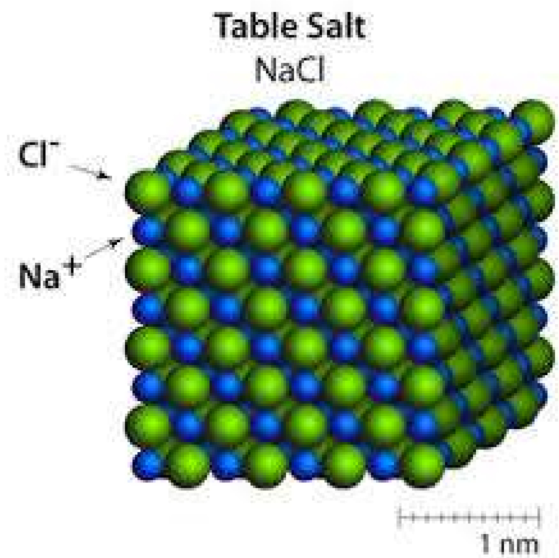
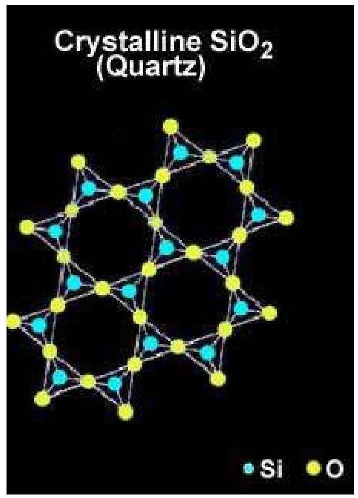
Técnicas de Caracterización – Clase II

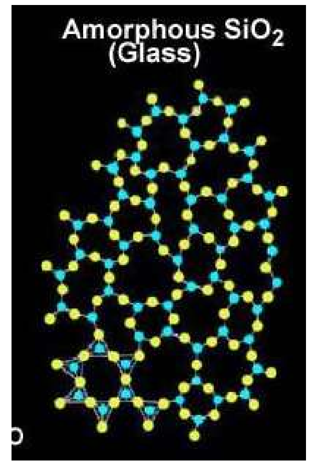
Muchas de las propiedades macroscópicas y microscópicas de la materia son el resultado de las interacciones entre las partículas que forman la materia (electrones, núcleos, defectos, etc)), para entender estas interacciones es importante conocer en primer lugar como se ordenan los átomos en los distintos materiales.

Cristales

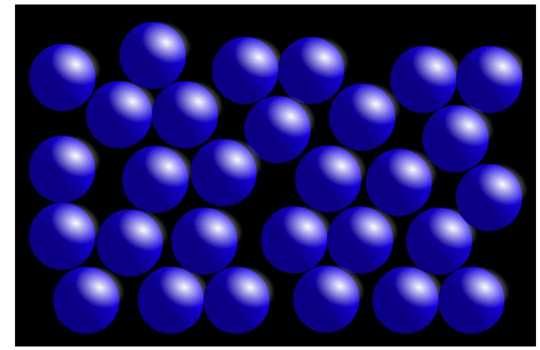




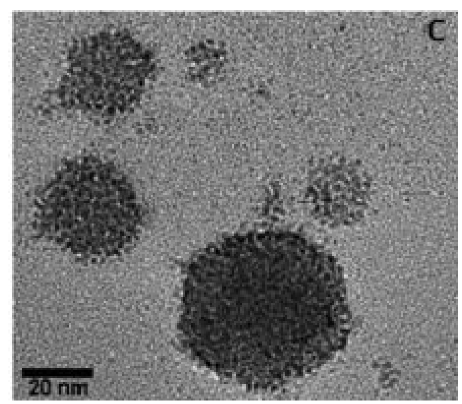
Amorfo



Líquido



Nanopartículas

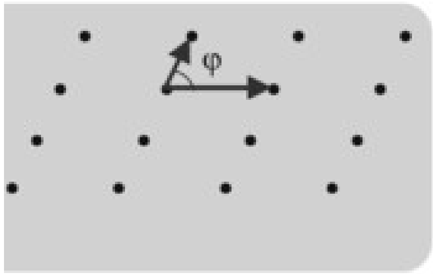


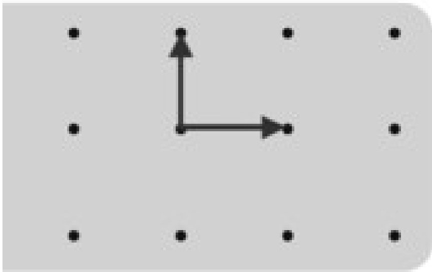
Red de Bravais

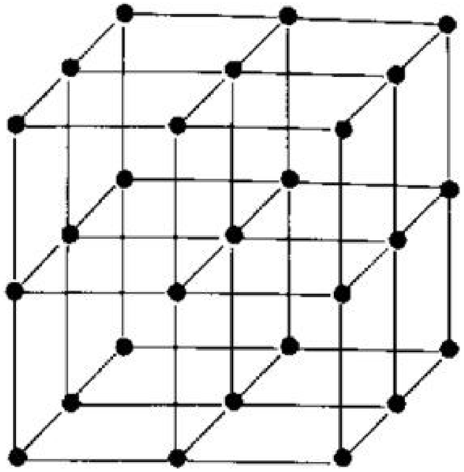
Definición 1: Una red de Bravais consiste de todos los puntos Definidos por un vector posición:

