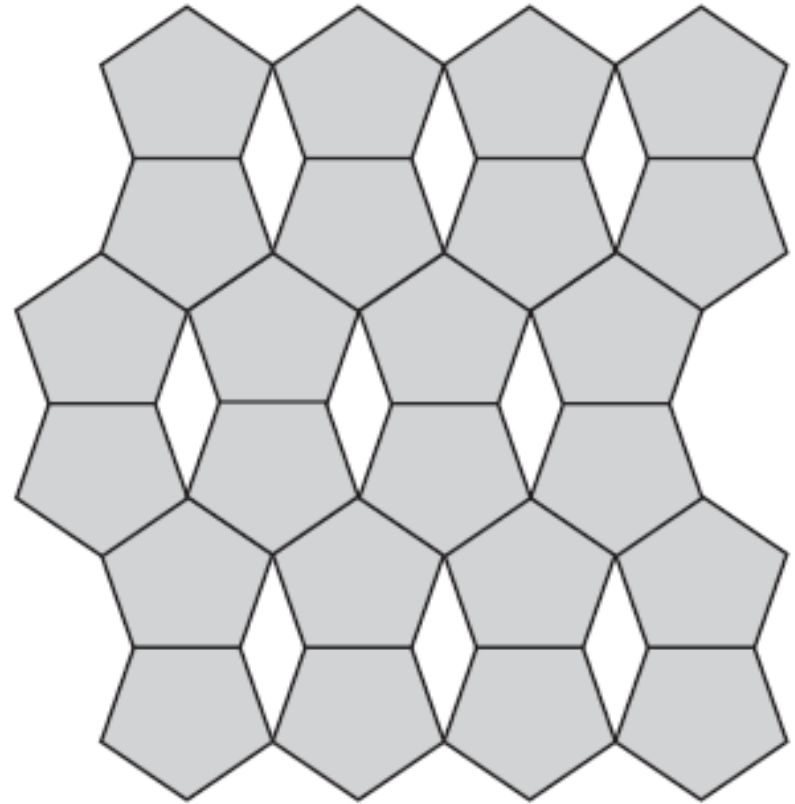
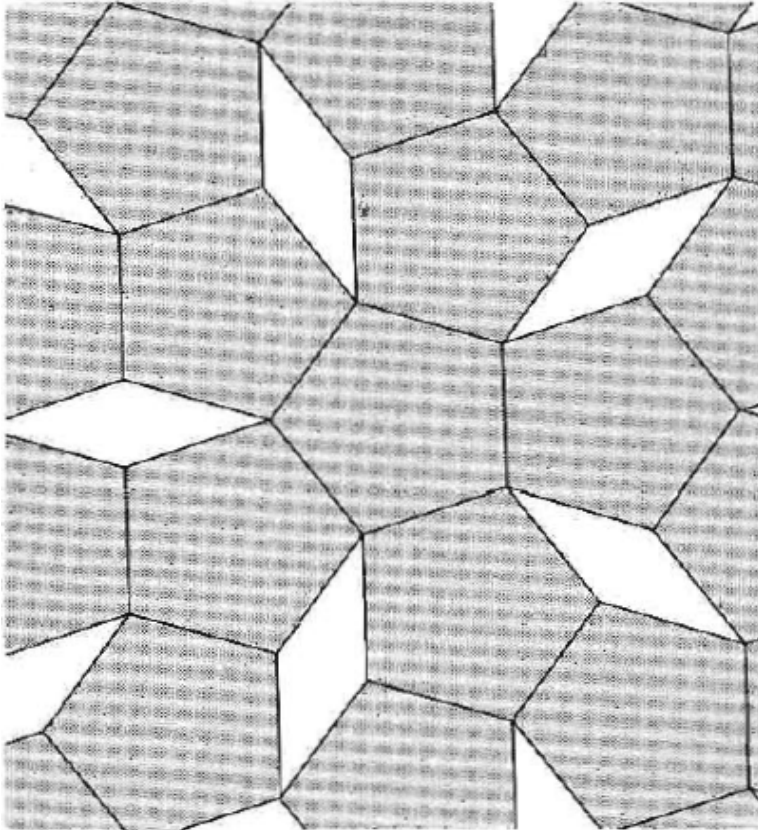
Las celdas pueden ser cualquier tipo
de poliedros?

