

# **Materia Condensada. Sistemas Complejos**

## **Clase 2**

# Bibliografía

Gerald Burns

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

Charles Kittel

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

Feng Duan, Jin Guojun

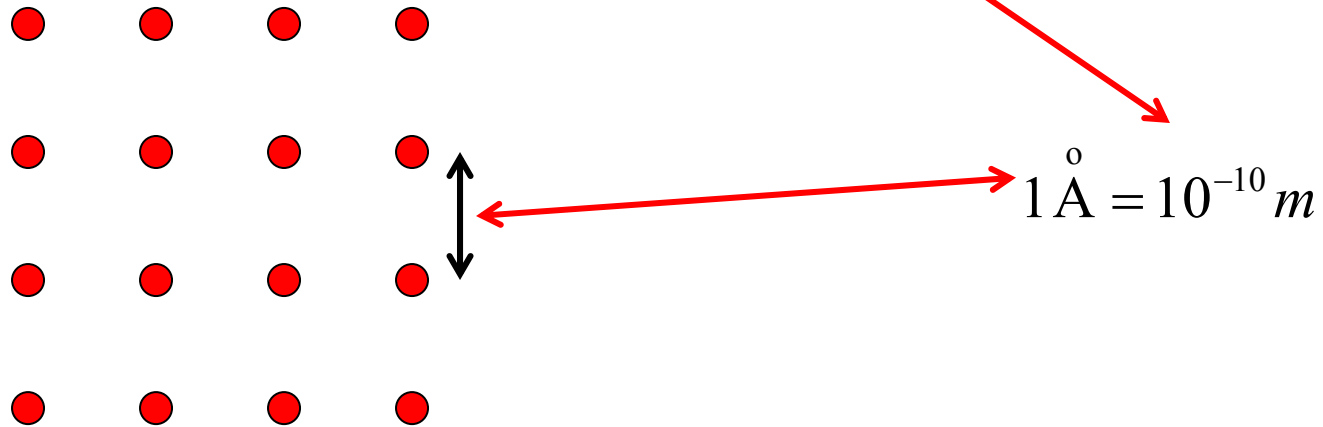
Introduction to Condensed Matter Physics  
World Scientific. 2005  
ISBN 981-238-711-0

# **Difracción de radiación**

Neutrones, electrones, Rx

# Difracción de neutrones, electrones y Rx

La longitud de onda  $\lambda$  debe ser del orden de la separación interatómica



# Difracción de neutrones, electrones y Rx

## neutrones

$\lambda$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$$E = \frac{1}{2m} \left( \frac{h}{\lambda} \right)^2 \approx \frac{1}{2 \times 1.675 \times 10^{-27}} \left( \frac{6.626 \times 10^{-34}}{10^{-10}} \right)^2 \text{ J}$$

$$E = \frac{1}{2m} \left( \frac{h}{\lambda} \right)^2 \approx 1.31 \times 10^{-20} \text{ J} \approx 0.082 \text{ eV}$$

# Difracción de neutrones, electrones y Rx

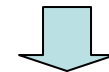
neutrones

A temperatura  
ambiente

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2}kT \approx \frac{3 \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300}{2} J \approx 6.2 \times 10^{-21} J \approx 0.039 eV$$

$$\lambda \approx 1.45 \text{ \AA}$$

neutrones térmicos




REACTORES

Los neutrones se dispersan por los núcleos o por los momentos magnéticos atómicos. Se pueden observar estructuras magnéticas y la contribución de los elementos livianos en las estructuras cristalinas .

# Difracción de neutrones, electrones y Rx

electrones

Usando la masa del electrón

$$E = \frac{1}{2m} \left( \frac{h}{\lambda} \right)^2 \approx \frac{1}{2 \times 9.1 \times 10^{-31}} \left( \frac{6.626 \times 10^{-34}}{10^{-10}} \right)^2 J \approx 2.41 \times 10^{-17} J \approx 151 eV$$


Los electrones interactúan fuerte e inelásticamente con los electrones del material, por lo que sólo puede analizarse una zona muy superficial del mismo.

Para lograr observar espesores de algunas decenas de nm hacen falta electrones mucho más energéticos:

$$E \approx 1.5 \times 10^5 eV \Rightarrow \lambda \approx 2.6 \times 10^{-3} \text{ \AA}$$

Ello da lugar a que la difracción sea mucho más difícil de observar: ocurre a ángulos mucho menores.

# Difracción de neutrones, electrones y Rx

## Rayos X

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \approx \frac{6.62 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{10^{-10}} J \approx 2 \times 10^{-15} J \approx 1.2 \times 10^4 eV$$

Los Rx se generan frenando un haz de electrones al incidir sobre un blanco material. Los electrones se aceleran a través de una diferencia de potencial  $V_{ca}$  entre cátodo y ánodo.

