

# FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

## Octavo Semestre 2021

Jorge Alejandro Rodriguez Aldana

20 de agosto de 2021



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. ¿Qué es la materia condensada?

- Fases condensadas: aparecen cuando los sistemas físicos están formados por un número grande de elementos que interactúan fuertemente.
- Fases condensadas bastante conocidas: sólidos, líquidos.
- Otras fases condensadas: superconductores, superfluidos, ferromagnetos, antiferromagnetos, condensados Bose-Einstein.
- Otras mesofases: cristales líquidos, membranas autoensambladas, geles, coloides, cristales, vidrios, etc.

Categorías de la física:

- Teórico
- Experimental
- Fenomenológica
- Computacional

#### 1.1.1. De la física del estado sólido a la física de la materia condensada

- La física del estado sólido en los 30 (siglo XX):
  - Cristalografía por Rayos X
  - Difracción de electrones
  - M cuántica + M estadística

#### 1.1.2. Tipos de fuerzas

- Van der Waals
- Interacción electromagnética

- Interacción de intercambio
- Potencial de London
- Potencial de Lenard-Jones

## 1.2. ¿Qué estudia la materia condensada?

Se vale de muchos métodos para estudiar la materia.

- Mecánica estadística
  - Modelo de campo medio
  - Movimiento Browniano
  - Dinámica molecular
- Mecánica cuántica
  - Modelo de Hubbard (1963-1966)

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} + C_{j\sigma}^\dagger C_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Donde:

- $C_{i\sigma}^\dagger$ : Operador bosónico de creación de partículas de espín  $\sigma$  en la posición  $i$ .
- $C_{j\sigma}$ : Operador bosónico de aniquilación de partículas de espín  $\sigma$  en la posición  $j$ .
- $n_i$ : Operador número en la posición  $i$ .

Un mol es  $6.022E23$ .

### 1.2.1. Objetivo de la materia condensada

- El objetivo de la Física de la materia condensada es el entendimiento de las propiedades de grandes conjuntos de átomos y moléculas en términos de las interacciones entre ellas.
- Propiedades macroscópicas
  - Temperatura
  - Presión
  - Volumen
  - Energía de enlace
  - Opacidad
- De lo más notable de la física de la materia condensada, es el poder explicar la fenomenología de un sistema que surge de un Hamiltoniano relativamente simple.

### 1.2.2. Hitos de la física de la materia condensada

- Efecto fotoeléctrico (Einstein, 1905)
- Capacidad Calorífica (Einstein, 1907)
- Ferromagnetismo (Weiss, 1907)
- Licuefacción de He @ 4.1K (Kemerling Onnes, 1908)
- Superconductividad (Kamerling Onnes, 1911)
- Difracción de Rayos X (Von Laue, 1912)
- Cuantización de las vibraciones de una red cristalina (Max Born, 1912)
- Corrección de la aproximación de la capacidad calorífica (Debye, 1912)
- Ecuación de Schrodinger (Schrodinger, 1926)
- Principio de exclusión de Pauli (Pauli, 1926)
- Aproximación Born-Oppenheimer (1927) Desacoplan dinámicas de núcleos y electrones.
- Descripción cuántica del modelo de electrones libres (Sommerfeld, 1928)

### 1.2.3. Materia Blanda y Materia Sólida

Orden (desorden) estadístico:

$$\text{Entropía}$$

$$S = -k \log \omega$$

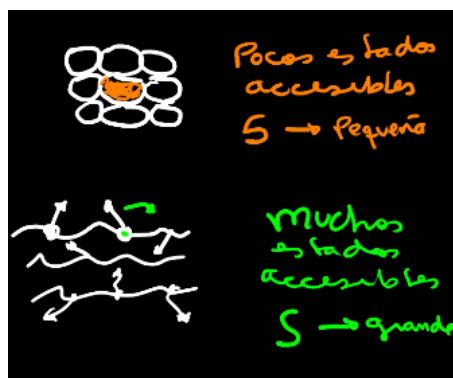


Figura 1.1: Sólidos ordenados, líquidos desordenados

Tres categorías:

1. Orden de largo alcance

2. Orden de corto alcance

3. Desorden

### **Materia blanda:**

- Escalas de longitud: Desde escalas atómicas a escalas macroscópicas.
- Fluctuaciones
- Autoreorganización
- **Macroscópicas**
  - Polímeros
  - Interfaces
- **Microscópicas**
  - Coloides
  - Geles
  - Cristales líquidos

### **Fluctuaciones y Movimiento Browniano**

- Partes pequeñas que tienen movimiento aleatorio
- Fluctuaciones térmicas

### **1.2.4. Materia sólida**

Cristalografía clásica: Sistemas que se representan como puntos con patrones específicos.

