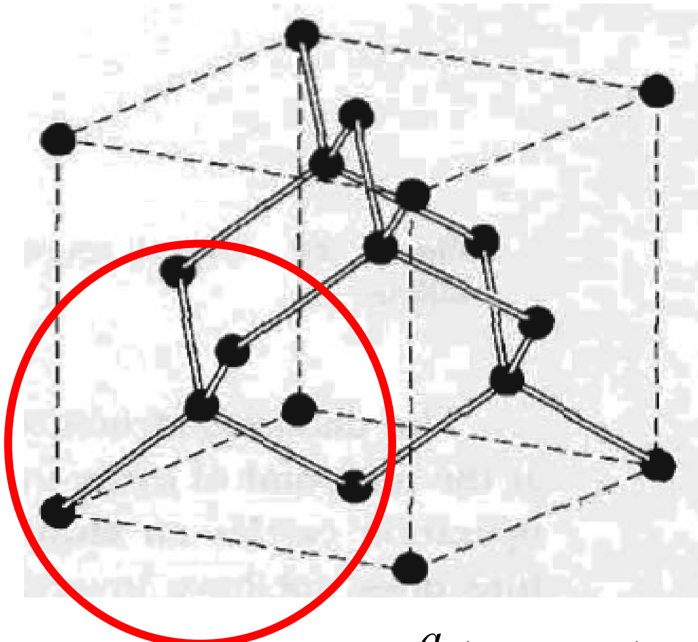
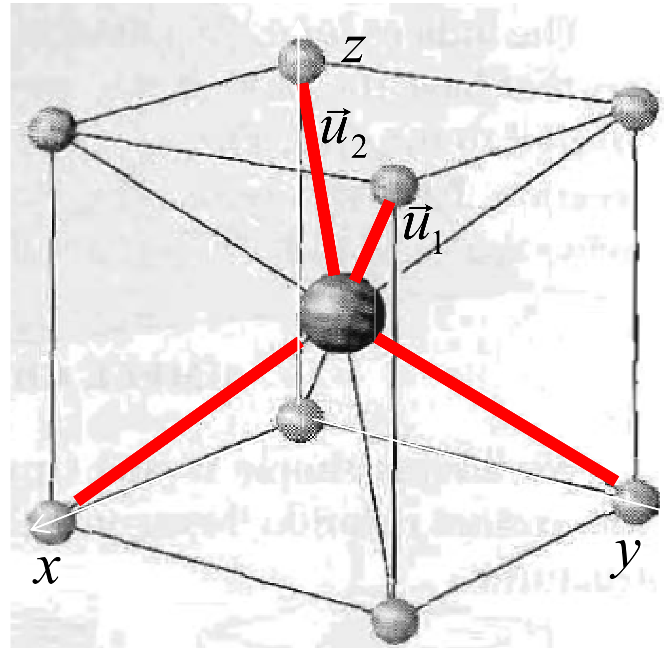
Materia Condensada. Sistemas Complejos

Problemas 1 - 3

Problema 1

Los vectores $\vec{u}_1 = a(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z});\ \vec{u}_2 = a(-\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})$ están en las direcciones de dos de las diagonales de un cubo.





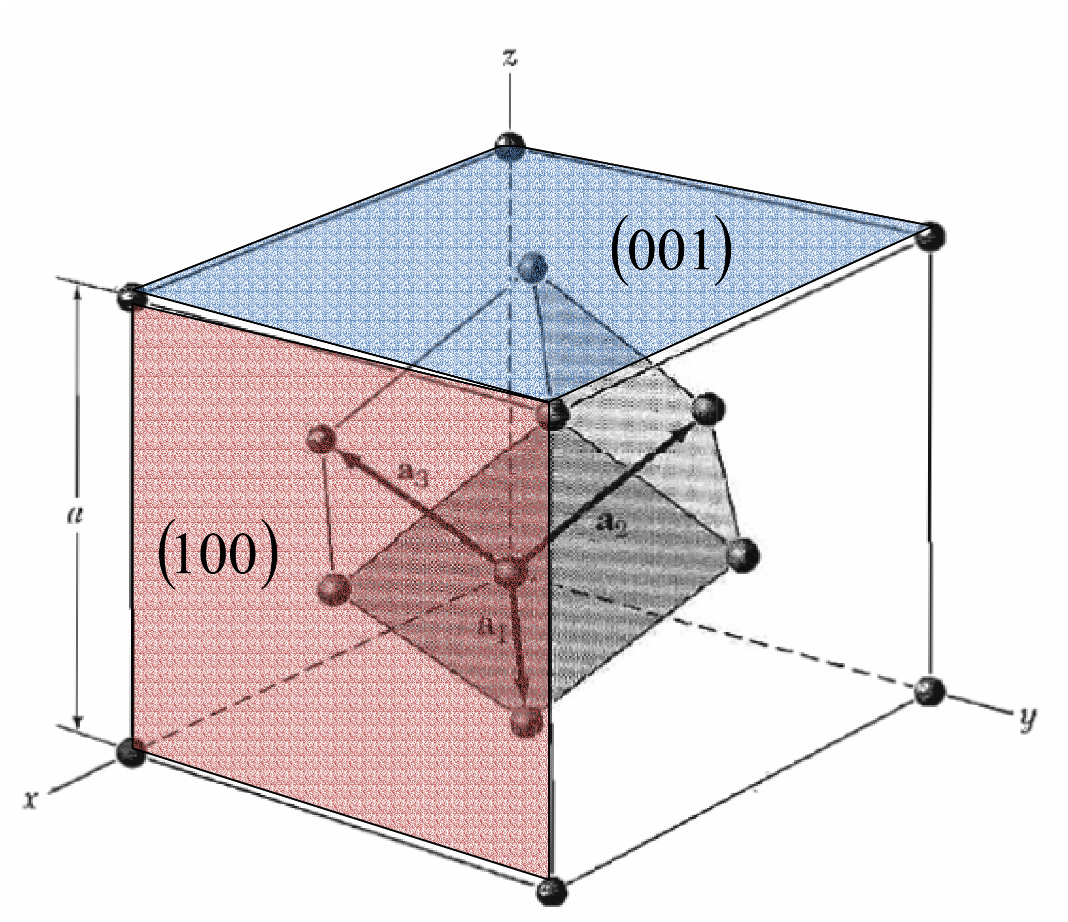
$$\vec{u}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$