$$\frac{hc}{\lambda} \leq eV_{ca} \Rightarrow \lambda \geq \frac{hc}{eV_{ca}}$$

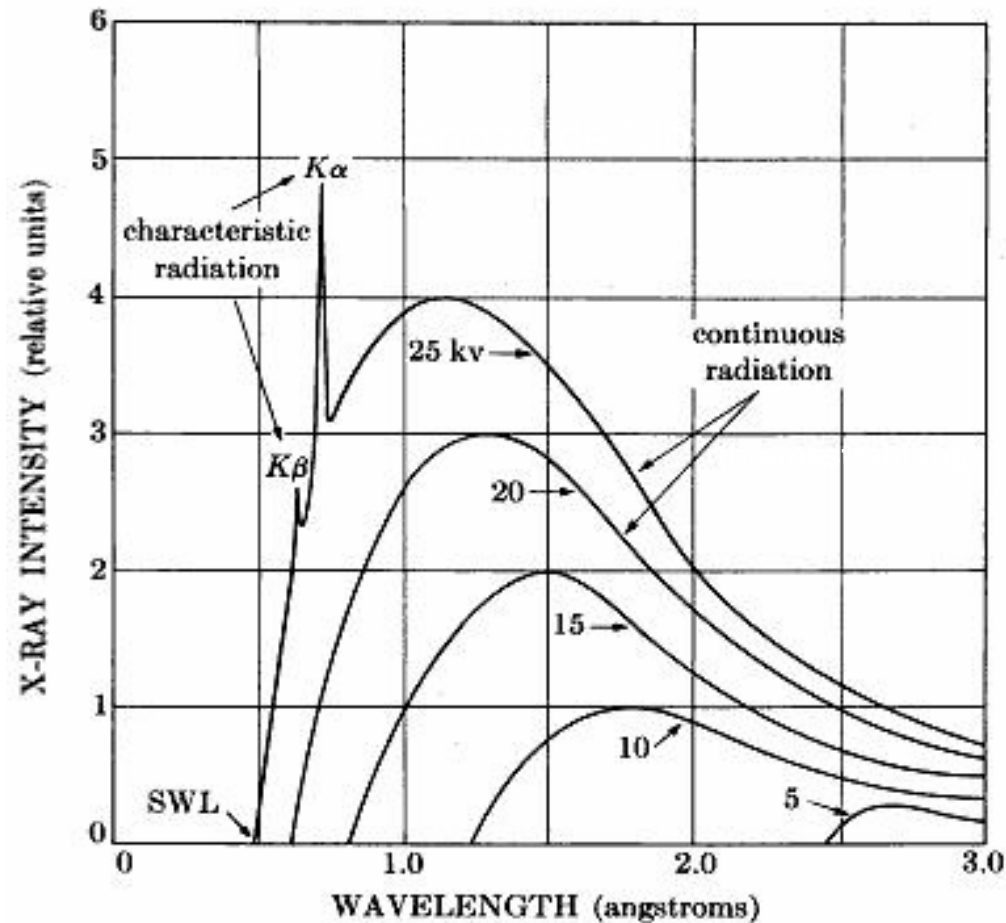
Para  $V_{ca} = 4 \times 10^4 eV$

$$\lambda \geq 0.3 \text{ \AA}$$



# Difracción de neutrones, electrones y Rx

Rayos X



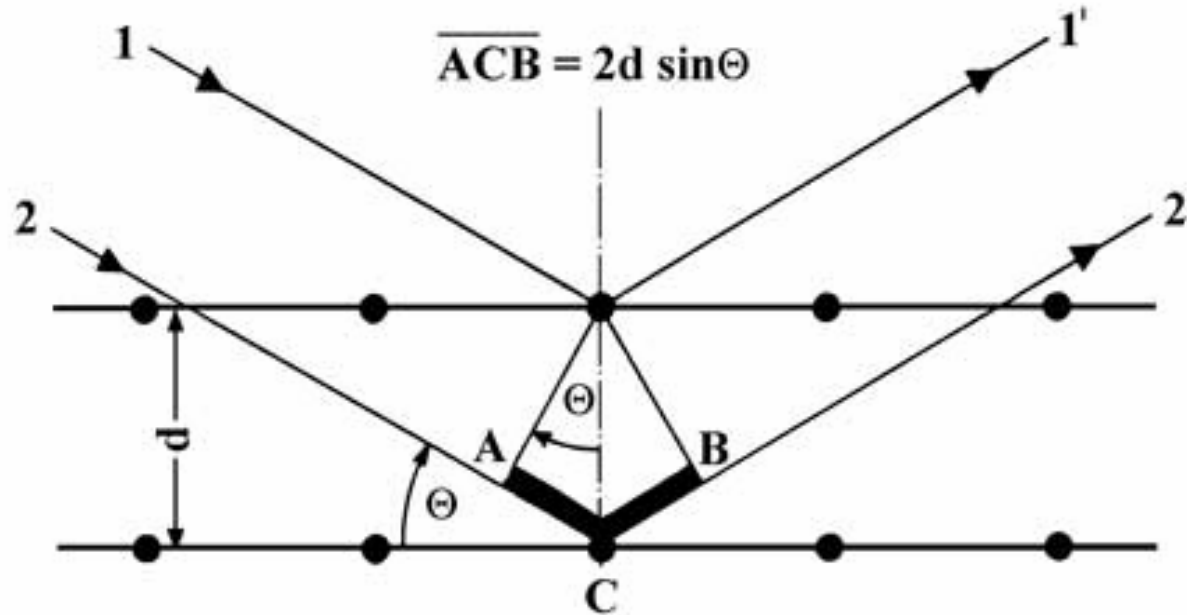
Cuando los electrones tienen suficiente energía pueden arrancar electrones de las capas más internas de los átomos del blanco. El llenado de los huecos por electrones atómicos de niveles superiores da lugar a picos estrechos de radiación característica.

# Difracción de neutrones, electrones y Rx

	<i>Radiación</i>	<i>Rayos X característicos</i>	
		<i>Cu</i>	<i>Mo</i>
$n$	$\lambda_{Neut} = \frac{0.28}{[E(keV)]^{0.5}}$	$\lambda_{K_{\alpha 1}} = 1.54056 \text{ \AA}$	$\lambda_{K_{\alpha 1}} = 0.70930 \text{ \AA}$
$e^{-}$	$\lambda_{Elect} = \frac{12}{[E(keV)]^{0.5}}$	$\lambda_{K_{\alpha 1}} = 1.54439 \text{ \AA}$	$\lambda_{K_{\alpha 1}} = 0.71359 \text{ \AA}$
$X$	$\lambda_{RX} \geq \frac{12.4}{E_{ca}(keV)}$	$\lambda_{K_{\beta 1}} = 1.39222 \text{ \AA}$	$\lambda_{K_{\beta 1}} = 0.63229 \text{ \AA}$

# Difracción de Rx

Ley de Bragg (1913)

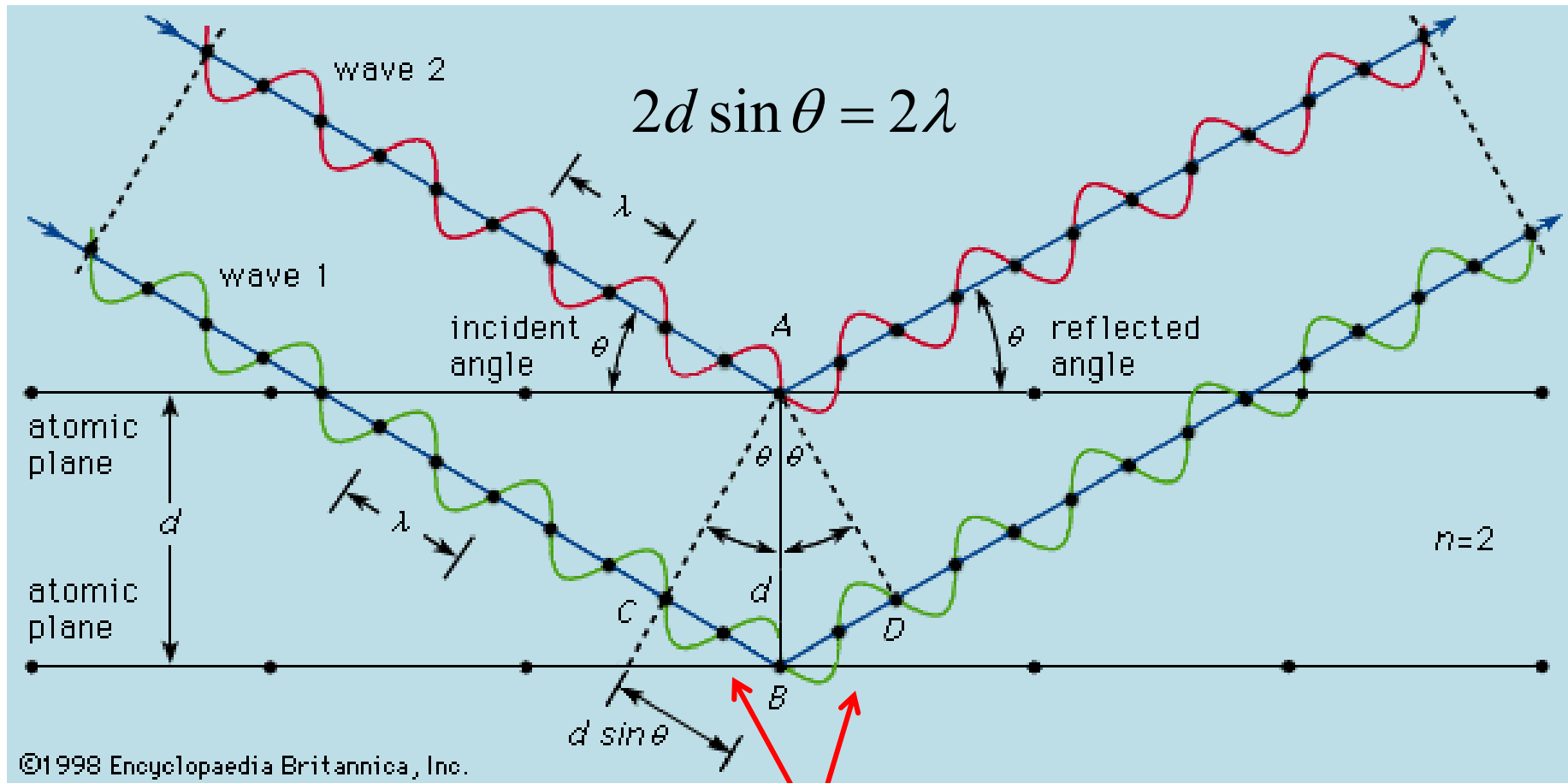


Diferencia de camino (ACB)  $2d \sin \theta = n\lambda$

Condición de interferencia constructiva entre ambos rayos dispersados

# Difracción de Rx

Ley de Bragg (1913)