- Grupos de traslación (redes Bravais)
- Traslación y simetría (grupos de Schöenflies)

### **1.2.5. Fases de la materia**

	Ordenadas	No ordenadas
Clásica	Hielo de agua	Agua líquida
Cuántica	Ferromagnética	
	Antiferromagnética	

**1.2.6. Conjuntos de puntos:**

- Conjunto unitario: tiene un solo elemento.
- La union contable de conjuntos unitarios suma un conjunto de puntos.
- Un conjunto de puntos,  $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ , es un conjunto discreto si  $x \in \Lambda$  tiene una vecindad abierta  $U = U(x) \subset \mathbb{R}^d$  que no tiene ningún elemento de  $\Lambda$ .
- Para cada  $x \in \Lambda$ , existe un radio de empaquetamiento  $r > 0$  tal que  $B(r)$  es una hipersfera de radio  $r$  tal que  $B_r(x) \cap \Lambda = \{x\}$ .
- Por otro lado,  $\Lambda$  es uniformemente discreto si hay una vecindad abierta,  $U$ , de  $0 \in \mathbb{R}^d$  tal que  $(x + U) \cap (y + U) = \emptyset$ . Se cumple para todo  $x, y \in \Lambda$  la suma y diferencia de Minkowski para dos conjuntos  $U \pm V := \{u \pm v | u \in U, v \in V\}$
- Para un conjunto discreto se tiene una distancia mínima entre puntos. Los subconjuntos de  $\mathbb{Z}$  son uniformemente discretos. Pero podemos construir conjuntos discretos no uniformes, por ejemplo:  $A = \{\frac{1}{n} | n \in \mathbb{N}\}$
- Un conjunto  $\Lambda$  es localmente finito, si para todos los conjuntos  $K \subset \mathbb{R}^d$ ,  $K \cap \Lambda$  es un conjunto finito o  $\emptyset$ . “Cuando  $\Lambda$  es un conjunto de puntos, también es localmente finito si y solo si es discreto y cerrado.” Además,  $\Lambda$  es relativamente denso si existe un conjunto compacto  $K \subset \mathbb{R}^d$  tal que  $\Lambda + K = \mathbb{R}^d$ .
- Un conjunto de puntos  $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$  es un conjunto de Delone (Delany), “un Delone” si es uniformemente discreto y relativamente denso.
- Para cualquier conjunto de Delone,  $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$  se puede elegir un radio de empaquetamiento  $r$  y otro de “recubrimiento”,  $R$  tal que  $U = B_r(0)$  (hipersfera) y  $K = \overline{B_R(0)}$  son vecindades apropiadas para confinar  $\Lambda$ .
- Un conjunto de puntos  $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$  es un conjunto de Meyer, “un Meyer”, si  $\Lambda$  es relativamente denso y  $\Lambda - \Lambda$  es uniformemente discreto.
- Todos los conjuntos de Meyer son de Delone, pero no todos los conjuntos de Delone son de Meyer.

**Por ejemplo:**

$$\begin{aligned}\Lambda &= \left\{ n + \frac{1}{n} | n \in \mathbb{Z} \setminus 0 \right\} \\ &= \left\{ 2, 2\frac{1}{2}, 3\frac{1}{3}, \dots \right\}\end{aligned}$$

- Es uniformemente discreto.
- Tiene un radio de empaquetamiento  $r = 1/4$
- Es relativamente denso

- Radio de recubrimiento  $R = 2$

Es un conjunto de Delone. No es un conjunto de Meyer.

- Un conjunto de puntos  $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$  son puntos de red (grid). O simplemente una red en  $\mathbb{R}^d$  si existen  $d$  vectores  $\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_d$  tal que

$$\Gamma = \mathbb{Z}b_1 \oplus \dots \oplus \mathbb{Z}b_d := \left\{ \sum_{i=1}^d m_i b_i \mid \forall m_i \in \mathbb{Z} \right\}$$

y que además, si  $\mathbb{R}^d$  es generado por  $\{b_1, \dots, b_d\}$  es una base de la red  $\Gamma$ . Es un conjunto de Meyer, y consecuentemente, es un conjunto de Delone.

### Celda de Voroni y celda de Delone:

Considere un conjunto de puntos localmente finito  $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$  y  $\Lambda \neq \emptyset$ . Entonces el dominio de Voronoi o celda de Voronoi para  $a \in \Lambda$  es  $V(a) := \{x \in \mathbb{R}^d \mid \|x - a\| \leq \|x - b\| \forall b \in \Lambda\}$

Donde  $\|\bullet\|$  es la métrica euclídeana.

$V(a)$  es cerrada en volumen y es abierta en muchas ocasiones en las fronteras.

$V(a)$  tiene un hipervolumen finito y no nulo.

$V(a)$  no necesariamente es compacta. ( $A \cup B = \text{Universo}$ ,  $A \cap B = \emptyset$ ),  $\Rightarrow A$  es compacto).

