



FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO



TEMA 1

SIMETRÍA EN SÓLIDOS CRISTALINOS

CONTENIDO

El estado sólido

Sólido ideal y sólido real

Simetría de traslación: la red directa

Definición de simetría

Invariancia traslacional: la red directa

Red *vs.* cristal: base estructural

Celdas unidad y redes de Bravais

Planos y filas reticulares

Ejemplos de estructuras cristalinas

La red recíproca

Definición formal

Relación con los índices de Miller

Zonas de Brillouin

Grupos espaciales de simetría

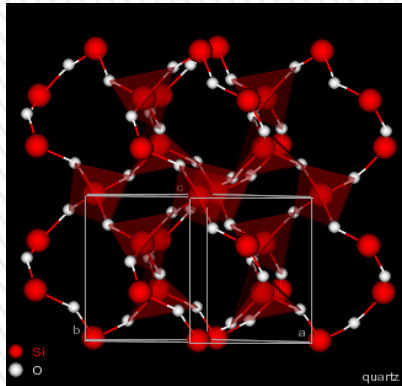
Operaciones de simetría

Simetrías puntuales y grupos puntuales

Simetrías no puntuales y grupos espaciales

Defectos estructurales

EL ESTADO SÓLIDO



SÓLIDO IDEAL

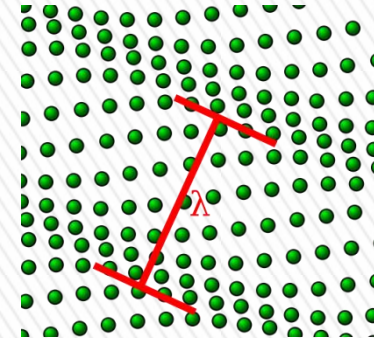
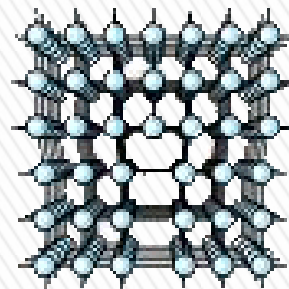
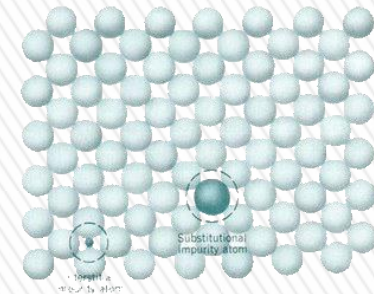
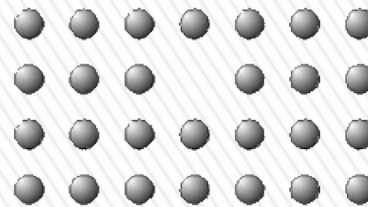
Infinito

Composición uniforme

Estructura regular

Estado fundamental

DEFECTOS

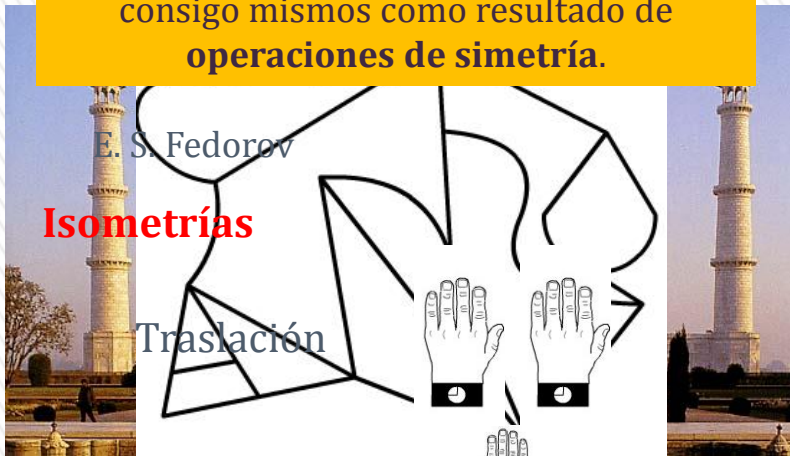


SÓLIDO REAL =
SÓLIDO IDEAL + DEFECTOS

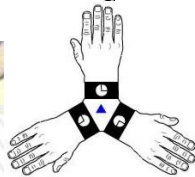
SIMETRÍA DE TRASLACIÓN

Simetría

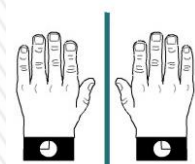
Propiedad de los objetos en virtud de la cual éstos pueden ser llevados a coincidir consigo mismos como resultado de **operaciones de simetría**.