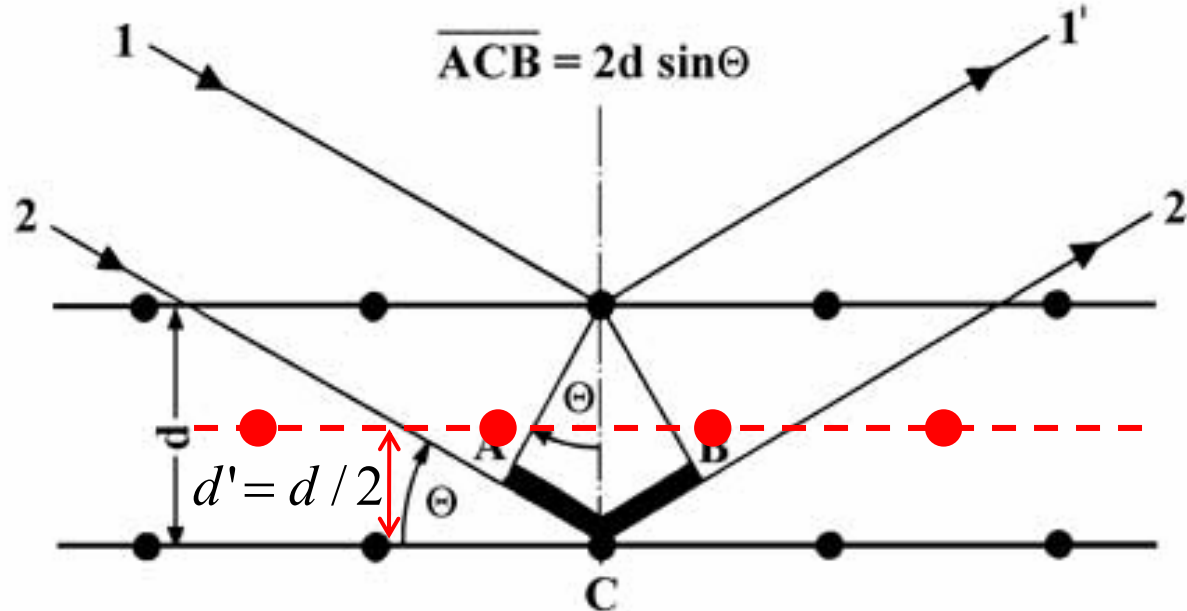


©1998 Encyclopaedia Britannica, Inc.

Ejemplo para  $n = 2$

# Difracción de Rx

Si agregamos un plano intermedio de átomos idénticos con un espaciado  $d/2$  (por ejemplo en el centro de las celdas)



Cuando se cumple la condición de interferencia constructiva para el sistema original (sin los planos extra)

$$2d \sin \theta = \lambda$$

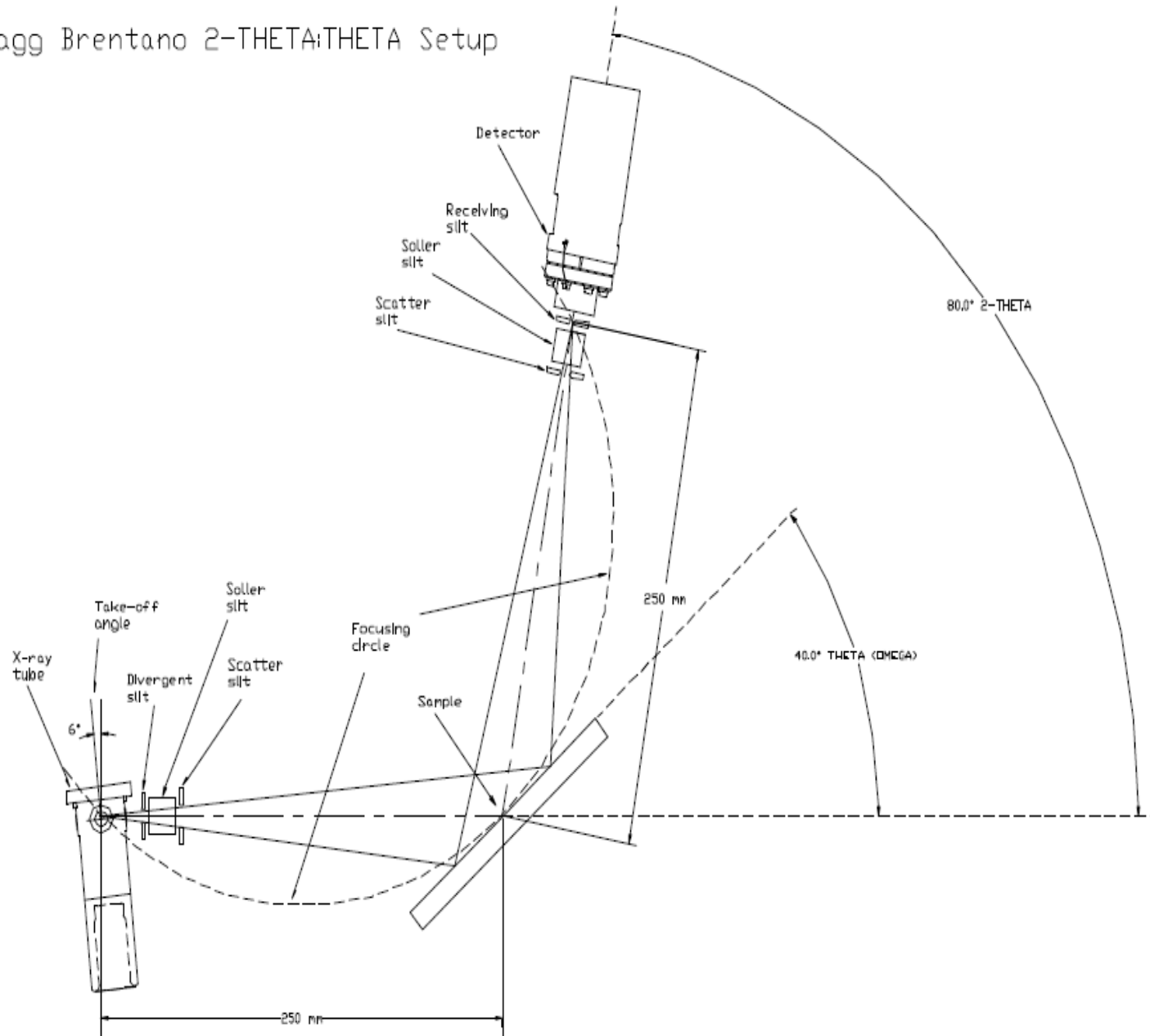
Hay un efecto entre un plano “negro” y uno “rojo” dado por

$$2d' \sin \theta = \lambda / 2$$

Que extingue la línea de difracción.

