

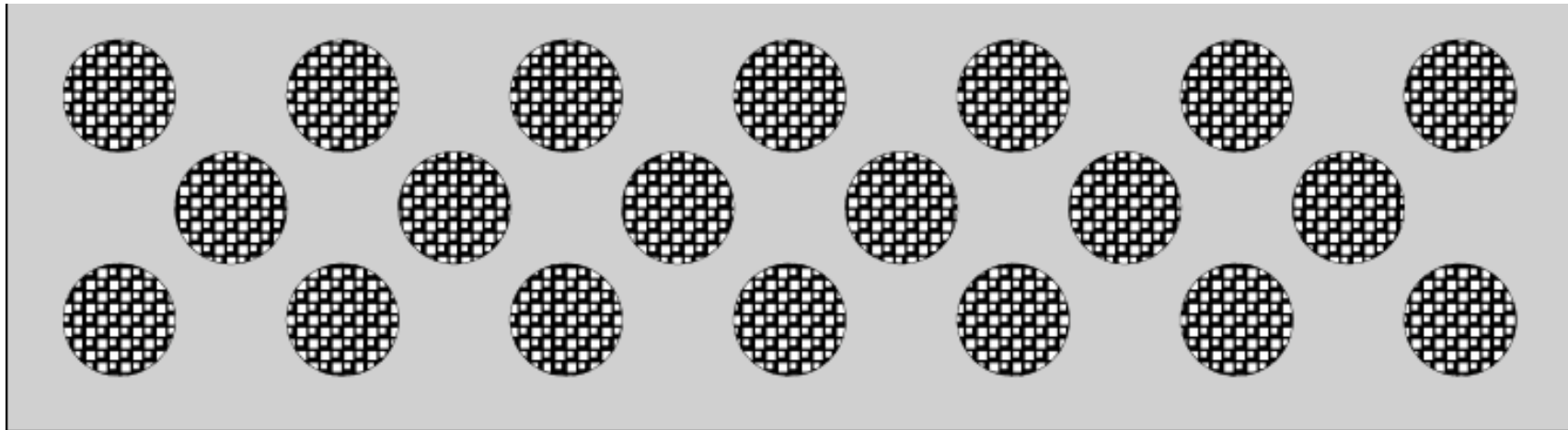
Estructura cristalina

Operaciones de simetría

Difracción de rayos-X (Laue, Bragg)

Objetivo

Los cristales están constituidos por la repetición infinita de estructuras idénticas (átomos, moléculas, conglomerados,..) en el espacio.



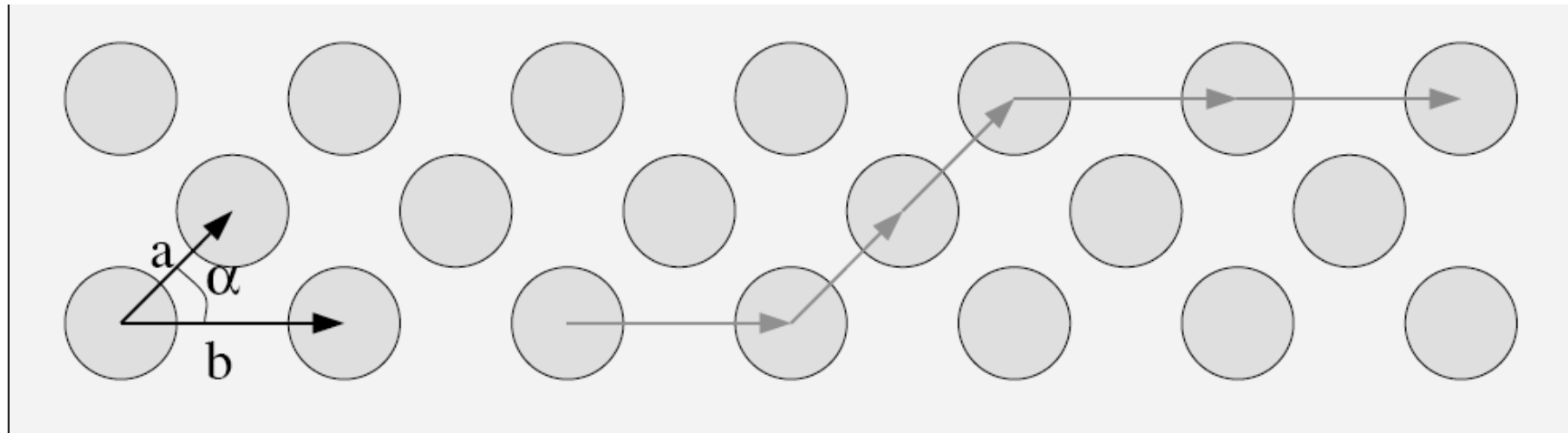
¿Cómo se comportan los electrones en presencia de la estructura periódica de los iones?

Contenido

- Definición de estructura cristalinas: redes de Bravais y operaciones de simetría.
- Tipos de redes de Bravais en dos dimensiones.
- Redes Bravais en tres dimensiones. Redes cúbicas: FCC, HCP, BCC.

¿Qué es una red?

Red más sencilla con un átomo por sitio (Li, Na, K, Rb, Cu, Ag, Au, Fe, Al):