$$\vec{u}_2 = \frac{a}{2}(-\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})$$

$$\vec{u}_1\cdot\vec{u}_2 = \frac{3}{4}a^2\cos\theta;\quad \vec{u}_1\cdot\vec{u}_2 = -\frac{a^2}{4}$$

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

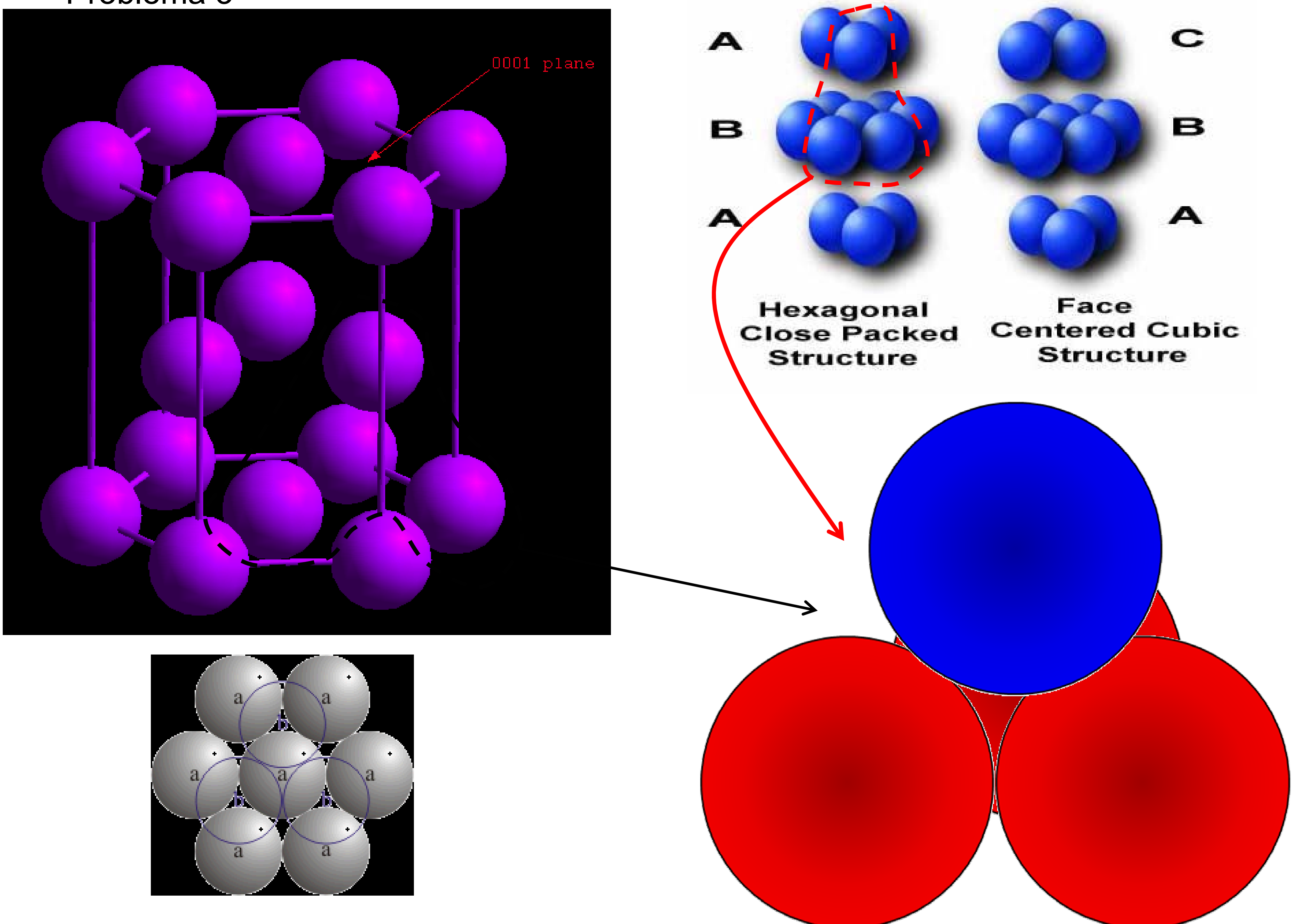
Problema 2



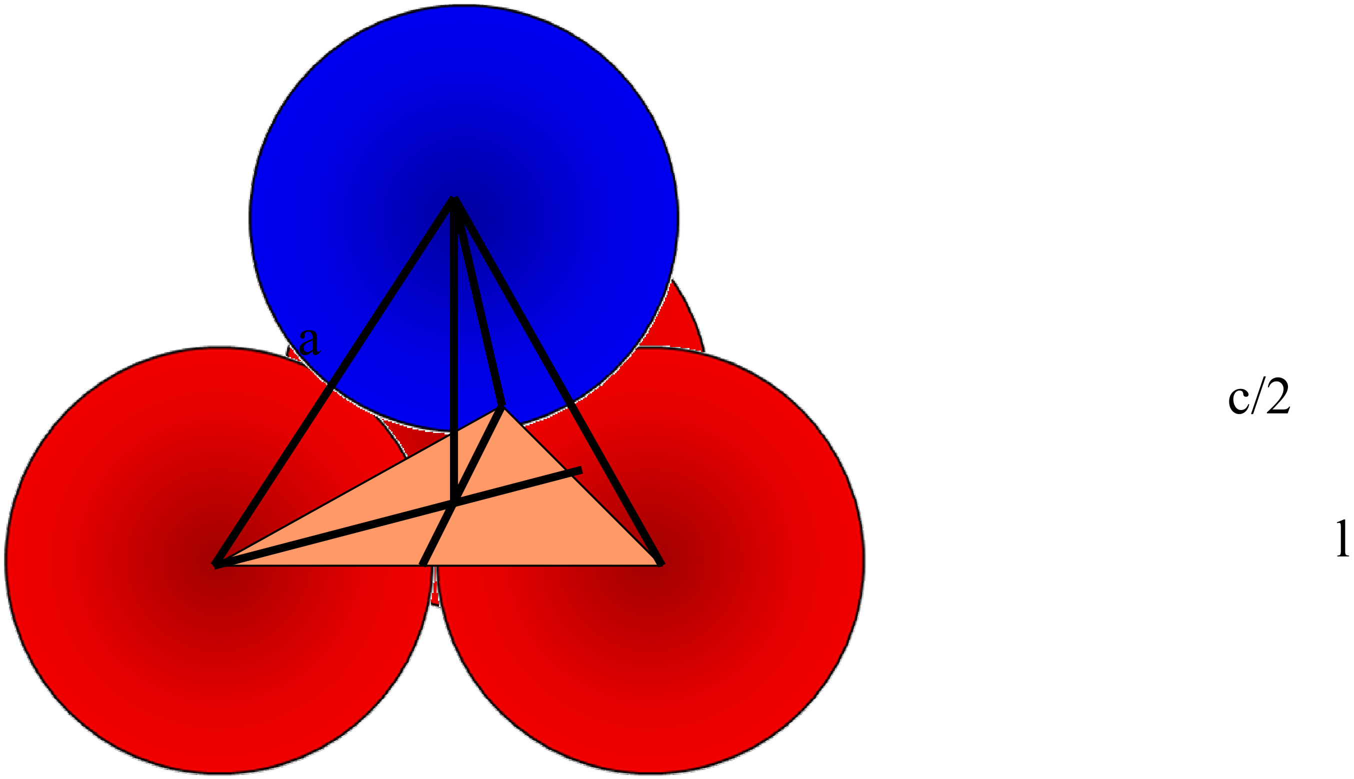
$$sc\ (100) \Rightarrow intersección\ \ fcc\ 202 \Rightarrow "\ fcc"\ (101)$$