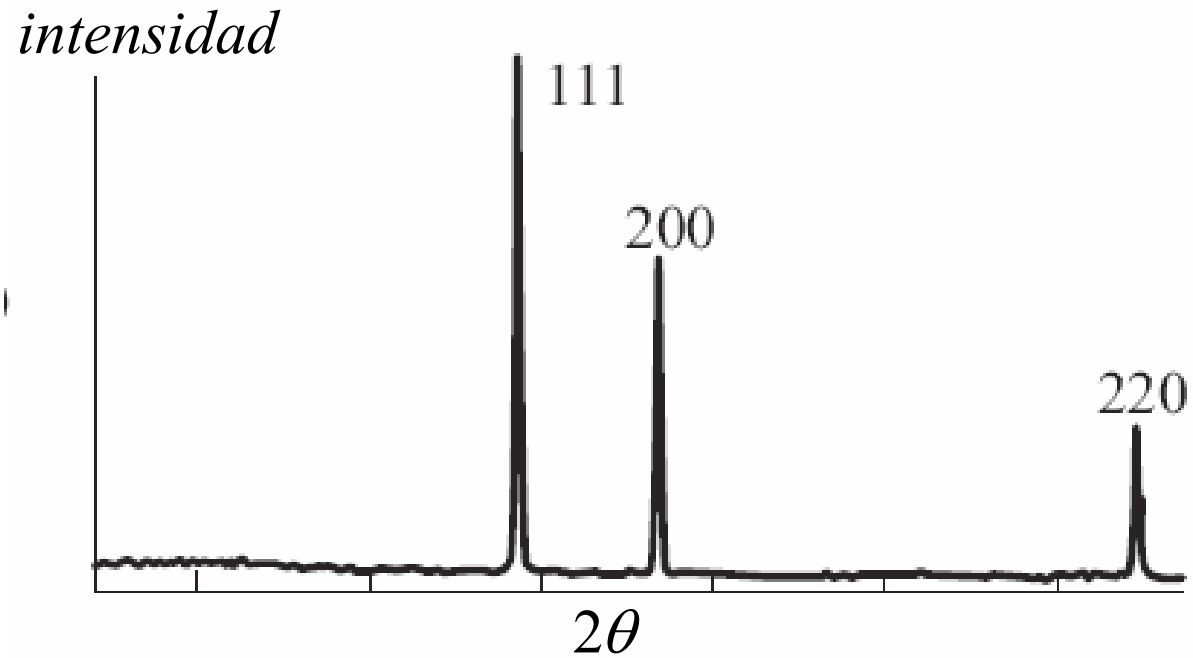
# Difractómetro $\theta - 2\theta$

Bragg Brentano  $2\text{-THETA}/\text{THETA}$  Setup



# Red recíproca

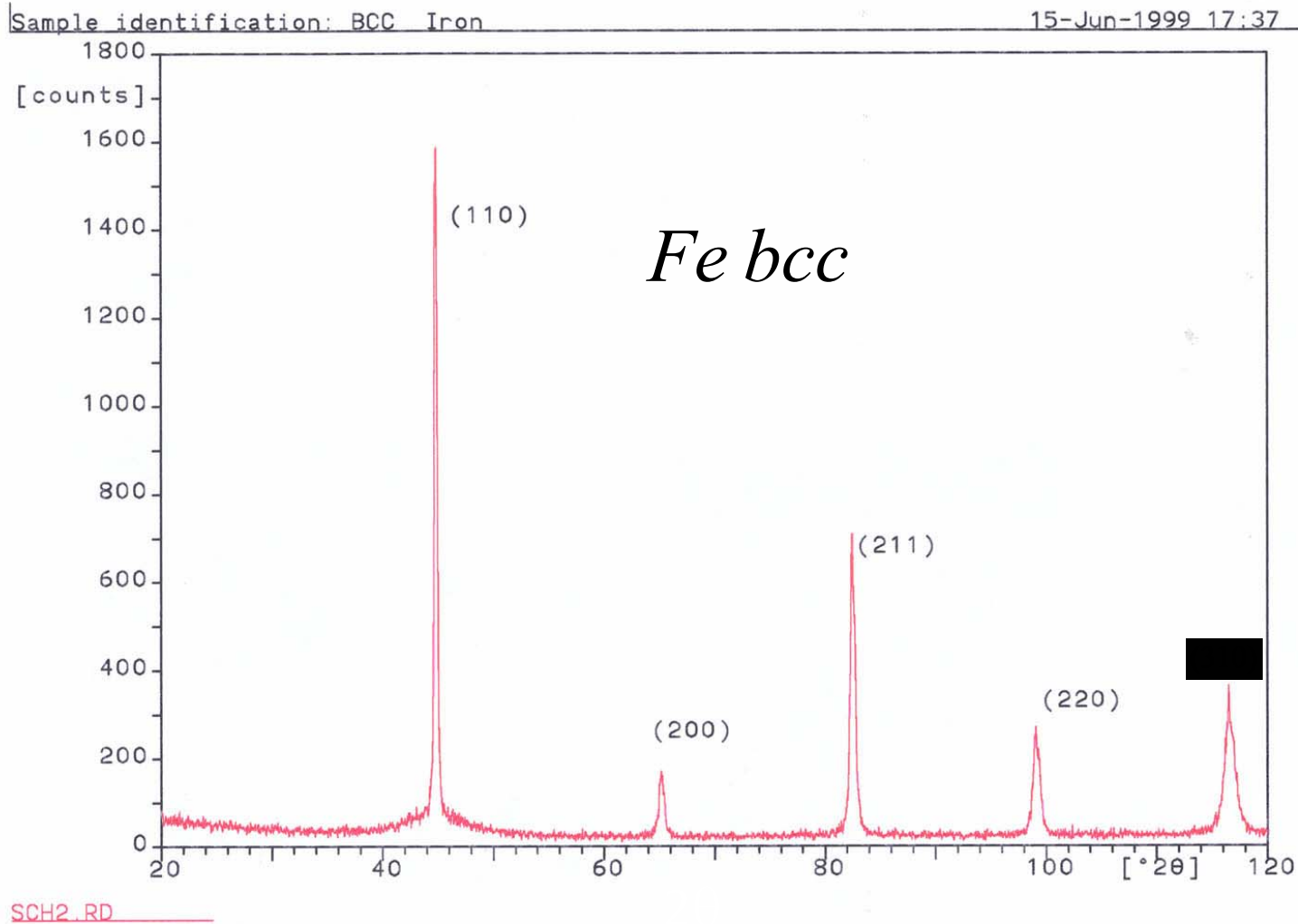
Difracción de una estructura fcc



Al, Ca, Ni, Cu, Pd, Ag, Sr, Rh, Ir, Pt, Au, Pb

# Red recíproca

## Difracción de una estructura bcc

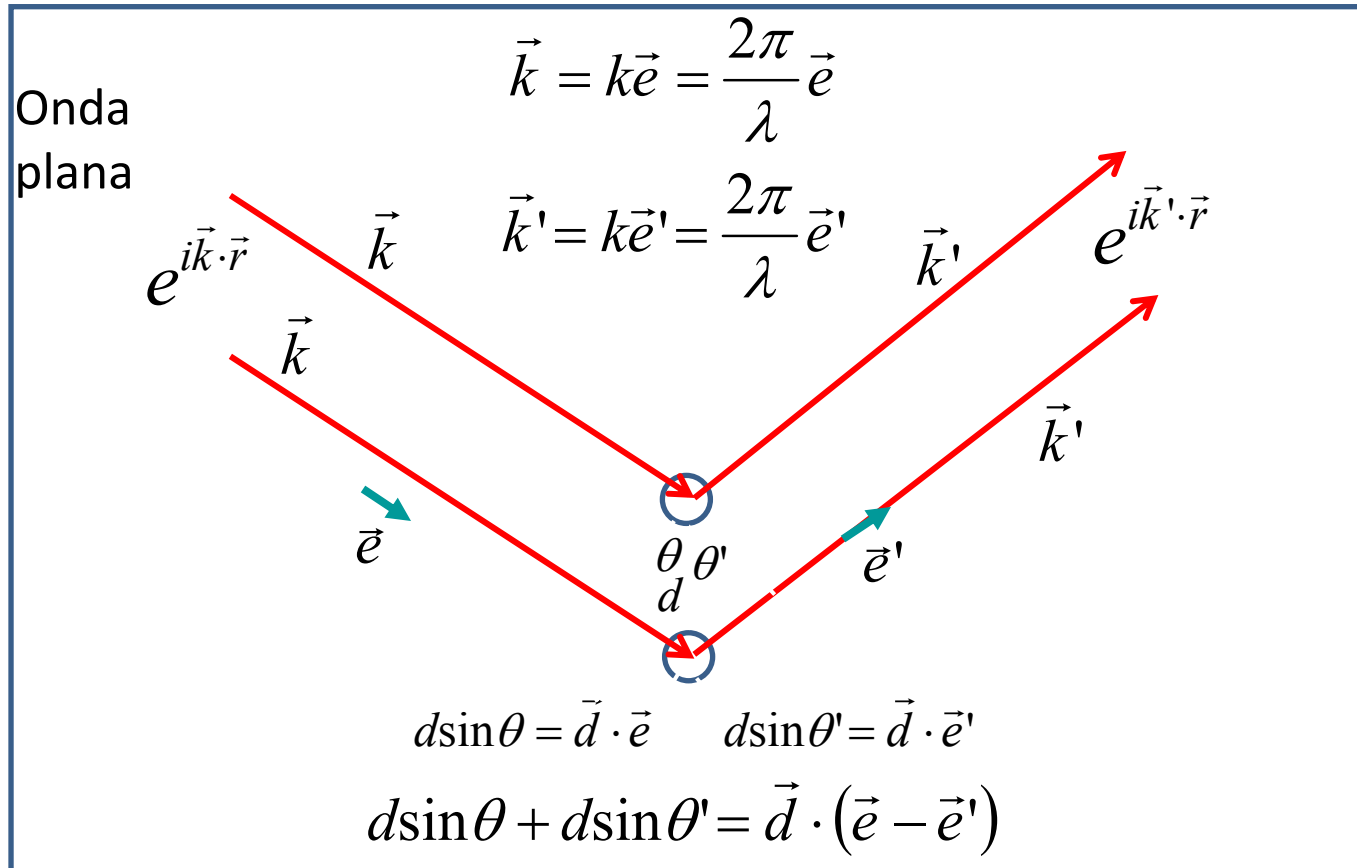


Li, Na, K, V, Cr, Mn, Fe, Rb, Nb, Mo, Cs, Ba, Ta, W, Fr, Ra



# Difracción de Rx

**Formulación de Laue:** Cada punto de la red puede dispersar la radiación incidente con la misma frecuencia en todas las direcciones.

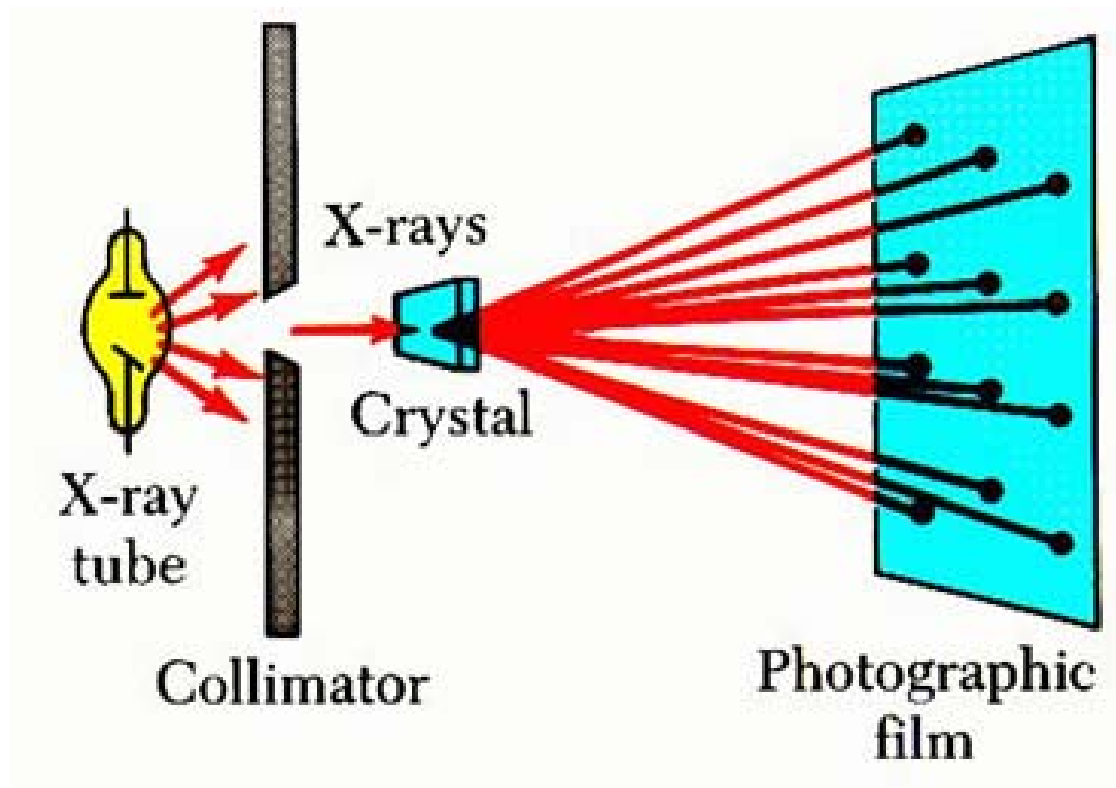