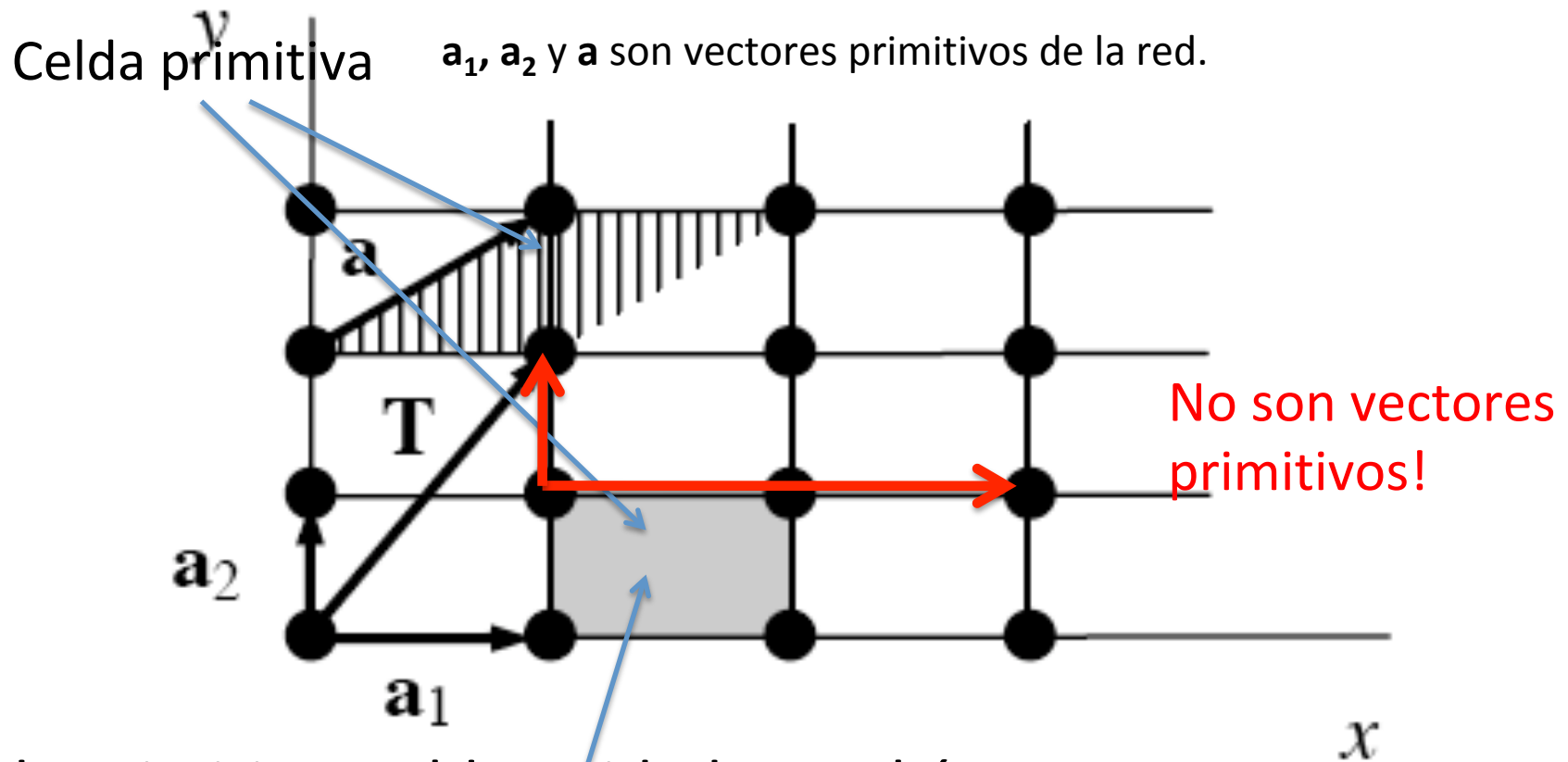


Podemos ir de un punto de la red a otro a través de la traslación dada por :

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}$$

La red permanece invariante ante una traslación dada por \mathbf{R} con n_1, n_2, n_3 dados por números enteros.

Vectores primitivos de la red y definición de celda unidad



$$S = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|.$$

Celda unidad Wigner-Seitz

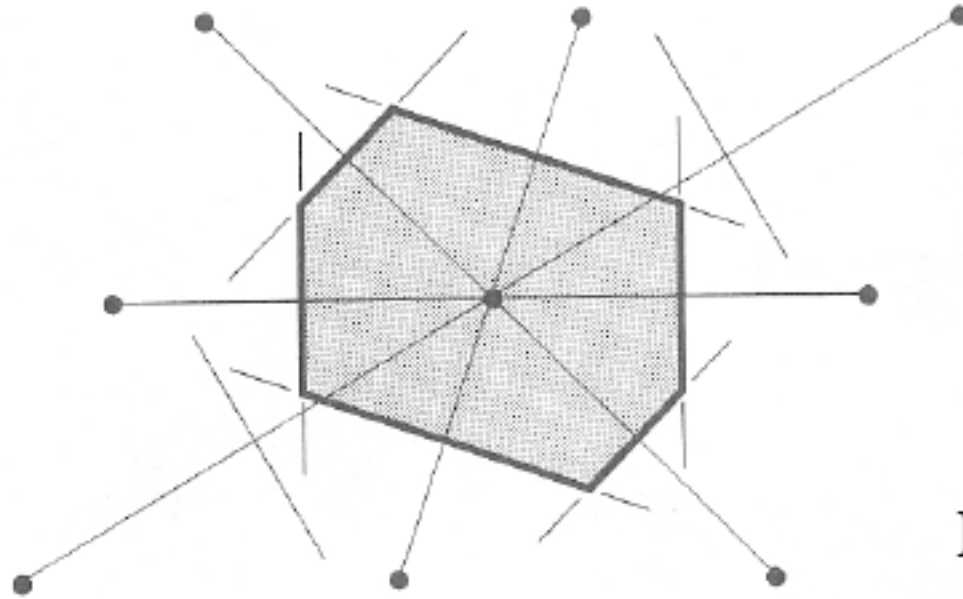


Fig.4

Podemos cubrir todo el espacio de la red infinita con la celda de Wigner-Seitz.

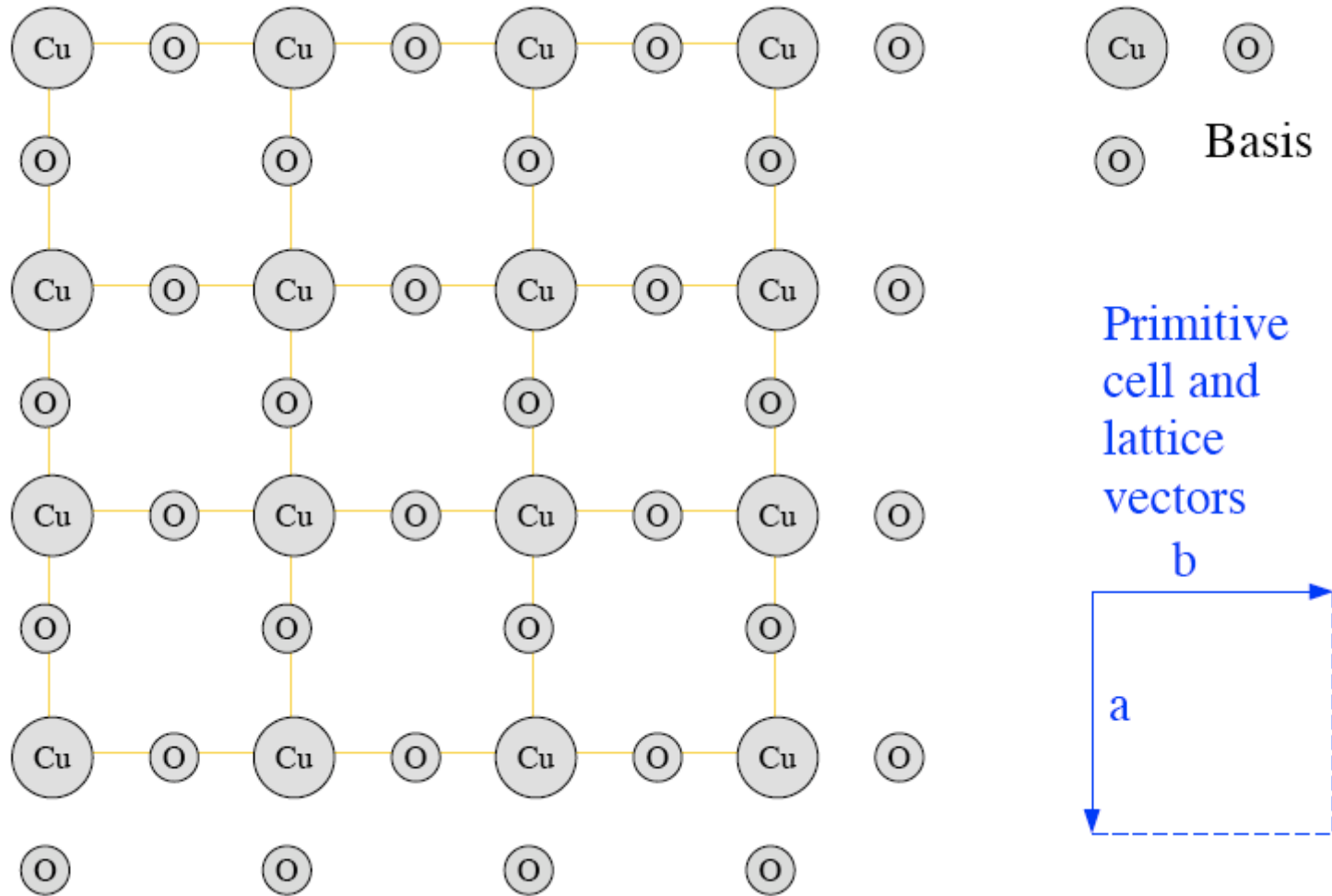
Idea de base

Sistemas simples: Li, Na, K, Cu, Ag, Au, Fe, Al, un átomo por celda unidad.