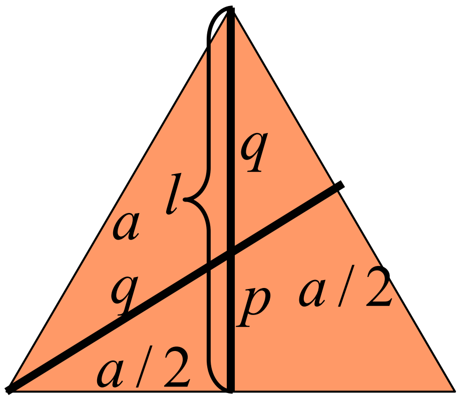
$$sc\ (001) \Rightarrow intersección\ \ fcc\ 022 \Rightarrow "\ fcc"\ (011)$$

Problema 3


0001 plane
A
B
A
C
B
A
Hexagonal Close Packed Structure
Face Centered Cubic Structure
a
b

Problema 3



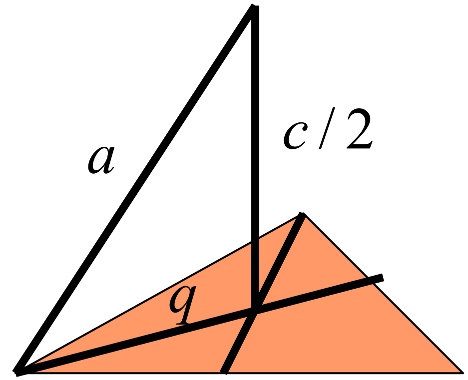


$$\frac{a/2}{l} = \tan 30 = \frac{1}{\sqrt{3}} \Rightarrow l = \frac{a}{2}\sqrt{3}$$