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

donde n_1, n_2, n_3 = enteros y los $\bar{a}_i$ son vectores no-coplanares que generan la red de puntos y se denominan vectores primitivos

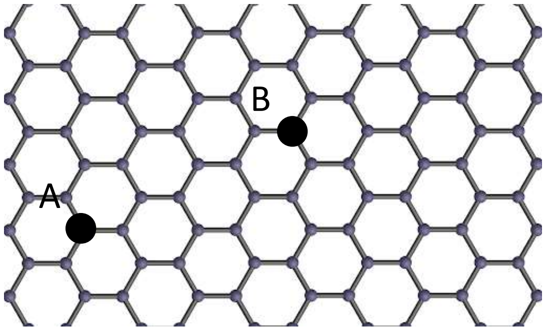


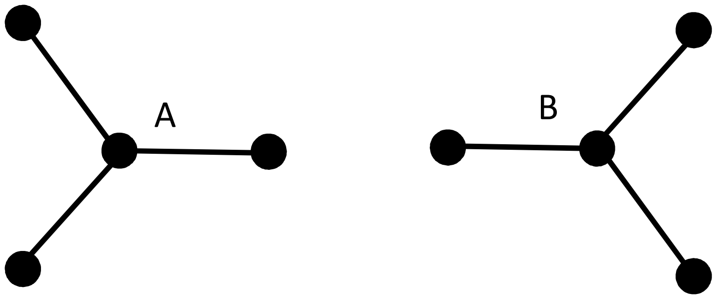




Definición 2: Arreglo infinito de puntos con una disposición y Orientación tales que el entorno se ve igual desde cualquiera de los puntos del arreglo

La red de puntos panal de abeja,
¿es una red de Bravais?





No es una red de Bravais, el punto A tiene un entorno distinto al punto B

Técnicas de Caracterización – Clase II
Periodicidad de una red de puntos

Celda primitiva: En 3D una celda primitiva define un volumen que al desplazarla según todos los vectores de la Red de Bravais llena el volumen del sólido sin dejar huecos o superponerse.

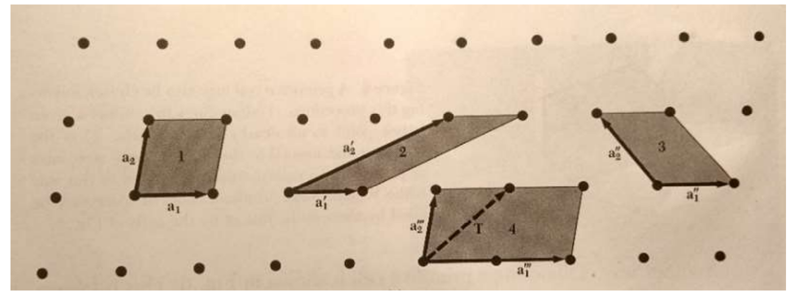
Obs. 1. La celda primitiva contiene un punto de red.

Obs. 2. De acuerdo a la definición no existe una única celda primitiva para una red de Bravais.

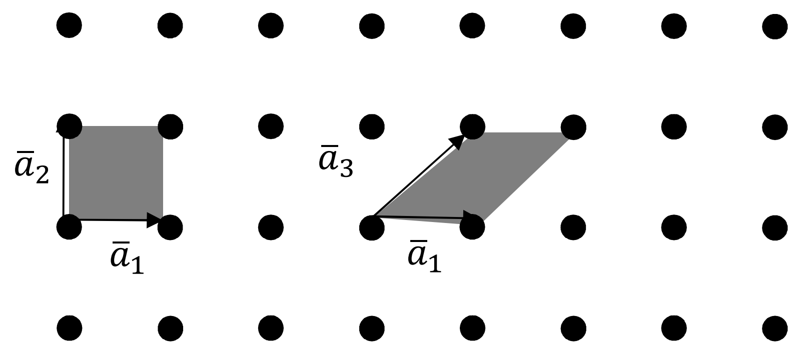
Obs. 3. El área de la celda primitiva es independiente de la Elección.

Obs. 4. En el caso de la red cuadrada se observa que la Celda primitiva definida por $\boldsymbol{a}_1$ y $\boldsymbol{a}_2$ contiene las simetrías de la red cuadrada de puntos (rotación de 90°). Este no es el Caso de la celda definida por $\boldsymbol{a}_1$ y $\boldsymbol{a}_3$.