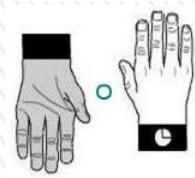
Rotación



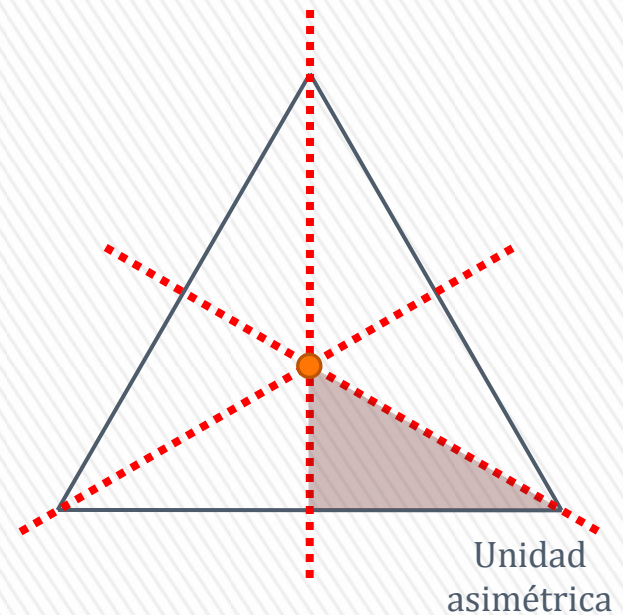
Reflexión



Inversión



Simetrías de un triángulo equilátero

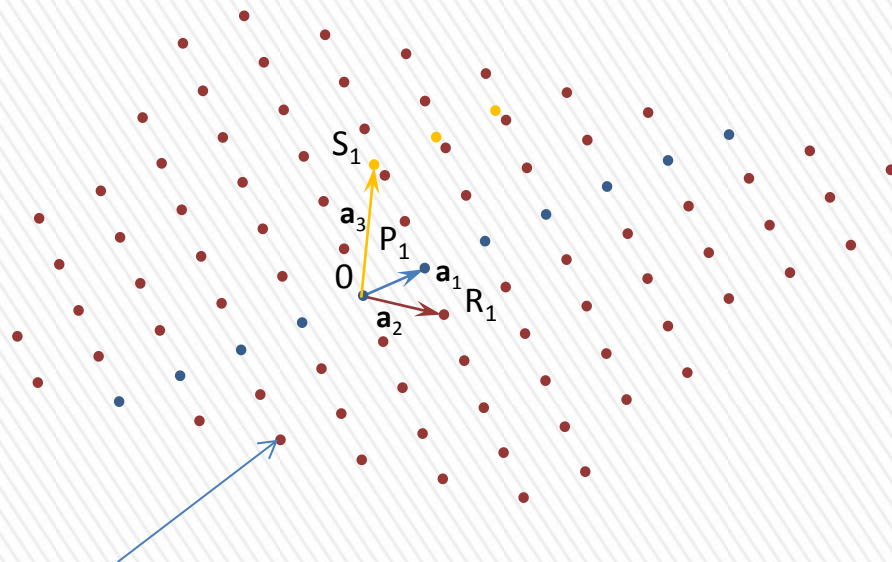


SIMETRÍA DE TRASLACIÓN

POSTULADO DE BRAVAIS

“Dado un punto \mathbf{r} del sólido cristalino, existe un conjunto infinito, discreto e ilimitado, de orden tres, de puntos \mathbf{r}' que tienen el mismo entorno atómico de \mathbf{r} y con la misma orientación”

Redes de Bravais



Nudo de la red

RED DIRECTA

$$\vec{t} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$\{n_1, n_2, n_3\}$ enteros

$\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3\}$ generadores

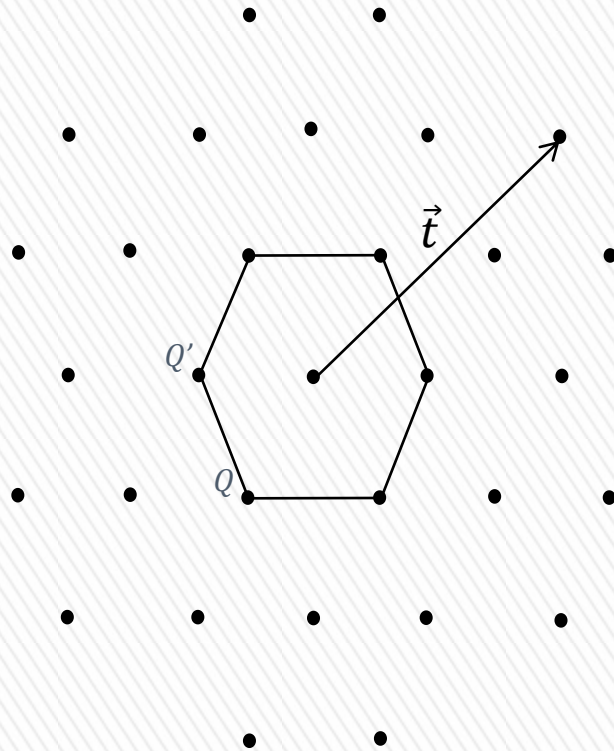
GRUPO DE TRASLACIÓN

Invariancia traslacional

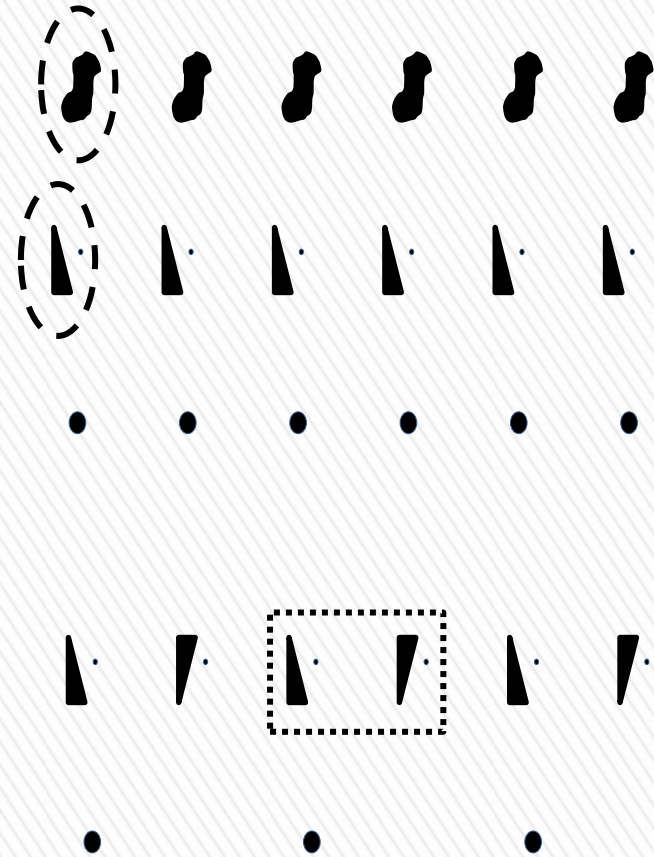
$$\vec{r} \equiv \vec{r} + \vec{t} \quad \forall \vec{t} \in \{T\}$$

SIMETRÍA DE TRASLACIÓN

Red de Bravais vs. otras redes



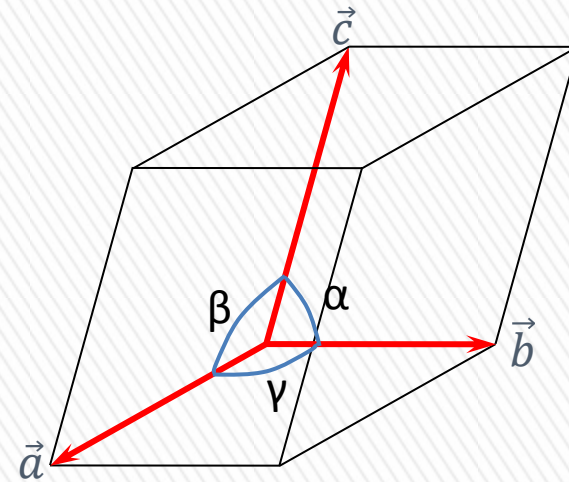
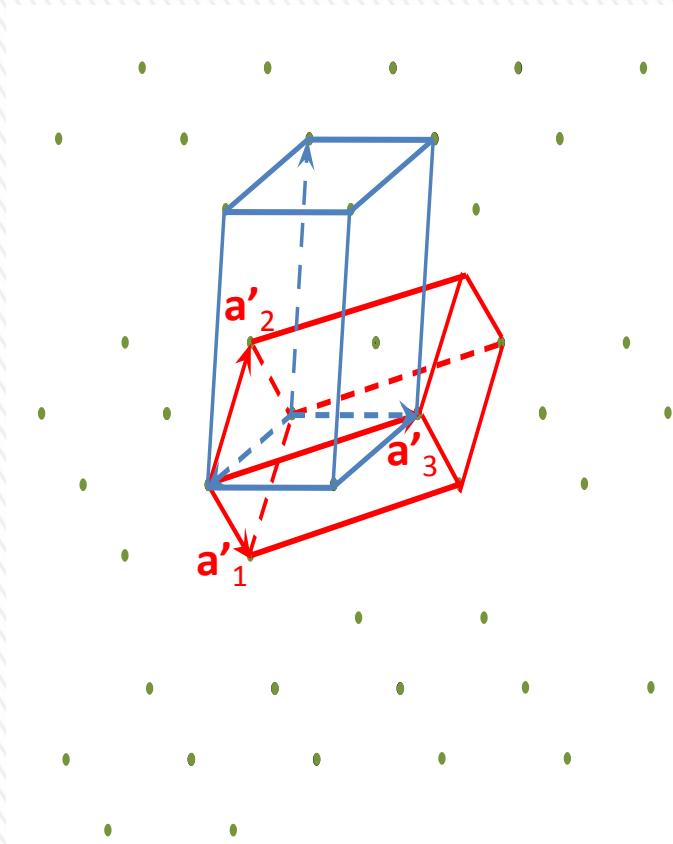
Red vs. cristal



