

Materia Condensada. Sistemas Complejos

Problemas 4-5

Problema 4: Red hexagonal (antes de la clase 4)

Los vectores de traslación primitivos de la red hexagonal pueden tomarse como

$$\vec{a} = \left(\frac{3^{1/2} a}{2} \right) \hat{x} + \left(\frac{a}{2} \right) \hat{y} \quad \vec{b} = -\left(\frac{3^{1/2} a}{2} \right) \hat{x} + \left(\frac{a}{2} \right) \hat{y} \quad \vec{c} = c \hat{z}$$

(verificar)

(a) Mostrar que el volumen de la celda primitiva es $V_{\text{Celda}} = \frac{3^{1/2}}{2} a^2 c$

(b) Mostrar que los vectores de traslación primitivos son

$$\vec{a}^* = \left(\frac{2\pi}{3^{1/2} a} \right) \hat{x} + \left(\frac{2\pi}{a} \right) \hat{y} \quad \vec{b}^* = -\left(\frac{2\pi}{3^{1/2} a} \right) \hat{x} + \left(\frac{2\pi}{a} \right) \hat{y} \quad \vec{c} = \left(\frac{2\pi}{c} \right) \hat{z}$$

¿A qué estructura cristalina pertenece la red recíproca? Qué puede decirse de su orientación relativa a la red directa?

(c) Intente hacer un esquema de la primera zona de Brillouin (es la celda unitaria de la Red Recíproca) y calcule su volumen; puede usarse la identidad

$$(\vec{c} \times \vec{a}) \times (\vec{a} \times \vec{b}) = (\vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})) \vec{a}$$

Problema 4: Red hexagonal (antes de la clase 4)

solución

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_{\text{Celda}}} \vec{b} \times \vec{c}$$

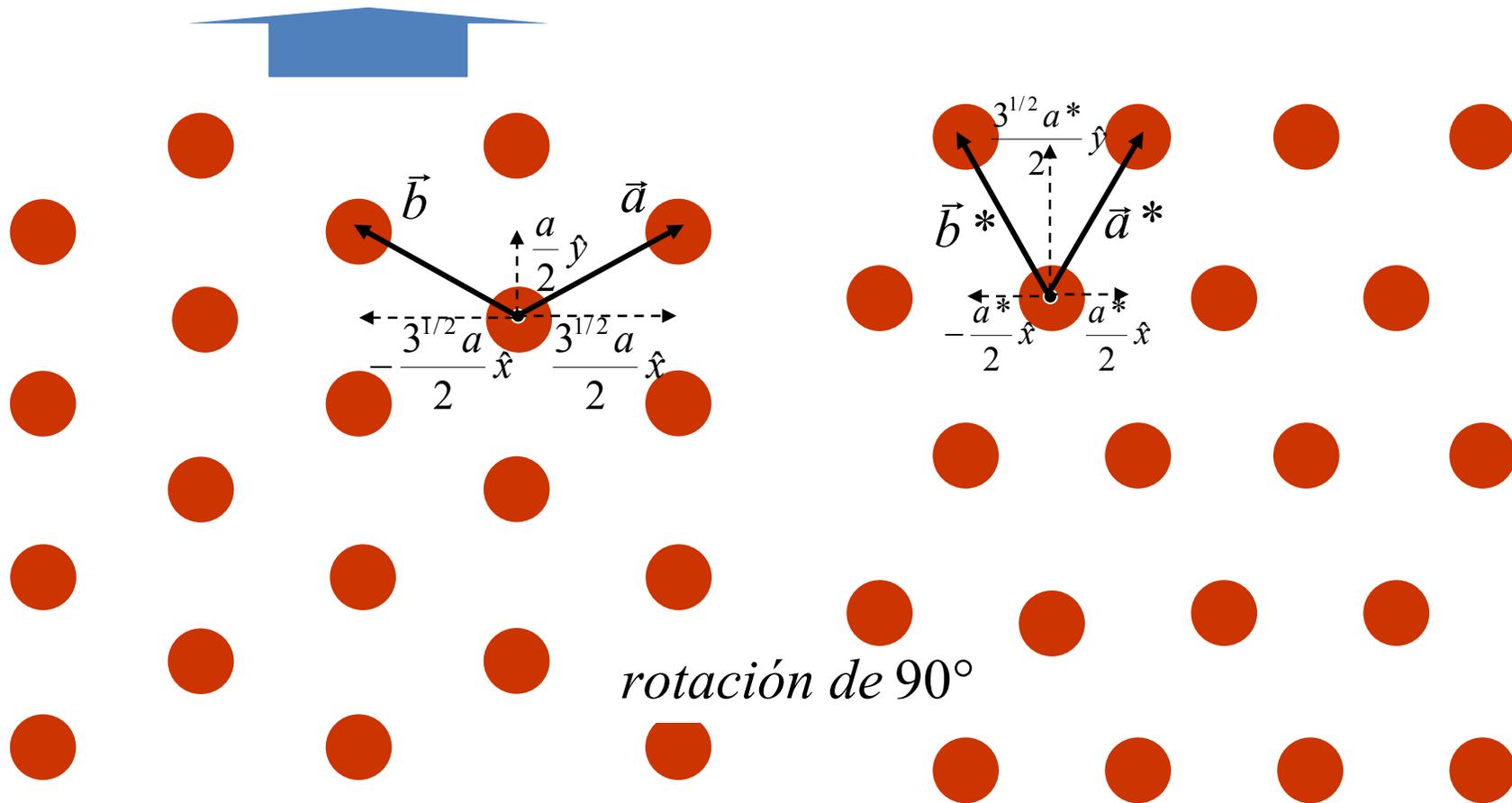
$$\vec{b} \times \vec{c} = \left[-\left(\frac{3^{1/2}a}{2}\right)\hat{x} + \left(\frac{a}{2}\right)\hat{y} \right] \times (c\hat{z}) = \frac{3^{1/2}ac}{2}\hat{y} + \frac{ac}{2}\hat{x}$$

$$V_{\text{Celda}} = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \left[\frac{3^{1/2}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} \right] \cdot \left[\frac{3^{1/2}ac}{2}\hat{y} + \frac{ac}{2}\hat{x} \right] = \frac{3^{1/2}a^2c}{2}$$



$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{3^{1/2}a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y}; \text{ etc.}$$

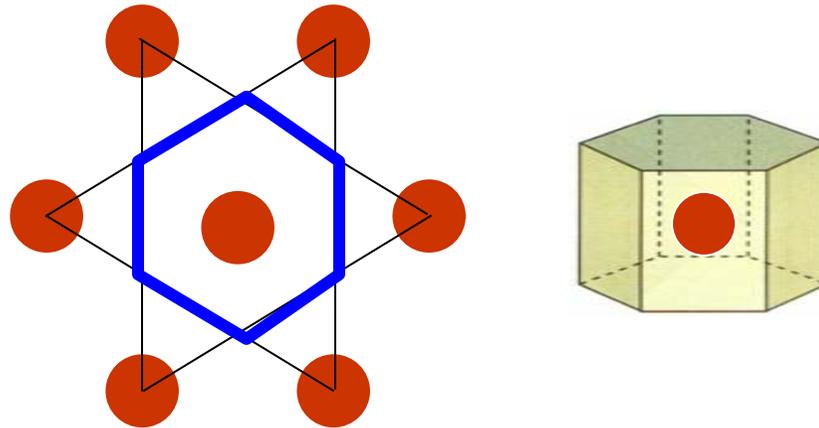
$$\vec{a} = \left(\frac{3^{1/2} a}{2} \right) \hat{x} + \left(\frac{a}{2} \right) \hat{y} \quad \vec{b} = -\left(\frac{3^{1/2} a}{2} \right) \hat{x} + \left(\frac{a}{2} \right) \hat{y} \quad \vec{c} = c \hat{z}$$



rotación de 90°

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{3^{1/2} a} \hat{x} + \frac{2\pi}{a} \hat{y} \quad \vec{b}^* = -\left(\frac{2\pi}{3^{1/2} a} \right) \hat{x} + \left(\frac{2\pi}{a} \right) \hat{y} \quad \vec{c} = \left(\frac{2\pi}{c} \right) \hat{z}$$

primera zona de Brillouin



Problema 6: arreglo unidimensional biatómico (para después de la clase 4)

Considerar una línea de átomos $ABAB\dots AB$ con una separación $A-B$ de $a/2$ y con factores de forma atómicos f_A y f_B , respectivamente. El haz incidente de R_x es perpendicular a la línea de átomos.

(a) Mostrar que la condición de interferencia es $n\lambda = a\cos\theta$, siendo θ el ángulo entre el haz difractado y la línea de átomos.

(b) Mostrar que intensidad del haz difractado para n impar es proporcional a

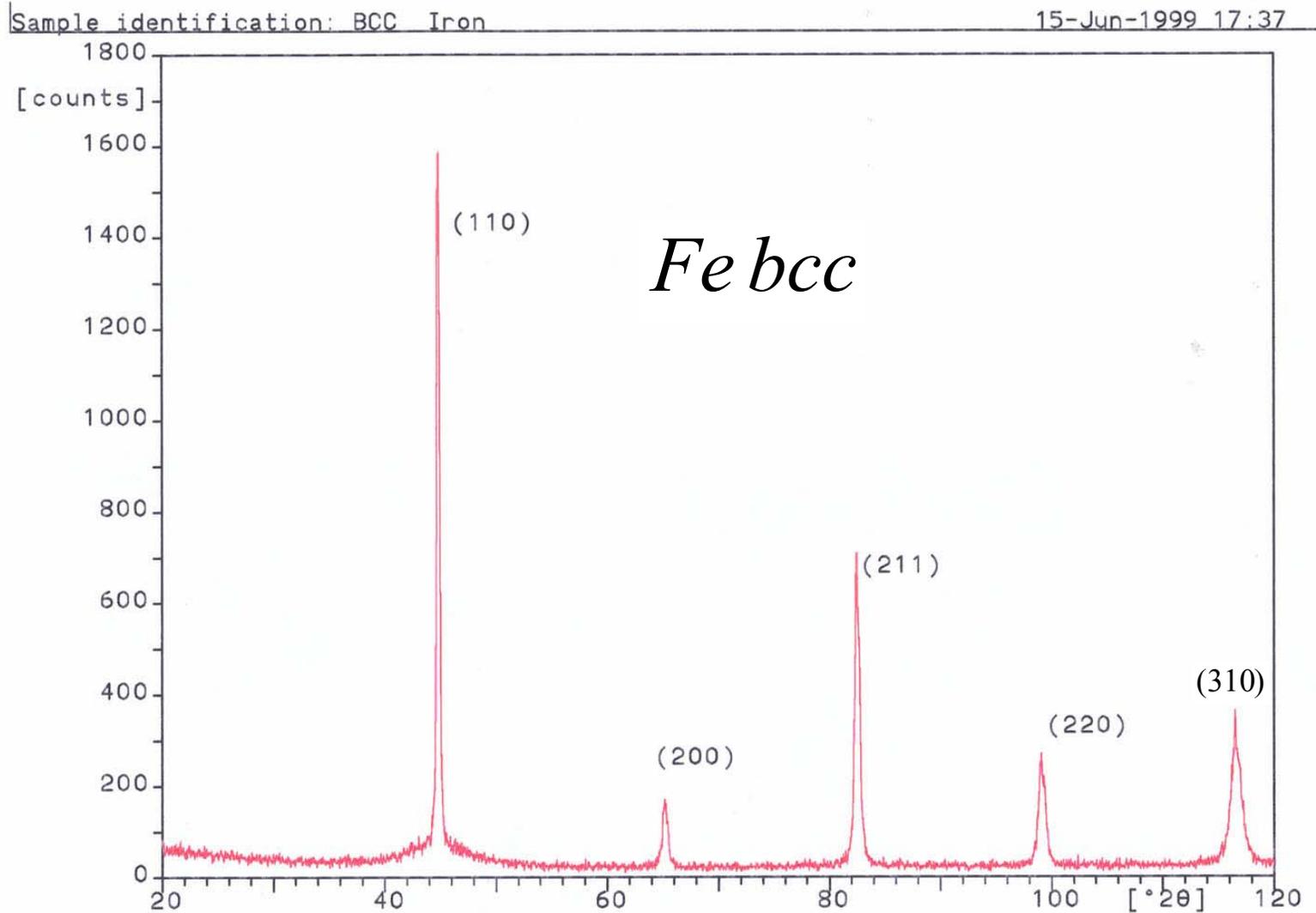
$$|f_A - f_B|^2$$

y para n par es proporcional a

$$|f_A + f_B|^2$$

Qué pasa si $f_A = f_B$?