Sistemas más complicados: sólidos moleculares, superconductores de alta temperatura crítica, ...necesitamos una base además de la red para describir la estructura cristalina:

Estructura cristalina=red+base

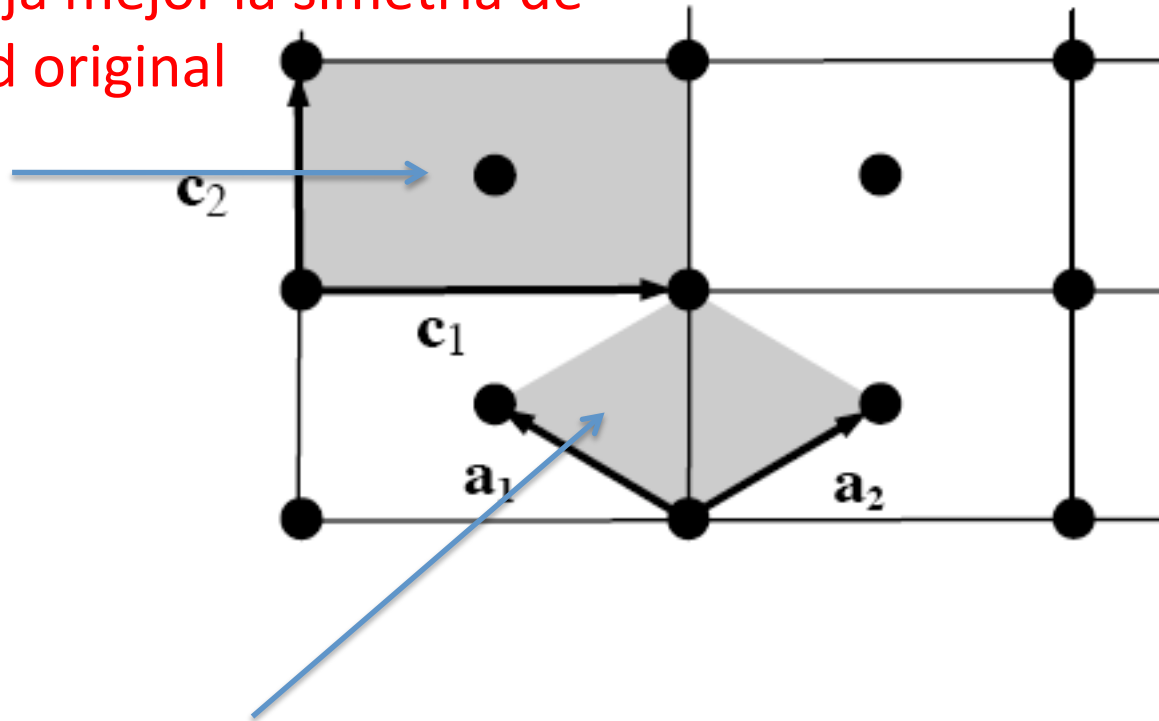
Planos de CuO_2 en superconductores de alta temperatura crítica



M. Jarrell, Solid State Physics.

Elección de celda unidad

Celda unidad no-primitiva:
Refleja mejor la simetría de
la red original










Celda unidad primitiva

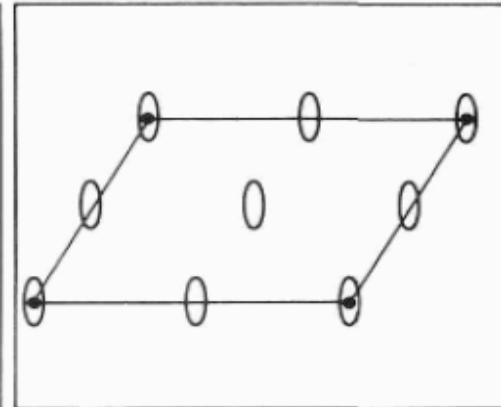
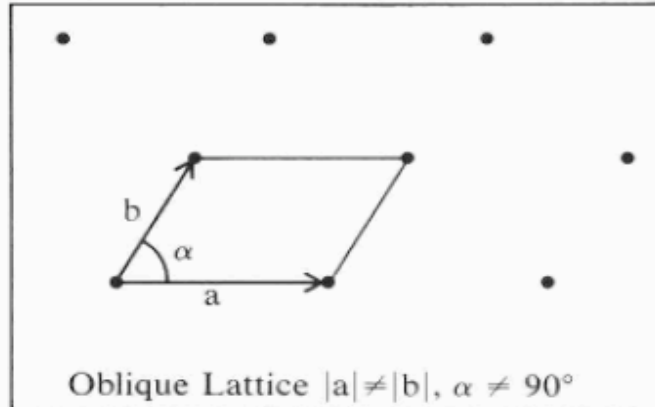
Área de la celda unidad no-primitiva es el doble de la celda unidad primitiva pero puede ser más útil en algunos casos.

Clasificación de las redes: operaciones de simetría puntuales

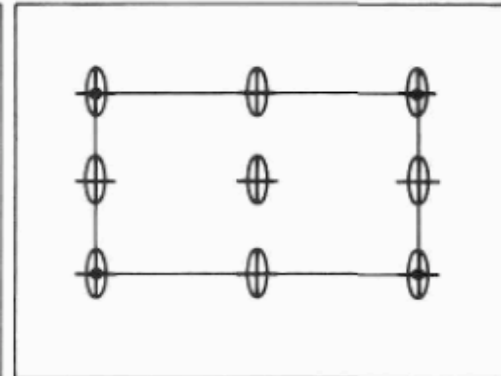
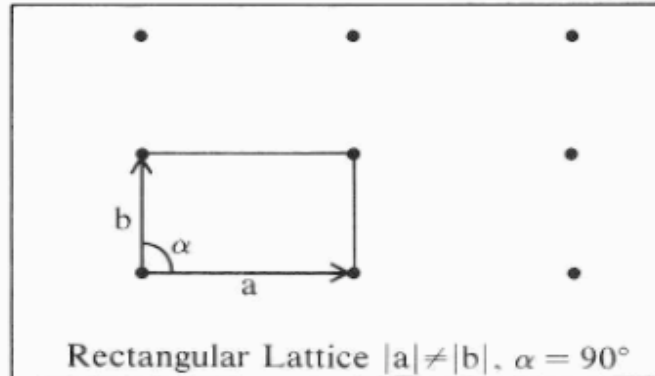
- **Inversión:** el cristal permanece invariante al hacer $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ respecto a un punto de inversión.
- **Reflexión especular:** el cristal tiene un plano de reflexión si permanece invariante al hacer una reflexión especular.
- **Rotación:** existe un eje del cristal alrededor del cual la celda permanece invariante. El eje se denomina n-fold si tiene un ángulo de rotación $2\pi/n$. Solo puede haber ejes 2-, 3-, 4- y 6-fold en dos dimensiones