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

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

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



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

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

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

Materia Condensada. Sistemas Complejos

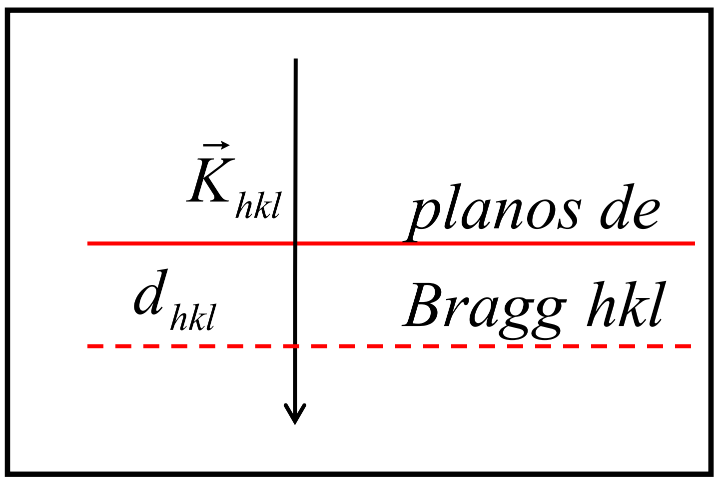
Clase 3

Red recíproca

Vectores de la RR

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

Los módulos de los vectores de la RR son inversamente proporcionales a la distancias entre planos de la RD



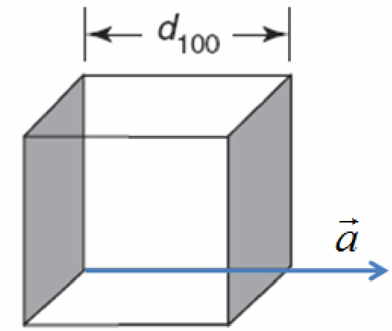
$$\left|\vec{K}_{hkl}\right| = \frac{2\pi n}{d_{hkl}}$$

Estos planos se designan por los índices de Miller *h, k, l,* que son las componentes del vector RR en la base ***a**, *b**, *c****.

Red recíproca

En el caso de la red cúbica simple

$$\underbrace{\alpha = \beta = \gamma = \pi/2 \qquad\qquad a = b = c}$$



(a) planos {1 0 0}

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\breve{a} \qquad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\breve{b} \qquad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}\breve{c}$$

$$(a^*)^2 = (b^*)^2 = (c^*)^2 = \frac{4\pi^2}{a^2}$$

$$\left|\vec{K}\right|^2 = \left(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*\right)^2 = h^2(a^*)^2 + k^2(b^*)^2 + l^2(c^*)^2 = \frac{4\pi^2}{a^2}\left(h^2 + k^2 + l^2\right)$$

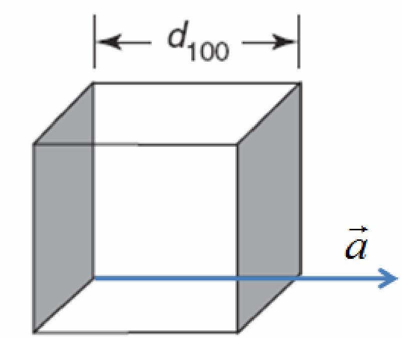
$$\boxed{\left|\vec{K}\right| = \frac{2\pi}{a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}} \qquad \boxed{\left|\vec{K}_{hkl}\right| = \frac{2\pi n}{d_{hkl}}}$$

Red recíproca

$$\left|\vec{K}\right| = \frac{2\pi}{\sqrt{\frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}}}$$

Consideramos ahora algunas familias de planos

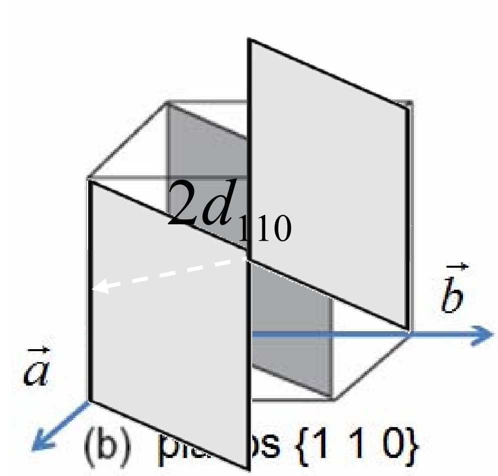
$$\{hkl\} = \{100\} \qquad \sqrt{\frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}} = a = d_{100}$$



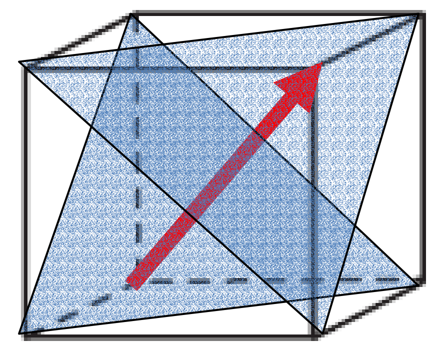
(a) planos {1 0 0}

Red recíproca

$$\{hkl\} = \{110\} \qquad \sqrt{\frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}} = \frac{a}{\sqrt{2}} = d_{110}$$



$$\{hkl\} = \{111\} \qquad \sqrt{\frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}} = d_{111}$$



Red recíproca

En general:

$$\{hkl\} \qquad \sqrt{\frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}} = d_{hkl}$$

$$\left|\vec{K}\right| = \frac{2\pi}{\sqrt{\frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}}} \quad \Longrightarrow \quad \left|\vec{K}\right| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