Problema 5: análisis del difractograma del α -Fe (bcc) tomado con radiación de ánodo de Cu ($K\alpha$)



Cu $\lambda_{K_{\alpha 1}} = 1.54056 \text{ \AA}$, 66.6...% $\lambda_{K_{\alpha 2}} = 1.54439 \text{ \AA}$ 33.3...%

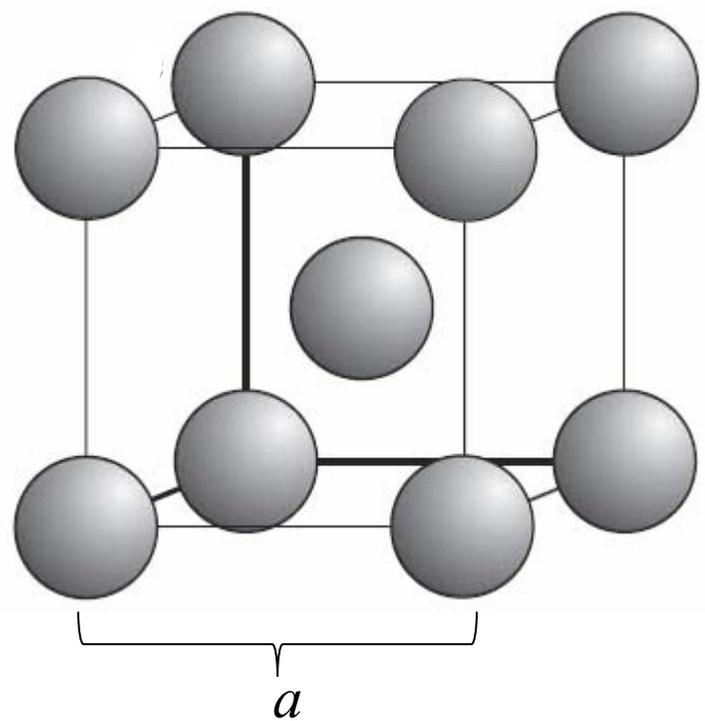
$$\langle \lambda_{K_{\alpha}} \rangle = 1.54184 \text{ \AA}$$

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

2θ(°)	d(Å)	hkl
45	2.01	110
66	1.42	200
82.5	1.17	211
99	0.99	220
116.5	0.91	310

$$a = d \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

hkl	a(Å)
110	2.84
200	2.84
211	2.87
220	2.80
310	2.88



Materia Condensada. Sistemas Complejos

Clase 4

Dispersión

Amplitud de dispersión

La amplitud de dispersión de una onda electromagnética es proporcional a la densidad electrónica $n(\mathbf{r})$ en el cristal. La amplitud de dispersión en la dirección \mathbf{k}' es proporcional a la integral de volumen de $n(\vec{\mathbf{r}})$ y al factor de fase $e^{i(\vec{\mathbf{k}}-\vec{\mathbf{k}}')\cdot\vec{\mathbf{r}}}$

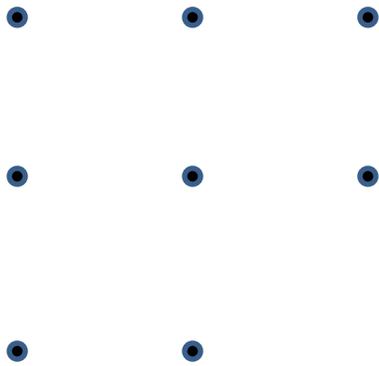
Definimos la amplitud de dispersión por

$$S = \int dV n(\vec{\mathbf{r}}) e^{-i(\vec{\mathbf{k}}-\vec{\mathbf{k}}')\cdot\vec{\mathbf{r}}} \quad (1)$$

Dispersión

Amplitud de dispersión

Caso extremo: electrones “concentrados” en los puntos de la red



$$n(\vec{r}) = n_0 \delta(\vec{r} - \vec{t}_m)$$

Función δ de Dirac

$$S = n_0 \int dV \delta(\vec{r} - \vec{t}_m) e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}}; \forall m \text{ entero}$$

$$S = n_0 \sum_m e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{t}_m} = \begin{cases} Nn_0 & \text{si } \vec{k} - \vec{k}' = \vec{K} \\ 0 & \text{si } \vec{k} - \vec{k}' \neq \vec{K} \end{cases}$$

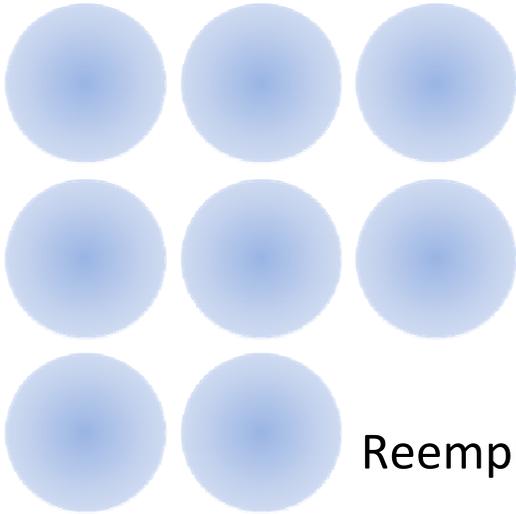
Condición de Laue

N: número de celdas en el cristal

Dispersión

Amplitud de dispersión

Caso general: electrones “distribuidos” periódicamente en la red



$$S = \int dV n(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \quad (1)$$

Reemplazando $n(\vec{r})$ por su desarrollo de Fourier

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} n_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \quad \longrightarrow \quad S = \sum_{\vec{K}} \int dV n_{\vec{K}} e^{i(\vec{K}-\Delta\vec{k})\cdot\vec{r}}$$

Dispersión

Amplitud de dispersión

$$S = \sum_{\vec{K}} \int dV n_{\vec{K}} e^{i(\vec{K} - \Delta\vec{k}) \cdot \vec{r}}$$

sólo hay dispersión significativa cuando $\Delta\vec{k}$ es también un vector de la red recíproca (condición de Laue en $\vec{r} = \vec{t}_m$). En tal caso:

$$S_{\vec{K}} = \int dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} = N \int_{\text{celda}} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} = NF_{\vec{K}}$$

N : número de celdas en el cristal

$F_{\vec{K}}$: amplitud de dispersión por celda \leftrightarrow Factor de Estructura.

Dispersión

Amplitud de dispersión

$$F_{\vec{K}} = \int_{\text{celda}} dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} \quad \text{Factor de Estructura}$$

Es útil escribir $n(\mathbf{r})$ como superposición de contribuciones n_j de cada uno de los átomos de la base (átomos contenidos en la celda unidad).

$$n(\vec{r}) = \sum_j n_j(\vec{r} - \vec{r}_j)$$



$$F_{\vec{K}} = \sum_j \int_{\text{celda}} dV n_j(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} \quad \text{La suma va sobre los átomos de la celda}$$

Dispersión

Amplitud de dispersión

$$F_{\vec{K}} = \sum_j \int_{\text{celda}} dV n_j(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}} = \sum_j e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}_j} \int_{\text{celda}} dV n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\rho}} \quad \vec{\rho} = \vec{r} - \vec{r}_j$$

Definimos el factor de forma atómica

$$f_j = \int_{\text{celda}} dV n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\rho}} \quad \text{Propiedad del átomo } j$$



$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j}$$

Factor de Estructura

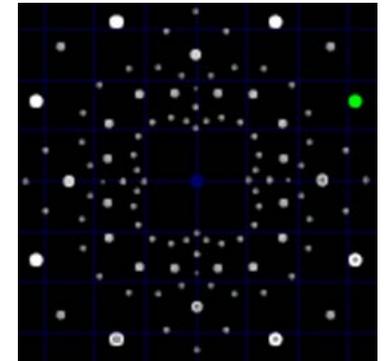
Dispersión

Factor de estructura - Resumen

La condición de interferencia constructiva se verifica en el punto (hkl) de la red recíproca para la familia de planos $\{hkl\}$ de la red directa.

$$e^{i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{t}_m} = 1$$

La proyección de la red recíproca sobre un plano produce un conjunto de puntos de difracción hkl . (Observación en un difractómetro de Laue)



La intensidad de un punto de difracción es proporcional al “factor de estructura”:

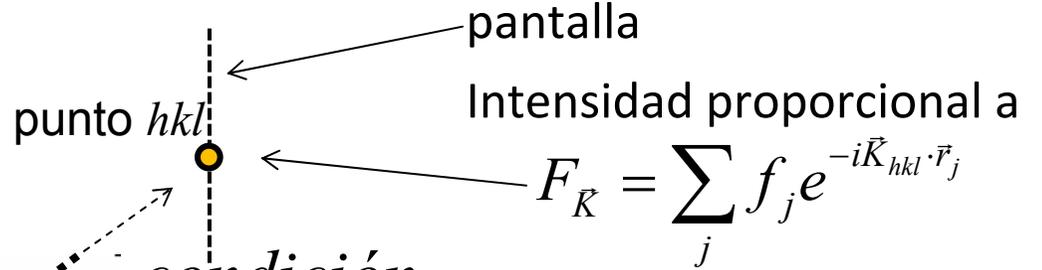
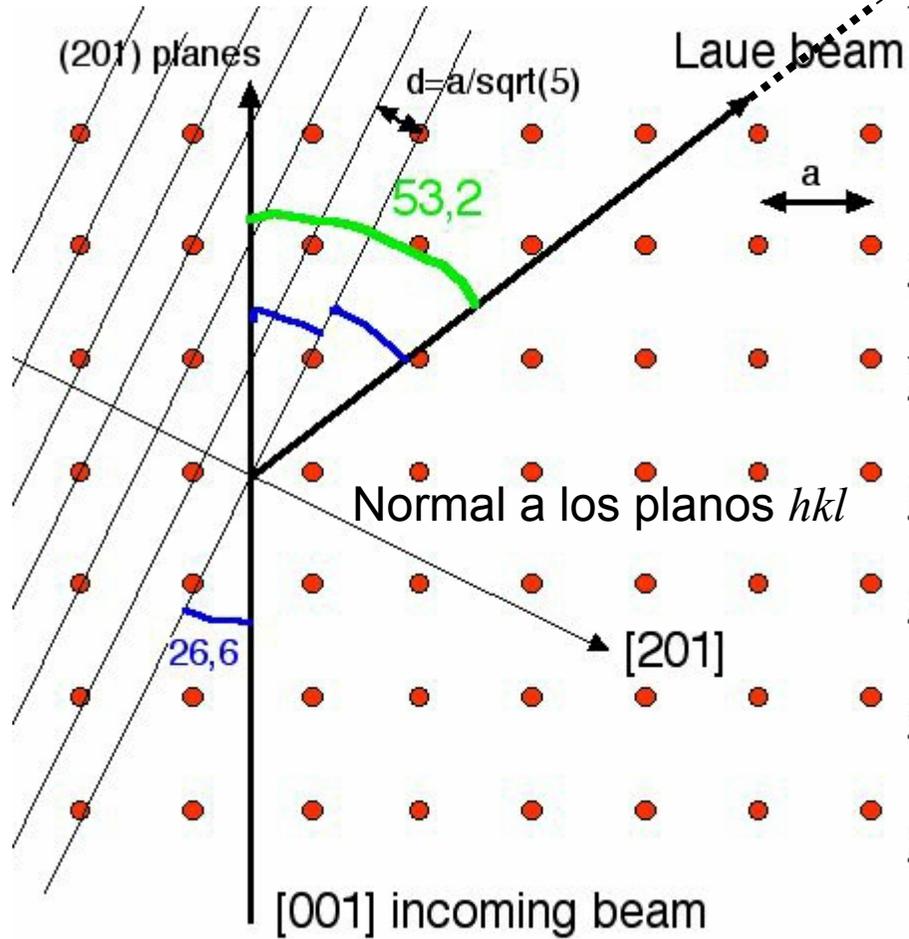
$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j}$$

j es un índice que recorre todos los átomos de la base. f_j es el factor de forma atómica de cada átomo de la base. Es proporcional al número de electrones Z del átomo. \vec{r}_j es la posición de cada átomo de la base respecto del punto de red correspondiente.