Dispersión elástica

# Difracción de Rx

## Formulación de Laue

En cualquier dirección espacial donde haya interferencia constructiva se observarán picos de intensidad.



monocristal

# Difracción de Rx

La diferencia de camino para las radiaciones dispersadas en la dirección  $\vec{e}'$  es:

$$d\sin\theta + d\sin\theta' = \vec{d} \cdot (\vec{e} - \vec{e}')$$

La condición para interferencia constructiva es:

$$\vec{d} \cdot (\vec{e} - \vec{e}') = n\lambda$$

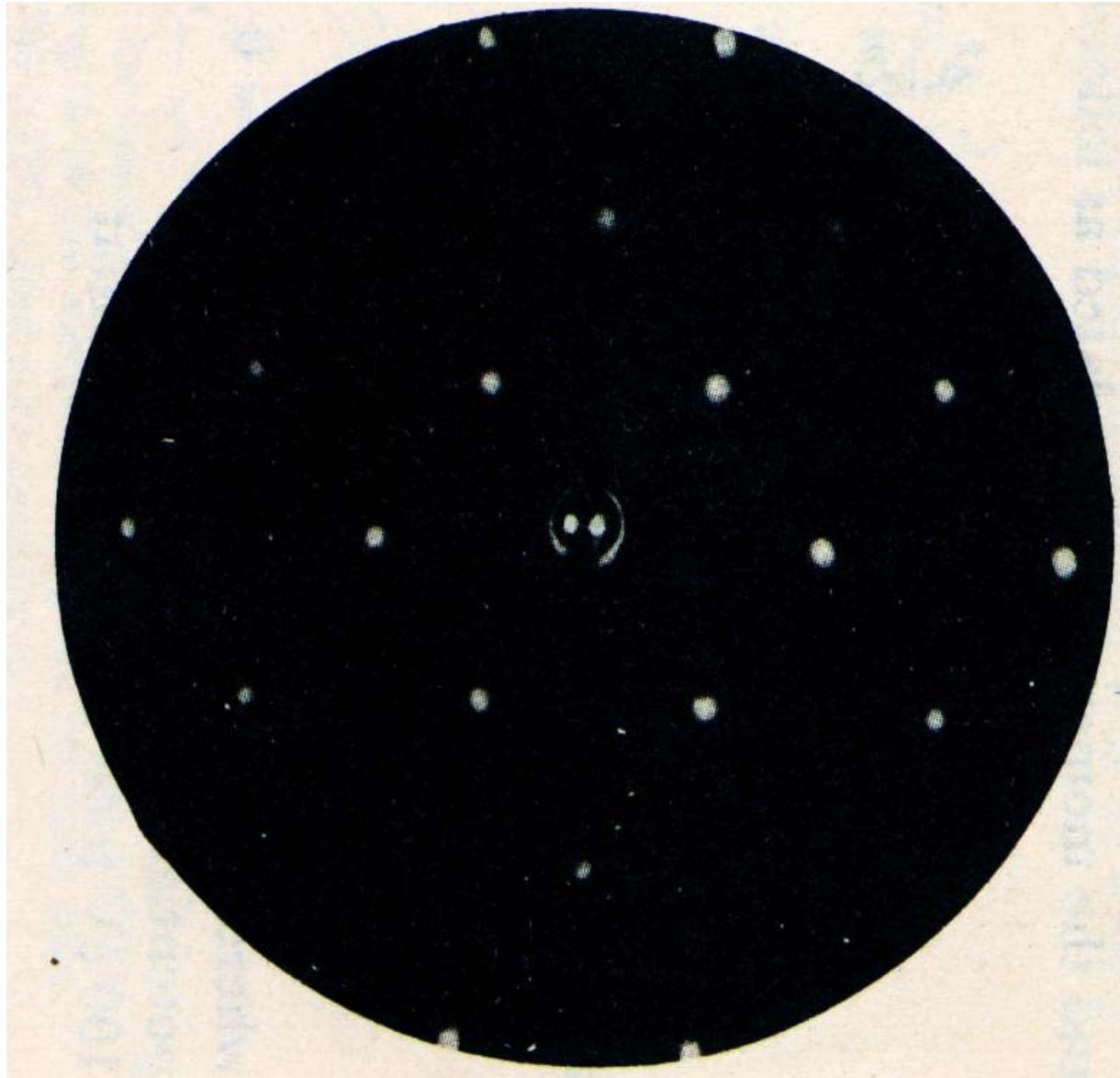


$$\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = n \frac{2\pi}{\lambda} \lambda = 2\pi n$$

