Estado Solido

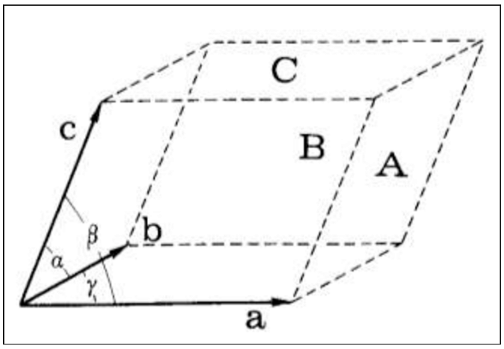
Cuestionario II

Marco Antonio Rodríguez de León [1941556]

1.- Explicar, (a) ¿Cómo se define una celda unitaria? (b) ¿Cómo se define una celda unitaria primitiva? (c) Definir punto de red (toda explicación aplicarla para 2D y 3D).

a) Una celda unitaria es la estructura mas pequeña y compacta de una estructura o arreglo cristalino, la cual mantiene todas las propiedades primordiales de los elementos en la red. La union de un conjunto de estas celdas, conforma la red cristalina de un solido. Las celdas unitarias ($\mathbb{R}^2$), conforman paralelogramos que al trasladarse llenan todo el espacio.

Para cada celda unitaria, tienen asociadas constantes de red, espaciales (a, b, c) y angulares (α, β, γ) para $\mathbb{R}^3$; las cuales determinan la forma de la red.

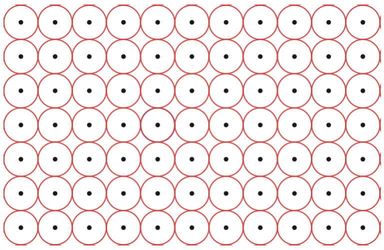


b) Las celdas unitarias primitivas, son aquellas celdas unitarias las cuales contienen un unico punto de red por celda. Es decir, no hay elementos interiores en la celda, sino unicamente en los vertices.

c) Los puntos de red, son puntos en el espacio que conforman la red. Estos puntos representan elementos, atomos o compuestos; los cuales mediante sus interacciones o enlaces, describen la geometria y por ende a la red cristalina.

2.- (a) Describir en qué consiste el arreglo compacto en 2D (b) Partiendo del arreglo compacto en 2D, explicar cómo se conforman los dos arreglos compactos en 3D,detallando el tipo de apilamiento.

a) Las estructuras cristalinas nacen de las interacciones entre los atomos/compuestos (representados por puntos de red), y sus enlaces (representados por rectas que unen puntos de red). Dado el prinicipio de minima energía, los sistemas buscan estar en equilibrio. Esto se obtiene de forma que, si se consideran los puntos de red como centros de circulos de radio r, las cuales son tangentes a todas las otros circulos adyacentes, se genera un conjunto compacto:



Al espacio vacio en el arreglo, se les conoce como: sitios intersticiales.

b) Al extrapolar las formas compactas en $\mathbb{R}^3$, se tiene en lugar de circulos, esferas de radio r, las cuales deberan ser adyacentes a sus respectivas esferas. De esta forma, los elementos del arreglo (atomos), mediante sus interacciones, determinaran las distancias o radios de las esferas y sus respectivas estructuras de equilibrio. Consigo, construir la estructura cristalina.

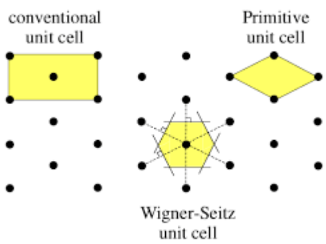
3.- Explicar (a) Qué es el espacio recíproco (b) Qué es la celda de Wigner-Seitz (c) Qué son las zonas de Brillouin.

a) Las redes cristalinas se pueden definir mediante sus constantes de red: $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ las cuales conforman lo que se conoce como: espacio real. No obstante, en la practica, al observar los solidos, lo que se muestran son puntos en un espacio caracteristico. Este espacio, tiene la propiedad de poder ser descrito mediante las constantes: $(\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3)$, tales que: $\vec{b}_i$ es ortogonal a $\vec{a}_i$ y su volumen es 2π. Lo anterior puede ser descrito mediante:

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

De dicha forma, se puede conocer la estructura de la red, observando los resultados experimentales.

b) La celda de *Weigner-seitz*, es una celda conformada por planos bisectrices perpendiculares a los vectores de la red, que unen a los primeros vecinos de un punto de red dado. Esto es, unir los primeros vecinos o puntos de red proximos a un punto de red especifico. Posteriormente, se generan a la immtad de dichas rectas, rectas perpendiculares. Finalmente, se construye el poligono que se forma con los planos perpendiculares y sus intersecciones.



c) Las celdas de Brillouin, son las respectivas celdas de Weigner-Seitz en el espacio reciproco. Al volumen mas pequeño acotado por los planos bisectrices perpendiculares a los vectores de la red reciproca que unen a un punto con sus primeros vecinos, se les conoce como: primera zona de Brollouin.