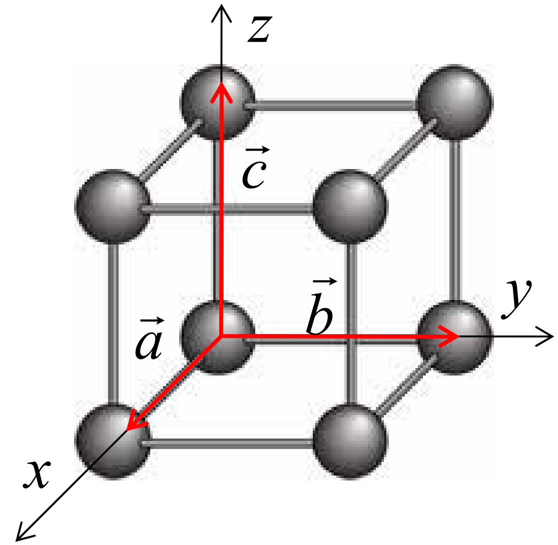
Red recíproca

Ejemplos de Redes Recíprocas para diferentes redes directas

Red cúbica simple

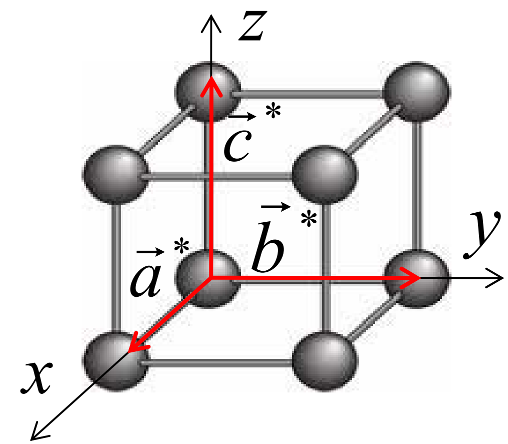
Red directa

$$\vec{a} = a\hat{u}_a \qquad \vec{b} = a\hat{u}_b \qquad \vec{c} = a\hat{u}_c$$



Red recíproca

$$\vec{a}^* = a^*\hat{u}_a \qquad \vec{b}^* = a^*\hat{u}_b \qquad \vec{c}^* = a^*\hat{u}_c$$



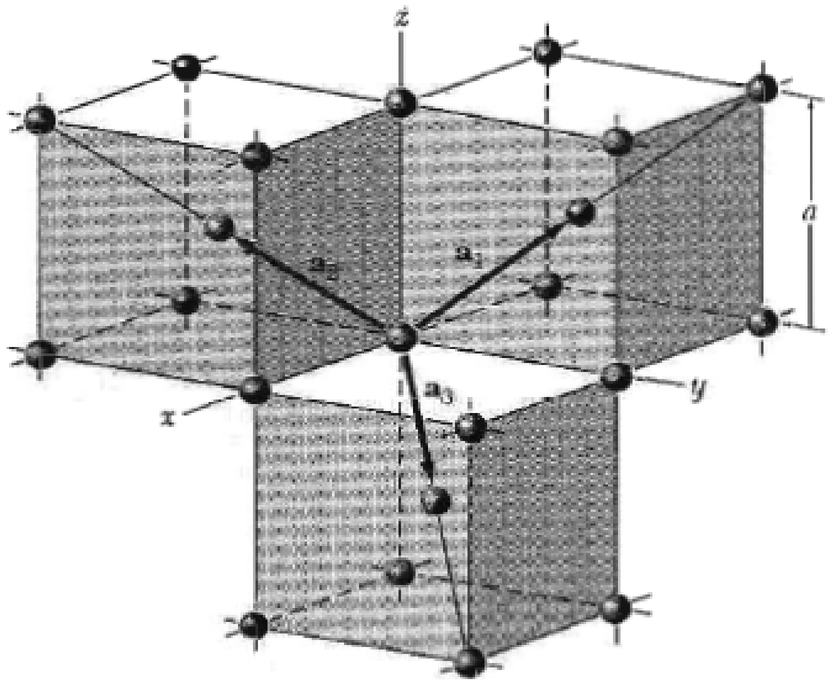
La red recíproca de una red CS en el espacio **r** es también una red CS pero en el espacio **k**

Red recíproca

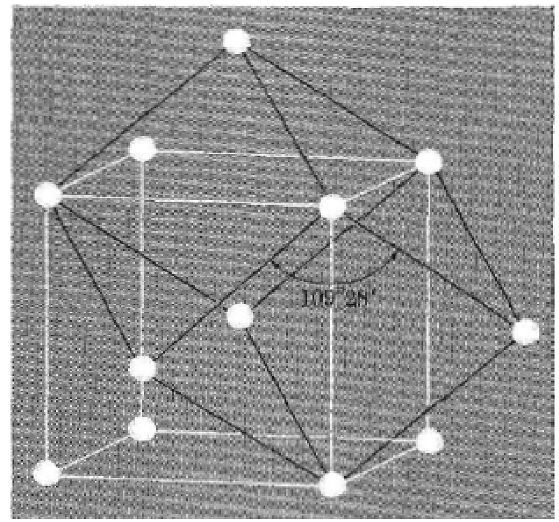
Red cúbica centrada en el cuerpo

Red directa

Vectores de una celda primitiva para la red bcc



celda primitiva



$$\vec{a} = \frac{a}{2}\left(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}\right)$$