En lugar de considerar sólo dos dispersores buscamos la condición para la interferencia constructiva de todos los puntos de la red de Bravais ubicados en las posiciones

$$\vec{t}_m \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi n \quad \Rightarrow \quad e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{t}_m} = 1 \quad \text{Condición de Laue}$$

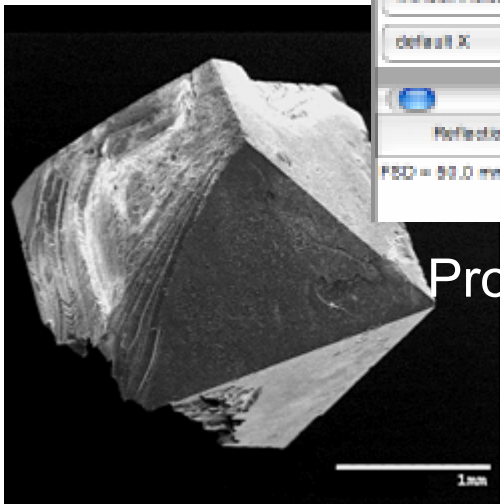
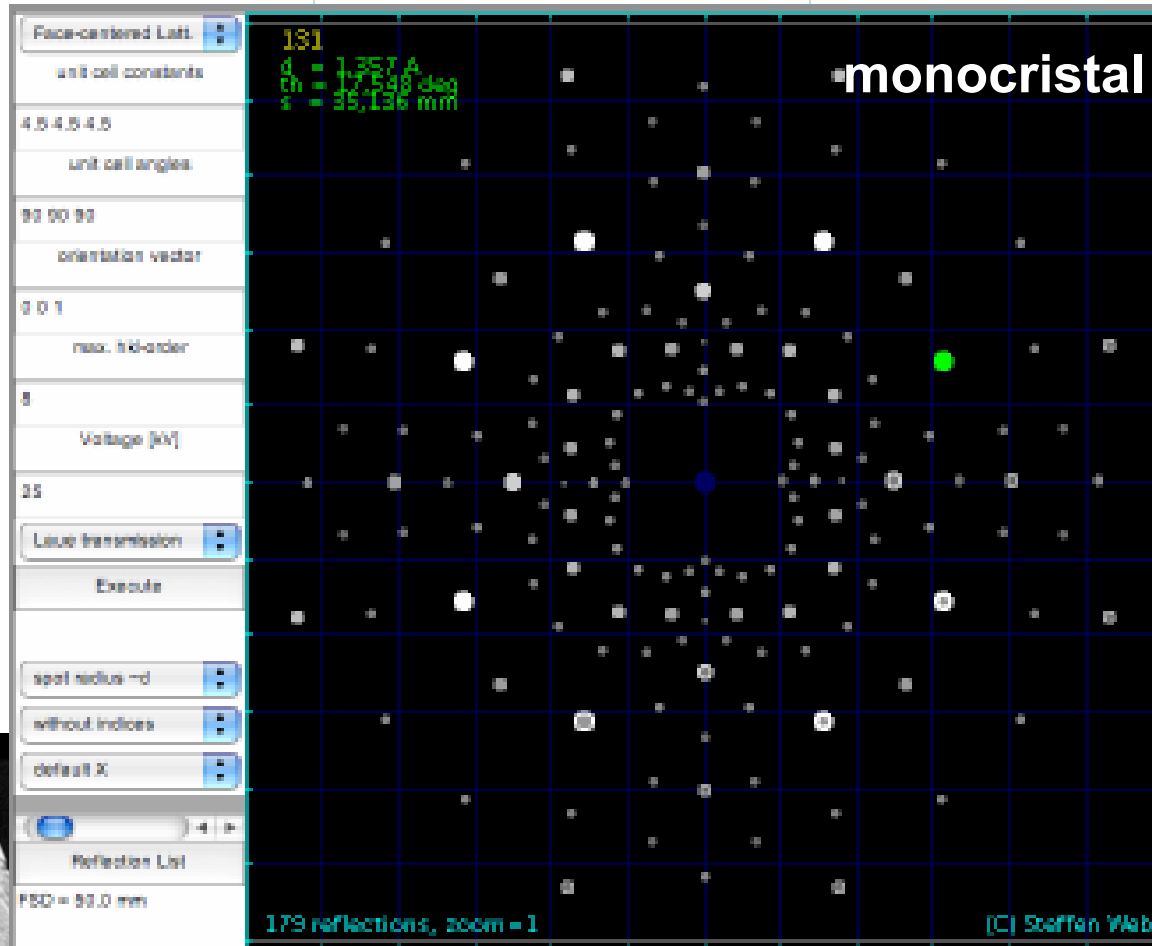
# Difracción de Rx



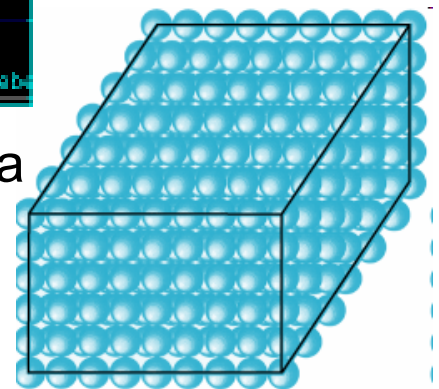
Laue spots for electron diffraction from a single tungsten crystal