CRISTAL = RED x BASE ESTRUCTURAL

SIMETRÍA DE TRASLACIÓN

Celdas unidad

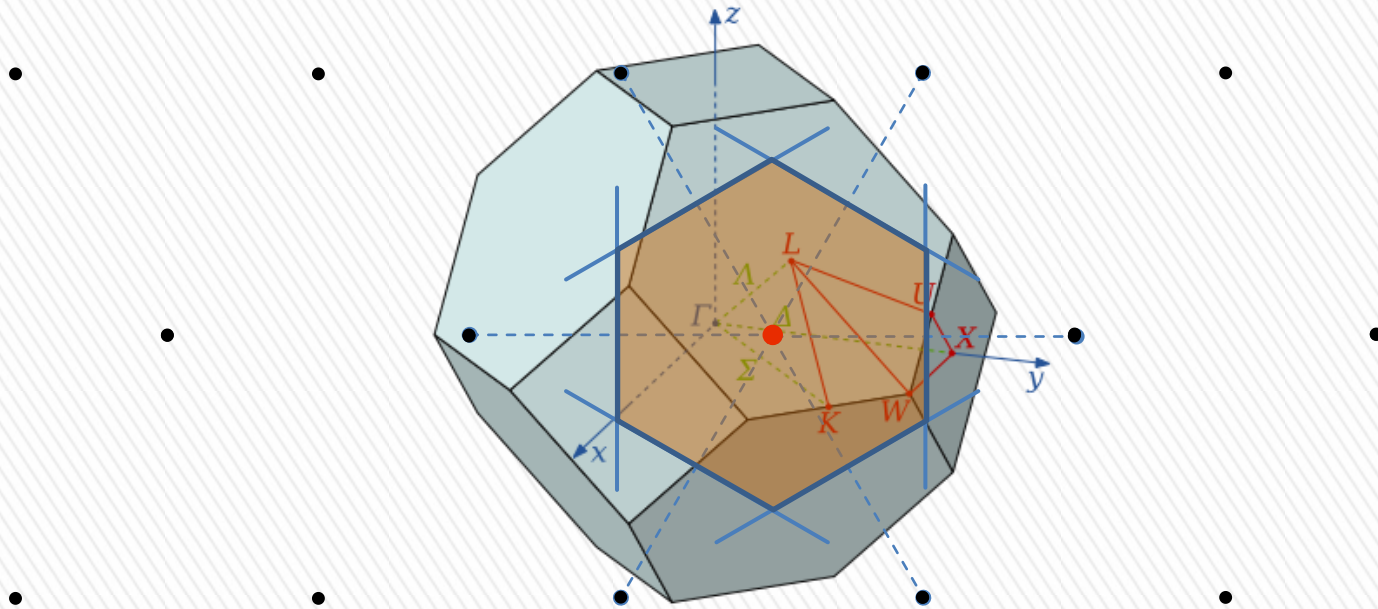


Parámetros reticulares

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

SIMETRÍA DE TRASLACIÓN

Celda de proximidad (Wigner - Seitz)



Celdas múltiples

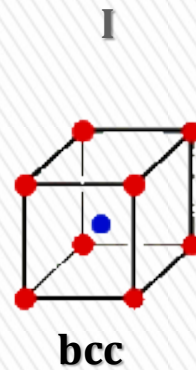
$$\vec{t} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$$

$\{h_1, h_2, h_3\}$ racionales

$\{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$ no son generadores

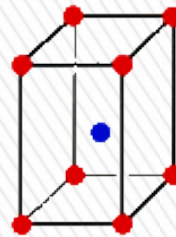
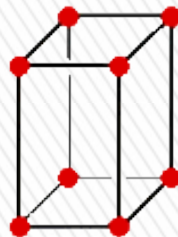
SIMETRÍA DE TRASLACIÓN

CÚBICO

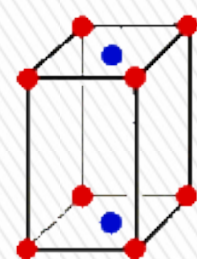
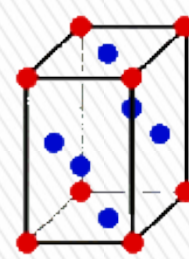
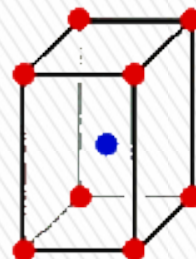
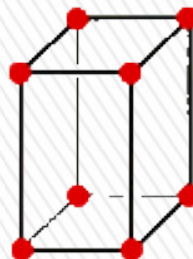


C

TETRAGONAL



ORTORRÓMBICO



SIMETRÍA DE TRASLACIÓN

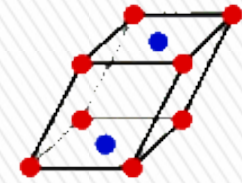
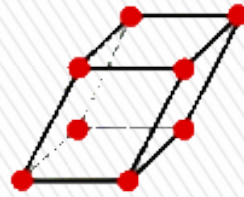
P