Dispersión - Red recíproca

$$hkl = 201$$

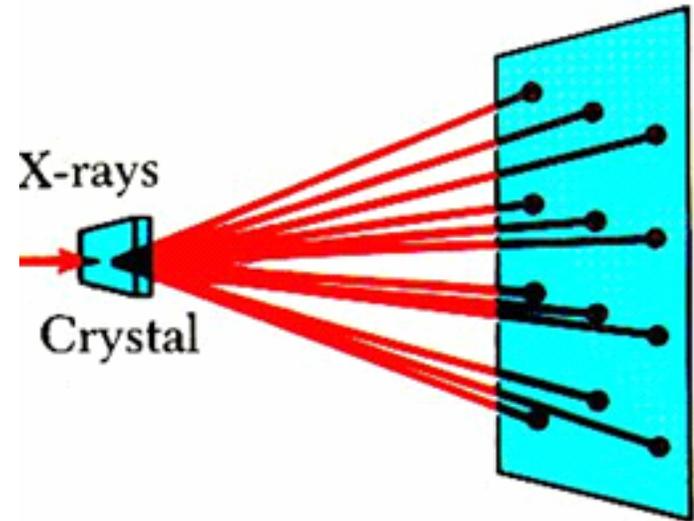
$$d = a / \sqrt{5}$$



condición

$$e^{i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_m} = 1$$

$$hkl = 201$$

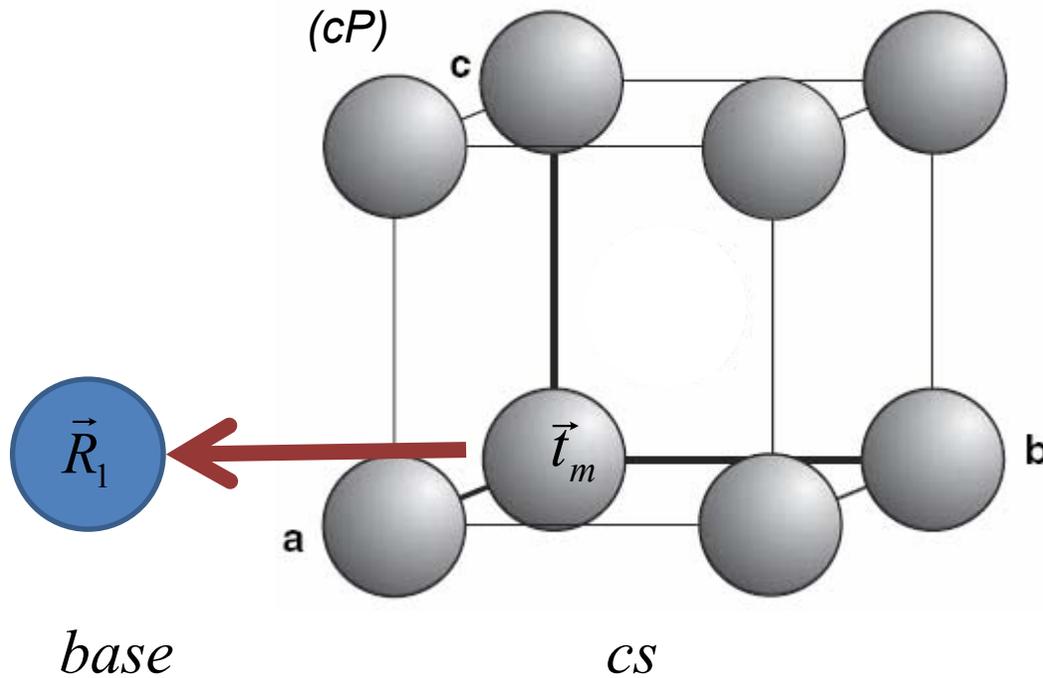


Red recíproca

Ejemplo: factor de estructura para la red *cs*

estructura = red + base

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



$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j}$$

$$F_{\vec{K}} = f$$

Red recíproca

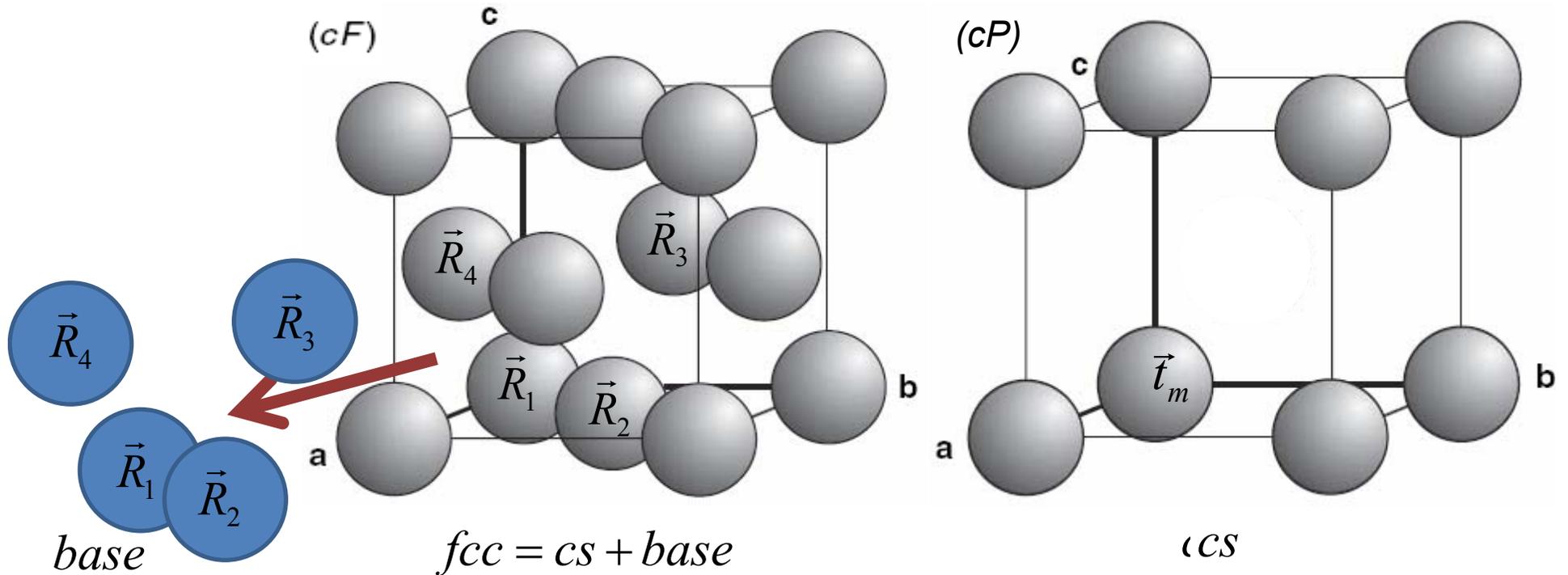
Ejemplo: factor de estructura para la red fcc

$$fcc = cs + base$$

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

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

$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j}$$



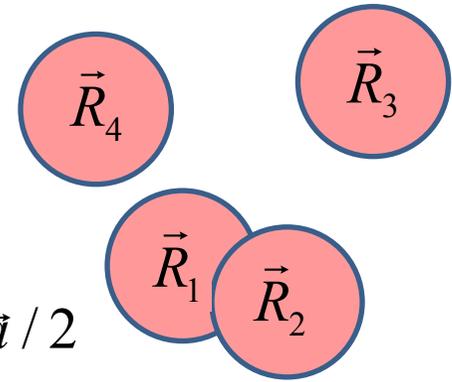
Red recíproca

Ejemplo: factor de estructura para la red fcc

base

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

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



$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j} = f \left(1 + \sum_{j=2}^4 e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j} \right)$$

$$\vec{a} = a\hat{x}$$

$$\vec{b} = a\hat{y}$$

$$\vec{c} = a\hat{z}$$

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

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{x} \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{y} \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

$$\vec{r}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \quad \vec{r}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{r}_4 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})$$

$$\vec{K}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$$

Red recíproca

Ejemplo: factor de estructura para la red fcc

$$\vec{r}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \quad \vec{r}_3 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{r}_4 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}) \quad \vec{K}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$$

$$\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_2 = \pi(h + k)$$

$$\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_3 = \pi(k + l) \quad \longrightarrow \quad F_{\vec{K}} = f(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)})$$

$$\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_4 = \pi(h + l)$$

Si todos los índices son pares o todos los índices son impares $F_{\vec{K}} = 4f$

Si hay índices pares e impares $F_{\vec{K}} = 0$

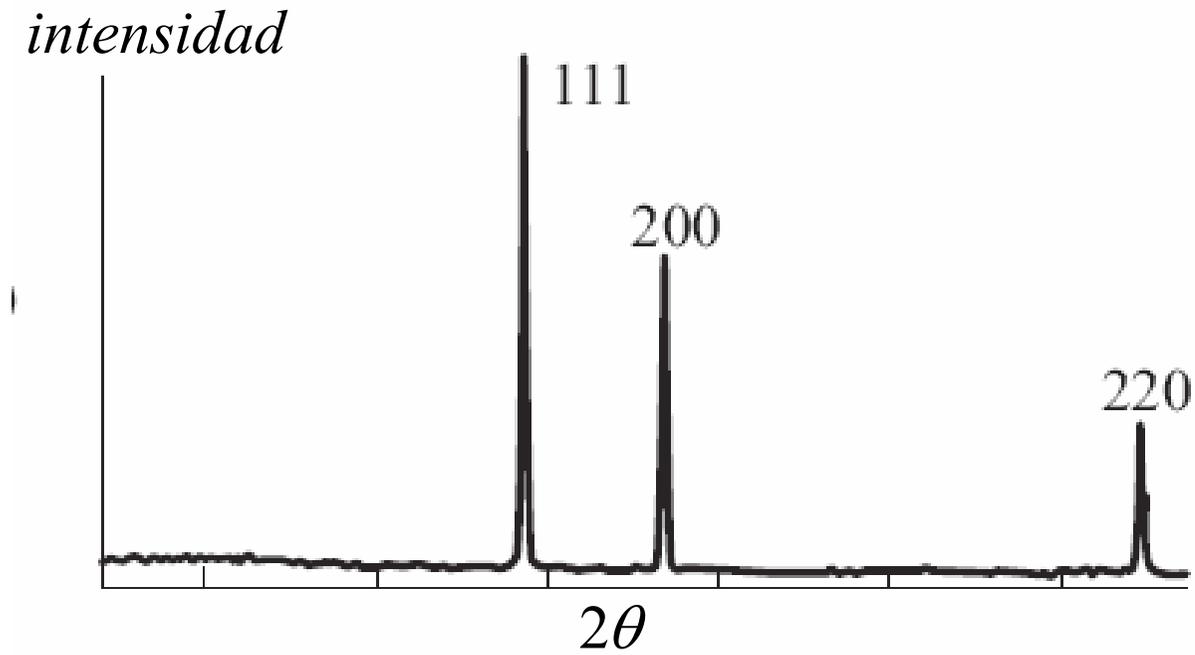
Es decir que sobreviven sólo los puntos de difracción correspondientes a

$h, k, l = \text{pares}$ o $h, k, l = \text{impares}$.