# Difracción de Rx

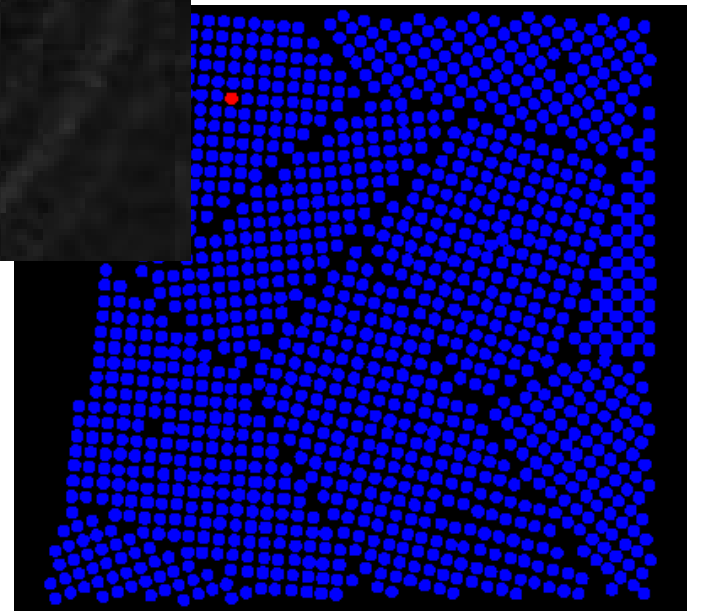
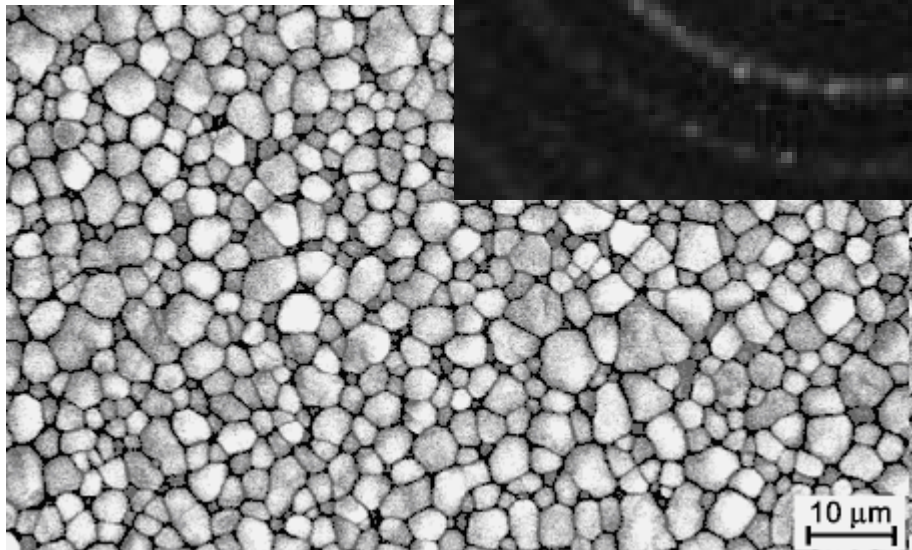
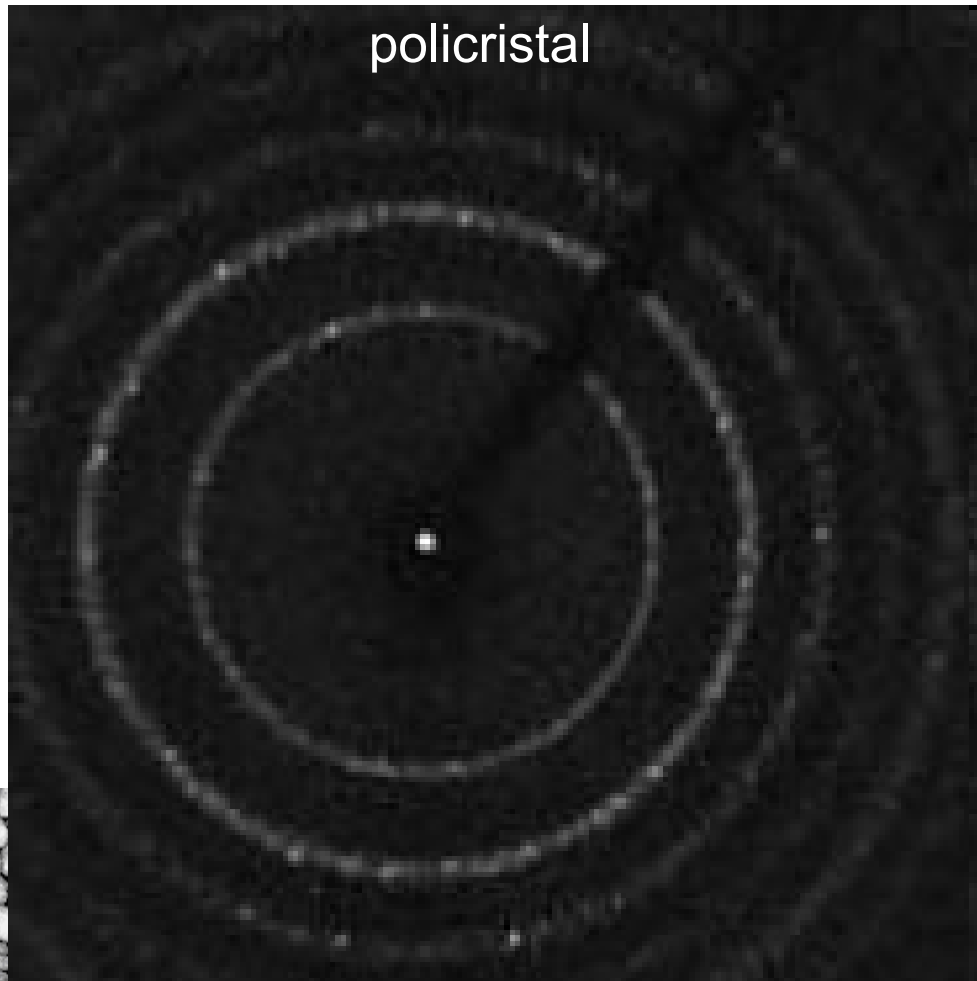
## Difracción de Laue



Proyección sobre un plano de la red recíproca



polycristal



# Red recíproca

El concepto de red recíproca no sólo es importante en cristalografía, sino también en el estudio de la estructura de bandas electrónicas, los espectros de vibraciones de red, etc. **Prácticamente está subyacente en toda la física del estado sólido.**

Es natural inferir que en **cualquier propiedad microscópica del sólido** se verán reflejadas las simetrías del cristal, en particular la **simetría traslacional**.

La red recíproca  $\vec{K}$  se define mediante la expresión:

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{t}_m} = 1 \quad \text{unidades } [K] = m^{-1}$$

Donde  $\vec{t}_m$  es la red “directa”

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

Veremos que la red recíproca  $\vec{K}$  está compuesta de las **direcciones** en las que aparecen los máximos de difracción (**interferencia constructiva**)

# Red recíproca

Los vectores de la red recíproca pueden expresarse mediante vectores primitivos  $\vec{a}^*$ ,  $\vec{b}^*$ ,  $\vec{c}^*$

$$\vec{K}_{m'} = m_1' \vec{a}^* + m_2' \vec{b}^* + m_3' \vec{c}^*, \quad \begin{cases} m_1' \\ m_2' \\ m_3' \end{cases} \text{ enteros}$$

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$$\vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

Donde  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  son los vectores primitivos de la red directa

$V$  = Volumen de celda de la red directa



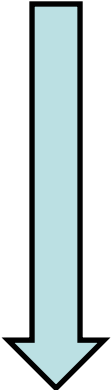
# Red recíproca

Consistencia con la definición de la RR  $e^{i\vec{K}\cdot\vec{t}_m} = 1$

$$\vec{K}_{m'} \cdot \vec{t}_m = (m_1' \vec{a}^* + m_2' \vec{b}^* + m_3' \vec{c}^*) \cdot (m_1 \vec{a} + m_2 \vec{b} + m_3 \vec{c})$$

$$\vec{K}_{m'} \cdot \vec{t}_m = m_1' m_1 \vec{a}^* \cdot \vec{a} + m_2' m_2 \vec{b}^* \cdot \vec{b} + m_3' m_3 \vec{c}^* \cdot \vec{c}$$

Usando las expresiones para  $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad \vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$


$$\boxed{\vec{K}_{m'} \cdot \vec{t}_m = 2\pi(m_1' m_1 + m_2' m_2 + m_3' m_3) = 2\pi n} \quad \Rightarrow \quad e^{i\vec{K}\cdot\vec{t}_m} = 1$$

# Red recíproca

En el caso de ejes ortogonales (redes cúbicas, tetragonales y ortorrómbicas)

$$\alpha = \beta = \gamma = \pi / 2$$

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$$\vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

Se llega a una relación simple entre los módulos de los vectores de ambas redes

$$a^* = \frac{2\pi}{a}$$

$$b^* = \frac{2\pi}{b}$$

$$c^* = \frac{2\pi}{c}$$

y se verifica

$$\vec{a}^* \parallel \vec{a}; \quad \vec{b}^* \parallel \vec{b}; \quad \vec{c}^* \parallel \vec{c}$$

$$V_R = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

# Red recíproca

Regresamos a la formulación de Laue. La condición de interferencia constructiva

$$e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{t}_m} = 1$$

equivale a

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{K}_m \quad \vec{k} - \vec{k}' = \text{vector } RR$$

entonces

$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{K}_m \Rightarrow (k')^2 = (\vec{k} - \vec{K}_m)^2 = k^2 + K_m^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{K}_m$$

Teniendo en cuenta

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| \Rightarrow k^2 = (k')^2$$