-  Two-fold rotation axis
-  Three-fold rotation axis
-  Four-fold rotation axis
-  Six-fold rotation axis

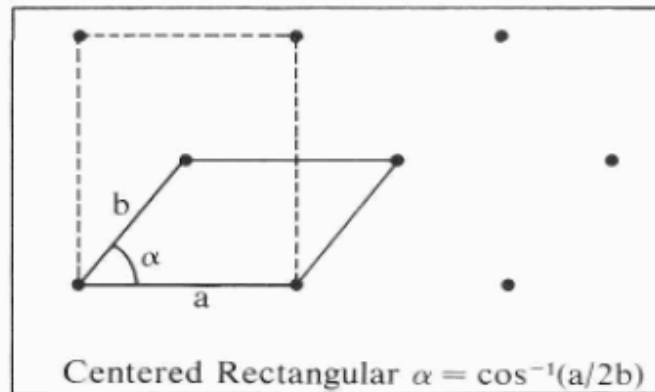
-  Mirror symmetry plane
-  Orthogonal mirror planes
-  Mirror planes every 45°



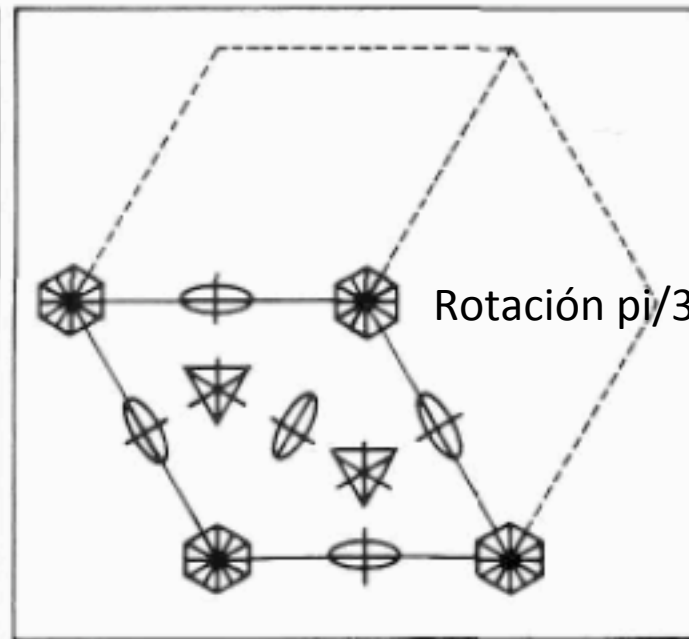
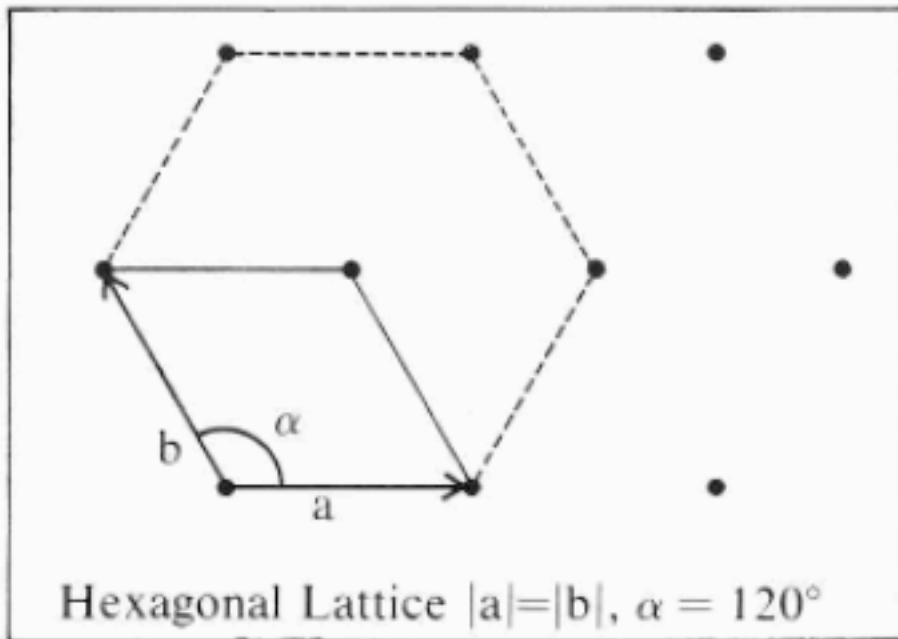
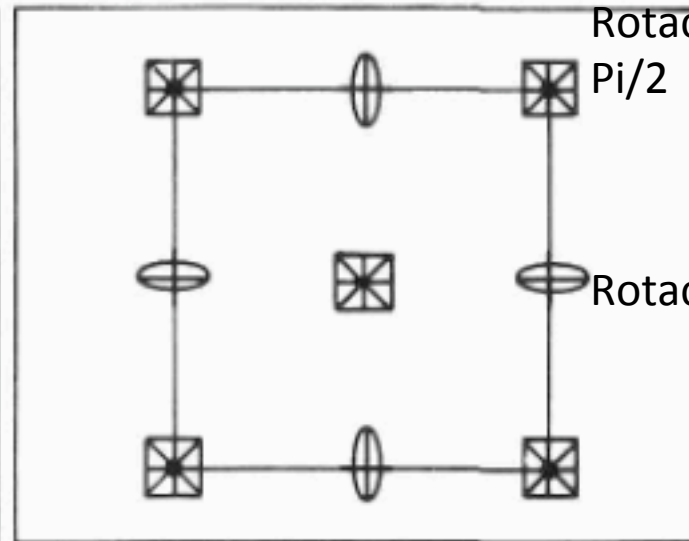
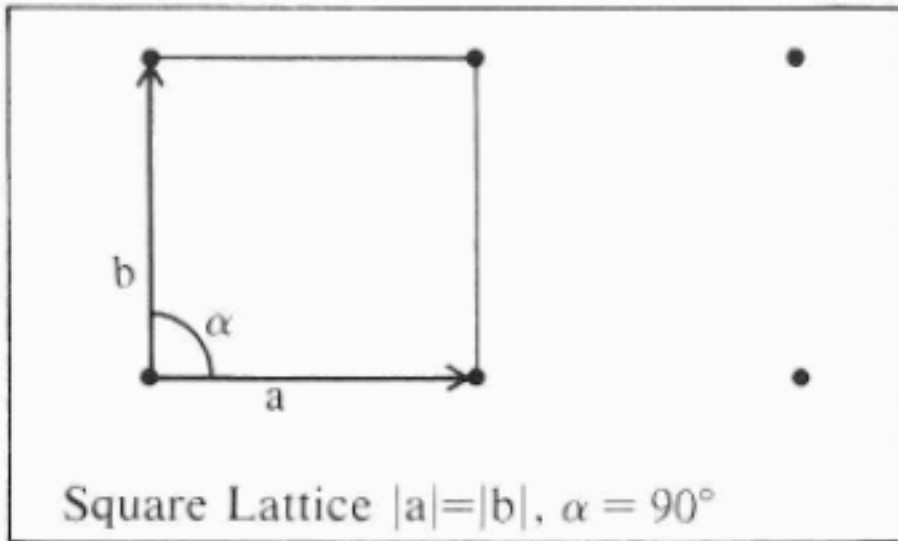
Solo rotación de pi o 2pi