I

F

C

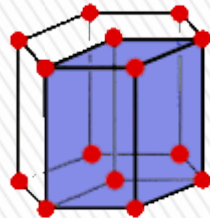
MONOCLÍNICO



TRICLÍNICO



HEXAGONAL



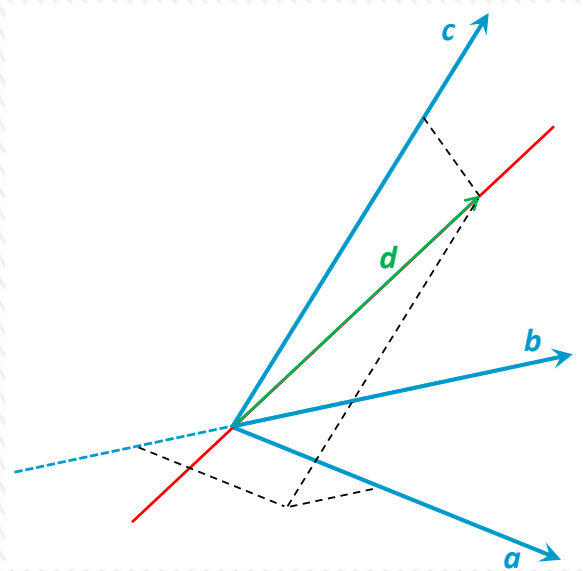
TRIGONAL



Romboédrica

SIMETRÍA DE TRASLACIÓN

Filas reticulares

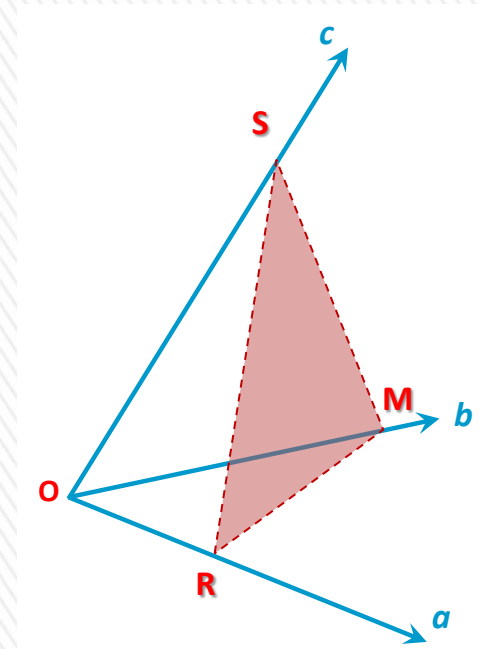


$$\vec{d} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

[u v w]