Red oblicua en 2D

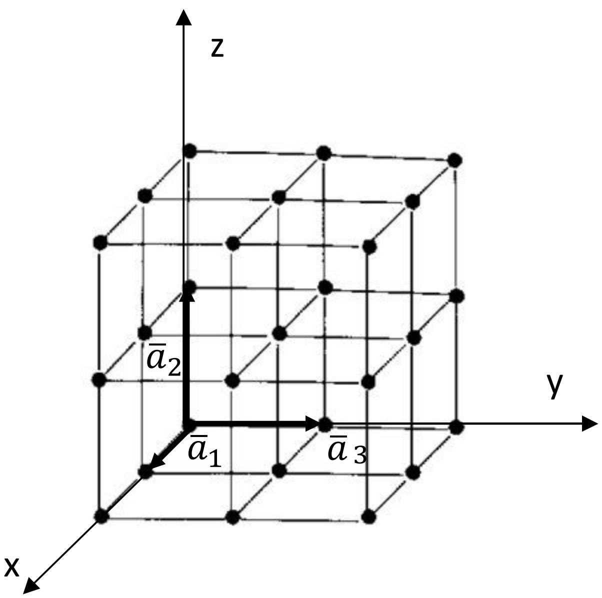


Red cuadrada en 2D



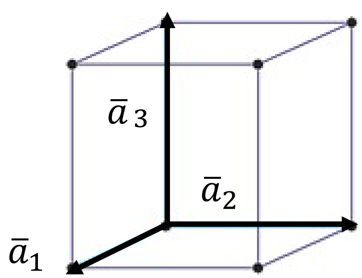
Técnicas de Caracterización – Clase II
Celdas primitivas de las Redes de Bravais cúbicas

1) Red de puntos simple cúbica (SC)



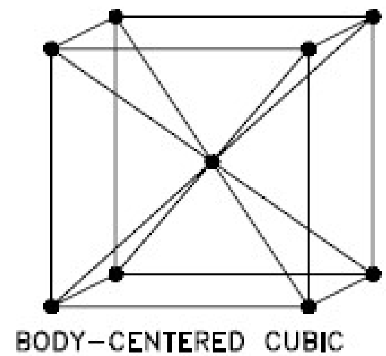
Vectores primitivos

$$\bar{a}_1 = a(1{,}0{,}0)$$
$$\bar{a}_2 = a(0{,}1{,}0)$$
$$\bar{a}_3 = a(0{,}0{,}1)$$



$$V = \bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3 = a^3$$

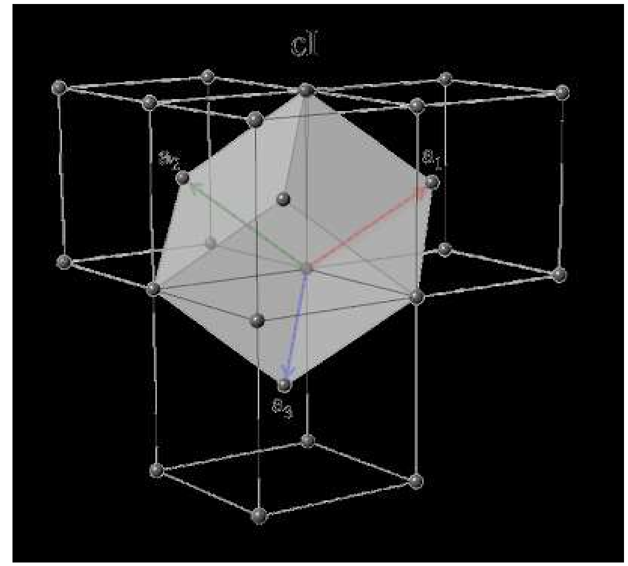
2) Red de puntos cúbica centrada en el cuerpo (BCC)



Vectores primitivos (1)

$$\bar{a}_1 = \frac{a}{2}(-1{,}1{,}1)$$
$$\bar{a}_2 = \frac{a}{2}(1{,}-1{,}1)$$
$$\bar{a}_3 = \frac{a}{2}(1{,}1{,}-1)$$
$$V = \bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3 = \frac{a^3}{2}$$