2-fold:
Rotación de pi

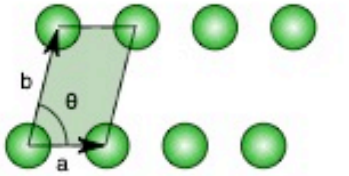
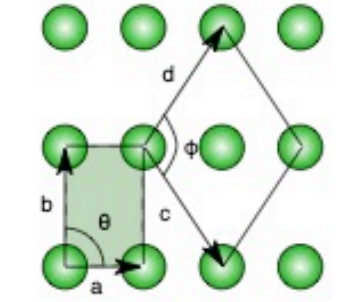
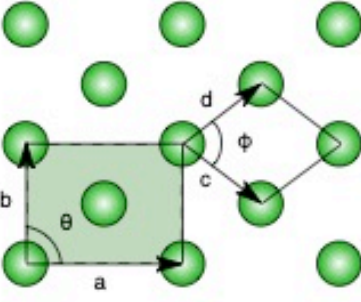
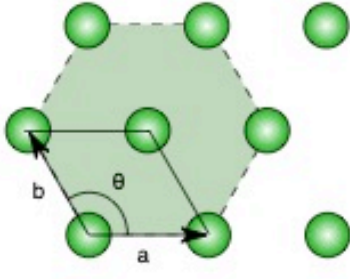
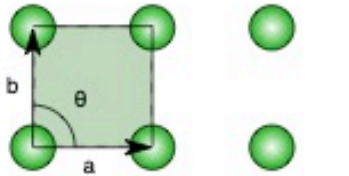


The symmetry is the same as that for any other rectangular lattice, in addition to the minimum symmetries of any oblique lattice.



Cinco redes de Bravais en dos dimensiones

1/10/19 12:09

 <p>1</p>	 <p>2</p>  <p>3</p>	 <p>4</p>	 <p>5</p>
<p>$a \neq b , \theta \neq 90^\circ$</p>	<p>$a \neq b , \theta = 90^\circ$ $c = d , \phi \neq 90^\circ$</p>	<p>$a = b , \theta = 120^\circ$</p>	<p>$a = b , \theta = 90^\circ$</p>

Pentagon can not be unit cell

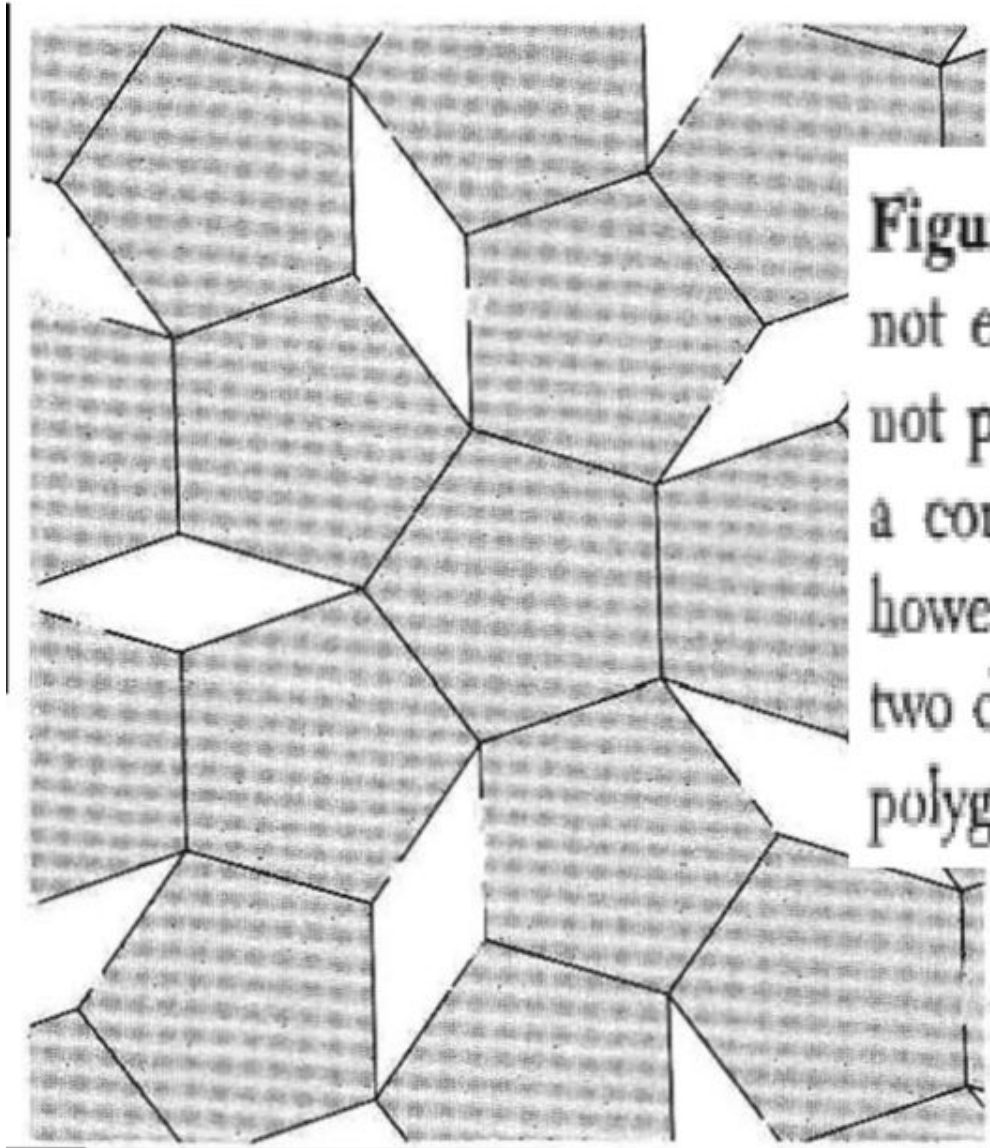
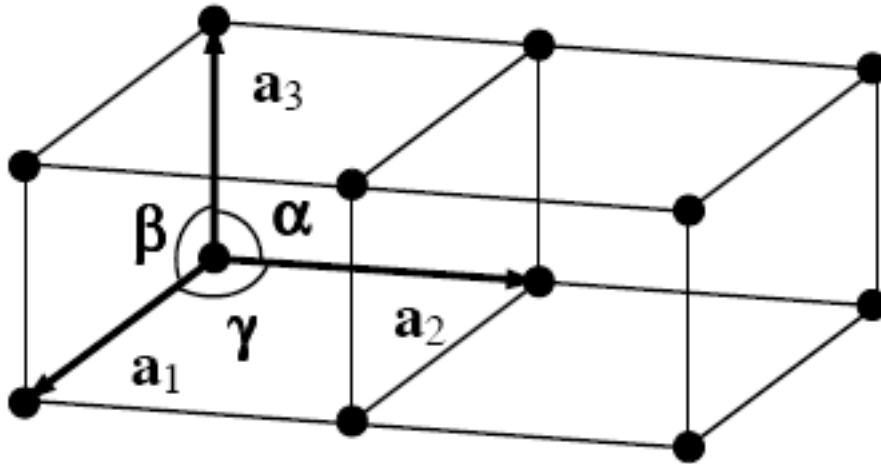


Figure 5 A fivefold axis of symmetry cannot exist in a periodic lattice because it is not possible to fill the area of a plane with a connected array of pentagons. We can, however, fill all the area of a plane with just two distinct designs of "tiles" or elementary polygons.