Arribamos a

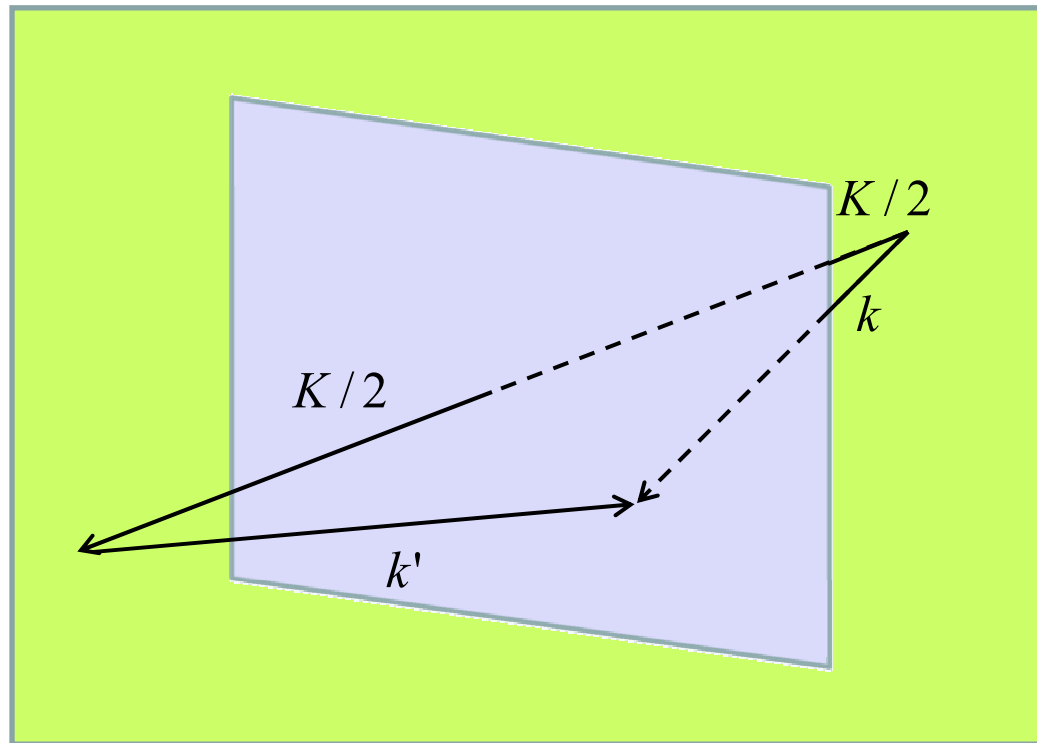
$$\vec{k} \cdot \vec{K}_m = \frac{1}{2} K_m^2$$

La componente de  $\mathbf{k}$  a lo largo de  $\mathbf{K}_m$  debe ser la mitad de la longitud de  $\mathbf{K}_m$ .

## Red recíproca

Las expresiones  $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{K}_m$        $\vec{k} \cdot \vec{K}_m = \frac{1}{2} K_m^2$

Corresponden a la siguiente representación geométrica



La condición de Laue establece que la punta del vector  $\mathbf{k}$  debe yacer sobre el plano bisector de  $\mathbf{K}_m$ . Estos planos son los planos de Bragg.

# Red recíproca

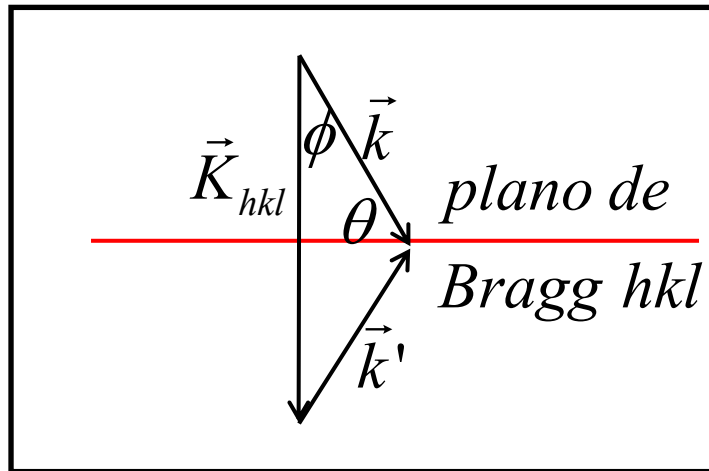
Es común llamar

$$h = m_1'; k = m_2'; l = m_3';$$

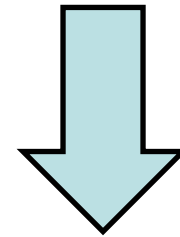
y expresar  $\mathbf{K}$  como

$$\vec{K}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad (h, k, l \text{ índices de Miller})$$

veamos ahora a que nos lleva la expresión



$$\vec{k} \cdot \vec{K}_{hkl} = \frac{1}{2} K_{hkl}^2$$

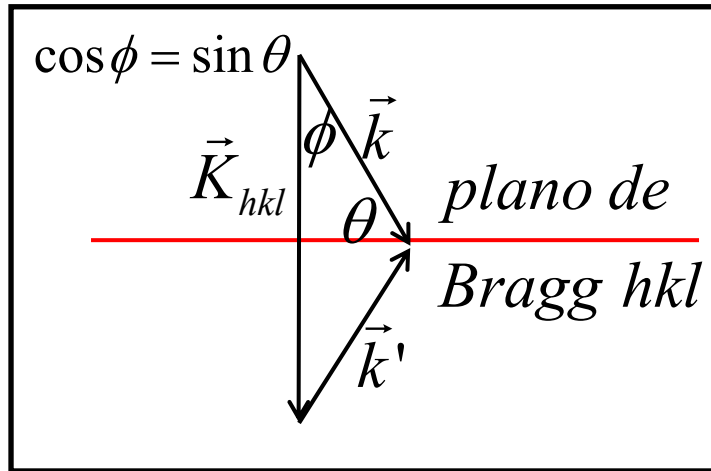


$$\frac{2\pi}{\lambda} |\vec{K}_{hkl}| \cos \phi = \frac{1}{2} |\vec{K}_{hkl}|^2$$

# Red recíproca

Seguimos

$$\frac{2\pi}{\lambda} |\vec{K}_{hkl}| \cos \phi = \frac{1}{2} |\vec{K}_{hkl}|^2$$



$$\frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta = |\vec{K}_{hkl}|$$

condición de Bragg  
 $n\lambda = 2d \sin \theta$

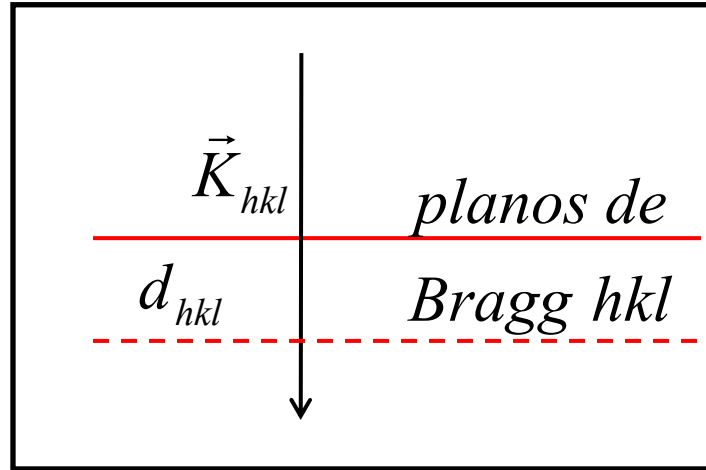
$$\lambda = \frac{4\pi}{|\vec{K}_{hkl}|} \sin \theta$$

$$\frac{4\pi}{|\vec{K}_{hkl}|} = \frac{2d_{hkl}}{n}$$

$$|\vec{K}_{hkl}| = \frac{2\pi n}{d_{hkl}}$$

# Red recíproca

Concluimos entonces  
que



$$|\vec{K}_{hkl}| = \frac{2\pi n}{d_{hkl}}$$

Los módulos de los vectores de la red recíproca son inversamente proporcionales a las distancias entre los planos difractores de la red directa. Estos planos se designan por los índices de Miller  $h, k, l$ .

Fin clase 2