Celdas que no llenan el espacio 2d



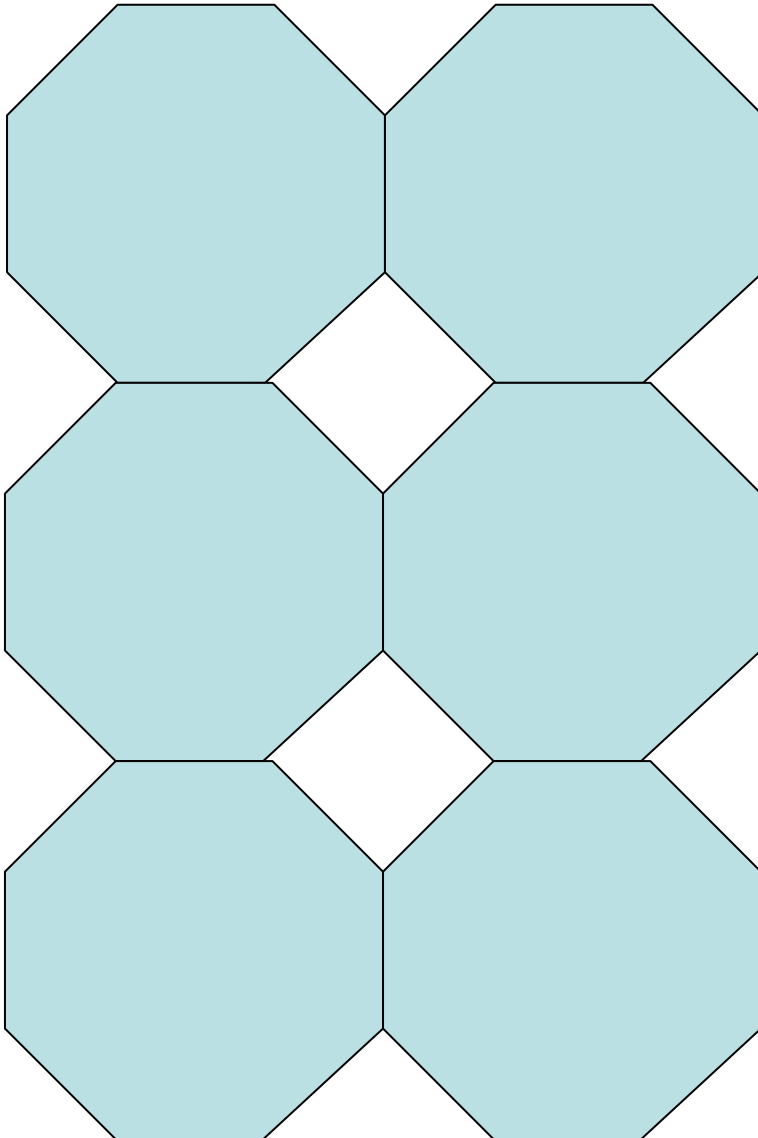
Celdas que no llenan el espacio 2d

pentagonal



Celdas que no llenan el espacio 2d

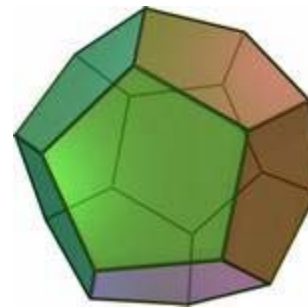
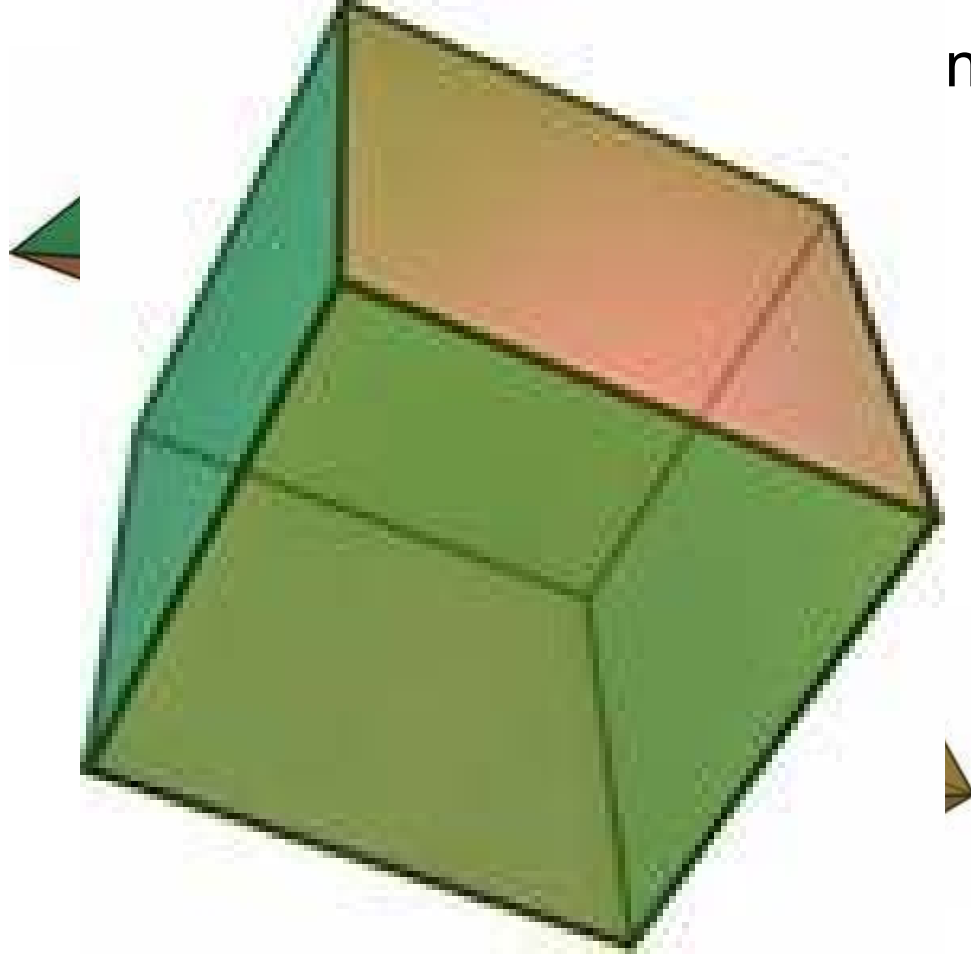
octogonal



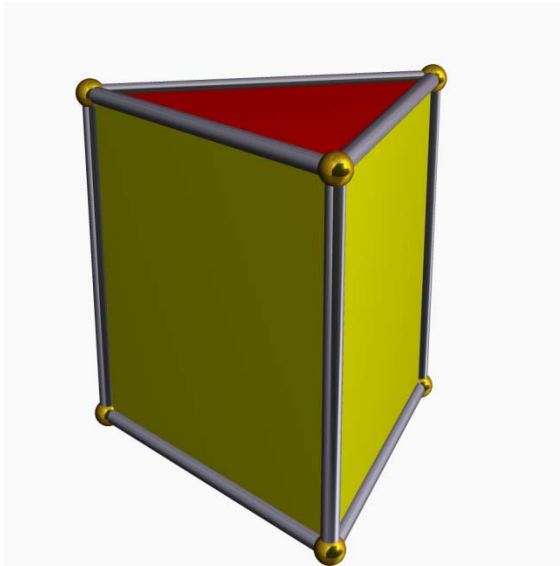
Heptágonos, octógonos, etc.,
tampoco llenan el plano.

En 3d, el requisito de llenar el
espacio excluye geometrías
diferentes de las consideradas
en las 14 redes de Bravais.

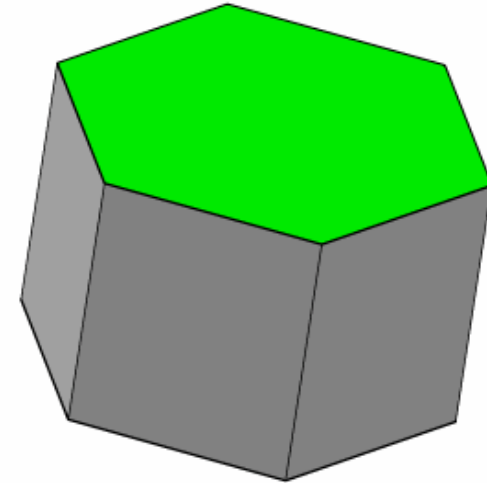
n el espacio 3d?



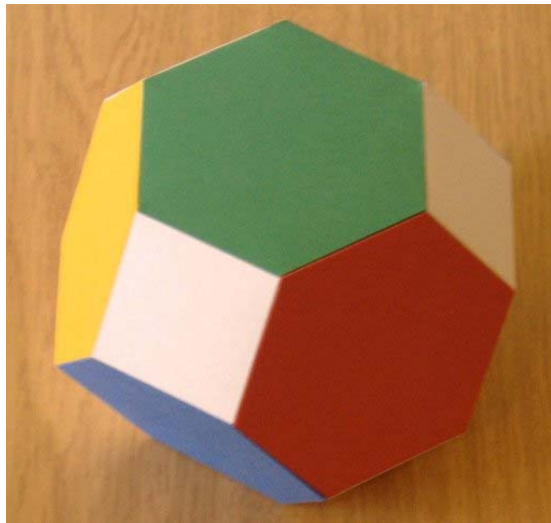
Estas celdas también llenan el espacio 3d



triangular prism



hexagonal prism



truncated octahedron

¿Pueden ser
Celdas unitarias?



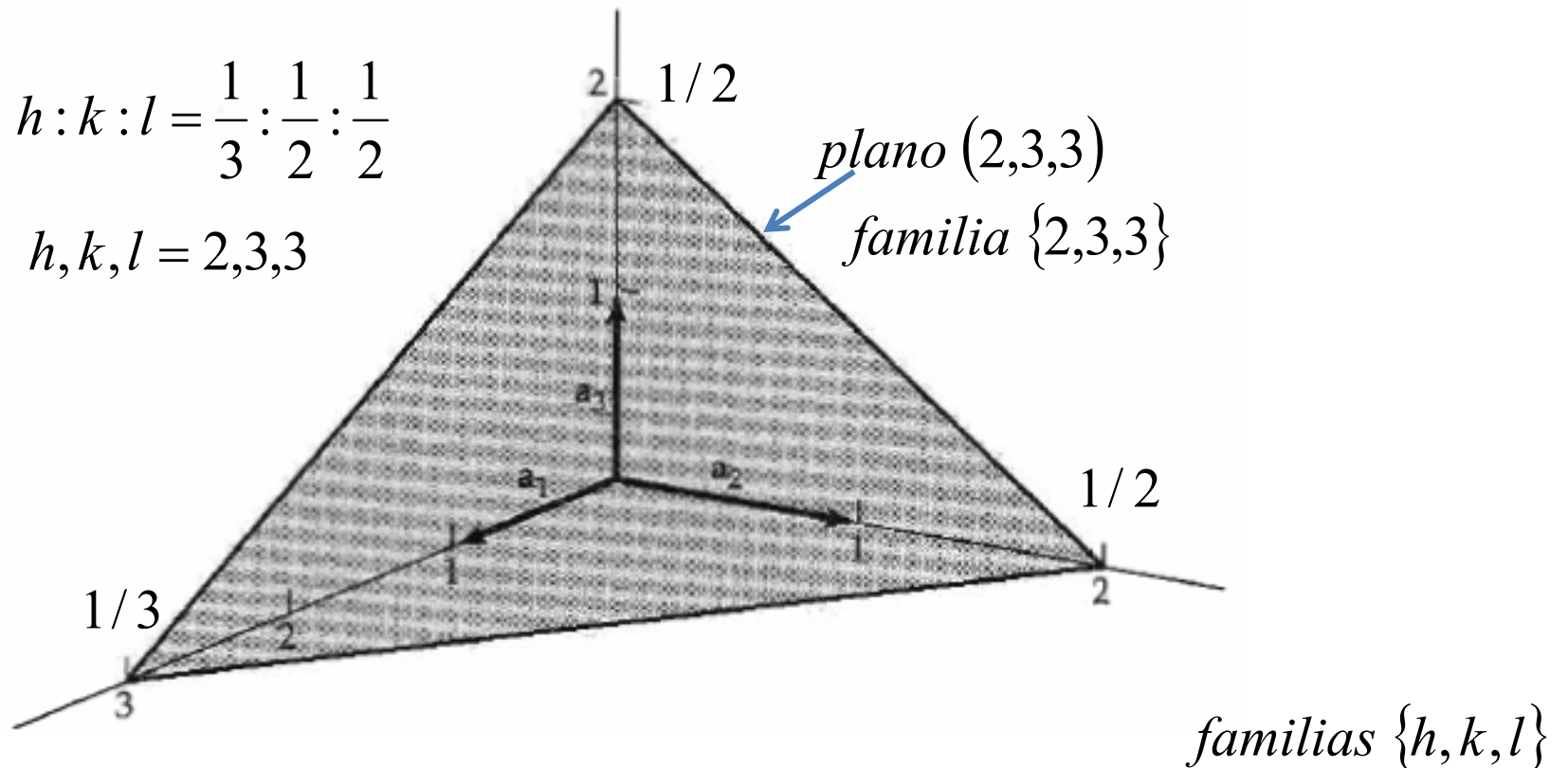
girobifastigium

Planos y direcciones

“Índices de Miller”