[Difracción de Laue](#)

Red recíproca

Difracción de una estructura fcc



Red recíproca

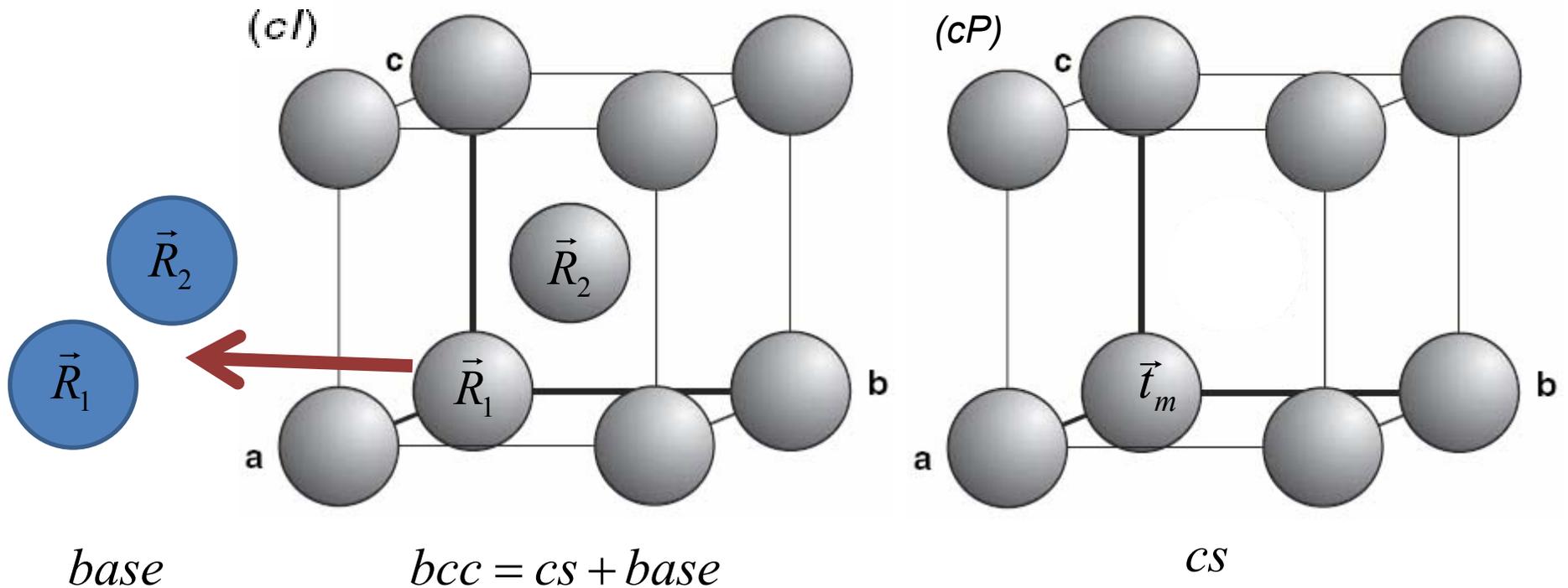
Ejemplo: factor de estructura para la red bcc

$$bcc = cs + base$$

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

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

$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j}$$



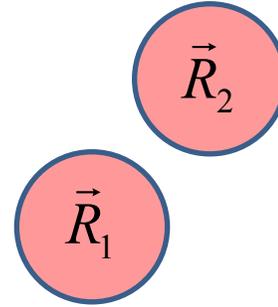
Red recíproca

Ejemplo: factor de estructura para la red bcc

base

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

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



$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j} = f \left(e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_1} + e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_2} \right) = f \left(1 + e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_2} \right)$$

$$\vec{a} = a\hat{x}$$

$$\vec{b} = a\hat{y}$$

$$\vec{c} = a\hat{z}$$

$$\vec{K}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad \vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{x} \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{y} \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

$$\vec{r}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{K}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$$

$$\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_2 = \pi(h+k+l) \quad \longrightarrow \quad F_{\vec{K}} = f \left(1 + e^{-i\pi(h+k+l)} \right)$$

Red recíproca

Ejemplo: factor de estructura para la red bcc

$$\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_2 = \pi(h+k+l) \quad \longrightarrow \quad F_{\vec{K}} = f(1 + e^{-i\pi(h+k+l)})$$

Para sumas de índices impares

$$\pi(h+k+l) = (2n-1)\pi; \quad n = 1, 2, \dots \quad \Rightarrow \quad e^{-i\pi(h+k+l)} = -1$$

$$\longrightarrow \quad F_{\vec{K}_{h+k+l=\text{impar}}} = f(1-1) = 0$$

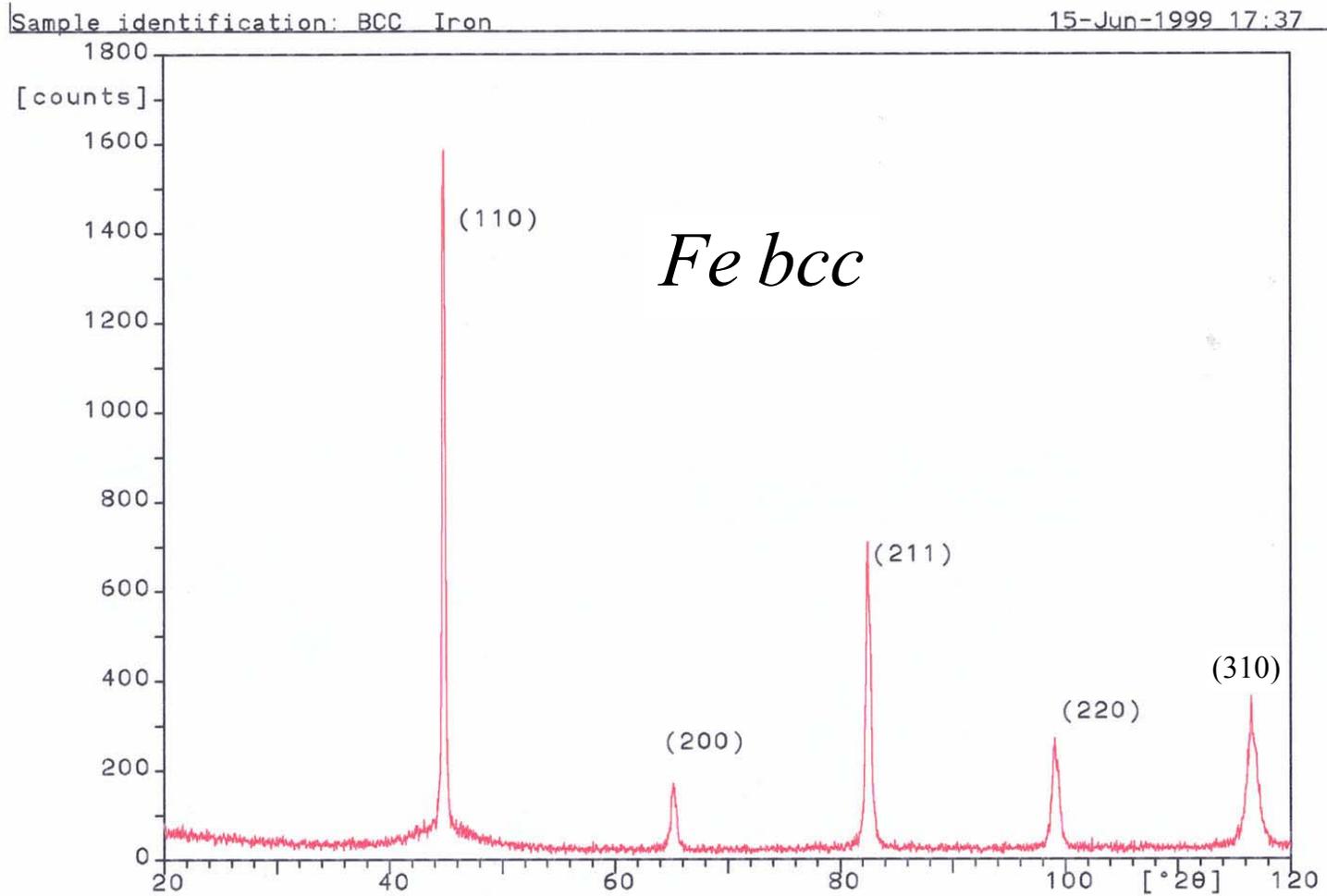
Es decir que sobreviven sólo los puntos de difracción correspondientes a
 $h+k+l = \text{par}$. En ese caso

$$F_{\vec{K}_{h+k+l=\text{par}}} = f(1+1) = 2f$$

[Difracción de Laue](#)