<u v w>

Planos reticulares

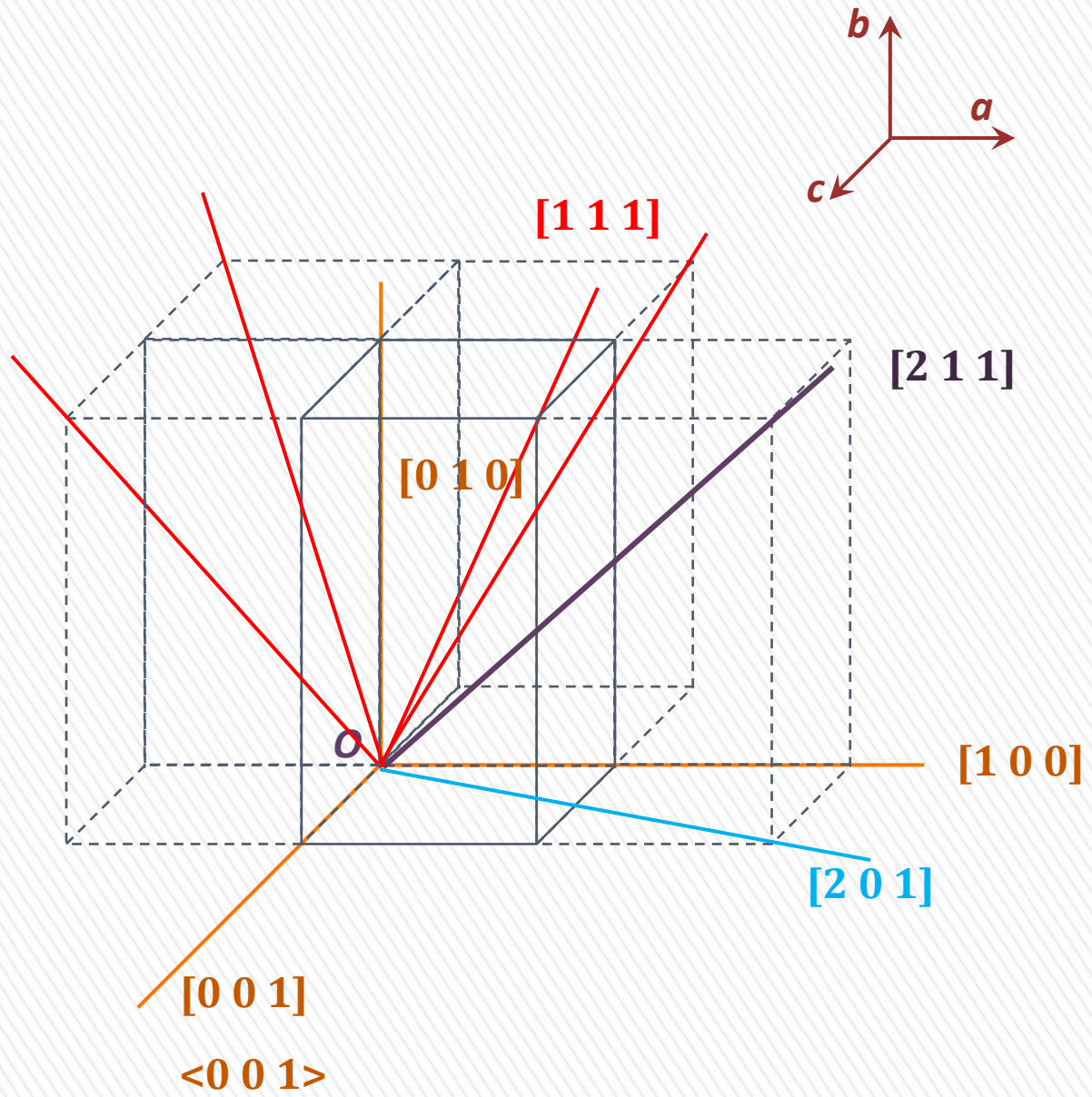


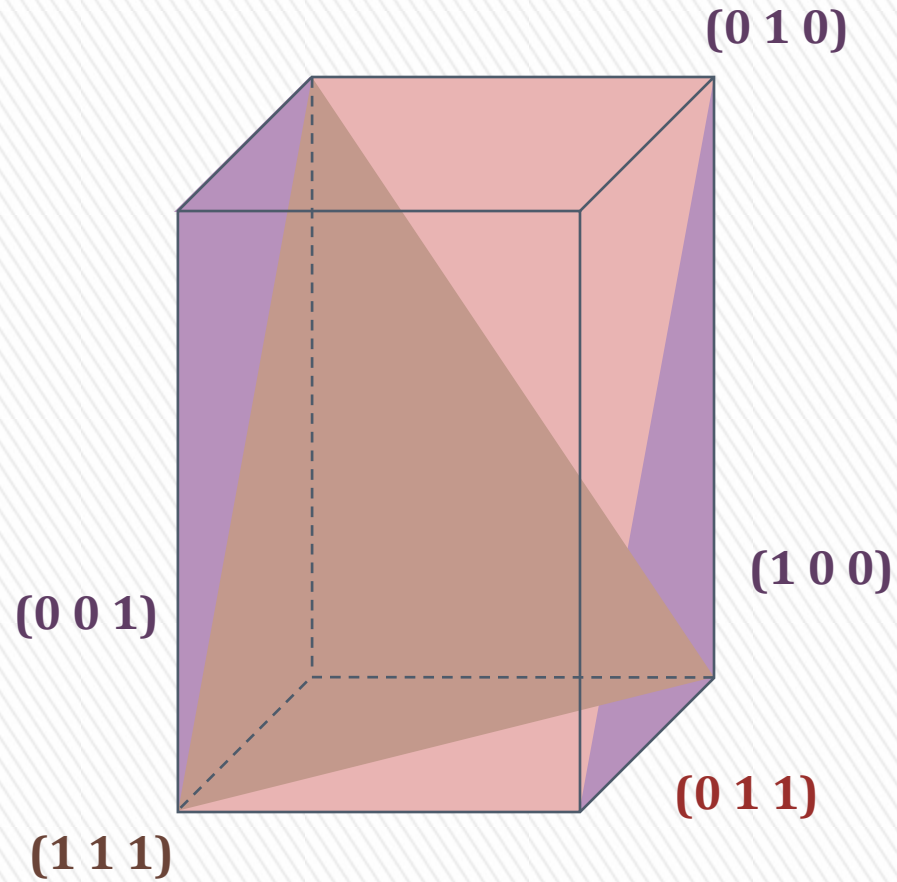
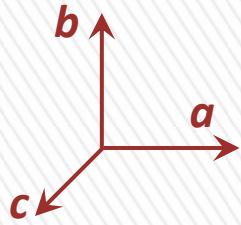
$$h = \frac{1}{r} \quad k = \frac{1}{m} \quad l = \frac{1}{s}$$

(h k l)

{h k l}

ÍNDICES DE MILLER

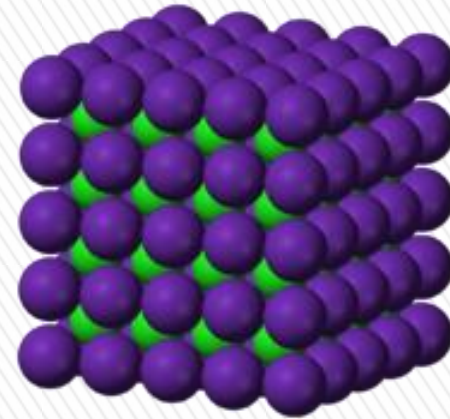
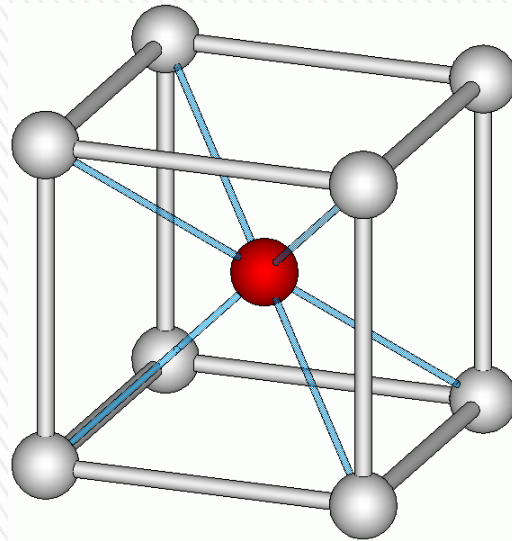




