



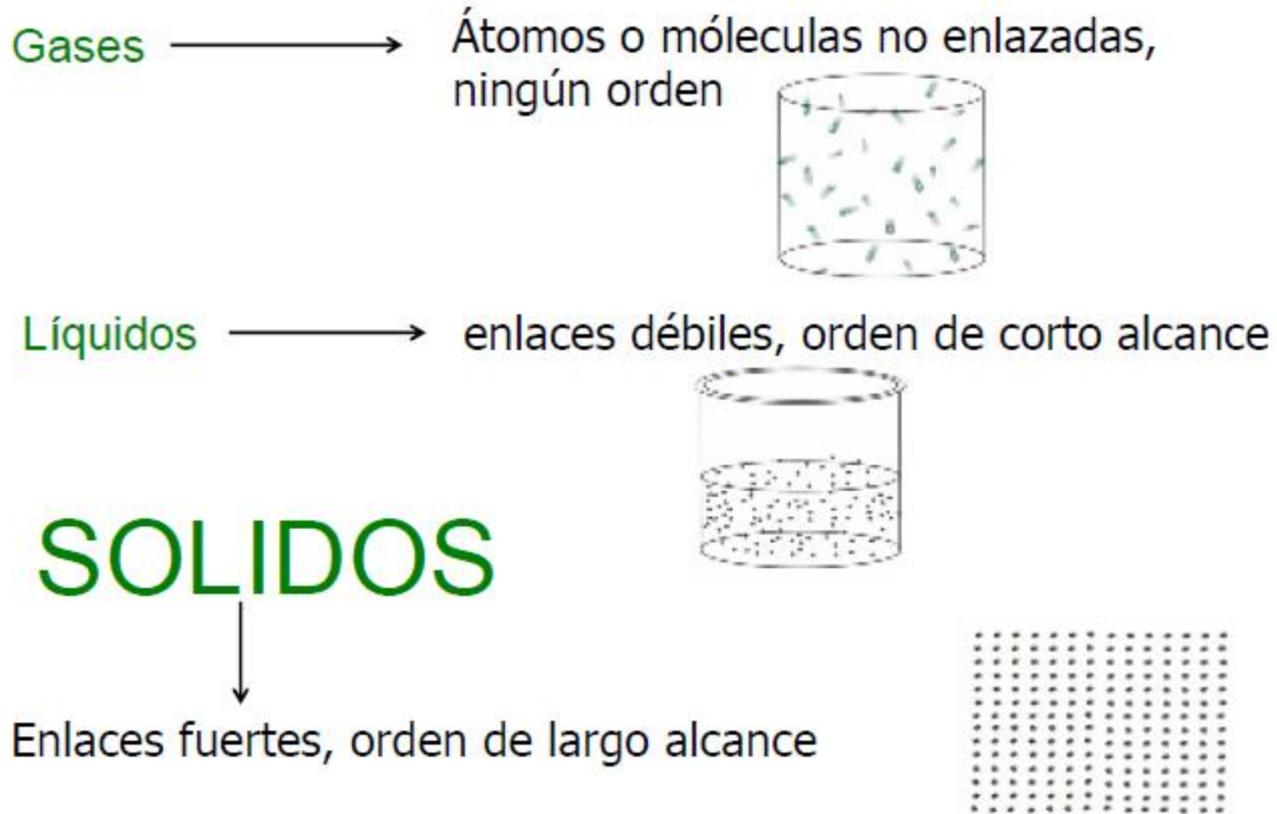
(Algunas nociones *muy* básicas de)

FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO y ESTRUCTURAS CRISTALINAS

Dina Tobia

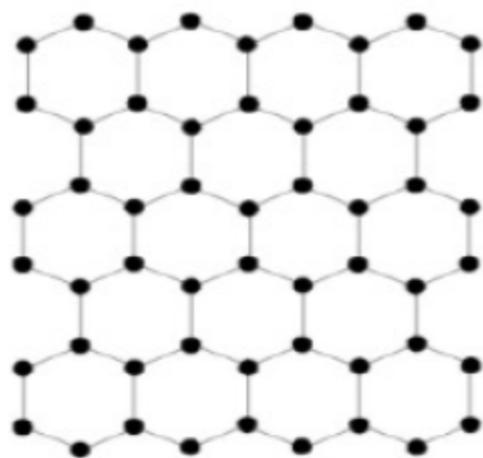
Física Experimental III – IB – U. N. Cuyo
Segundo semestre 2025