Ángulo a_1-a_2 ~ 70.5°

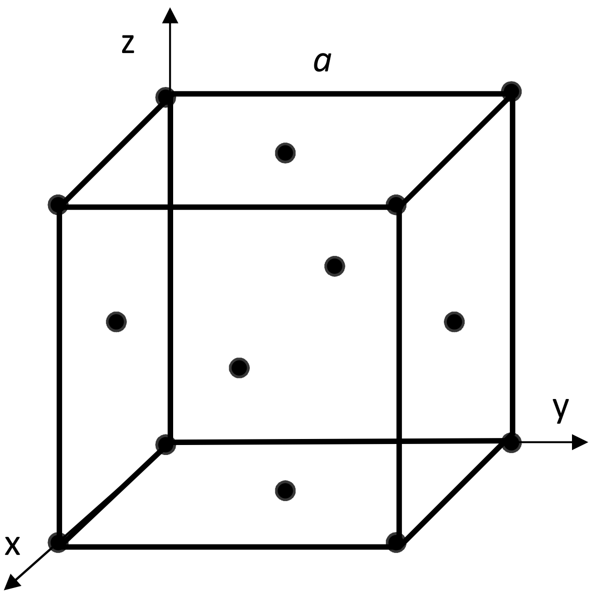


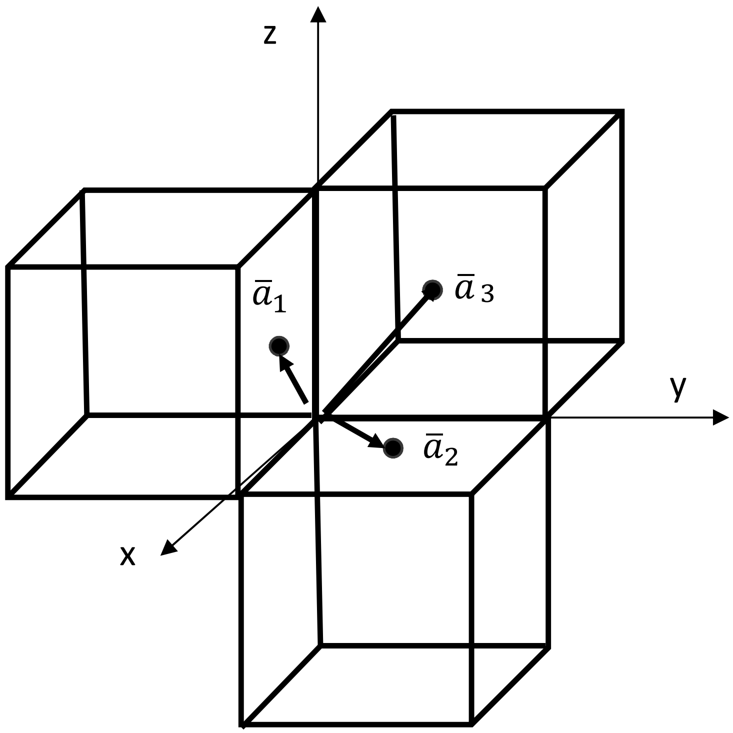
Vectores primitivos (2)

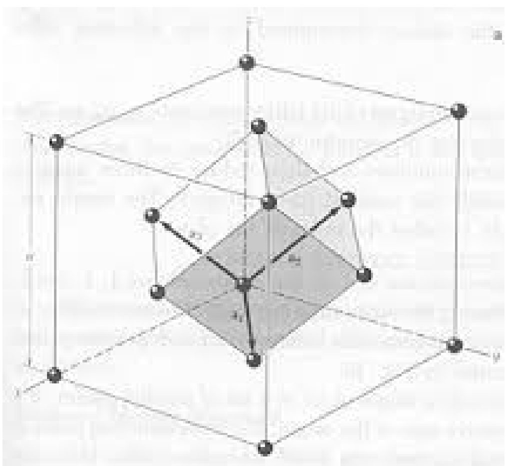
$$\bar{a}_1 = a(1{,}0{,}0)$$
$$\bar{a}_2 = a(0{,}1{,}0)$$
$$\bar{a}_3 = \frac{a}{2}(1{,}1{,}1)$$
$$V = \bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3 = \frac{a^3}{2}$$

Celdas primitivas de las Redes de Bravais cúbicas

3) Red de puntos cúbica centrada en las caras (FCC)