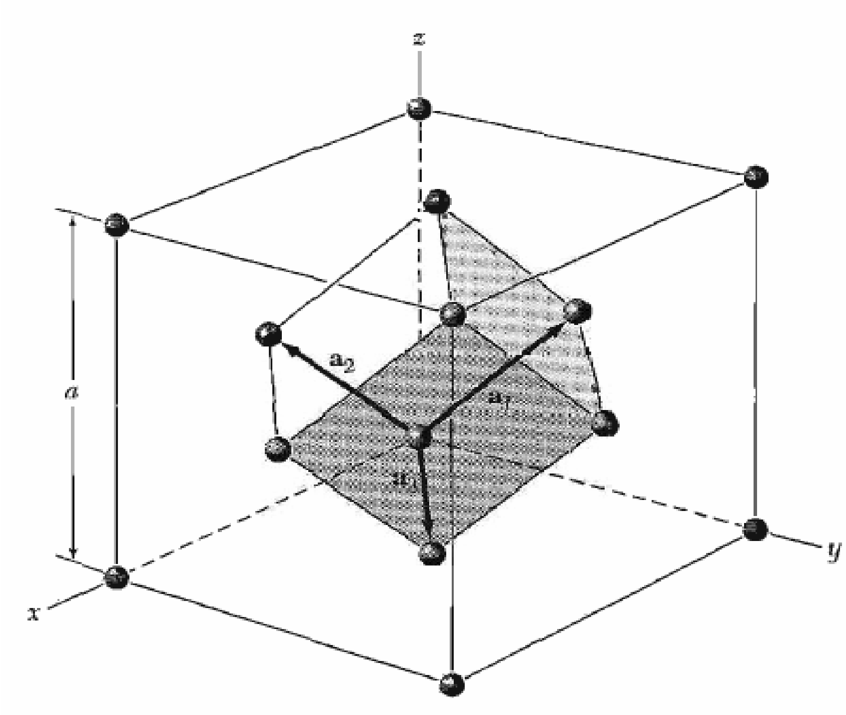
$$\vec{b} = \frac{a}{2}\left(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}\right)$$

$$\vec{c} = \frac{a}{2}\left(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}\right)$$

Red recíproca

Vectores de la celda primitiva de la red recíproca de una red directa bcc

$$\boxed{\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{y}+\hat{z}\right)} \qquad \boxed{\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{x}+\hat{z}\right)} \qquad \boxed{\vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{x}+\hat{y}\right)}$$



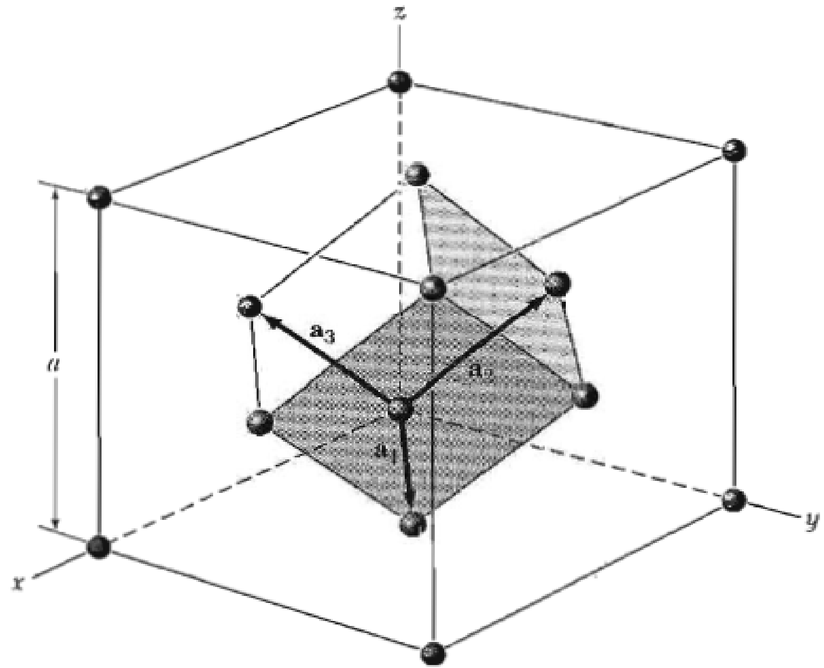
La red recíproca de una red directa bcc es una red fcc

Red recíproca

Red cúbica centrada en las caras

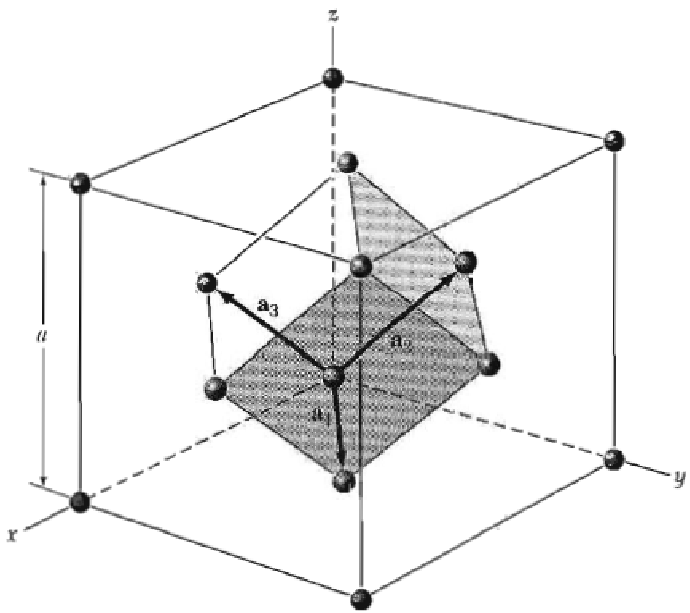
Red directa

Vectores de una celda primitiva para la red fcc



$$\boxed{\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})} \quad \boxed{\vec{b} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})} \quad \boxed{\vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})}$$