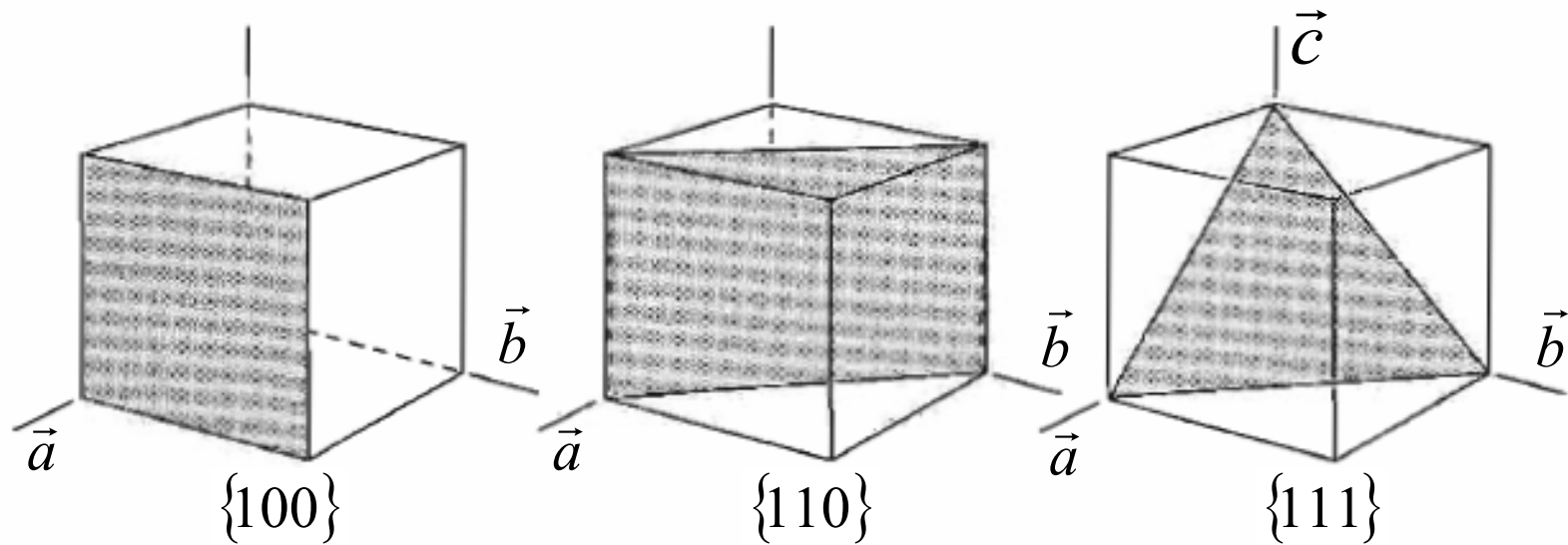
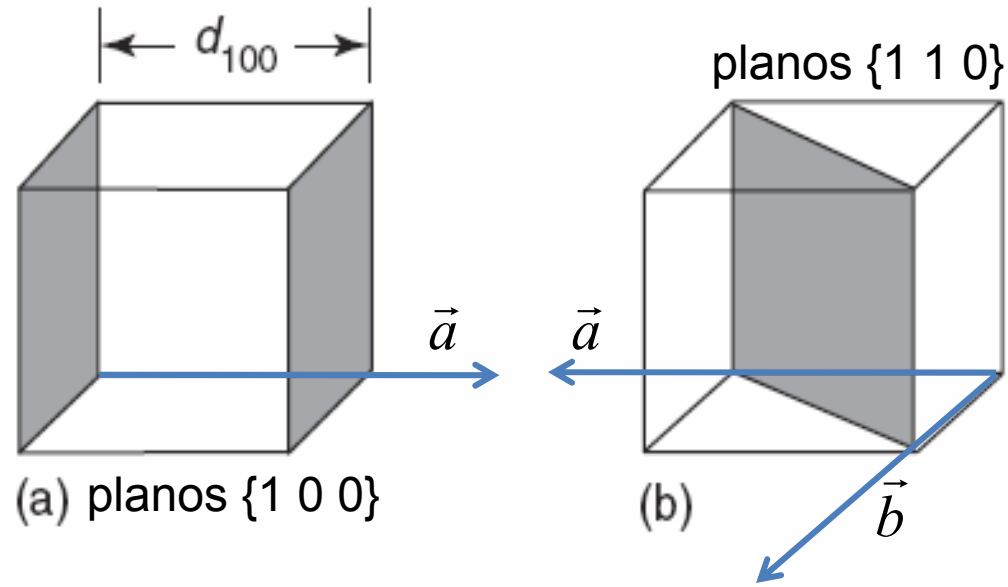
h, k, l

Son los menores enteros, proporcionales a las recíprocas de las intersecciones que hace el plano con los ejes de la red (se toma el plano más próximo al origen de una familia de planos cristalinos paralelos)



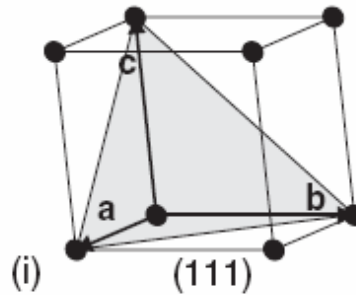
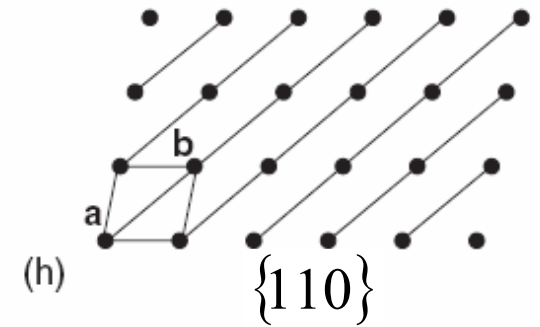
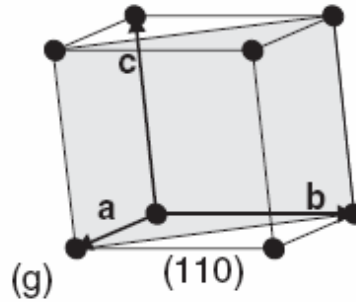
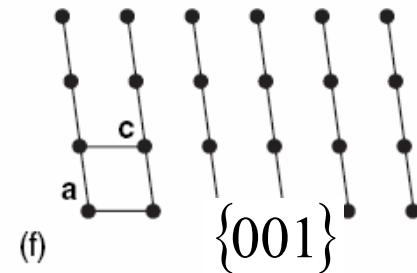
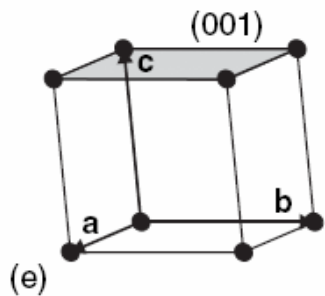
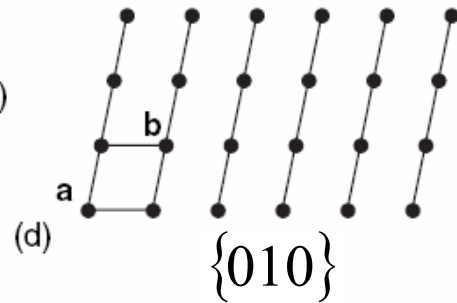
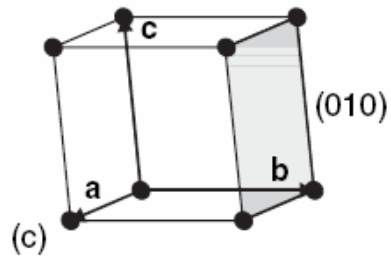
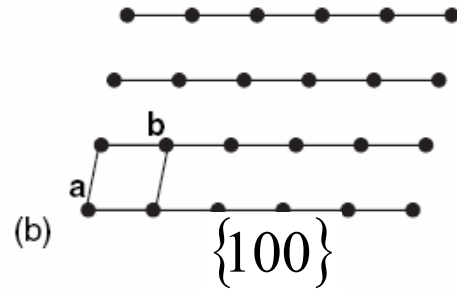
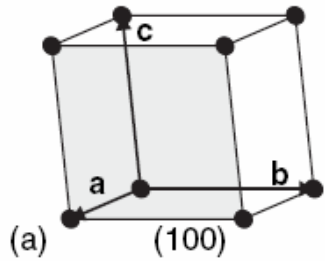
Planos y direcciones