Vectores primitivos

$$\bar{a}_1 = \frac{a}{2}(1,0,1)$$

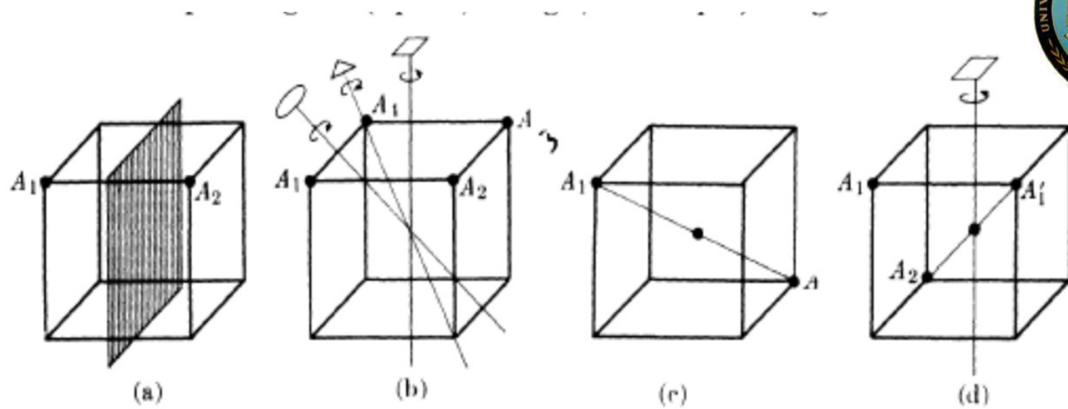
$$\bar{a}_2 = \frac{a}{2}a(1,1,0)$$

$$\bar{a}_3 = \frac{a}{2}(0,1,1)$$

$$V = \bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3 = \frac{a^3}{4}$$

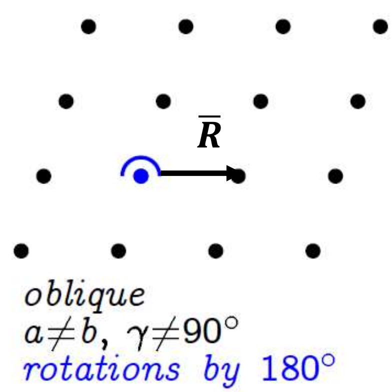
Ángulo a_1-a_2 ~ 60°

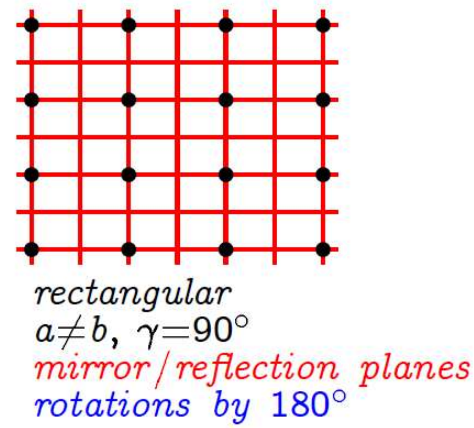
Las Redes de Bravais y los cristales que vamos a construir a partir de ellas exhiben distintas tipos de simetría. Estas operaciones de simetría son tales que luego de realizadas mantienen invariante la red de puntos de la Red de Bravais y nos van a interesar para la definición de lo que vamos a denominar **celda convencional o unidad**:



Operaciones básicas

1- Translación
2- Reflexión a través de un plano espejo
3- Rotación alrededor de un eje un ángulo $2\pi/n$ donde n = 1,2,3,4,6.
4- Operación de inversión

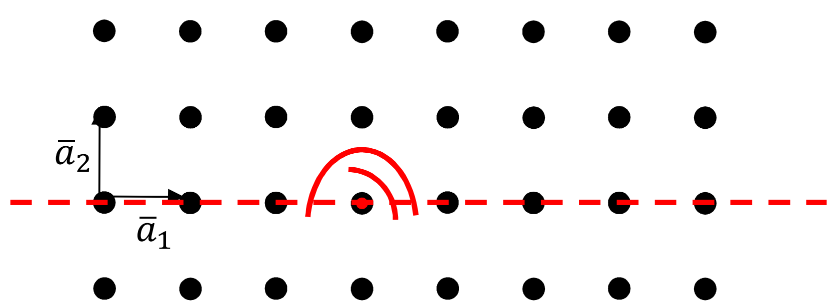




Operaciones compuestas. Consisten de una combinación de las operaciones básicas

1- Operación de rotación+traslación
2- Operación de rotación+inversión
3- Reflexión + traslación

Red cuadrada en 2D



Rotación de 90° y de 180°
Planos espejos

Técnicas de Caracterización – Clase II
Celda Unidad – Sistemas cristalinos

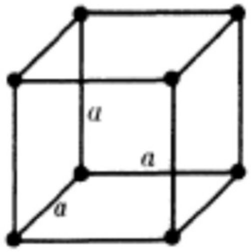
Celda unidad o convencional : La celda unidad es un volumen que puede desplazarse según un SUBCONJUNTO de vectores de la RB y llenar todo el volumen del sólido sin dejar huecos ni superposiciones. La celda unidad es usualmente elegida con un volumen mayor (o eventualmente igual) a la celda primitiva que tengan lo que vamos a denominar SIMETRIA ESCENCIAL de la Red de Bravais.

Vectores de red: Son los vectores que definen la Celda unidad

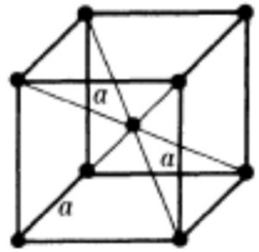
Descripción de la celda unidad: Se utilizan 6 parámetros, el módulo de los vectores de red, a, b, c y los ángulos entre los lados de la celda α, β, γ.

Sistemas cristalinos	Longitud vectores de red	Angulos	Red de Bravais	Símbolo	Simetría escencial
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	**Simple** **BCC** **FCC**	**P** **I** **F**	**4 ejes de orden 3**
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	**Simple** **BCC**	**P** **I**	**1 eje de orden 4**
Ortorrómbico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	**Simple** **BCC** **Centrada en la base** **FCC**	**P** **I** **C** **F**	**3 ejes de orden 2**
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90°$ $\beta \neq 90°$	**Simple**	**P**	**1 eje de orden 2 o un plano espejo**
Triclinico	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	**Simple**	**P**	**ninguno**
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$	**Simple** **Centrada en la base**	**P** **C**	**1 eje de orden 6**
Trigonal	$a = b = c$	$\alpha = \gamma = \beta \neq 90°$	**Simple**	**P**	**1 eje de orden 3**

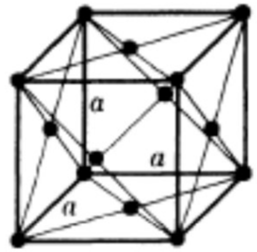
Técnicas de Caracterización – Clase II
Celda Unidad – Redes de Bravais



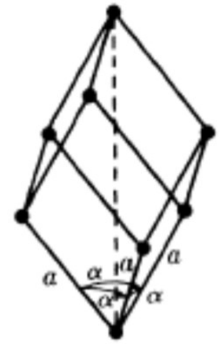
SIMPLE CUBIC (*P*)