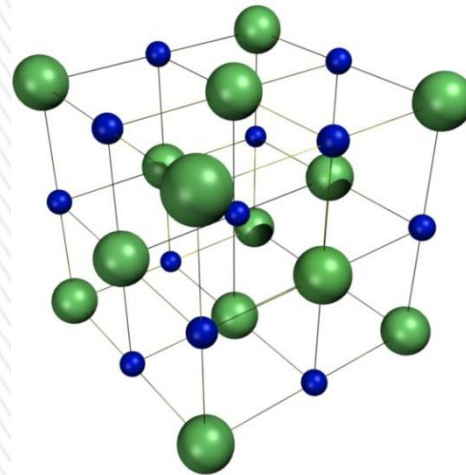
$\{1 0 0\}$

EJEMPLOS DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS

CsCl

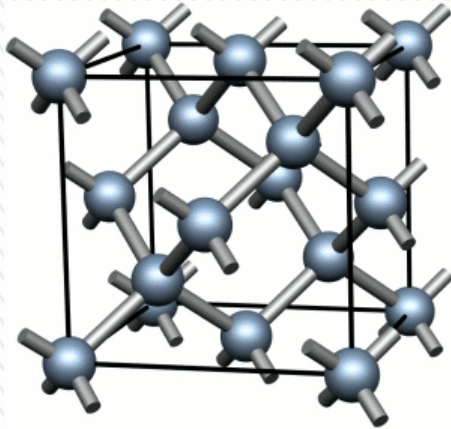


NaCl

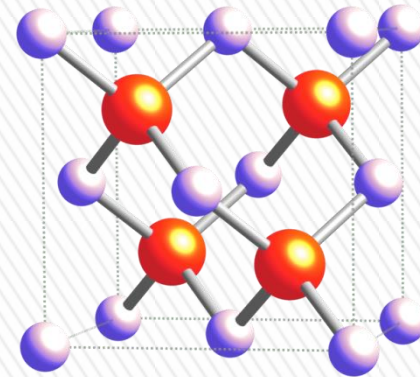


EJEMPLOS DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS

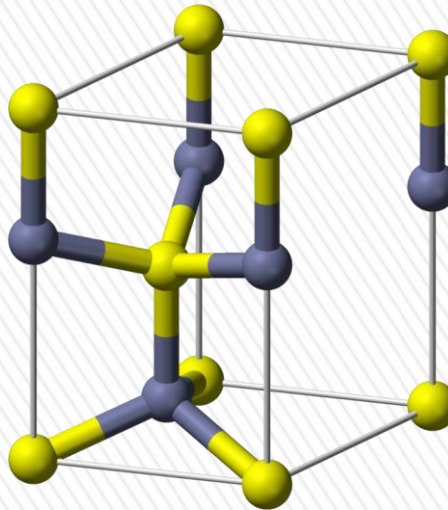
Diamante



(ZnS) Esfalerita

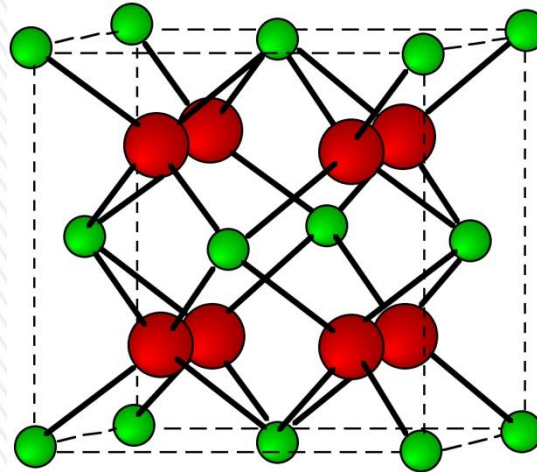


(ZnS) Wurtzita

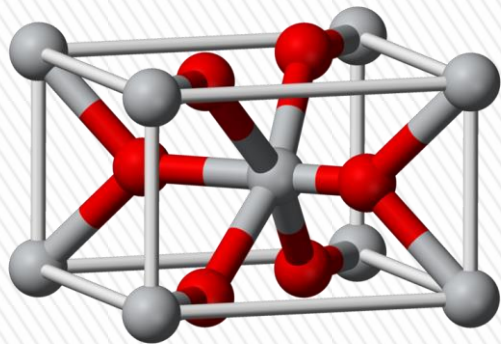


EJEMPLOS DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS

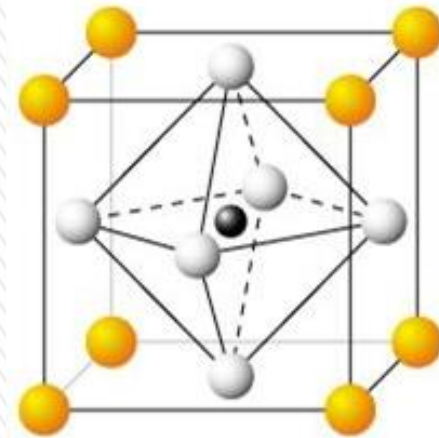
Fluorita



Rutilo

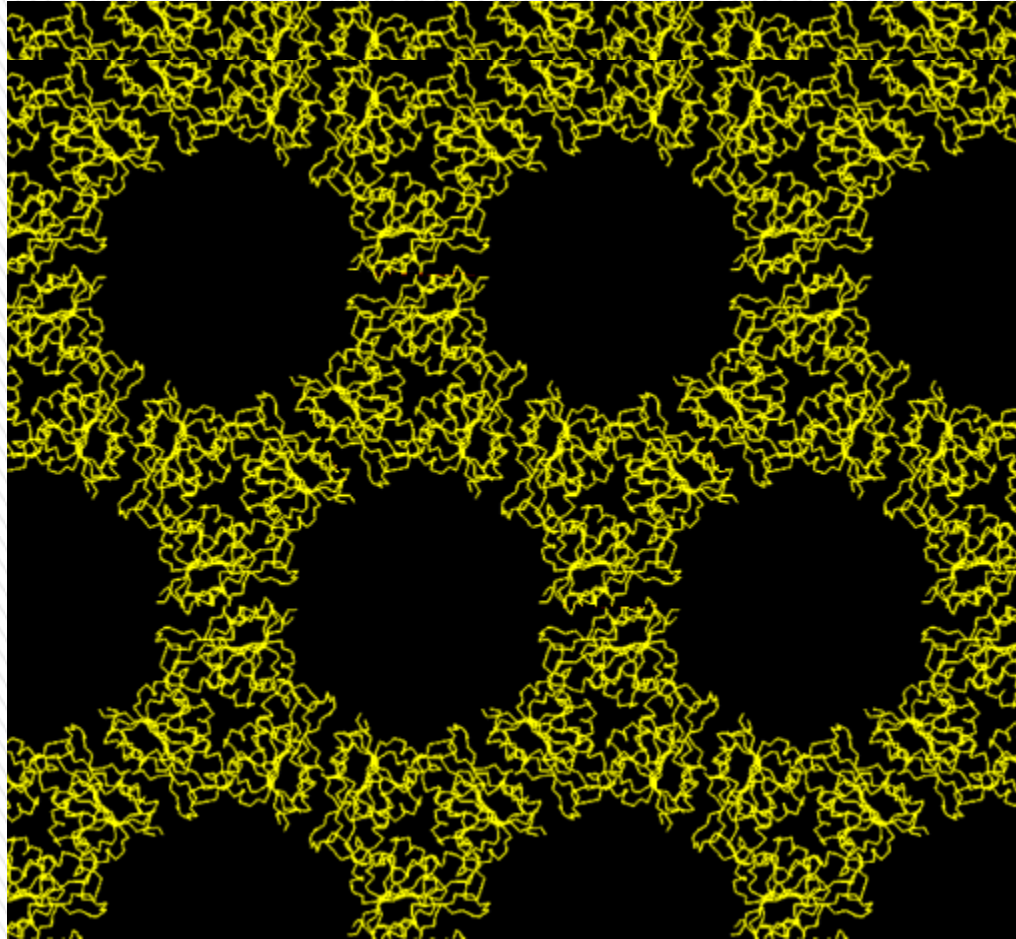


Perovskita



EJEMPLOS DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS

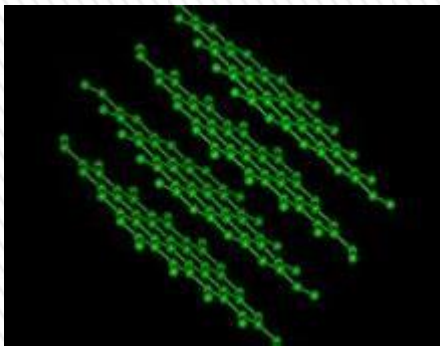
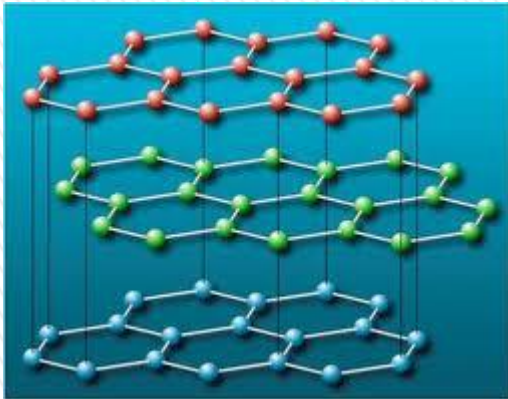
Proteína AtHal3