ejemplos



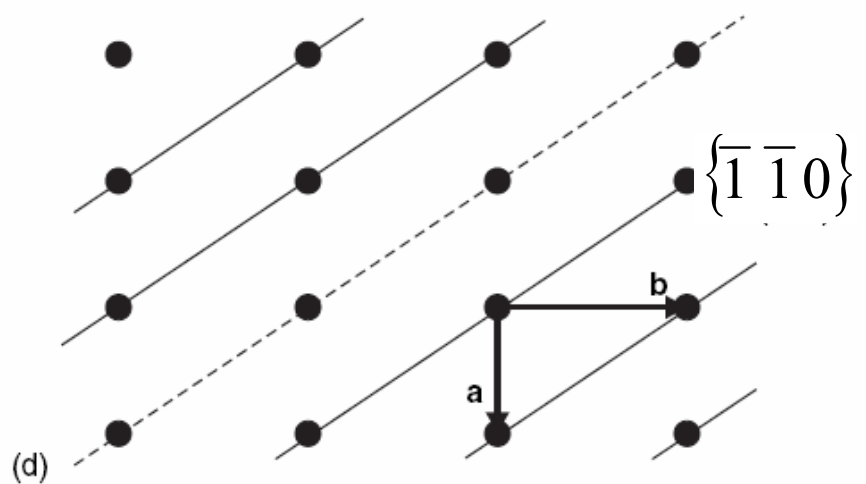
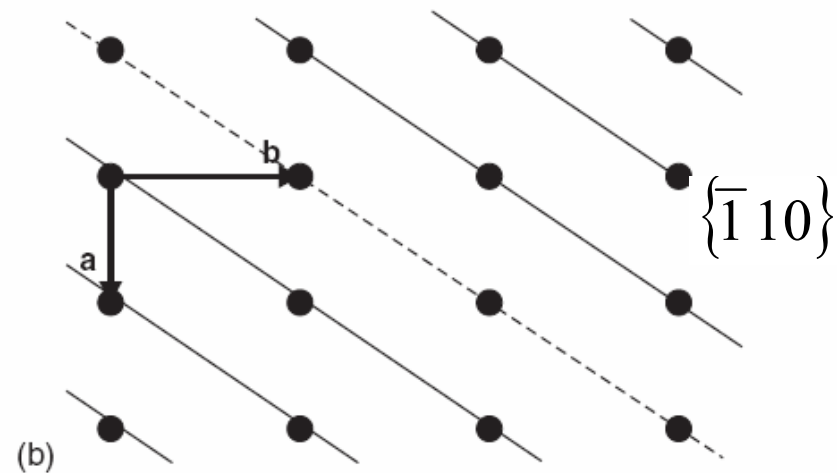
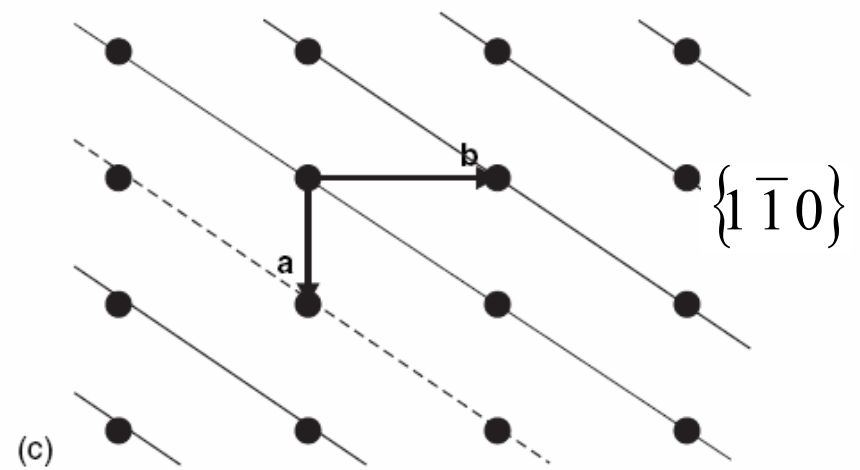
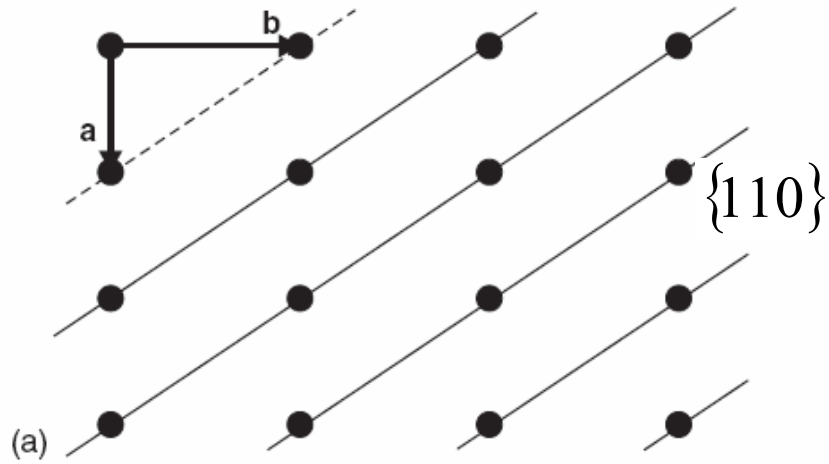
Planos y direcciones