Red recíproca

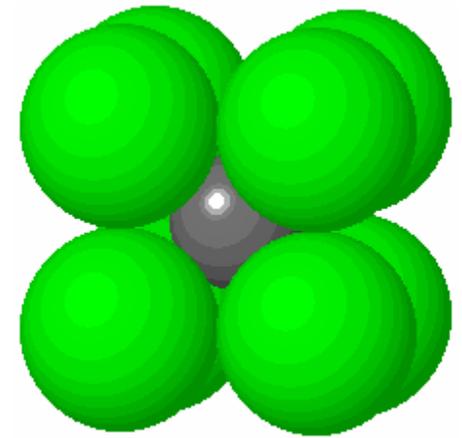
Difracción de una estructura bcc



SCH2_RD

Red recíproca

Ejemplo: factor de estructura para la red $CsCl$

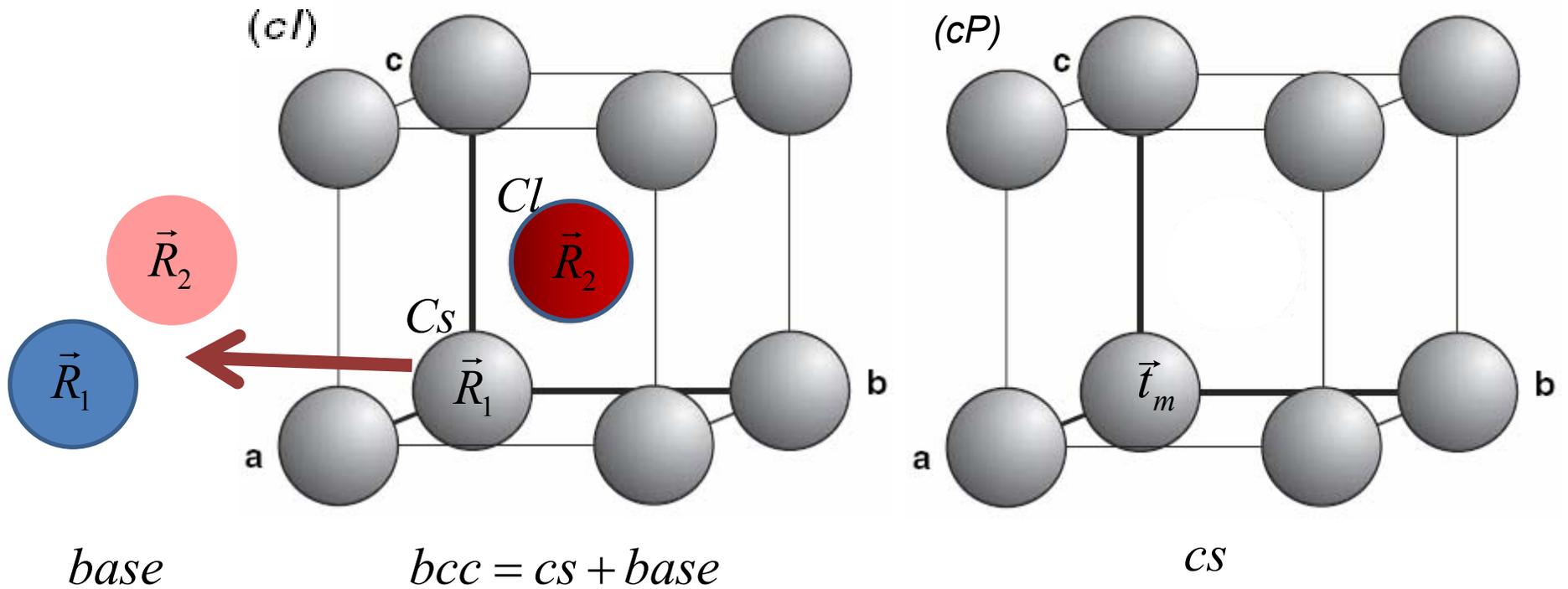


$$CsCl = cs + base$$

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

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

$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j}$$



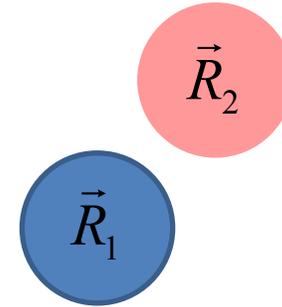
Red recíproca

Ejemplo: factor de estructura para la red $CsCl$

base

$$\vec{r}_1 = (0,0,0); Cs$$

$$\vec{r}_2 = \vec{a}/2 + \vec{b}/2 + \vec{c}/2; Cl$$



$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j} = f_{Cs} e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_1} + f_{Cl} e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_2} = f_{Cs} + f_{Cl} e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_2}$$

$$F_{\vec{K}} = f_{Cs} + f_{Cl} e^{-i\pi(h+k+l)} \quad f_j = \int_{\text{celda}} dV n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{K} \cdot \vec{\rho}}$$

$$F_{\vec{K}_{h+k+l=\text{impar}}} = f_{Cs} - f_{Cl} \neq 0 \quad \text{Las reflexiones } h+k+l = \textit{impar} \text{ est\u00e1n permitidas}$$



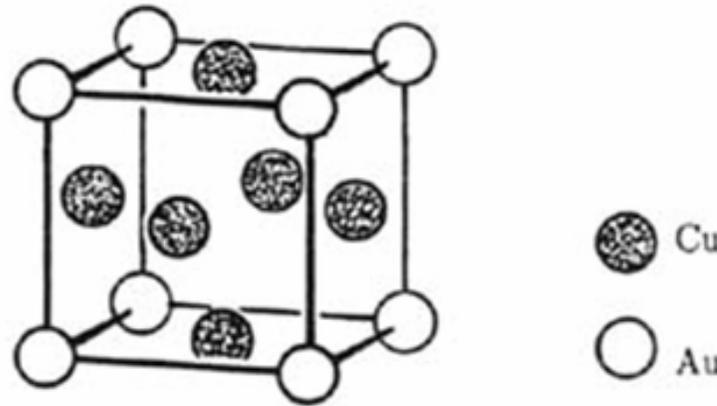
$$F_{\vec{K}_{h+k+l=\text{par}}} = f_{Cs} + f_{Cl}$$



$$F_{\vec{K}_{h+k+l=\text{par}}} > F_{\vec{K}_{h+k+l=\text{impar}}}$$

$$F_{\vec{K}}^{fcc} = f \left(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)} \right)$$

Si en la estructura *fcc* distribuimos ordenadamente dos elementos, por ejemplo *Au* y *Cu*, como en $AuCu_3$



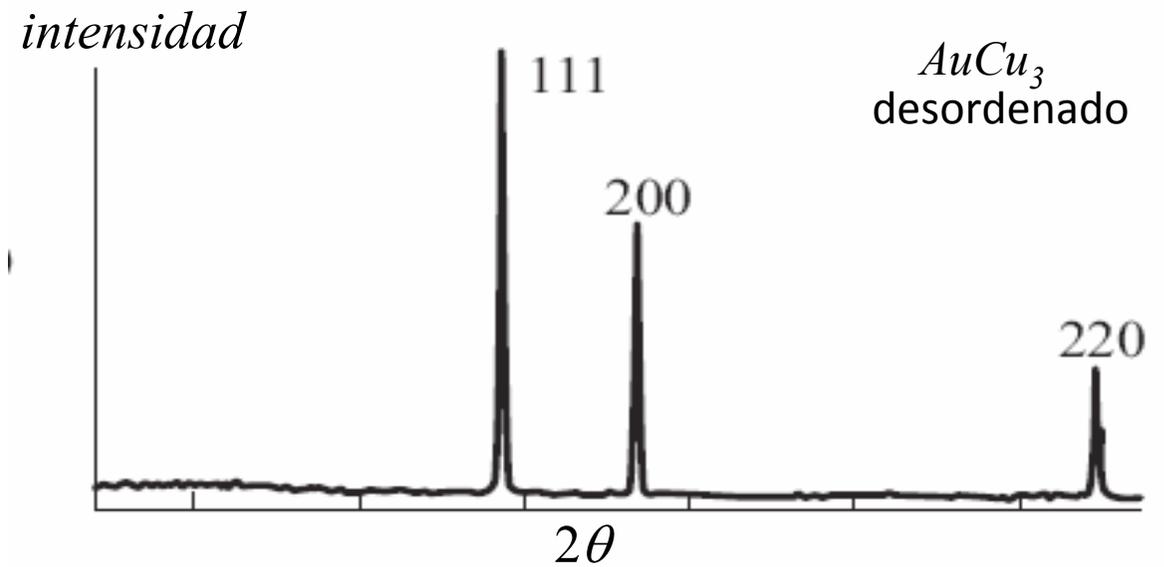
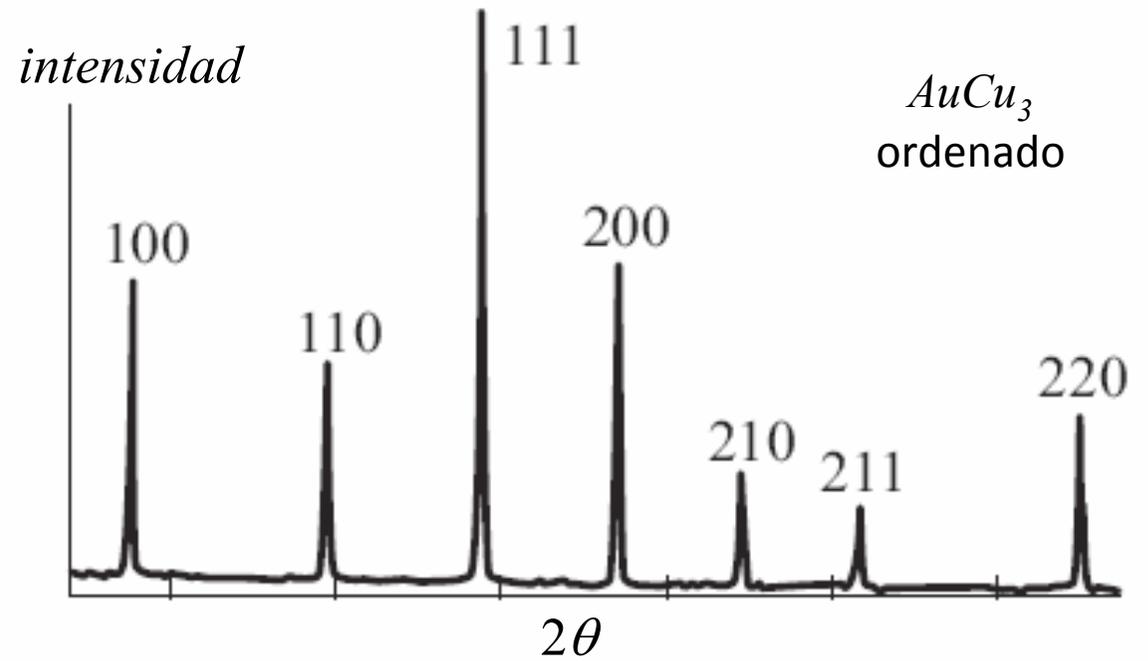
$$F_{\vec{K}} = f_{Au} + f_{Cu} \left(e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)} \right)$$