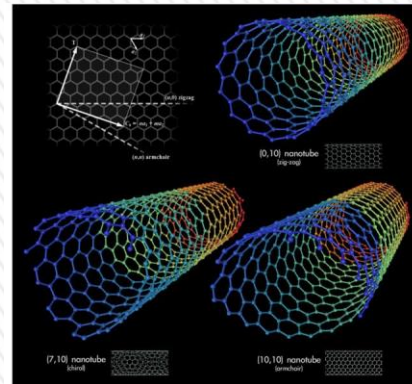
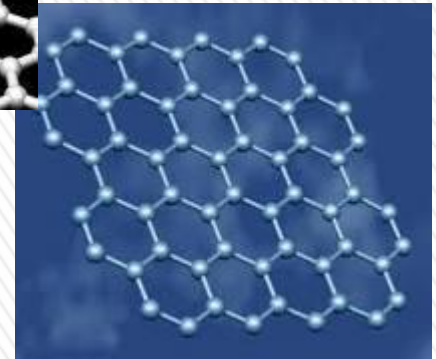
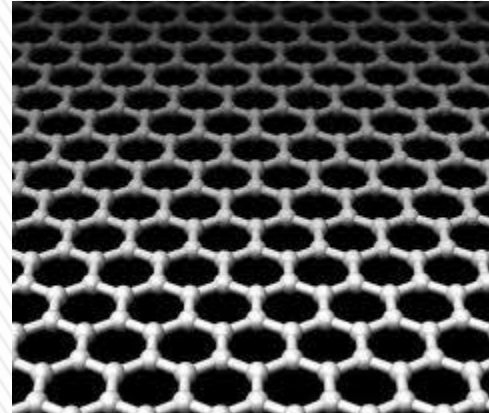
$a = 112.31 \text{ \AA}$
 $c = 33.18 \text{ \AA}$

EJEMPLOS DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS

Grafito



Grafeno



Nanotubos de carbono

LA RED RECÍPROCA

Invariancia traslacional

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{t}) \quad \forall \vec{t} \in \{T\} \quad f \text{ es periódica} \Rightarrow f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \tilde{f}(\vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} \quad \tilde{f}(\vec{G}) = \int_{\text{Celda}} f(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \tilde{f}(\vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = f(\vec{r} + \vec{t}) = \sum_{\vec{G}} \tilde{f}(\vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot (\vec{r} + \vec{t})} = \sum_{\vec{G}} \tilde{f}(\vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{t}} \quad \forall \vec{t} \in \{T\}$$

$$e^{i\vec{G} \cdot \vec{t}} = 1 \quad \forall \vec{t} \in T$$

$$\vec{G} \cdot \vec{t} = 2\pi p \quad \forall \vec{t} \in T$$

El conjunto $\{G\}$ define un retículo en el espacio de Fourier (recíproco)

$$\vec{a}_1^* = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{a}_2^* = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{a}_3^* = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

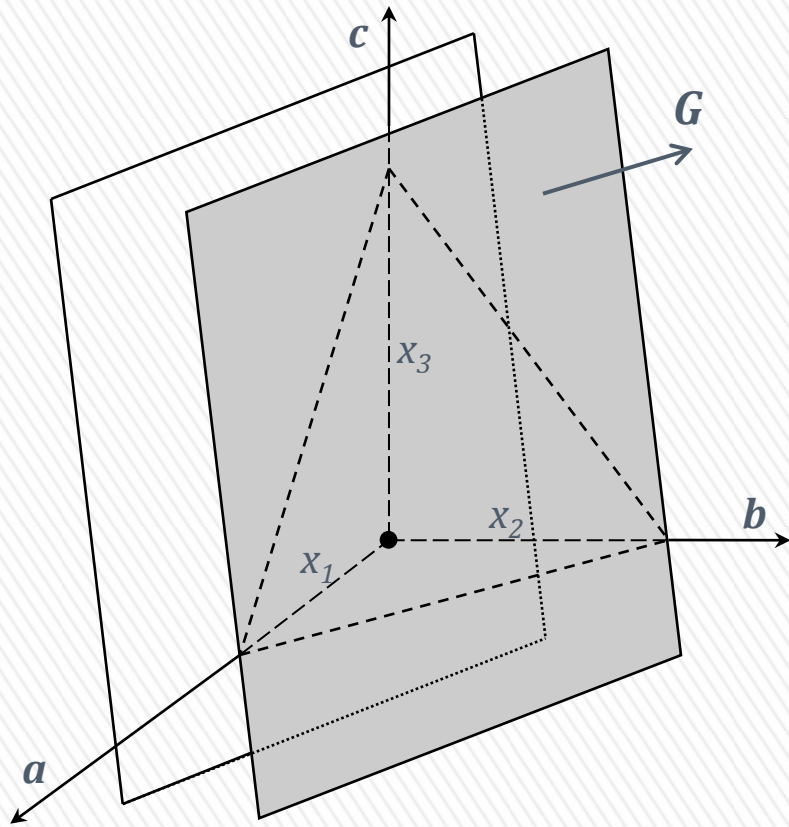
$$\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j^* = 2\pi \delta_{ij}$$

$$\vec{G} \cdot \vec{t} = 2\pi p \quad \forall \vec{t} \in T \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^3 n_i m_i = p \quad \forall \{n_i\}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*$$

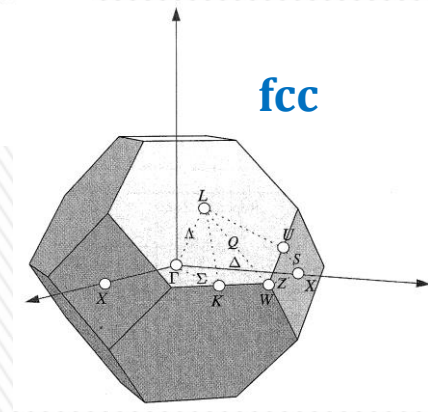
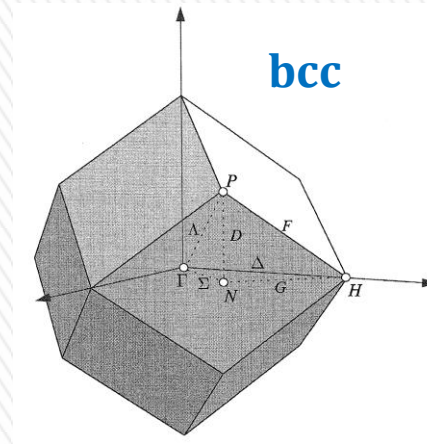
$$m_i \in \mathbb{Z}$$