ejemplos



Planos y direcciones

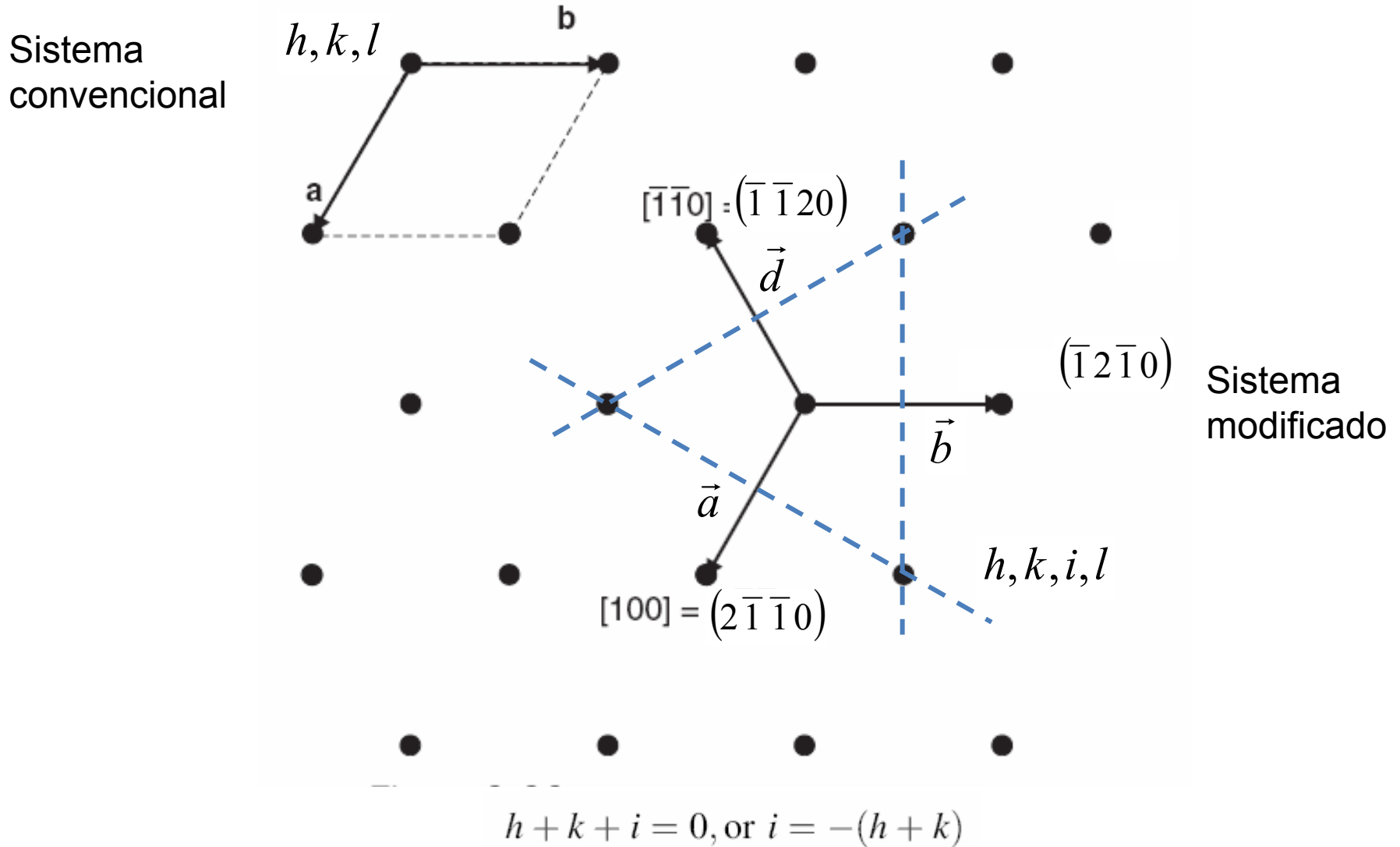
Familias equivalentes



Planos y direcciones

“Índices de Miller-Bravais”

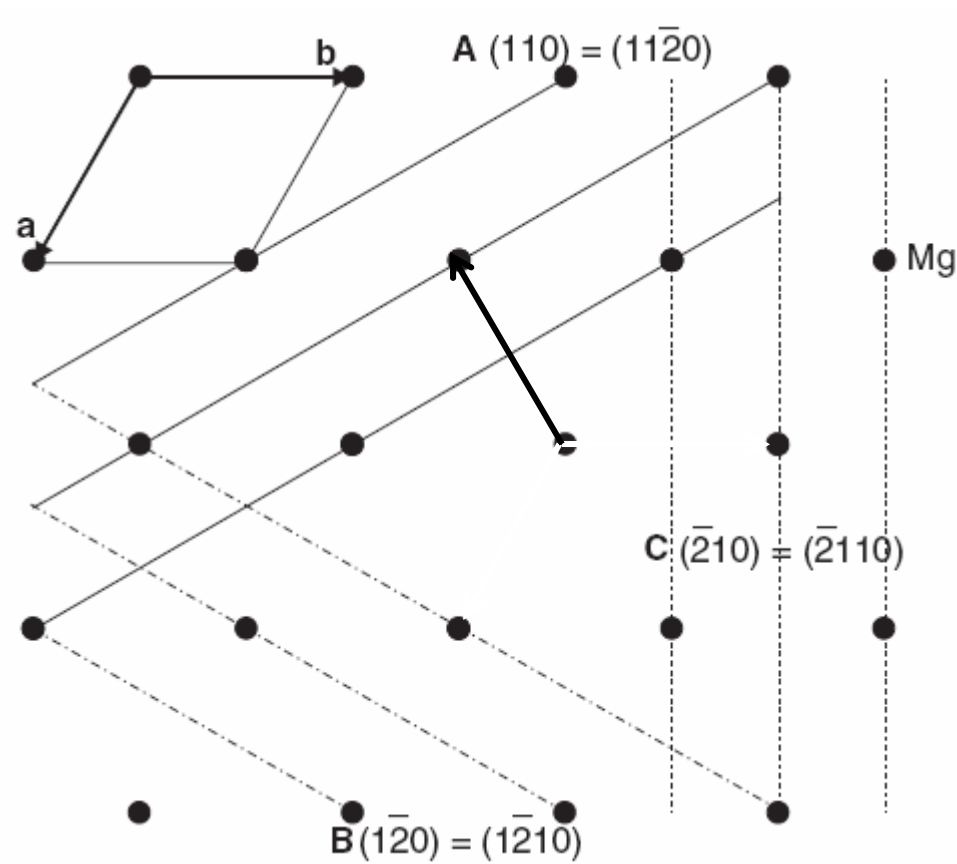
Se usan en los sistemas hexagonales



Planos y direcciones

“Índices de Miller-Bravais”

h, k, i, l



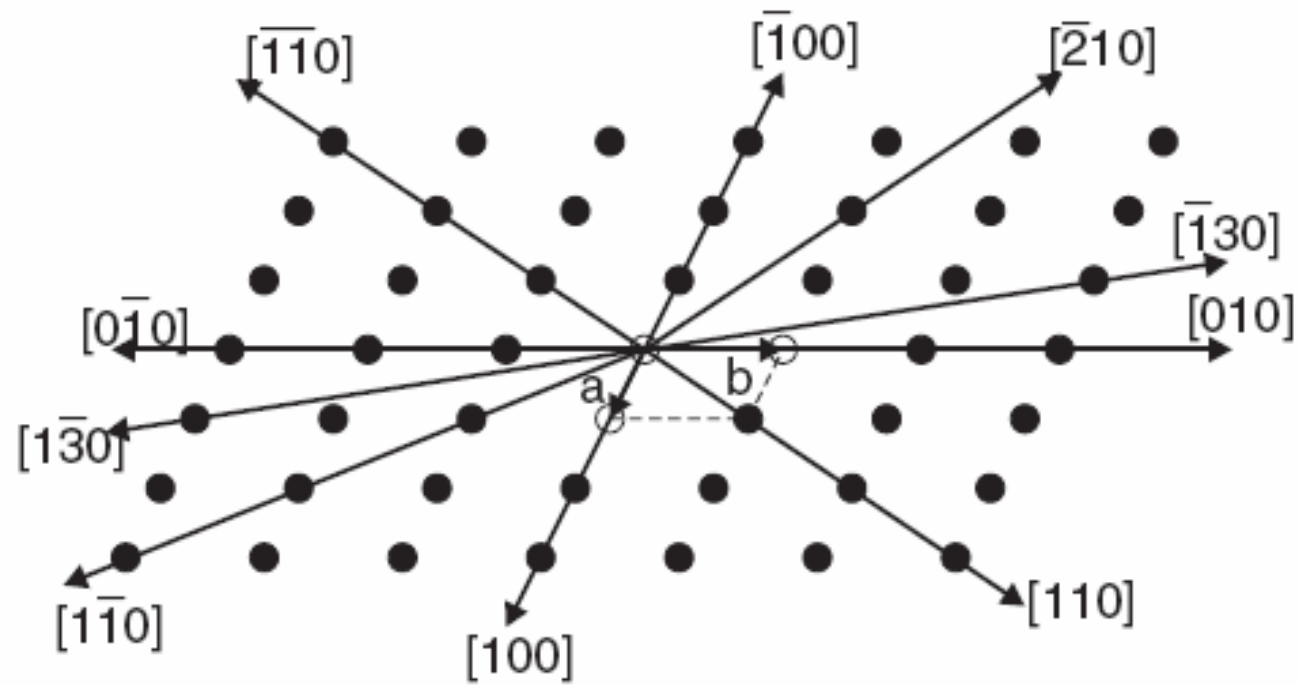
$$h + k + i = 0, \text{ or } i = -(h + k)$$