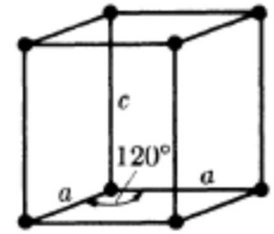
BODY-CENTERED CUBIC (*I*)



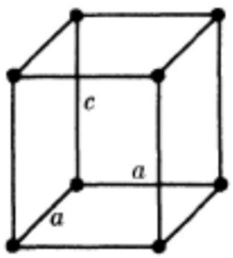
FACE-CENTERED CUBIC (*F*)



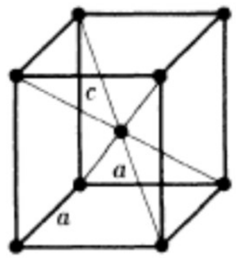
RHOMBOHEDRAL (*R*)



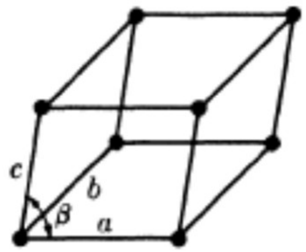
HEXAGONAL (*P*)



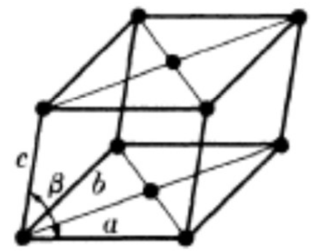
SIMPLE TETRAGONAL (*P*)



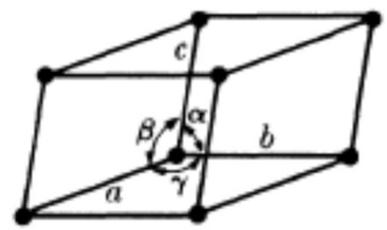
BODY-CENTERED TETRAGONAL (*I*)



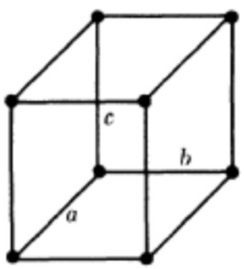
SIMPLE MONOCLINIC (*P*)



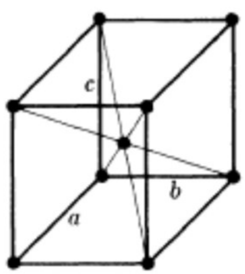
BASE-CENTERED MONOCLINIC (*C*)



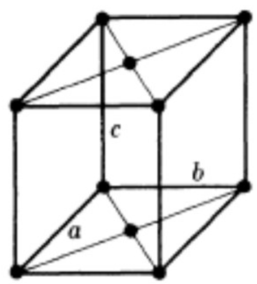
TRICLINIC (*P*)



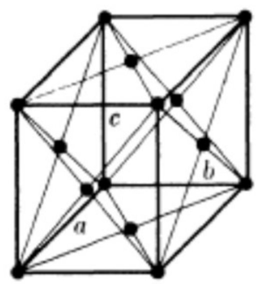
SIMPLE ORTHORHOMBIC (*P*)



BODY-CENTERED ORTHORHOMBIC (*I*)



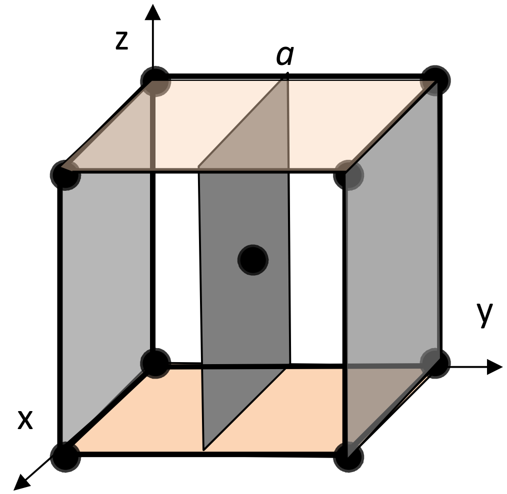
BASE-CENTERED ORTHORHOMBIC (*C*)



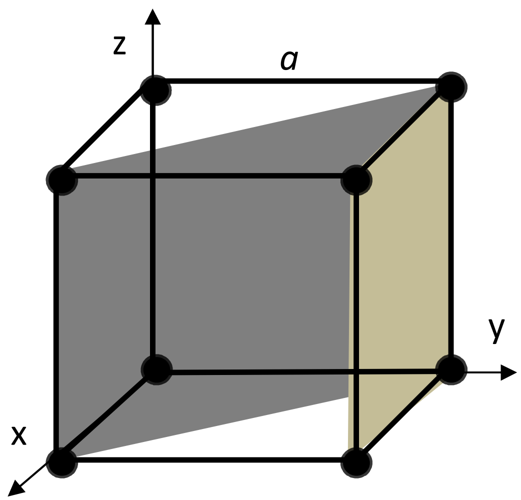
FACE-CENTERED ORTHORHOMBIC (*F*)