**Quasicristal, Dan Shechtman,
Premio Nobel de Quimica (2011)**

Celda unidad en tres dimensiones



$$V = |\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3|.$$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Redes de Bravais tridimensionales

Existen 7 grupos de simetría puntuales (sistemas cristalinos) diferentes:

Sistema cúbico (3): O_h (4 ejes 3-fold, 3 ejes 4-fold)

Sistema tetragonal (2)

Sistema ortorómbico (4)

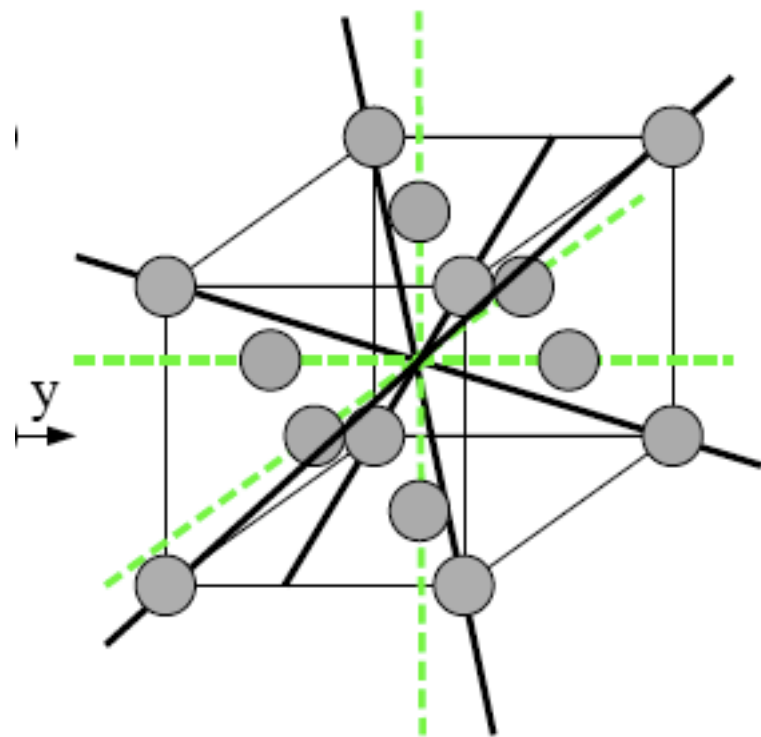
Sistema monoclinico (2)

Sistema triclinico (1)

Sistema romboédrico o trigonal (1)

Sistema hexagonal (1)

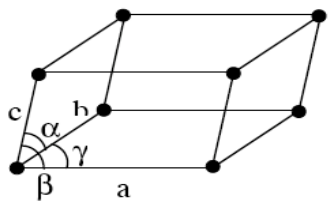
14 redes Bravais diferentes en 3D.



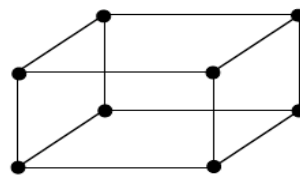
— 3-fold axes

- - - 4-fold axes

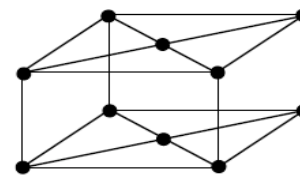
Triclinic ($a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$)



Monoclinic ($a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$)

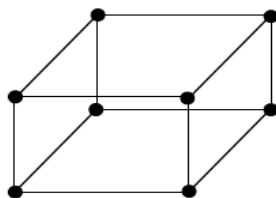


simple

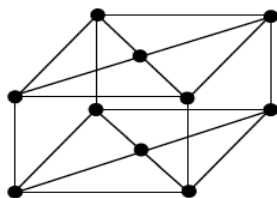


base-centered

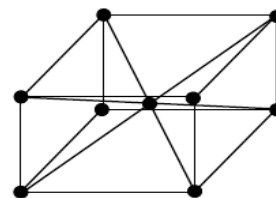
Orthorhombic ($a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)



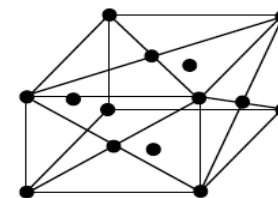
simple



base-centered

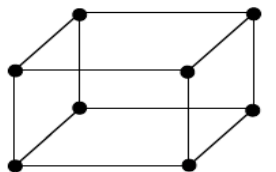


body-centered

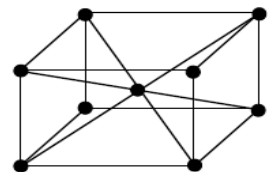


face-centered

Tetragonal ($a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)



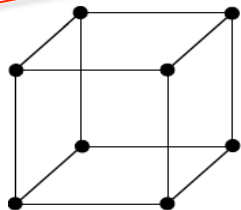
simple



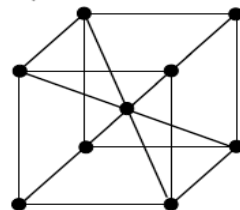
body-centered

14 redes Bravais diferentes!!

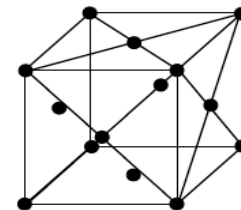
Cubic ($a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)



simple

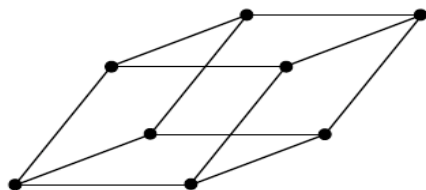


body-centered

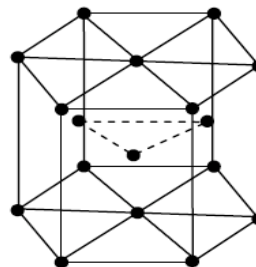


face-centered

Trigonal ($a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$)



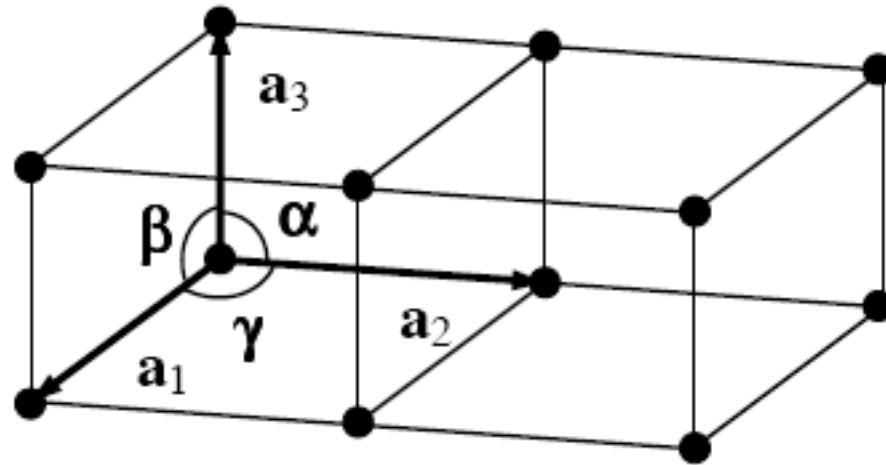
Hexagonal ($a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$)