Planos y direcciones

direcciones cristalinias

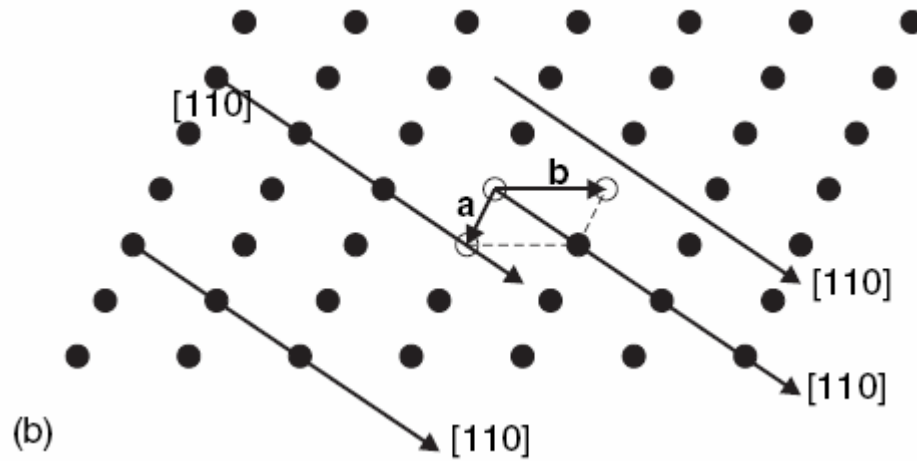
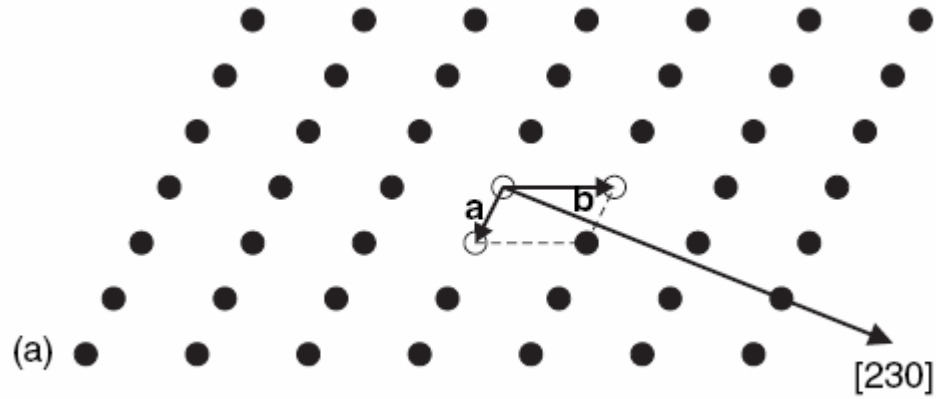
$\langle m_1, m_2, m_3 \rangle$ *específica*

$[m_1, m_2, m_3]$ *familia*



Planos y direcciones

Ejemplos de direcciones cristalinias



The Atomic Mac™

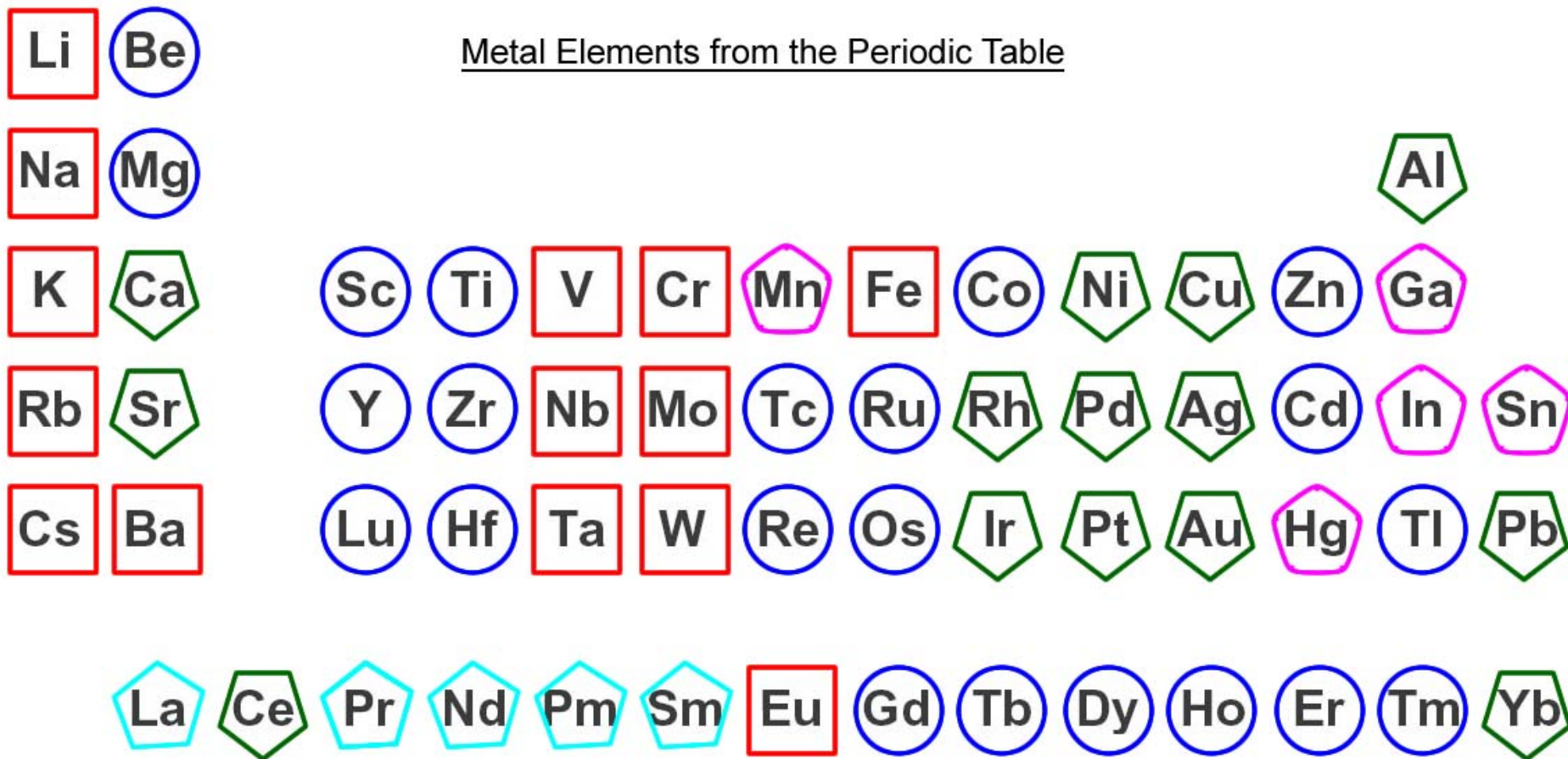
Registered to:
GREGORY TETRAULT
For use only on a single machine

-  Hexagonal
-  Cubic body centered
-  Rhombohedral
-  Cubic
-  Cubic face centered
-  Monoclinic
-  Orthorhombic
-  Tetragonal

H	The Atomic Mac™															He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Metal Elements from the Periodic Table



(Cubic Close Packing)



(Hexagonal Close Packing)



(Body Centered Cubic)