$$F_{\vec{K}_{hkl=pares}} = F_{\vec{K}_{hkl=impares}} = f_{Au} + 3f_{Cu}$$

$$F_{\vec{K}_{hkl=pares \ e \ impares}} = f_{Au} - f_{Cu}$$

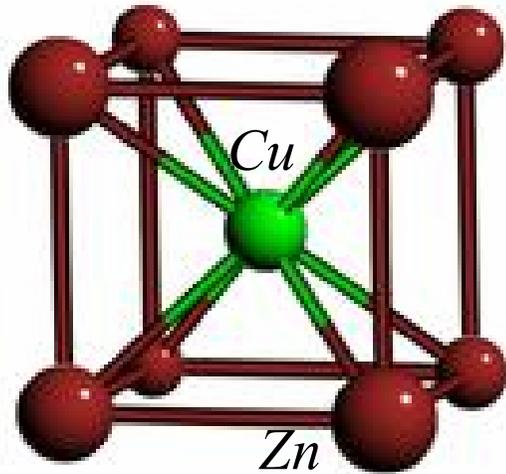
Red recíproca

Patrones de difracción

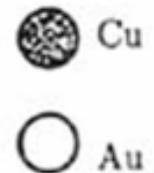
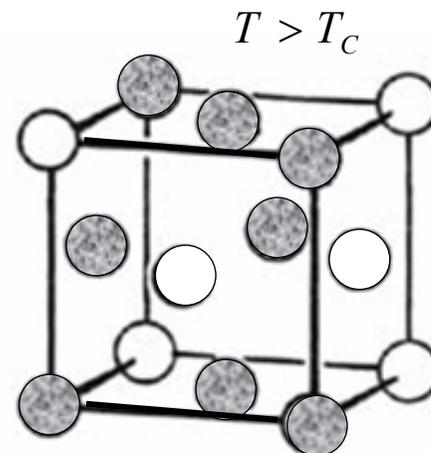
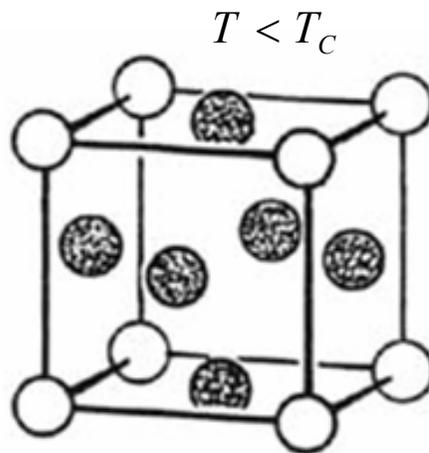
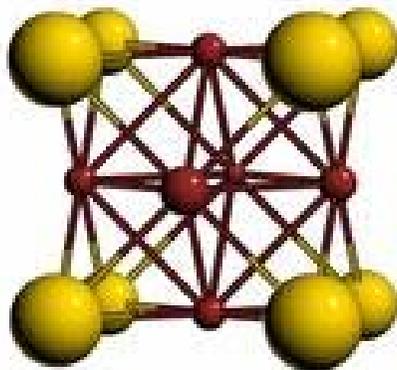
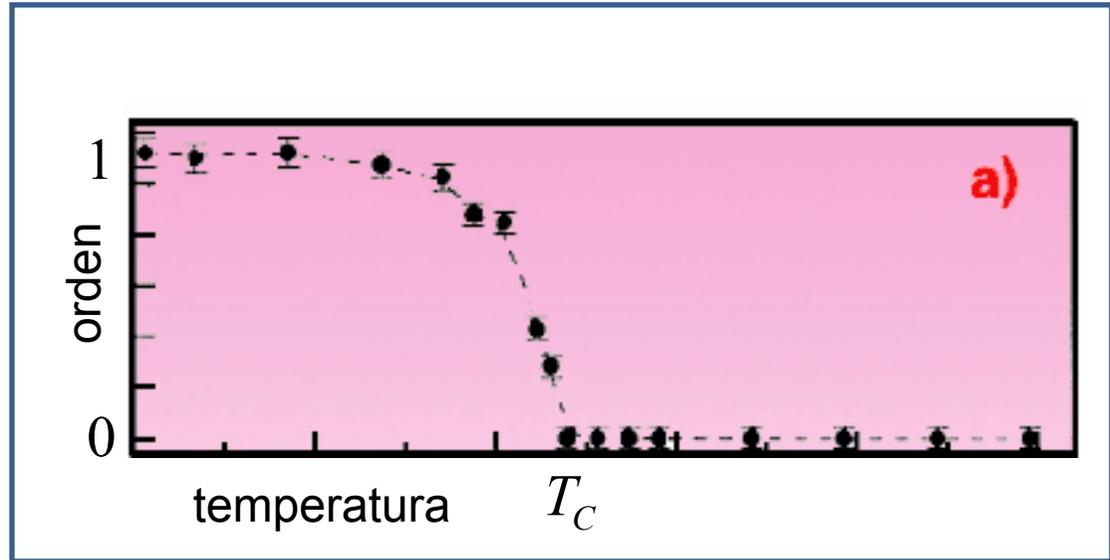


Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas



β -CuZn tiene una temperatura crítica $T_c = 743$ K



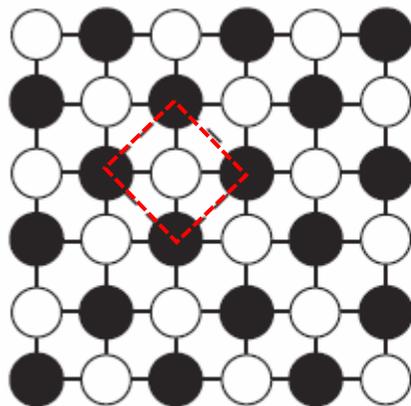
La T_c del Cu₃Au es 665 K

Más allá del estado cristallino

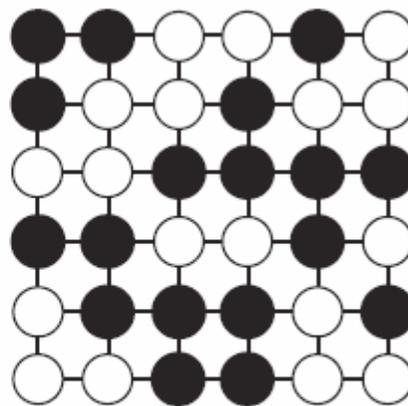
Aleaciones ordenadas y desordenadas

Ordenada: átomos
A en a y B en b

$T = 0 \text{ K}$



(a)



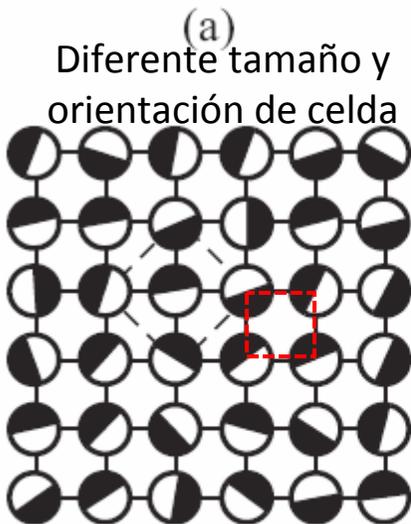
(b)

Desordenada: A y B
distribuidos
aleatoriamente

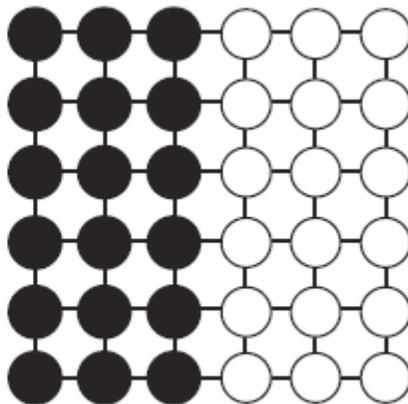
Destrucción de la
simetría
traslacional

Descripción
estadística del
estado
desordenado

Recuperación de la
simetría
traslacional



(c)



(d)

Otra clase de
orden: segregación
de A y B

Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas

$$\text{Aleación } A_{C_A} B_{C_B}; C_A \geq C_B; C_A + C_B = 1$$

Definimos las probabilidades de ocupación correcta e incorrecta de las subredes a y b

$r_a \rightarrow$ *probabilidad de A en a* Ocupación “correcta” de a

$\omega_a = 1 - r_a \rightarrow$ *probabilidad de B en a* Ocupación “incorrecta” de a

$r_b \rightarrow$ *probabilidad de B en b* Ocupación “correcta” de b

$\omega_b = 1 - r_b \rightarrow$ *probabilidad de A en b* Ocupación “incorrecta” de b

y definimos el parámetro de orden

$$\eta = \frac{r_a - C_a}{1 - C_a} \quad \text{ó} \quad \eta = \frac{r_b - C_b}{1 - C_a}$$

Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas

$$\text{Aleación } A_{C_A} B_{C_B}; C_A \geq C_B; C_A + C_B = 1$$

1. Aleación completamente ordenada

Los sitios a están ocupados exclusivamente por átomos A

$$r_a = 1 \quad \omega_a = 0$$

*0.5N de los $C_A N$ átomos A
están en los 0.5N sitios a*

El resto de los átomos A están en sitios b

$$\eta = \frac{r_a - C_a}{1 - C_a} = \frac{1 - C_a}{1 - C_a} = 1$$

*indica orden máximo para
la concentración dada*

Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas

Aleación $A_{C_A} B_{C_B}$; $C_A \geq C_B$; $C_A + C_B = 1$

Los átomos B no alcanzan para ocupar todos los sitios b

$$r_b = \frac{C_B N}{0.5N} = 2C_B \leq 1 \quad \omega_b = 1 - 2C_B = C_A - C_B$$

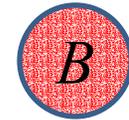
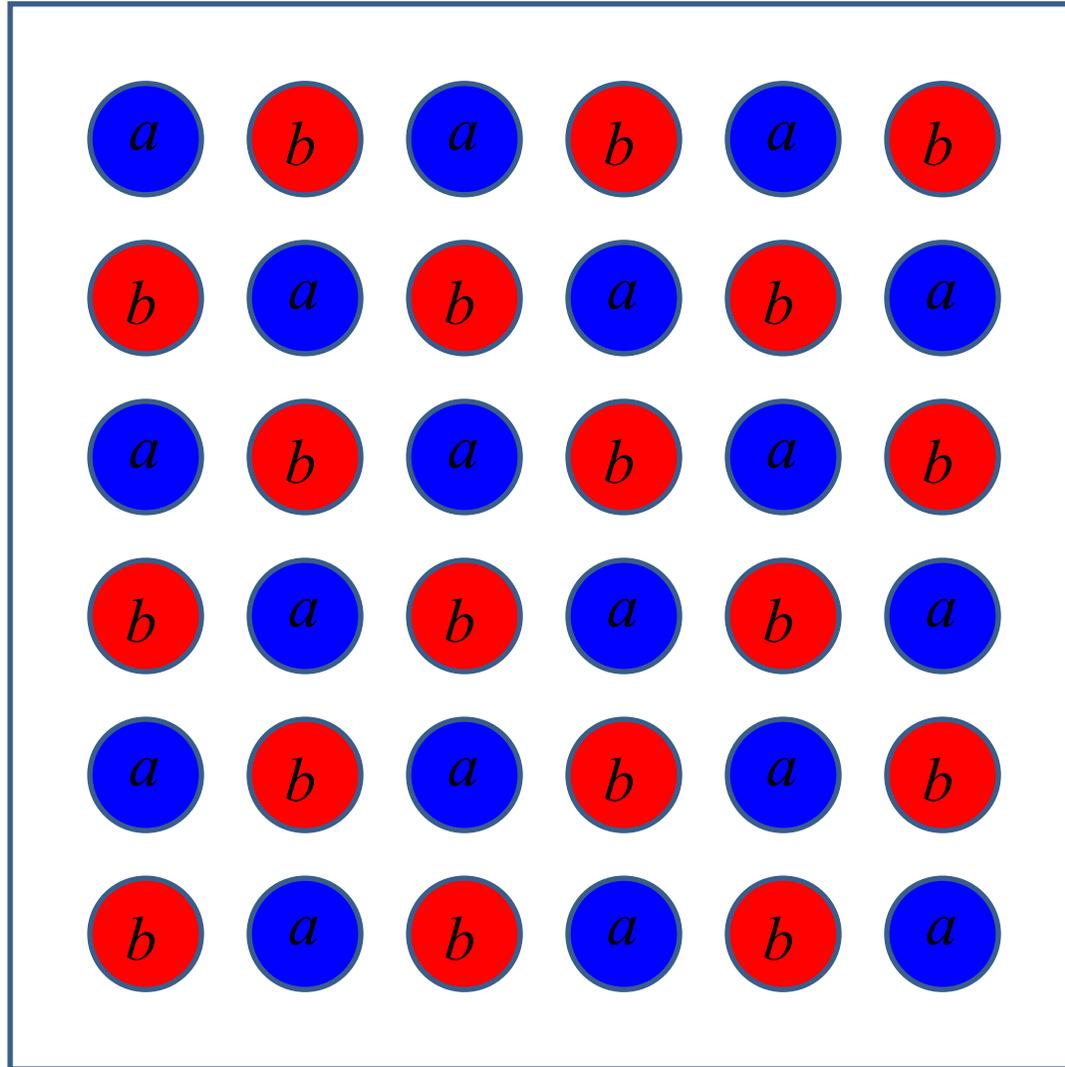
los $C_B N$ átomos B ocupan parte de los $0.5N$ sitios b

$$\eta = \frac{r_b - C_B}{1 - C_A} = \frac{2C_B - C_A}{1 - C_A} = \frac{1 - C_A}{1 - C_A} = 1$$