Red recíproca



$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\left(-\vec{x}+\vec{y}+\vec{z}\right)$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{x}-\vec{y}+\vec{z}\right)$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{x}+\vec{y}-\vec{z}\right)$$

La red recíproca de una red directa fcc es una red bcc

Análisis de Fourier

La periodicidad de la red

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

implica que la densidad electrónica es una función periódica de $\boldsymbol{r}$ con períodos a, b y c en las tres direcciones cristalinas principales.

$$n\left(\vec{r} + \vec{t}_m\right) = n\left(\vec{r}\right)$$

Tal periodicidad brinda una situación ideal para el análisis de Fourier.

Análisis de Fourier

Un desarrollo de Fourier de una función periódica es una serie infinita de términos. Cada término viene dado por una función “base” del mismo período multiplicada por un factor de peso. Son comunes los desarrollos en series de senos y cosenos. Por ejemplo, en una dimensión:

$1d \qquad n(x+ma) = n(x) \qquad \text{período } a$

$$n(x) = \sum_j \left\{ n_j^c \cos(k_j x) + n_j^s \sin(k_j x) \right\}$$

Alternativamente puede usarse una expresión compleja

$$n(x) = \sum_j n_j \exp(ik_j x) \qquad \exp(ik_j x) = e^{ik_j x} = \cos(k_j x) + i \sin(k_j x)$$

Análisis de Fourier

Ejemplo 1d

1d

$$f(x) = \sum_{p} g_K e^{i\frac{2\pi p x}{a}}$$

index.html

$$g_K = \frac{1}{a}\int_0^a dx f(x) e^{-i\frac{2\pi p x}{a}}$$

Análisis de Fourier

densidad electrónica tridimensional

$3d$

$$n\left(\vec{r}+\vec{t}_m\right)=n\left(\vec{r}\right)$$

a $n(\mathbf{r})$ le corresponde el desarrollo en serie:

$$\boxed{n\left(\vec{r}\right)=\sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}} \qquad (1)$$

Desarrollo en serie de Fourier (3d)

Análisis de Fourier

$$\boxed{n(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}} \qquad (1)$$

Los vectores $\vec{K} = (K_x, K_y, K_z), \in red\ recíproca$

$$n(\vec{r}+\vec{t}_m) = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{t}_m)} = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{t}_m} = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} = n(\vec{r})$$

$n(\vec{r})$ tiene la periodicidad de la RR.

Análisis de Fourier

$$\boxed{n(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}} \qquad (1)$$

Los $n_{\boldsymbol{K}}$ vienen dados por:

$$n_{\vec{K}} = \frac{1}{V_{celda}} \int_{celda} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} \qquad (2)$$

Análisis de Fourier

reemplazando (1) en (2)

$$n_{\vec{K}} = \frac{1}{V_{celda}} \sum_{\vec{K}'} n_{\vec{K}'} \int_{celda} dV e^{i(\vec{K}'-\vec{K})\cdot\vec{r}}$$

$$dV = dxdydz \qquad \underbrace{\vec{K} = (K_x, K_y, K_z) \qquad \vec{r} = (x, y, z)}$$

$$n_{\vec{K}} = \frac{1}{V_{celda}} \sum_{\vec{K}'} n_{\vec{K}'} \int_{celda} dxdydz e^{i\left[(K_x'-K_x)x+(K_y'-K_y)y+(K_z'-K_z)z\right]}$$

Celda cúbica

$$n_{\vec{K}} = \frac{1}{V_{celda}} \sum_{\vec{K}'} n_{\vec{K}'} \left\{\int_0^a dx e^{i\left[(K_x'-K_x)x\right]}\right\}^3$$

$$si\ K' \neq K \quad \int_0^a dx e^{i\left[(K_x'-K_x)x\right]} = \frac{1}{i(K_x'-K_x)} \int_0^a d\left(i(K_x'-K_x)x\right) = \frac{e^{i\left[(K_x'-K_x)a\right]}-1}{i(K_x'-K_x)} = 0$$

Análisis de Fourier

$$n_{\vec{K}} = \frac{1}{V_{celda}} \sum_{\vec{K}'} n_{\vec{K}'} \left\{ \int_0^a dx e^{i\left[\left(K'_x - K_x\right)x\right]} \right\}^3$$

$$V_{celda} = a^3$$

$$si\ K' = K \qquad \int_0^a dx e^{i\left[\left(K'_x - K_x\right)x\right]} = \int_0^a dx = a \quad \Rightarrow \quad n_{\vec{K}} = \frac{1}{V_{celda}} n_{\vec{K}} a^3 = n_{\vec{K}}$$

identidad

$$\boxed{n(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}}$$

Transformada de Fourier

Definimos la transformada de Fourier por

$$\varphi\left(\vec{K}\right) = \int \rho\left(\vec{r}\right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{r}; \quad \vec{r}, \overleftarrow{k} \ continuos \qquad TF$$

Donde ρ es cualquier función bien comportada del espacio directo, no necesariamente periódica. Por ejemplo puede ser la distribución de carga electrónica $n(\mathbf{r})$ en un átomo, una molécula, un líquido o un cristal.