La colección de todas las celdas de Voronoi forman una teselación cara a cara de  $\mathbb{R}^d$ .

En particular, dos celdas de Voronoi distintas pueden intersectarse.

El conjunto de celdas forma un espacio euclidano llamado Complejo de Voronoi.

El dual geométrico del complejo de Voronoi, es otro conjunto de celdas de Delone y se llama Complejo de Delone.

### 1.2.7. Grupos finitos:

- En cristalografía son importantes los grupos de moléculas
- Grupo lineal general en  $\mathbb{R}^d$   $GL(d, \mathbb{R})$ : Todas las matrices de dimensión  $d \times d$  y que todas sus entradas son invertibles.
- Grupo ortonormal especial o grupo de rotación: el subgrupo de rotaciones que preservan la orientación.

### Grupos finitos más usados en cristalografía

- Grupo cíclico de orden  $n$ ,  $C_n$  que satisface que si  $g^n = e$  entonces  $g^{ln} = e \forall l \in \mathbb{Z}$  y  $e$  : elemento neutro.
- Grupo didral de orden  $2n$ :

$$D_n = \langle g, h \mid g^n = h^2 = (gh)^2 = e \rangle$$

- 4-grupo de Klein.

$$D_2 = C_2 \times C_2$$



- Grupo de permutación: tiene  $n$  símbolos  $S_n$ , para  $n > 1$  su subgrupo de índice 2 permutaciones se llama grupo alternado o alternante.

$$A_n = \{\sigma \in S_n : \|\sigma\| \text{ es par}\}$$

- Grupos de simetría de polítopos regulares:



- Grupo tetraedro  $T_d \cong S_4$ : rotaciones y reflexiones del tetraedro.
- Grupo octaedro  $O \cong S_4$ : Preserva orientaciones de cubo y octaedro.
- Grupo icosaedro  $Y_h = Y \times C_2$ :  $Y$  subgrupo de rotaciones.

### 1.2.8. Cálculo de las celdas de Voronoi y de Delone

Propiedades de la celda de Voronoi  $V(a)$ :

1. Es una celda cerrada.
2. Hipervolumen no nulo.
3. No es necesariamente compacta.
4. Cada punto de conjunto de puntos tiene su propia celda.

El conjunto de celdas de Voronoi forma un complejo de Voronoi, que es una teselación del espacio.

El dual geométrico del complejo de Voronoi se llama complejo de Delone.

Se llama celda de Voronoi en honor de Georgy Voronoi (1868-1908).

Se llama celda de Delone en honor a Boris Delone (1890-1980).

#### Algoritmo de Fortune

Propuesto por Steve Fortune.

*Entrada:* El conjunto de puntos  $\{p_1, \dots, p_n\}$ . El índice del punto donde se calcula

*Salida:* La celda de Voronoi.

1. Iniciar
2.  $cell_i \leftarrow S$
3.  $P_i \leftarrow (x_i, y_i)$
4. Para todos los puntos  $i \neq j$  hacer:
  - a)  $P_j \leftarrow (x_j, y_j)$
  - b)  $R_j \leftarrow$  línea que une  $P_i$  y  $P_j$ .
  - c)  $PM_i \leftarrow$  punto medio entre  $P_i$  y  $P_j$ .
  - d)  $\bar{R}_j \leftarrow$  línea perpendicular a  $R_j$  en  $PM_i$

- e)* Hallar la intersección de  $cell_i$  y  $\bar{R}_j$ .
- f)* Si  $R_j$  y  $L$  se cruzan en 0 o 1 punto, continua.
- g)* Si no,  $cell_i \leftarrow$

## Capítulo 2

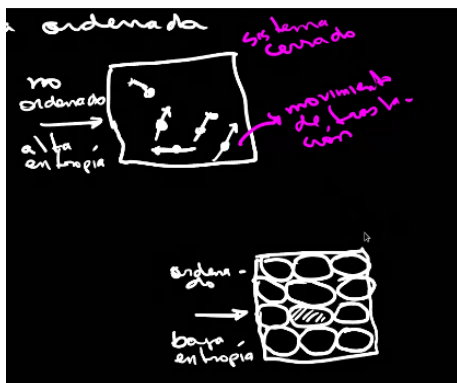
# Estructuras cristalinas y enlaces cristalinos

1. Red cristalina y tipos de cristales.
2. Redes de Bravais.
3. Planos cristalinos.
4. Índices de Miller.
5. Análisis cristalográfico.
6. Factor de dispersión.
7. Factor geométrico de estructura.
8. Red recíproca.
9. Enlaces en cristales de gases inertes (iónicos, metálicos, covalentes).