indica orden máximo para la concentración dada

Más allá del estado cristallino

Red de sitios a y b



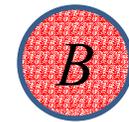
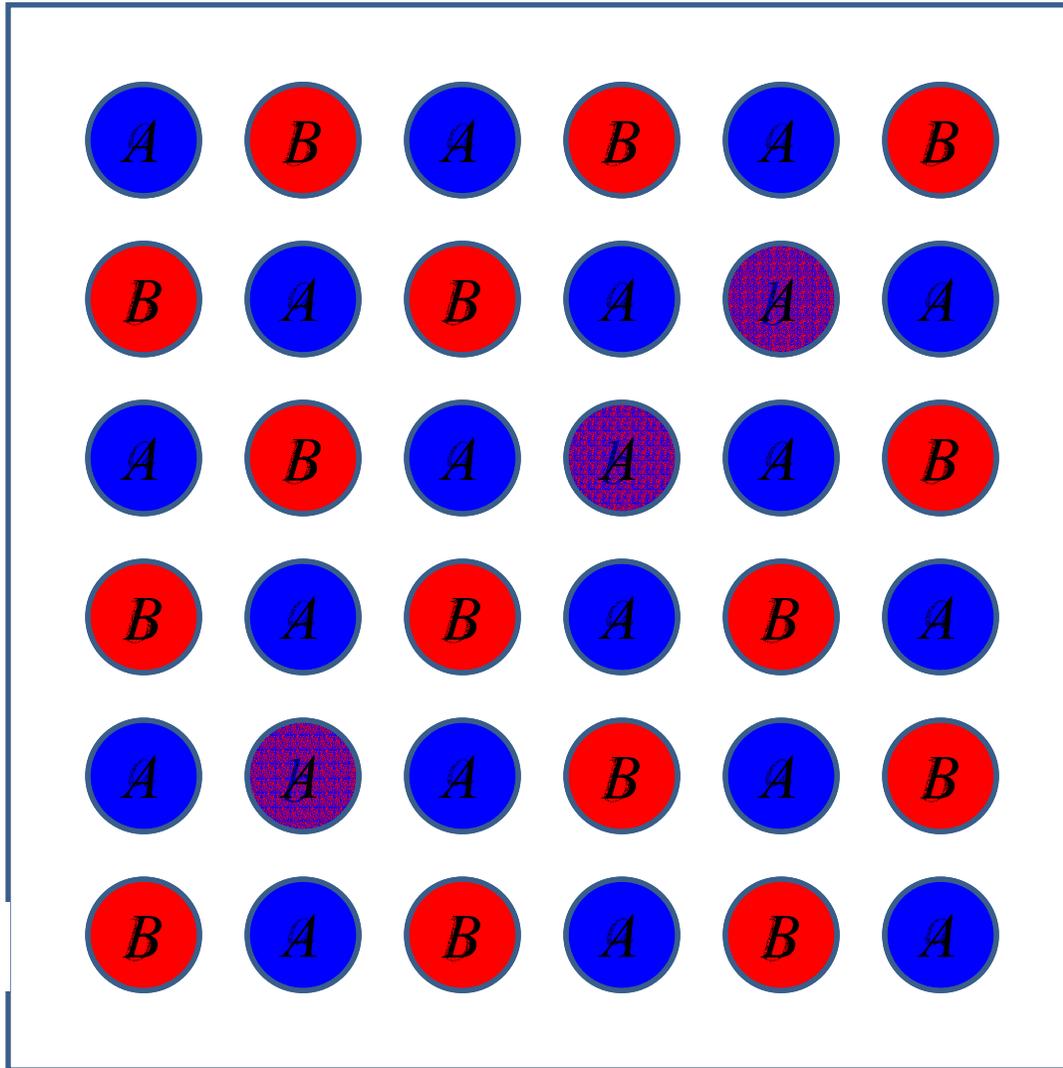
Más allá del estado cristallino

Ocupación ordenada de los sitios a y b por átomos A y B

$\frac{N_a}{2}$ átomos A

$N_A - \frac{N_a}{2}$
átomos A

N_B átomos B



21 átomos A

15 átomos B

$$C_A = 0.583$$

$$C_B = 0.417$$

Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas

$$\text{Aleación } A_{C_A} B_{C_B}; C_A \geq C_B; C_A + C_B = 1$$

2. Aleación completamente desordenada

Los sitios a están ocupados por átomos A y B proporcionalmente a C_A y C_B

$$r_a = C_A \quad \omega_a = C_B$$

El resto de los átomos A están en sitios b

$$\eta = \frac{r_a - C_a}{1 - C_a} = 0$$

*indica desorden máximo
para la concentración dada*

Idem para los sitios b

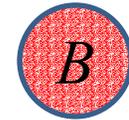
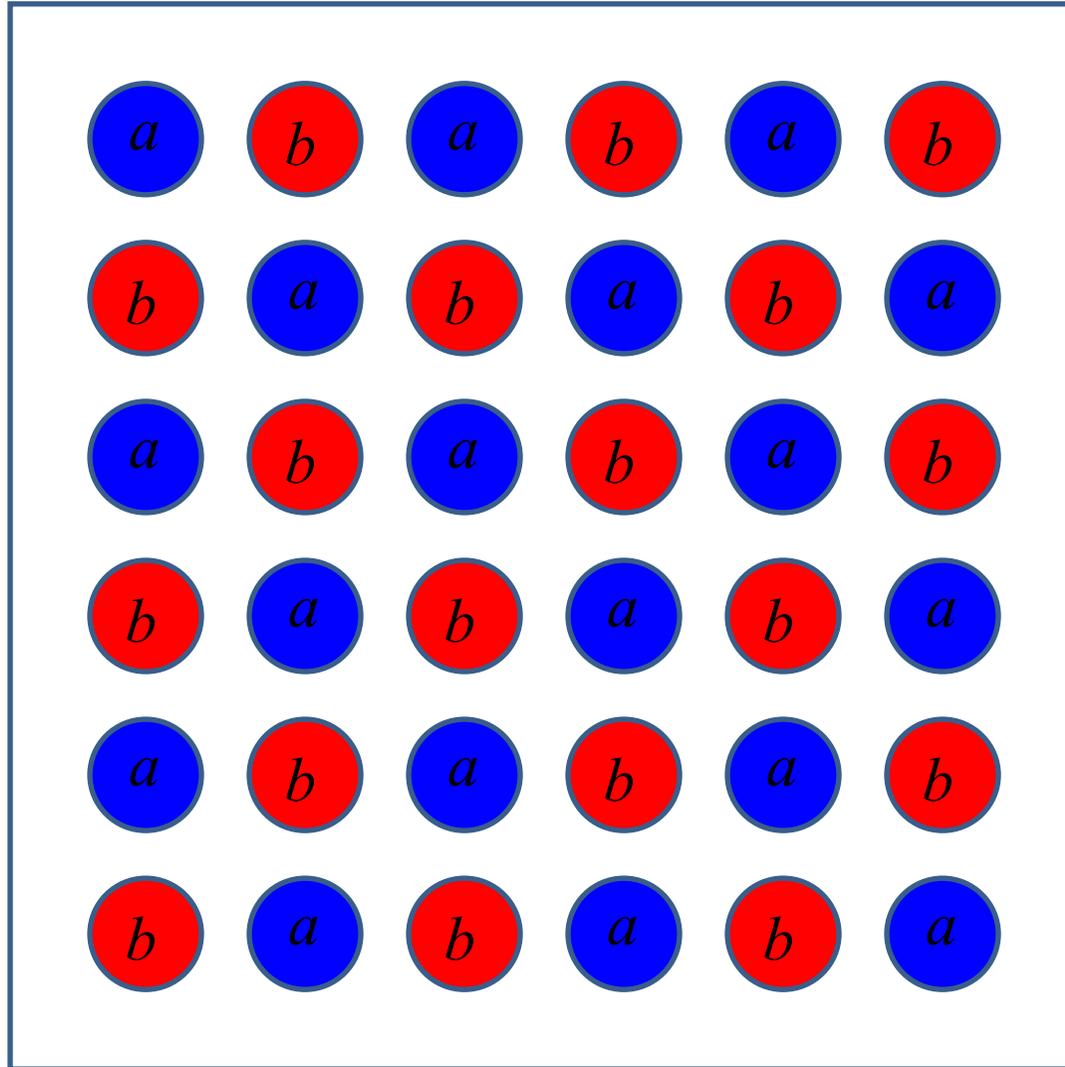
$$r_b = C_B \quad \omega_b = C_A$$

$$\eta = \frac{r_b - C_B}{1 - C_A} = 0$$

*indica desorden máximo
para la concentración dada*

Más allá del estado cristallino

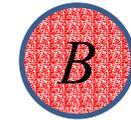
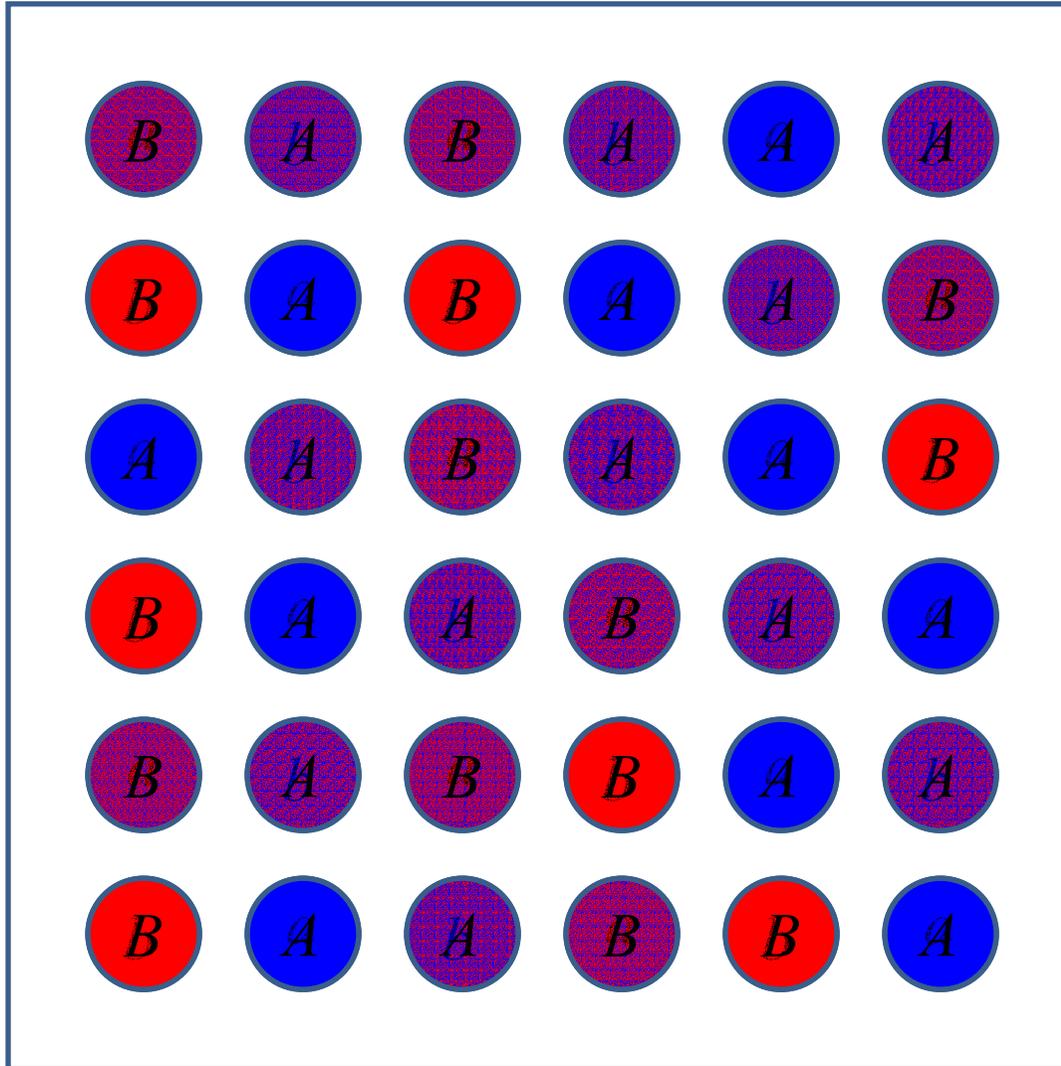
Red de sitios a y b



Más allá del estado cristallino

Ocupación desordenada de los sitios a y b por átomos A y B

N_A átomos A



21 átomos A

15 átomos B

$$C_A = 0.583$$

$$C_B = 0.417$$

N_B átomos B

Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas

$$\text{Aleación } A_{C_A} B_{C_B}; C_A \geq C_B; C_A + C_B = 1$$

$\eta \neq 0$ es la condición para la existencia de orden de largo alcance.