E. Y. Tymbal

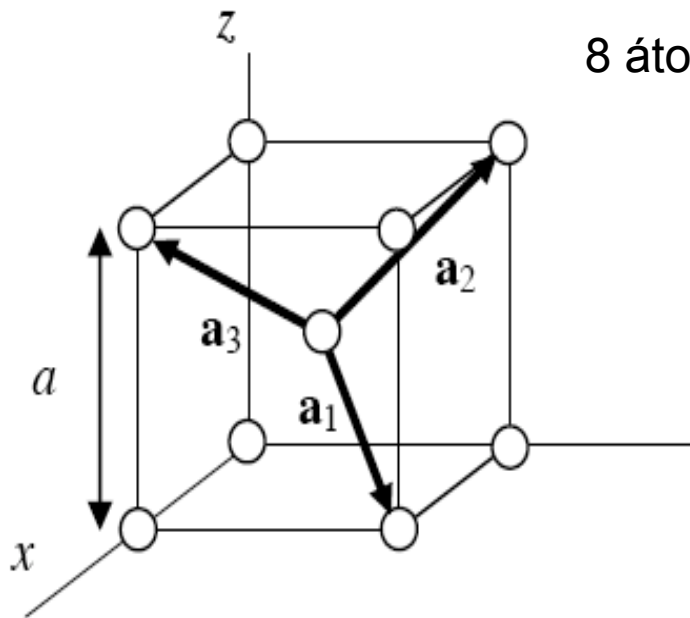
Sistema cúbico

Red cúbica simple (SC)



$\alpha, \beta, \gamma = 90^\circ$; a_1 , a_2 y a_3 son vectores de la celda unidad primitiva.

Red body-centered cubic (BCC)



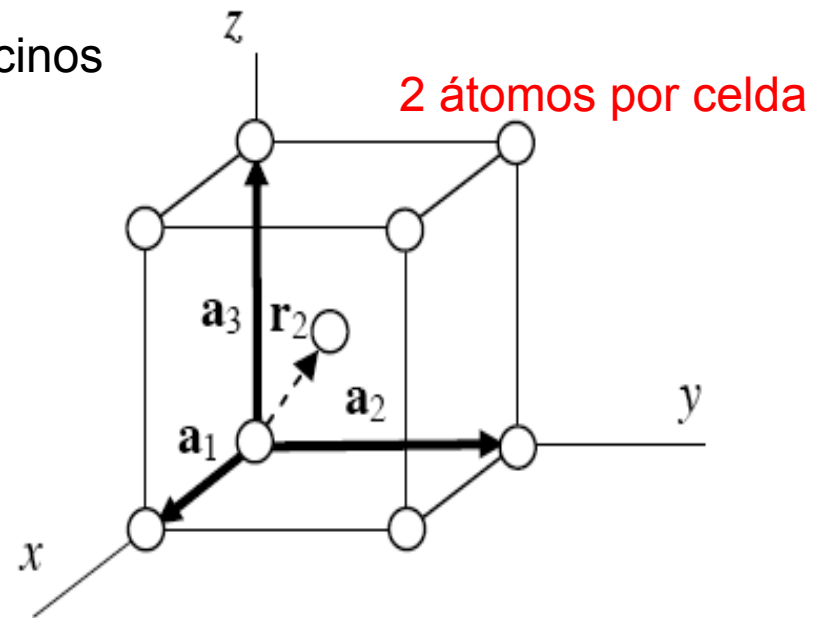
Celda unidad primitiva

$$\mathbf{a}_1 = (a/2, a/2, -a/2)$$

$$\mathbf{a}_2 = (-a/2, a/2, a/2)$$

$$\mathbf{a}_3 = (a/2, -a/2, a/2)$$

8 átomos vecinos



Celda unidad convencional

$$\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$$

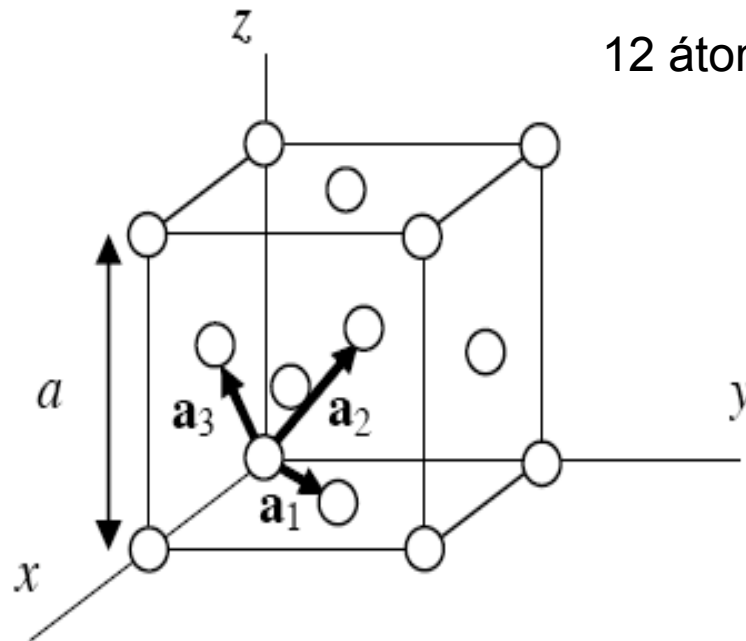
$$\mathbf{a}_2 = (0, a, 0)$$

$$\mathbf{a}_3 = (0, 0, a)$$

Na, Li, K, Rb, Cs (metales alcalinos)

Cr, Fe (metales magnéticos)

Red face centered cubic (FCC)