### 2.1. Red (estructura) cristalina y tipos de cristales

#### 2.1.1. Los sólidos:

- Los sólidos presentan una estructura cristalina ordenada.



## 2.2. Redes de Bravais

La estructura cristalina se estudia mediante las redes de Bravais.

- Pueden ser en 1D, 2D, y 3D.
- La periodicidad de la red era desconocida antes del análisis con Rayos X.  
→ la regularidad de los cristales macroscópicos debía seguir a nivel micro.  
La confirmación experimental viene de 1913 cuando Bragg estudia la difracción de rayos X por estas estructuras.
- Las redes de Bravais especifican los arreglos periódicos en los cuales se repiten las unidades cristalinas.
- Estas unidades cristalinas pueden ser átomos (cristal atómico), moléculas (cristal molecular), grupos de átomos, grupos de moléculas, iones, grupos de iones, etc.
- La red de Bravais resume la geometría del cristal, y es independiente de las unidades cristalinas.

*“Una red de Bravais es un conjunto infinito de puntos discretos con un arreglo y orientación que parece exactamente la misma desde cualquier punto.”*

*“Una red tridimensional de Bravais es el conjunto de puntos dados por el vector de posición  $\vec{R} = n_1\hat{a}_1 + n_2\hat{a}_2 + n_3\hat{a}_3$  donde  $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$  y  $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3$  son vectores no-coplanares, se llaman vectores primitivos y son una base de  $\mathbb{R}^3$ .”*

- Una base de un espacio genera un conjunto de puntos que pertenecen al espacio. Los elementos de la base son LI. Todo elemento del espacio se puede escribir como una combinación lineal de los elementos de la base.
- Aunque el término “Red de Bravais” corresponde al conjunto de puntos, también se usa para referirse al conjunto de vectores que unen estos puntos, y también al conjunto de las traslaciones determinadas por esos vectores.
- La red de Bravais en 1D es:  $\gamma := \{m_1\vec{b}_1 | \forall m_1 \in \mathbb{Z}\}$

### 2.2.1. Número de coordinación

- En una red de Bravais, los puntos más cercanos a un punto de interés son sus próximos vecinos y dada la periodicidad de la red, cada punto tiene el mismo número de próximos vecinos y este es un número de coordinación.

### 2.2.2. Celda primitiva

- El paralelepípedo definido por los ejes del cristal (vectores primitivos) se llama celda primitiva.
- Usando el conjunto de traslaciones, la celda primitiva llena el espacio. La celda primitiva forma una teselación del espacio.

- Hay muchas formas de elegir vectores primitivos. pero vamos a llamar celda primitiva a la celda de menor hipervolumen.
- Siempre hay un punto de la red por celda primitiva.
- El hipervolumen de la celda es:

$$V_c = |\vec{a}_1 \cdot \hat{a}_2 \times \hat{a}_3|$$

### Simetrías:

- × Continuas: Grupos de Lie.
- ✓ Discretas: Grupos finitos.

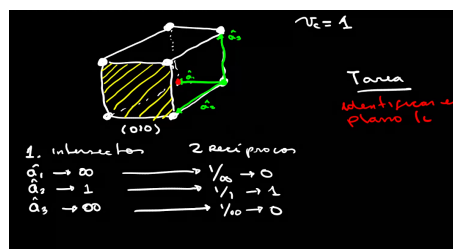
Fenómeno	Fenómeno natural	Simetría rota	excitación atómica
Fenómenos ópticos Antiferromagnetismo	Fenómenos ópticos ↑↑↑↑↑	Simetría espacial	ondas ópticas
Fenómenos magnéticos Antiferromagnetismo	Fenómenos magnéticos ↑↑↑↑	Simetría temporal	ondas de spin
Superconductividad	Superconductividad	Invariancia gauge	electrones
Superfluidos	Superfluidos	simetría temporal	fonones, rotones
Crystallization	crustales	fractura	Fonones

Figura 2.1: Tabla

### 2.2.3. Planos cristalinos

- La orientación de un plano está determinada por tres puntos en el plano.
- Si cada punto está en un eje distinto, el plano se puede especificar dando las coordenadas del punto.
- Según el procedimiento de Kittel
  1. Hallar los interceptos con los ejes en términos de las constantes de la red. Los ejes pueden ser los de la celda primitiva o no.
  2. Tomar los recíprocos de esos números y reducirlos a los tres enteros con la misma razón.
  3. El plano se denota con la triada de estos números (que se llaman “índices del plano”).

#### Ejemplo:



**■ Índices de Miller**

- La correspondencia entre los vectores primitivos y los índices de planos es una forma conveniente
- Los índices de Miller son las coordenadas del vector recíproco más pequeño y normal al plano.
- Los índices  $(h, k, l)$  describen al plano normal al vector  $h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$
- Conversión: Los planos de una red se expresan en términos de los índices de Miller.