El factor de estructura para la difracción de Rx es

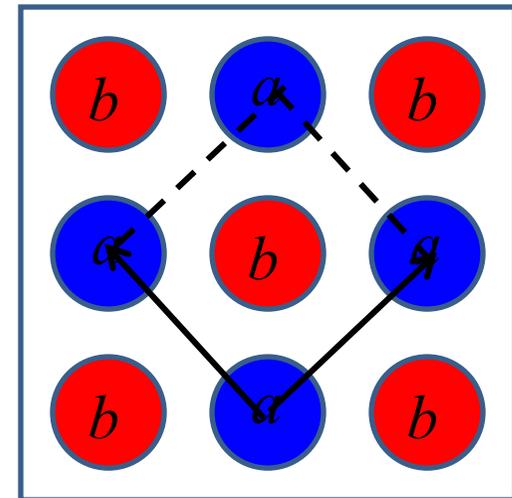
$$F_{\vec{K}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{K}_{hkl} \cdot \vec{r}_j}$$

$$F_{\vec{K}} = r_a f_A + \omega_a f_B + (r_b f_B + \omega_b f_A) e^{-i\pi(h+k)}$$

origen

átomo

central



Se puede escribir en función de η y C_A , **probarlo**

Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas

$$\text{Aleación } A_{C_A} B_{C_B}; C_A \geq C_B; C_A + C_B = 1$$

Si la aleación está desordenada

$$r_a = C_A \quad \omega_a = C_B \quad r_b = C_B \quad \omega_b = C_A$$

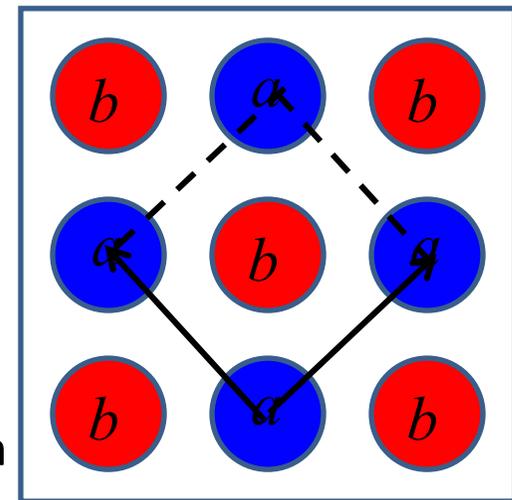
$$F_{\vec{K}} = r_a f_A + \omega_a f_B + (r_b f_B + \omega_b f_A) e^{-i\pi(h+k)}$$

$$F_{\vec{K}} = (C_A f_A + C_B f_B) (1 + e^{-i\pi(h+k)})$$

Equivalente a un sistema con un único elemento con factor de forma atómica:

$$\bar{f} = (C_A f_A + C_B f_B)$$

Las intensidades de difracción se extinguen si $h+k = \text{impar}$ aunque $f_A \neq f_B$



Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas

$$\text{Aleación } A_{C_A} B_{C_B}; C_A \geq C_B; C_A + C_B = 1$$

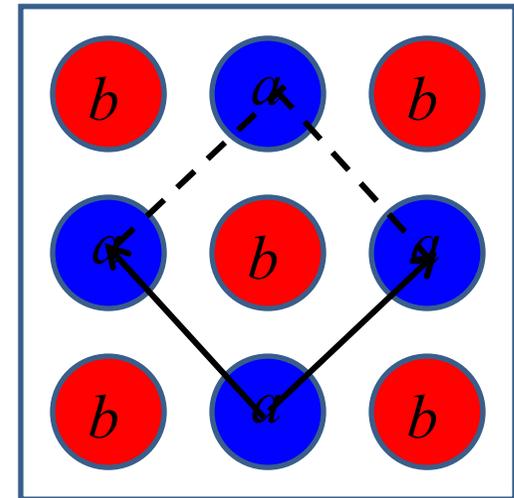
Si la aleación está ordenada y $C_A = C_B$

$$r_a = 1 \quad \omega_a = 0 \quad r_b = 1 \quad \omega_b = 0$$

$$F_{\vec{K}} = r_a f_A + \omega_a f_B + (r_b f_B + \omega_b f_A) e^{-i\pi(h+k)}$$

$$F_{\vec{K}} = f_A + f_B e^{-i\pi(h+k)}$$

En este caso, como $f_A \neq f_B$

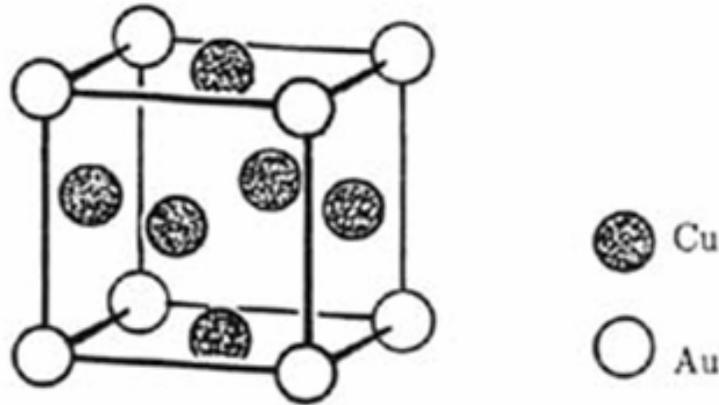


Las intensidades de difracción no se extinguen si $h+k = \text{impar}$

$$F_{\vec{K}(h+k=\text{impar})} = f_A - f_B \neq 0$$

Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas $AuCu_3$



Para este caso, si los átomos se distribuyen desordenadamente en la estructura *fcc*

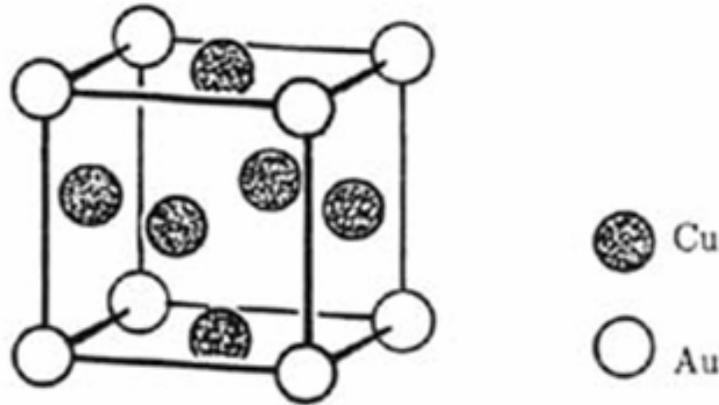
$$F_{\vec{K}}^{des} = \bar{f} \left(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)} \right)$$

$$\bar{f} = C_{Au} f_{Au} + C_{Cu} f_{Cu} = 0.33 f_{Au} + 0.67 f_{Cu}$$

$$F_{\vec{K}} = 0 \quad \text{for } hkl = \text{pares e impares}$$

Más allá del estado cristallino

Aleaciones ordenadas y desordenadas $AuCu_3$

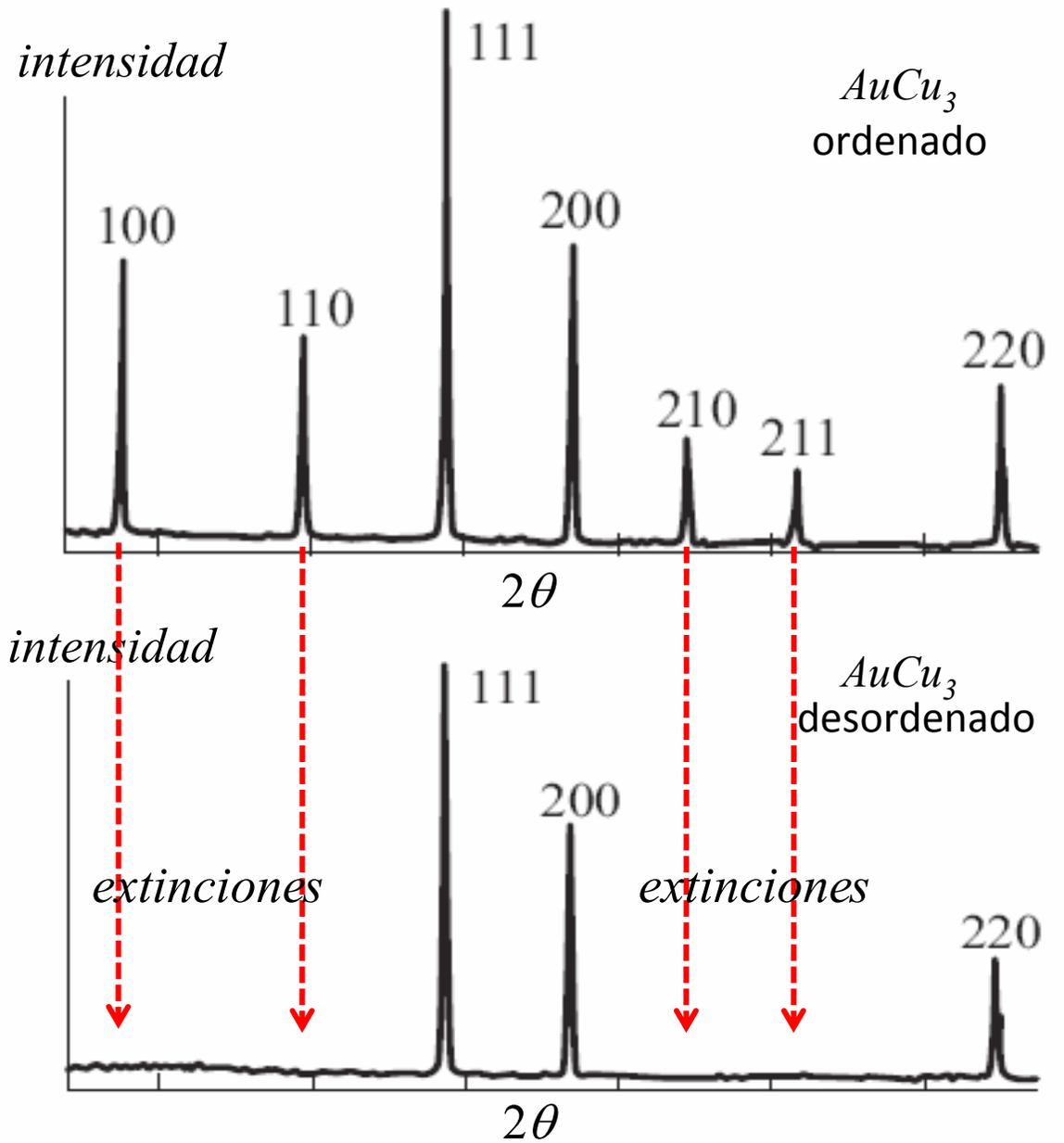


Si los átomos se distribuyen ordenadamente en la estructura *fcc*

$$F_{\vec{K}}^{ord} = f_{Au} + f_{Cu} \left(e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)} \right)$$

$$F_{\vec{K}_{hkl=\text{pares e impares}}} = f_{Au} - f_{Cu}$$

Patrones de difracción



“while flowers from plants are mostly fivefold, only snowflakes are sixfold.”

Peripheral Notes on Poetry by Han Scholars (circa 200 B. C., China)

“hexagonal symmetry of a snowflake is a manifestation of the internal periodic structure of closed-packed particles postulated as identical balls.”

On a Hexagonal Snowflake (J. Kepler, 1611)

“While pentagonal symmetry is frequent in the organic world, one does not find it among the most perfectly symmetrical creations of inorganic nature, among the crystals.”

(Hermann Weyl, 1952)