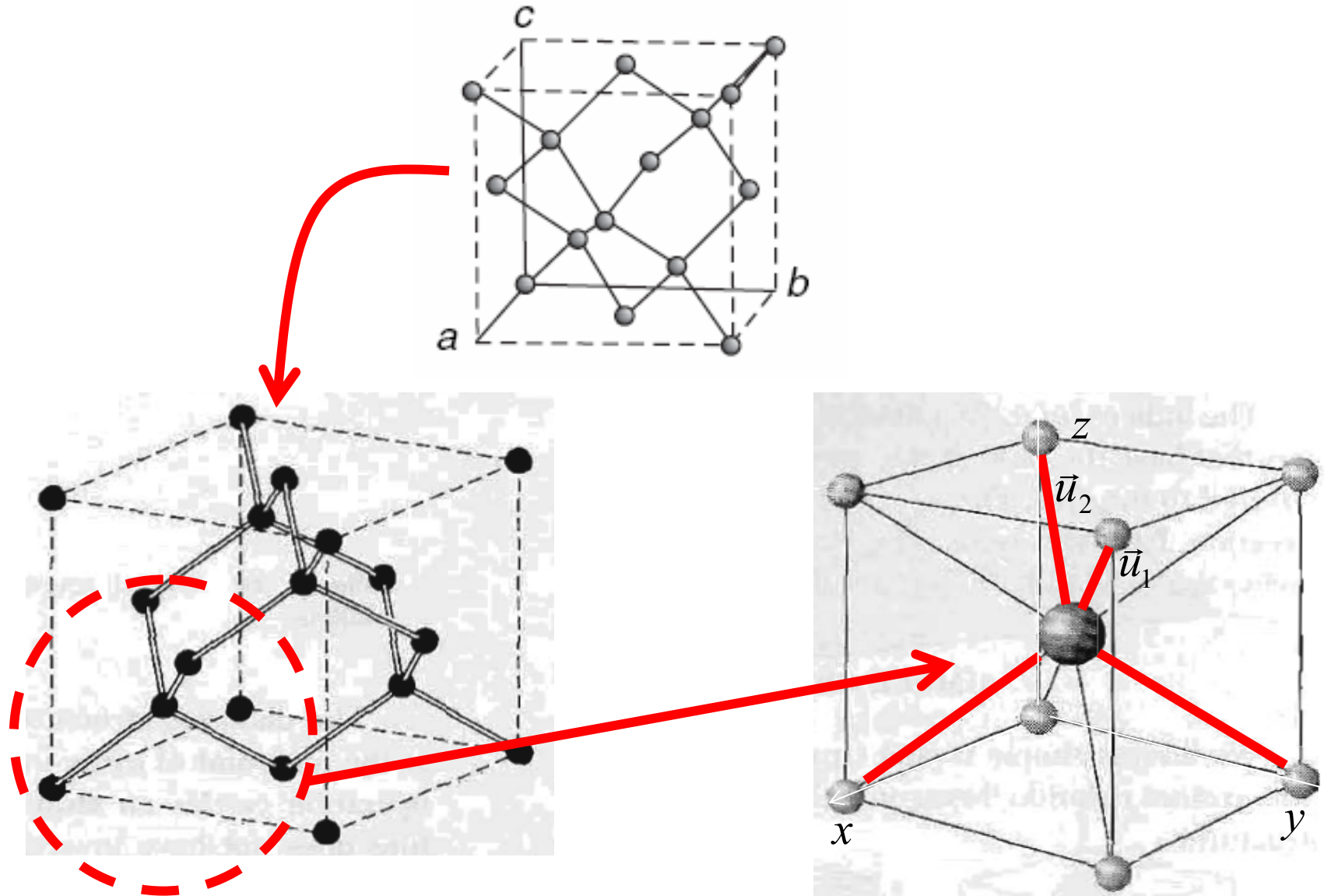
(4H)



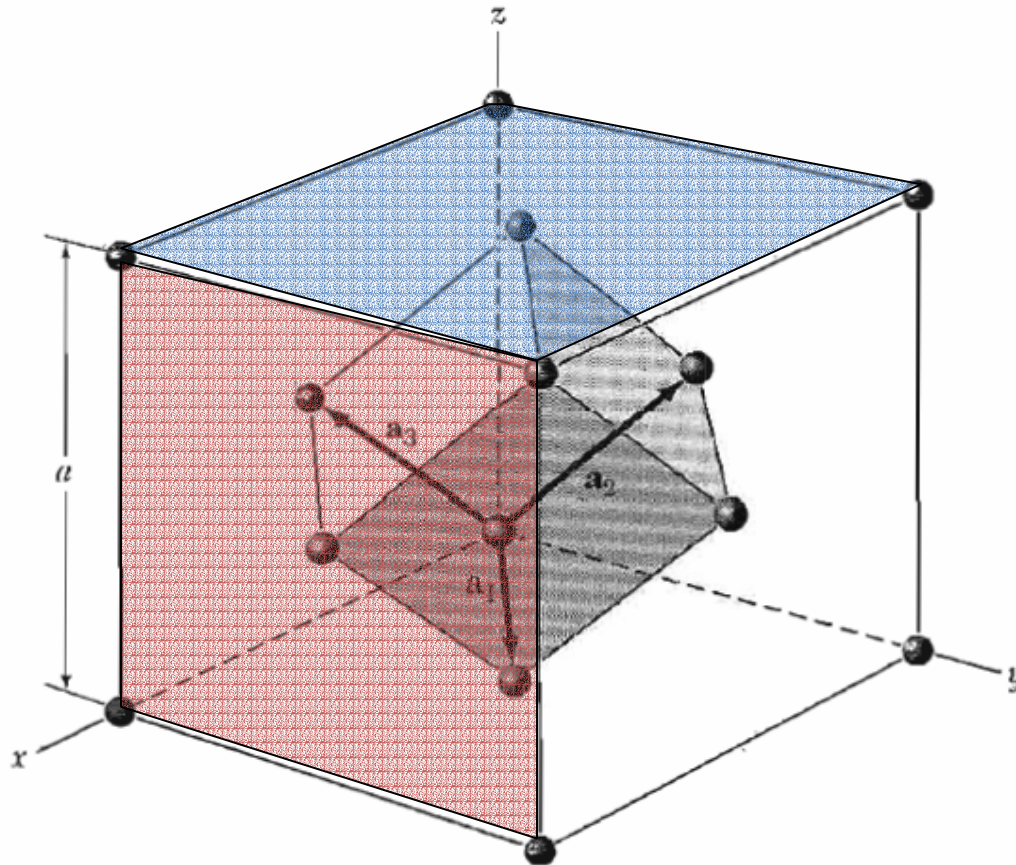
(Other)

problemas

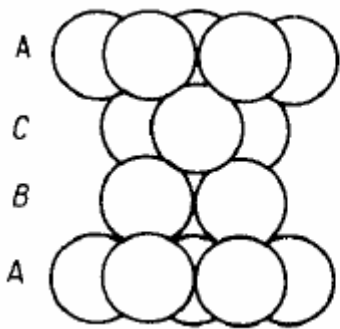
1. **Ángulos tetraedrales.** Los ángulos entre las uniones tetraedrales de la estructura diamante son iguales a los que existen entre las diagonales de un cubo. Hacer un análisis vectorial para hallar el valor del ángulo.



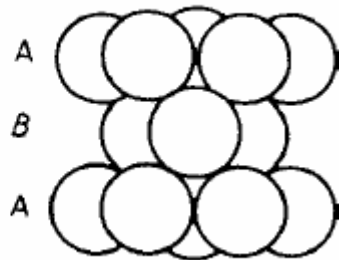
2. **Índices de planos.** Considerar los planos con índices (100) y (001). La red es fcc y los índices están referidos a la celda cúbica convencional. ¿Cuáles son los índices de esos planos cuando se refieren a la celda primitiva?



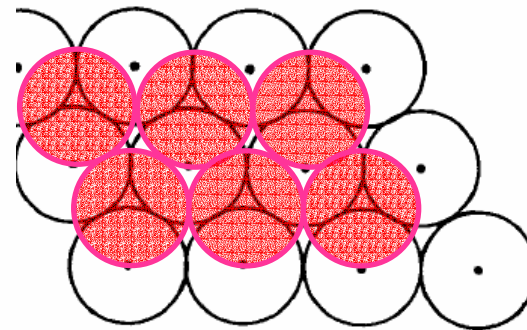
3. **Estructura hcp.** Mostrar que la relación c/a para la estructura hexagonal compacta es $(8/3)^{1/2} = 1.6333\dots$