Estados de la materia

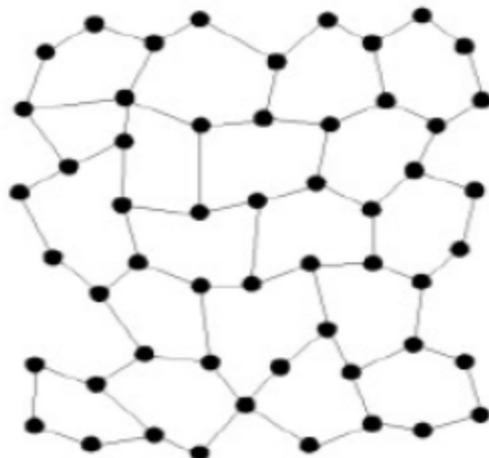


Tipos de sólidos

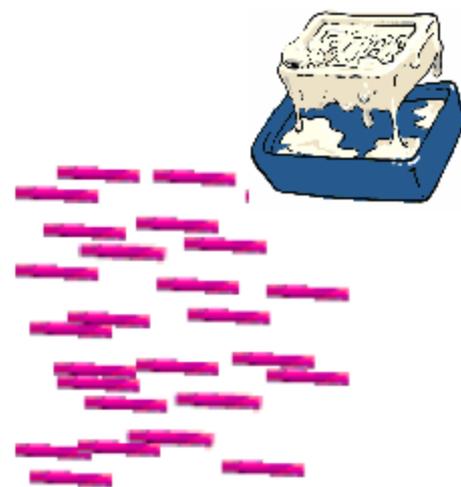
- Se diferencian dos tipos de sólidos: cristalinos y amorfos.
- Los **sólidos cristalinos** adoptan formas geométricas regulares en posiciones fijas en el espacio, alrededor de las cuales, los únicos movimientos son vibracionales.
- Los **sólidos amorfos** carecen de esta regularidad en gran extensión, por estar constituidos por macromoléculas que encuentran dificultad para acomodarse en posiciones fijas.



sólidos cristalinos



sólidos amorfos



cristales líquidos

¿Por qué es importante el estudio de los sólidos?

Temperatura °C °F K

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H Hidrógeno 1,008																	2 He Helio 4,0026
2	3 Li Litio 6,94	4 Be Berilio 9,0122											5 B Boro 10,81	6 C Carbono 12,011	7 N Nitrógeno 14,007	8 O Oxígeno 15,999	9 F Flúor 18,998	10 Ne Neón 20,180
3	11 Na Sodio 22,990	12 Mg Magnesio 24,305											13 Al Aluminio 26,982	14 Si Silicio 28,085	15 P Fósforo 30,974	16 S Azufre 32,06	17 Cl Cloro 35,45	18 Ar Argón 39,948
4	19 K Potasio 39,098	20 Ca Calcio 40,078	21 Sc Escandio 44,956	22 Ti Titanio 47,867	23 V Vanadio 50,942	24 Cr Cromo 51,996	25 Mn Manganeso 54,938	26 Fe Hierro 55,845	27 Co Cobalto 58,933	28 Ni Níquel 58,693	29 Cu Cobre 63,546	30 Zn Zinc 65,38	31 Ga Gallio 69,723	32 Ge Germanio 72,630	33 As Arsénico 74,922	34 Se Selenio 78,971	35 Br Bromo 79,904	36 Kr Kriptón 83,798
5	37 Rb Rubidio 85,468	38 Sr Estroncio 87,62	39 Y Itrio 88,906	40 Zr Circonio 91,224	41 Nb Niobio 92,906	42 Mo Molibdeno 95,95	43 Tc Tecnecio (98)	44 Ru Rutenio 101,07	45 Rh Rodio 102,91	46 Pd Paladio 106,42	47 Ag Plata 107,87	48 Cd Cadmio 112,41	49 In Indio 114,82	50 Sn Estaño 118,71	51 Sb Antimonio 121,76	52 Te Telurio 127,60	53 I Yodo 126,90	54 Xe Xenón 131,29
6	55 Cs Cesio 132,91	56 Ba Bario 137,33	57-71	72 Hf Hafnio 178,49	73 Ta Tántalo 180,95	74 W Wolframio 183,84	75 Re Renio 186,21	76 Os Osmio 190,23	77 Ir Iridio 192,22	78 Pt Platino 195,08	79 Au Oro 196,97	80 Hg Mercurio 200,59	81 Tl Talio 204,38	82 Pb Plomo 207,2	83 Bi Bismuto 208,98	84 Po Polonio (209)	85 At Astatido (210)	86 Rn Radón (222)
7	87 Fr Francio (223)	88 Ra Radio (226)	89-103	104 Rf Rutherfordio (267)	105 Db Dubnio (268)	106 Sg Seaborgio (269)	107 Bh Bohrio (270)	108 Hs Hasio (277)	109 Mt Meitnerio (278)	110 Ds Darmstatio (281)	111 Rg Roentgenio (282)	112 Cn Copernicio (285)	113 Nh Nihonio (286)	114 Fl Flerovio (289)	115 Mc Moscovio (290)	116 Lv Livermorio (293)	117 Ts Teneso (294)	118 Og Oganésion (294)