La transformada inversa o antitransformada se define por

$$\varphi^{-1}\left[\varphi\left(\vec{k}\right)\right] = \frac{1}{\left(2\pi\right)^3} \int \varphi\left(\vec{k}\right) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{k} = \rho\left(\vec{r}\right) \qquad ATF$$

Cada estructura tiene su inversa o recíproca, por ejemplo si $\rho(\mathbf{r})$ describe la red directa, entonces $\varphi(\mathbf{k})$ es la red recíproca. Ambas descripciones contienen la **misma** información.

Red recíproca

La red recíproca es la **transformada de Fourier** de la red directa

Habíamos mostrado que

$$\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{t}_m = 2\pi\left(m_1 h + m_2 k + m_3 l\right) \quad \Rightarrow \quad e^{i\vec{K}\cdot\vec{t}_m} = 1$$

entonces

$$n\left(\vec{r} + \vec{t}_m\right) = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\left(\vec{r}+\vec{t}_m\right)} = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{t}_m} = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} = n\left(\vec{r}\right)$$

Es decir, *n(**r**)* **tiene la periodicidad de la red**.
Cada estructura cristalina tiene **dos** redes asociadas: la “directa” y la “recíproca”. El patrón de difracción es un mapa de su red recíproca. Una imagen de microscopía electrónica de alta resolución es un mapa de la red directa.

La red recíproca es una red en el espacio de Fourier asociado al cristal.

Transformada de Fourier

Supongamos una sucesión de puntos equiespaciados a lo largo de una recta en el espacio directo. Podemos describir la densidad de puntos de la red como

$$\rho(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - m_1\vec{a}) = \left\{ \begin{matrix} 0 \ si \ \vec{r} \neq m_1\vec{a} \\ \to \infty \ si \ \vec{r} \to m_1\vec{a} \end{matrix} \right\}; \vec{a} = a\hat{x} \quad delta \ de \ Dirac$$

A partir de la definición de la *TF* se demuestra que

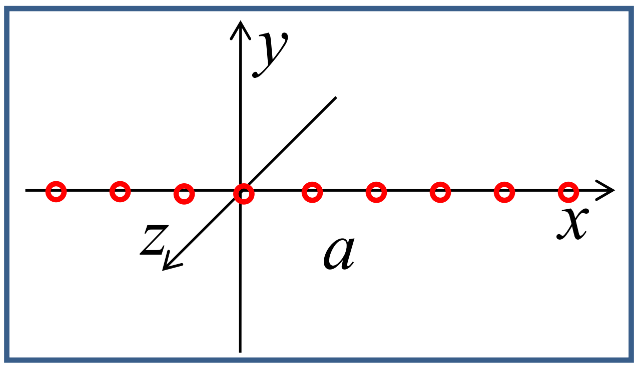
$$\varphi(\vec{k}) = \delta\left(\vec{k} - \frac{2\pi}{a}h\hat{x}\right)$$

Transformada de Fourier

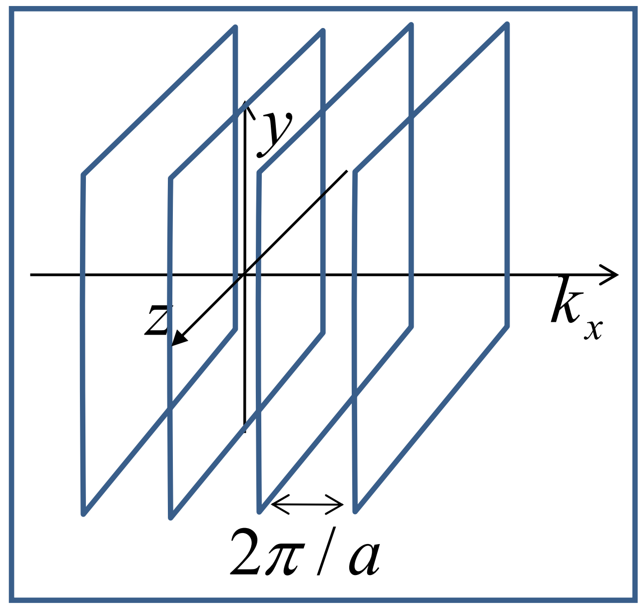
Por lo tanto

$$\varphi\left(\vec{k}\right) = \delta\left(\vec{k} - \frac{2\pi}{a} h\hat{x}\right)$$

Esta función corresponde a un conjunto de planos perpendiculares al *eje x* equiespaciados en $2\pi/a$.



Red directa



Red recíproca

Transformada de Fourier

generalizando

Para una red directa 3d

$$\vec{R} = m_1\vec{a} + m_2\vec{b} + m_3\vec{c} \quad \Longleftrightarrow \quad \rho(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{R})$$

Se tiene una TF

$$\varphi(\vec{k}) = \delta(\vec{k} - \vec{K}_{hkl})$$

Que corresponde a una red recíproca 3d

$$\vec{k} = \vec{K}_{hkl} = h\vec{a}* + k\vec{b}* + l\vec{c}*$$

Condiciones equivalentes

Con

$$\vec{a}\cdot\vec{a}* = \vec{b}\cdot\vec{b}* = \vec{c}\cdot\vec{c}* = 2\pi$$

ó

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

Fin Clase