fcc



hcp

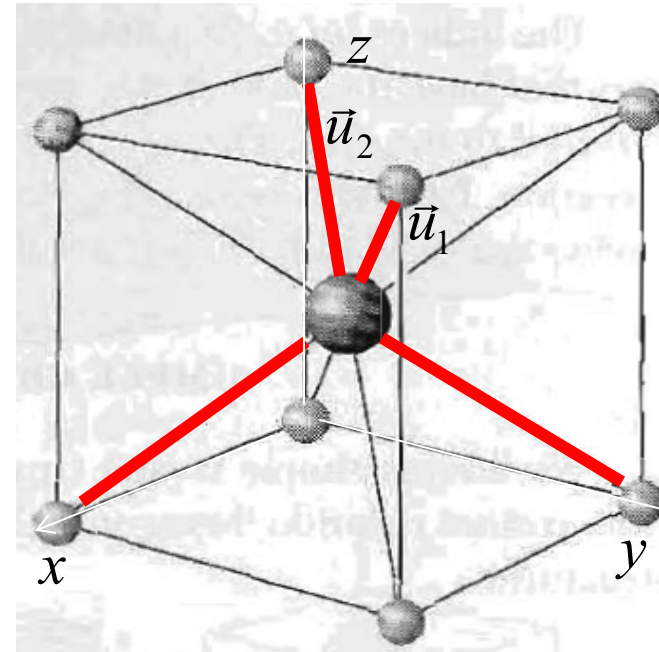
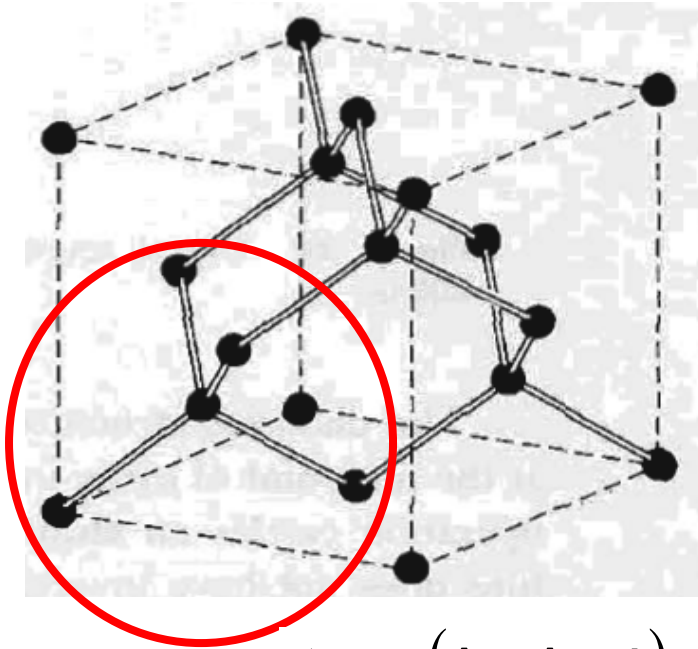


plano basal hcp

soluciones

CHAPTER 1

1. The vectors $\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}$ and $-\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}$ are in the directions of two body diagonals of a cube. If θ is the angle between them, their scalar product gives $\cos \theta = -1/3$, whence $\theta = \cos^{-1} 1/3 = 90^\circ + 19^\circ 28' = 109^\circ 28'$.



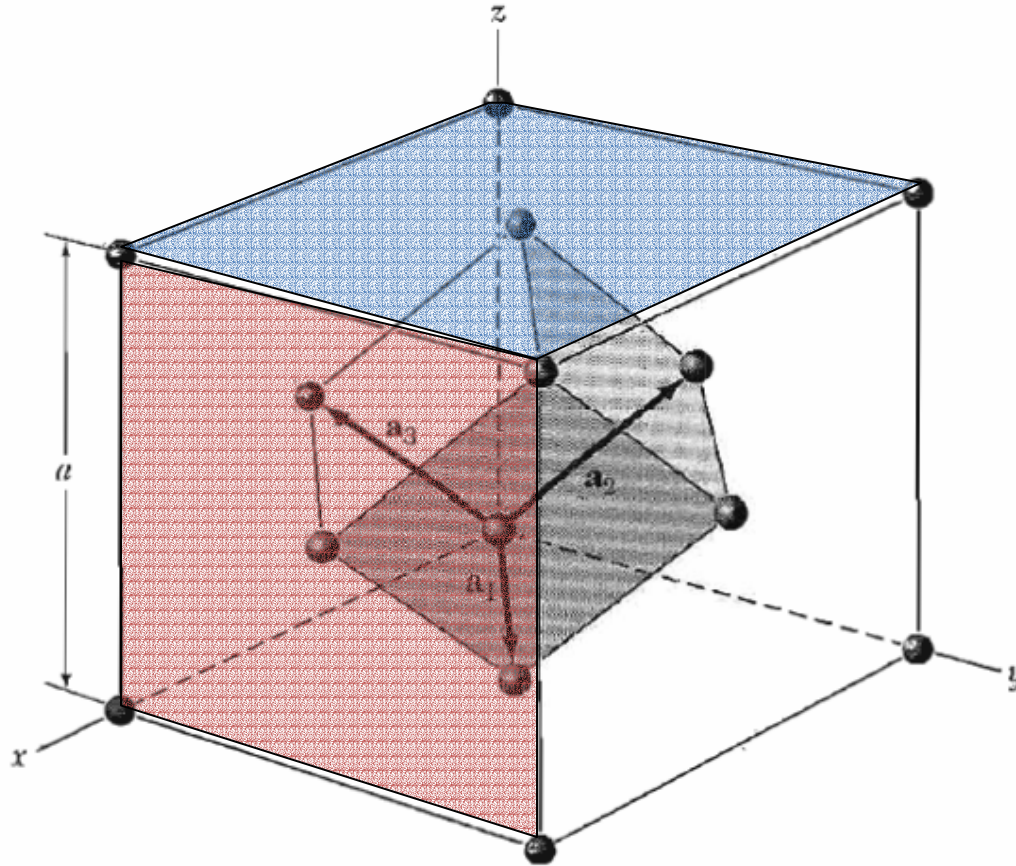
$$\vec{u}_1 = a(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{u}_2 = a(-\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_2 = 3a^2 \cos \theta$$

$$-a^2 = 3a^2 \cos \theta \Rightarrow \cos \theta = -\frac{1}{3} \Rightarrow \theta = 109.47^\circ$$

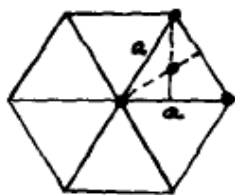
2. The plane (100) is normal to the x axis. It intercepts the a' axis at 2a' and the c' axis at 2c'; therefore the indices referred to the primitive axes are (101). Similarly, the plane (001) will have indices (011) when referred to primitive axes.



$sc (100) \Rightarrow intercept. 202 \Rightarrow "fcc" (101)$

$sc (001) \Rightarrow intercept. 022 \Rightarrow "fcc" (011)$

3. The central dot of the four is at distance



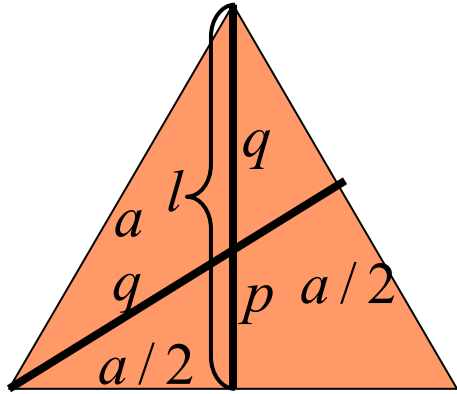
$$a \frac{\cos 60^\circ}{\cos 30^\circ} = a \operatorname{ctn} 60^\circ = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

from each of the other three dots, as projected onto the basal plane. If the (unprojected) dots are at the center of spheres in contact, then

$$a^2 = \left(\frac{a}{\sqrt{3}} \right)^2 + \left(\frac{c}{2} \right)^2,$$

or

$$\frac{2}{3}a^2 = \frac{1}{4}c^2; \quad \frac{c}{a} \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633.$$

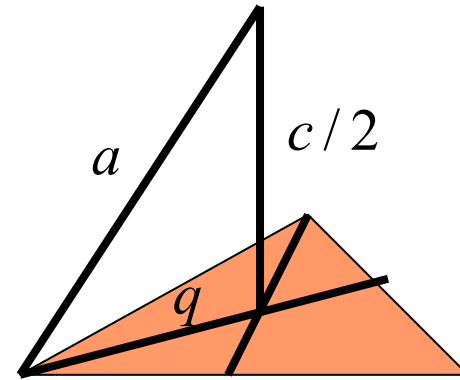


$$\frac{a/2}{l} = \tan 30 = \frac{1}{\sqrt{3}} \Rightarrow l = \frac{a}{2} \sqrt{3}$$

$$\frac{p}{a/2} = \tan 30 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\frac{p}{l} = \frac{1}{3}$$

$$q = l - p = \frac{2}{3}l = \frac{a}{\sqrt{3}}$$



$$q^2 + \left(\frac{c}{2}\right)^2 = a^2$$

$$c^2 = 4 \left(a^2 - \frac{a^2}{3} \right) = \frac{8}{3} a^2$$

$$c = \sqrt{\frac{8}{3}} a = 1.633\dots$$