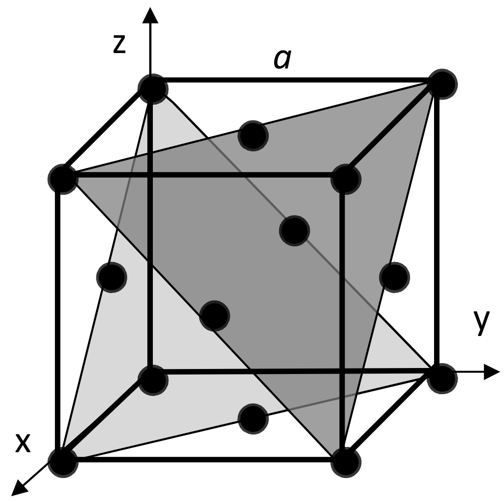
Planos de red, Índices de Miller, direcciones cristalinas

Algunas definiciones

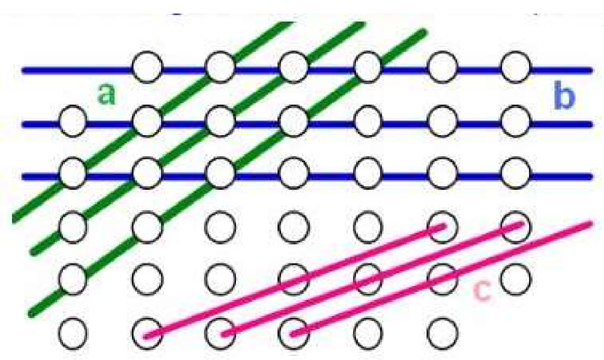


Planos de red: Dada una red de Bravais, un plano de red es aquél que contiene al menos 3 puntos no-colineales . Cada uno de estos planos contiene infinitos puntos.





Familia de planos de red: Son un conjunto de planos || separados una distancia ***d*** que contienen todos los puntos de la red de Bravais.

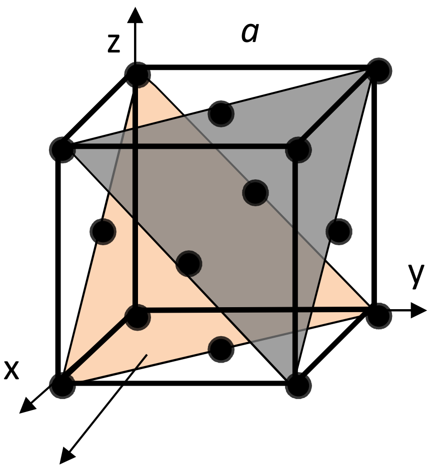


Técnicas de Caracterización – Clase II

Planos de red, Índices de Miller, direcciones cristalinas

Indices de Miller: son números que permiten identificar una familia de planos.

- Dada una familia de planos de red, tomamos aquél más cercano al origen sin que lo contenga.
- Vemos la intersección del plano con los ejes en términos de la fracción de los parámetros de red de la celda unidad.
- Se toma el recíproco y se obtienen los índices de Miller.

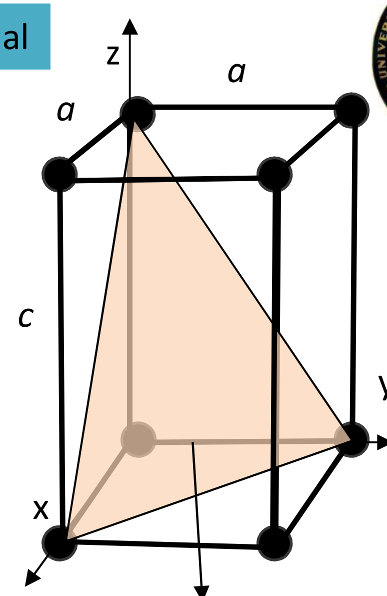


(1, 1, 1)

Índices de Miller

(1, 1, 1)

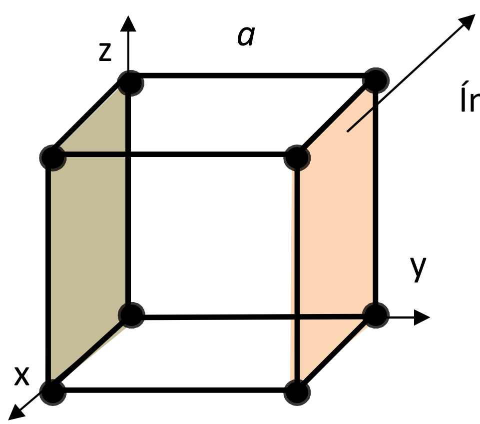
tetragonal



(1, 1, 1)

Índices de Miller

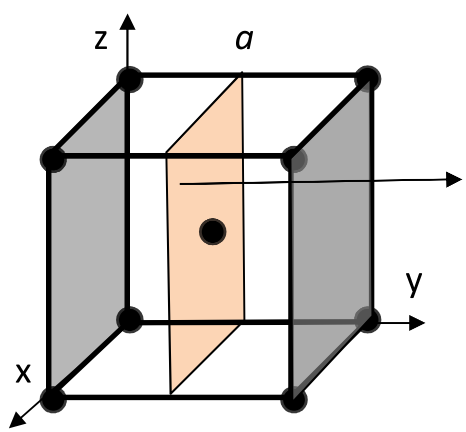
(1, 1, 1)