LA RED RECÍPROCA



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

Primera zona de Brillouin



$$\vec{k} \cdot \vec{G} = \frac{1}{2} \vec{G}^2$$

GRUPOS ESPACIALES DE SIMETRÍA

Operaciones de simetría

$$\vec{r}' = S \cdot \vec{r} + \vec{t}$$

Puntos equivalentes

Rotación

Reflexión

Inversión

Rotación – inversión

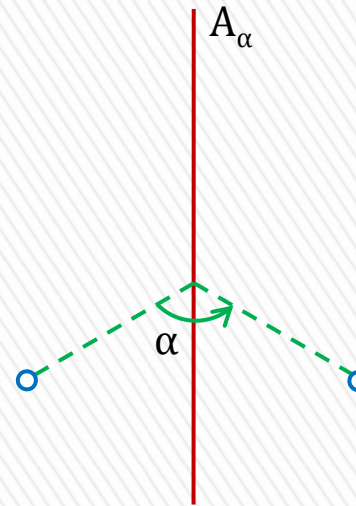
Ops. puntuales

Ops. no puntuales

Eje helicoidal

Plano de deslizamiento

Rotación



El cristal es invariante bajo una rotación de ángulo α en torno al eje A_α

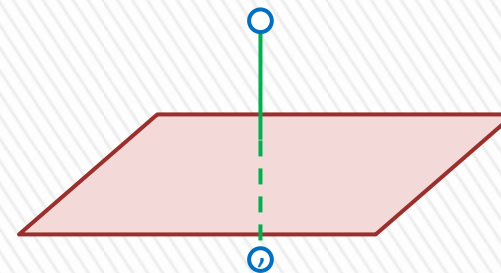


$$\frac{2\pi}{\alpha} = n$$

$$n = 1, 2, 3, 4 \text{ o } 6$$

n

Reflexión



m

GRUPOS ESPACIALES DE SIMETRÍA

Inversión



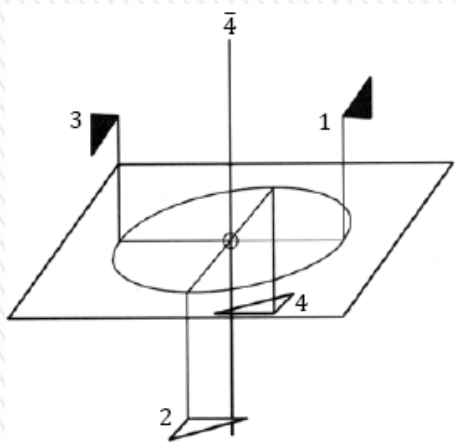
Cambia la orientación del objeto

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$$

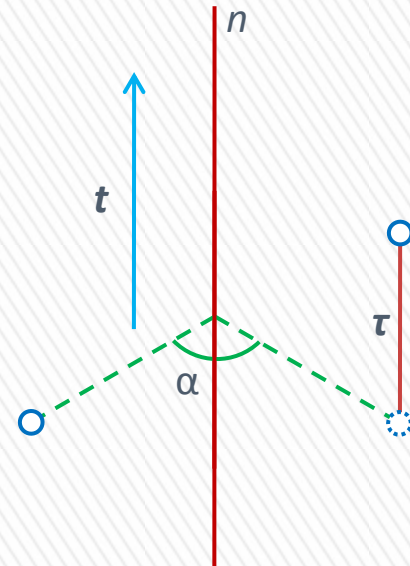


Rotación - inversión

Rotación de orden n + inversión respecto a un punto del eje



Eje helicoidal



$$n\vec{\tau} = p\vec{t}$$

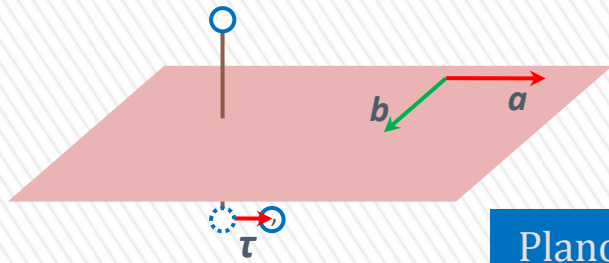
$$\vec{\tau} = \frac{p}{n}\vec{t},$$

$$p = 1, 2, \dots, n - 1$$



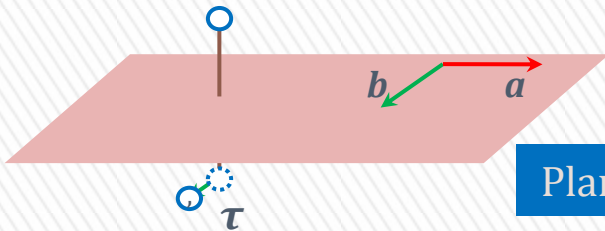
GRUPOS ESPACIALES DE SIMETRÍA

Plano de deslizamiento

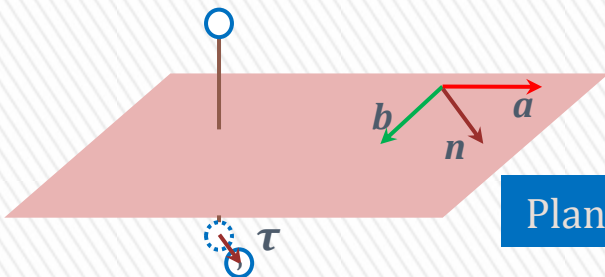


Plano a

$$2\vec{\tau} = p\vec{t} \quad \Rightarrow \quad \vec{\tau} = \frac{p}{2}\vec{t}$$



Plano b



Plano n

**GRUPOS PUNTUALES
DE SIMETRÍA**

32 GRUPOS

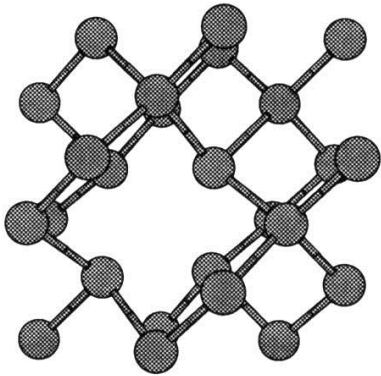
**GRUPOS ESPACIALES
DE SIMETRÍA**

230 GRUPOS

DEFECTOS ESTRUCTURALES

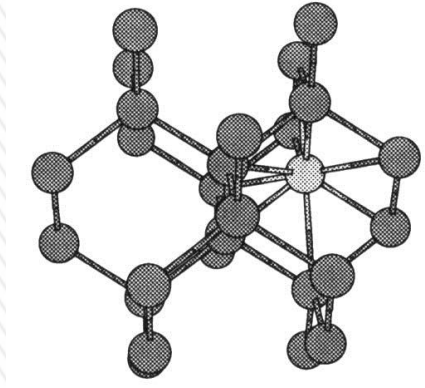
Defectos puntuales

Vacantes



Constitucionales
Estequiométricas
Compensación

Intersticiales

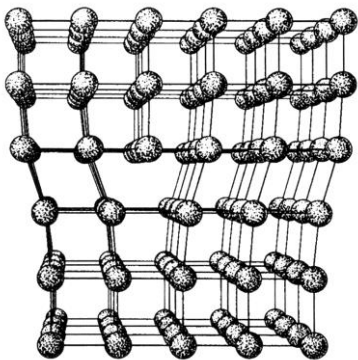


Auto-
Hetero-

Impurezas

Defectos lineales

Dislocaciones



Defectos bidimensionales

Superficies

Faltas de apilamiento

Maclas

Fronteras de grano