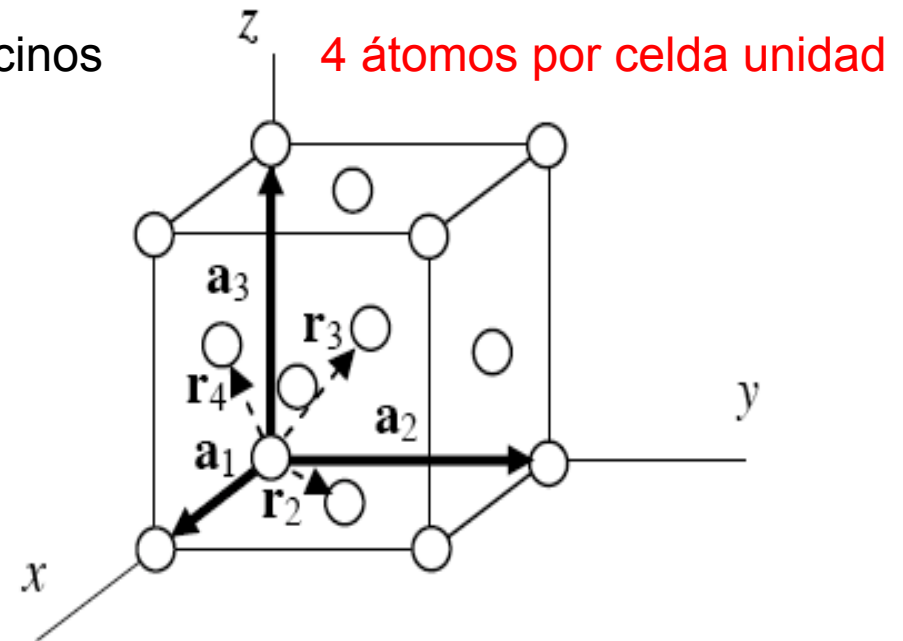


Celda unidad primitiva

$$\mathbf{a}_1 = (a/2, a/2, 0)$$

$$\mathbf{a}_2 = (0, a/2, a/2)$$

$$\mathbf{a}_3 = (a/2, 0, a/2)$$



Celda unidad convencional

$$\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$$

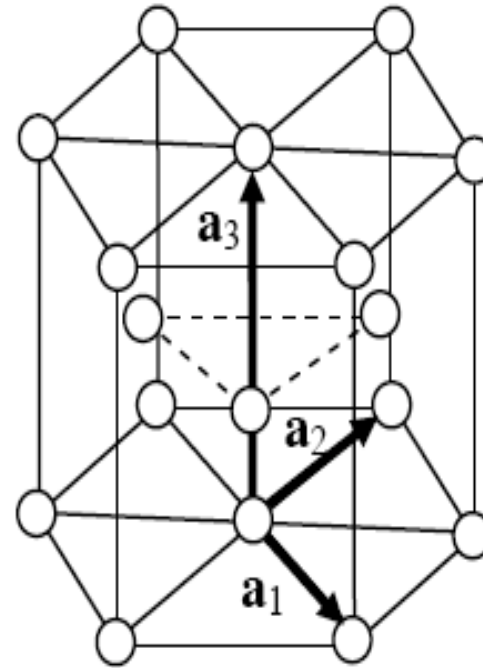
$$\mathbf{a}_2 = (0, a, 0)$$

$$\mathbf{a}_3 = (0, 0, a)$$

Cu, Ag, Au (metales nobles), Al, Pb, Ni y sólidos de gases nobles: Ne, Ar, Kr, Xe
Fullerenos: C60

Hexagonal closed packed (HCP)

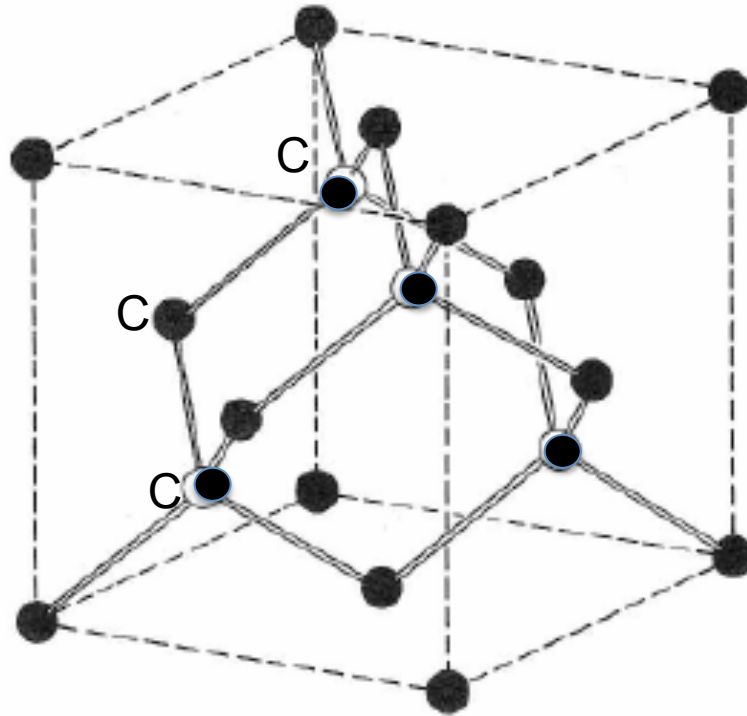
Hexagonal closed-packed (hcp) lattice:



The hcp structure has $a_1=a_2 \neq a_3$, $\alpha=\beta=90^\circ$ and $\gamma=120^\circ$ with a basis of two atoms

Be, Mg, Zn, Cd (column II tabla periódica)
Ti, Co (metales de transición)

Estructura del diamante



4 enlaces covalentes entre C simétricamente dispuestos

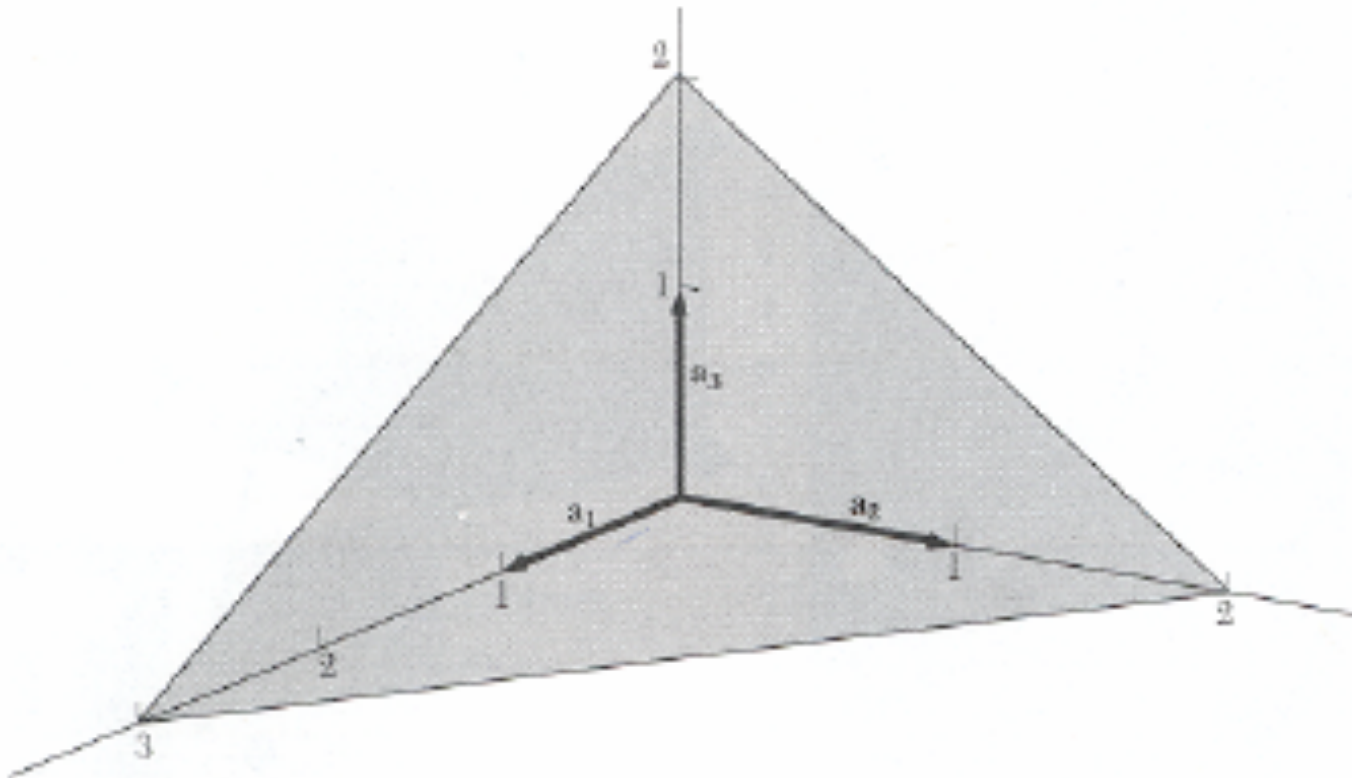
2 átomos por celda unidad primitiva uno en $(0,0,0)$ y otro en $(a/4,a/4,a/4)$

8 átomos de C por celda unidad convencional cúbica.

Dos redes FCC interpenetradas y desplazadas $(a/4,a/4,a/4)$ una de otra

Ejemplos: Si, Ge, Sn, diamante

Indices de planos cristalinos



Plano (233)