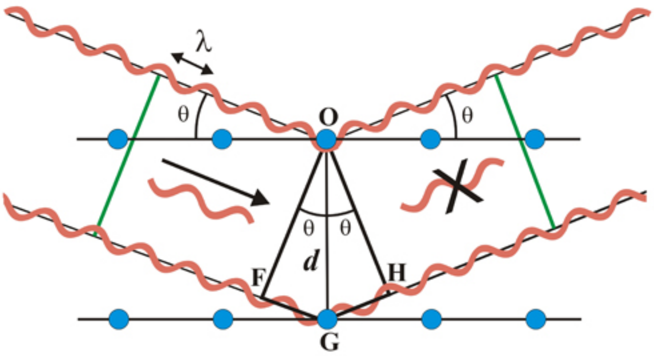
4.- (a) Describir el proceso de generación de rayos X como herramienta analítica para el análisis de estructura cristalina.

Tomando una estructura cristalina dada, a la cual se le inciden rayos X, estos seran difractados con cierto angulo a un punto del espacio. El analizar las distancias a donde se difractan, el angulo de incidencia, y la longitud de onda del rayo, se obtiene consigo un patron caracteristico para la estructura cristalina. Al ser rayos de alta energia y velocidades, su comportamiento ondulatorio es sumamente importante. Por lo que, la descripción mediante ondas constructivas y destructivas, genera patrones caracteristicos de los cristales. Mismos los cuales, mediante analisis del material, pueden determinar los planos y constantes de red.

5.- Describir y explicar en qué consiste la aproximación de Bragg.

Sea una estructura cristalina a la cual se le inciden rayos X con energia definida. De la relación de Einstein-Planck: $E = hc/\lambda$, se obtiene que la longitud de onda del rayo, determina la energia del sistema. Al chocar los rayos X con un atomo de la red, este sera difractado con un angulo especifico (θ) dada las propiedades estructurales del mismo compuesto (carga electrica). Dicha interacción, para dos rayos que inciden en dos atomos de la red a una distancia d, puede ser descrita matematicamente mediante:

$$d = \frac{\lambda}{2sin(\theta)}$$



Esto quiere decir que, si se tiene la energia o longitud de onda de los rayos X incididos, y el angulo con el que se difracta; se conocera la distancia entre los atomos adyacentes. No obstante, dicha expresión no es tan general. Realmente, estos rayos, por principios cuanticos, difractan en ciertos angulos. Mismos que, son multiplos enteros de esta distancia.

$$d = \frac{n\lambda}{2sin(\theta_n)}$$

Finalmente, mediante la relación:

$$d = \frac{1}{\sqrt{h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2}}$$

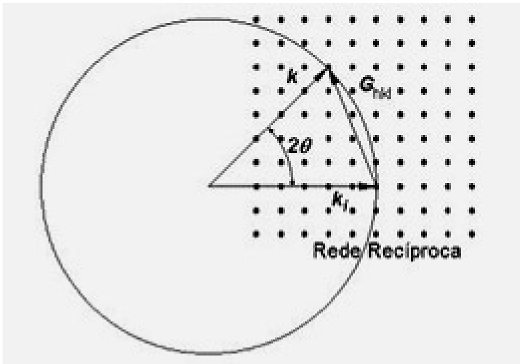
se es capaz de determinar las constantes de red y los planos de la red reciproca.

6. (a) Describir y explicar cómo se construye la esfera de Ewald (b) Describir y explicar en qué consiste la aproximación de Von Laue.

a) La esfera de Ewald es una construcción en el espacio reciproco. Se genera por la intersección de un haz, usualmente rayos X, donde los atomos del cristal actuan como divisores o difusores (dispersan el haz).

Se construye mediante lo siguiente:

1. Localizar un punto en la red reciproca que sea el origen.
2. Trazar una esfera de radio: $r = 1/\lambda$, apartir del origen del punto en la red reciproca.
3. La difracción se da cuando la esfera toque un punto de la red reciproca.
4. La difracción del haz se dirige de origen (centro de la esfera), al punto de contacto.



Mediante un analisis geometrico y con la relación longitude de onda (λ) - energia (E), se obtiene la ley de Bragg:

$$d_{h\ k\ l} = \frac{\lambda}{2sin(\theta)}$$

b) La aproximación de Von-Laue, consiste en considerar los vectores de propagación de los rayos X incidentes, y la diferencia de camino optico. Con ello, se obtiene la ecuación general de la ley de Bragg:

$$d_{h\ k\ l} = \frac{n\lambda}{2sin(\theta_n)}$$

Donde λ es la longitud de onda del rayo, n es un entero, y θ_n el angulo refractado, o el angulo que sostiene el arco de los dos puntos con los que choca la esfera de Ewald. El parametro: $d_{h\ k\ l}$ representa la distancia entre los puntos, y esta asociada al plano ($h\ k\ l$).

7. Describir el proceso de difracción de electrones como herramienta analítica para el análisis de estructura cristalina.

El proceso de difracción de electrones permite determinar el espacio reciproco de una estructura cristalina. Al estar los atomos sumamente juntos y "quietos" (relativos a otros estados de la materia), son perfectos para que funcionen como rejillas. Mediante ello, y desarrollos de analisis teoricos sobre la dispersión de los haces y su respectiva proyección, se determina consigo el espacio reciproco. Así, dados los conocimientos teoricos de las redes cristalinas y las transformadas integrales (transformada de Fourier), se logra determinar los parametros caracteristicos de las redes.