(∞, 1, ∞)

Índices de Miller

(0, 1, 0)

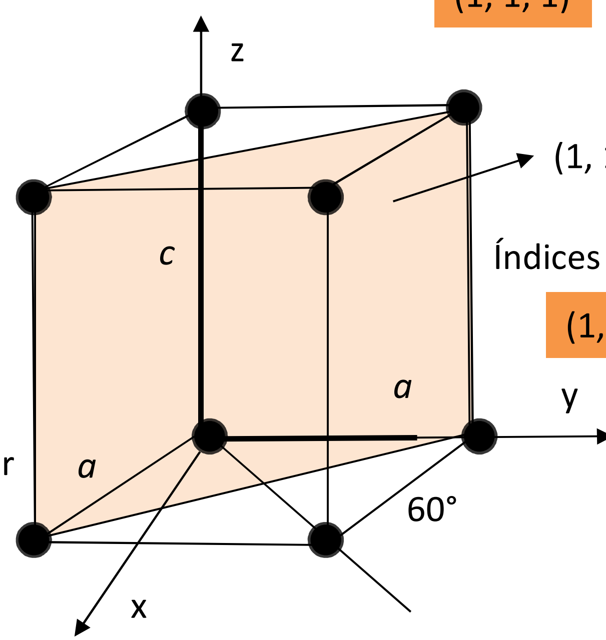


(∞, 1/2, ∞)

Índices de Miller

(0, 2, 0)

hexagonal



(1, 1, ∞)

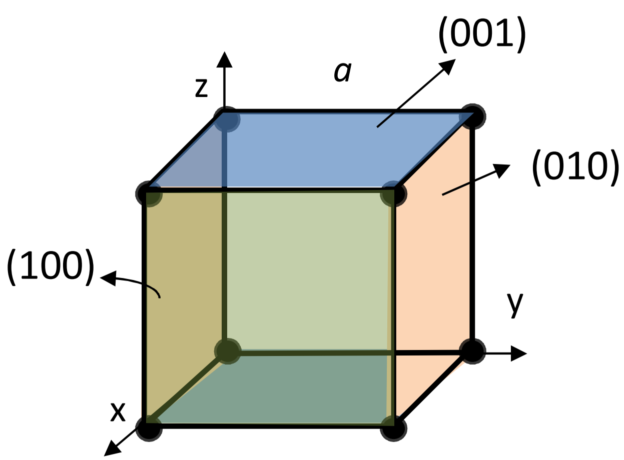
Índices de Miller

(1, 1, 0)

Planos de red, Índices de Miller, direcciones cristalinas

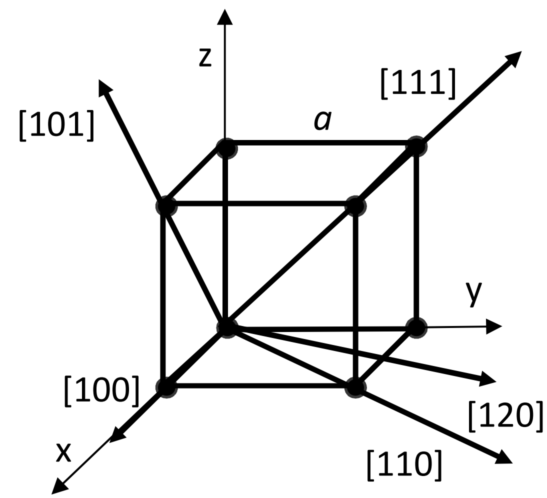
Familia de planos equivalentes: son aquellos Planos indistinguibles por una operación de Simetría y los identificamos con llaves.

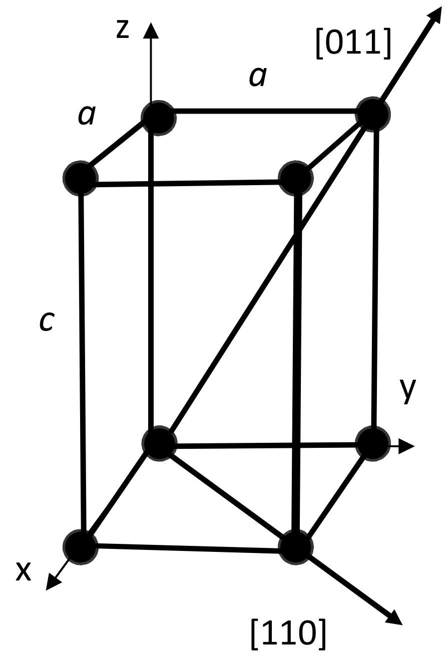
{100} → (100), (010), (001)
{110} → (011), (110), (101)



Las familias de plano (100), (010) y (001) están relacionadas por una rotación de 90 °.

Direcciones cristalinas: Se definen por las componentes según los ejes que definen la celda unidad de la dirección cristalina. Se utilizan corchetes para las direcciones y brakets para las direcciones equivalentes.





Por ejemplo en la red SC las direcciones [100], [010] y [001] son direcciones equivalentes y las indicamos como <100>. Están relacionadas por una rotación de 90 °.