C Sólido

Hg Líquido

H Gas

Rf Desconocido



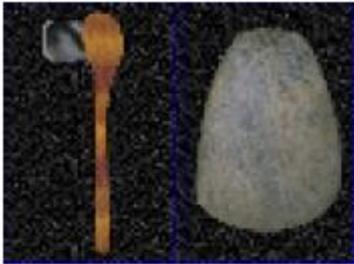
En el caso de los elementos con isotopos no estables, entre parentesis se encuentran las masas de aquellos isótopos que son más estables o más abundantes.

6	57 La Lantano 138,91	58 Ce Cerio 140,12	59 Pr Praseodimio 140,91	60 Nd Neodimio 144,24	61 Pm Prometio (145)	62 Sm Samario 150,36	63 Eu Europio 151,96	64 Gd Gadolinio 157,25	65 Tb Terbio 158,93	66 Dy Disprosio 162,50	67 Ho Holmio 164,93	68 Er Erbio 167,26	69 Tm Tulio 168,93	70 Yb Iterbio 173,05	71 Lu Lutecio 174,97
7	89 Ac Actinio (227)	90 Th Torio 232,04	91 Pa Protactinio 231,04	92 U Uranio 238,03	93 Np Neptunio (237)	94 Pu Plutonio (244)	95 Am Americio (243)	96 Cm Curio (247)	97 Bk Berkelio (247)	98 Cf Californio (251)	99 Es Einstenio (252)	100 Fm Fermio (257)	101 Md Mendelevio (258)	102 No Nobelio (259)	103 Lr Lawrencio (266)

<https://ptable.com/?lang=es#Propiedades>

La mayor parte de los elementos son sólidos a temperatura ambiente.

Tecnología ↔ **Uso y entendimiento de los materiales**



- **Edad de Piedra:**

Se utilizan materiales naturales: piedra, madera, barro, piel, etc



- **Edad de Bronce:**

El bronce es una **aleación** cobre + < 25% de estaño + otros elementos.



- **Edad de Hierro:**

El uso del hierro y del acero (Fe + C)



- **Edad moderna:**

cerámicos, semiconductores, polímeros, etc.

Estudio de las propiedades de la materia:

Forma en la que un material responde al ambiente y a fuerzas externas.

- **Propiedades Mecánicas:** respuesta a fuerzas mecánicas, presiones, etc

-¿Por qué algunos sólidos se deforman fácilmente bajo una tensión aplicada y después vuelven a su condición original cuando se quita la tensión?

- ¿Por qué otros sólidos se rompen bajo las mismas condiciones?

¿Qué determina la velocidad de las ondas elásticas en los sólidos?



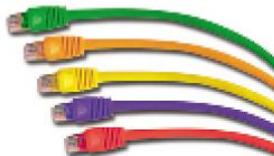
Estudio de las propiedades de la materia:

Forma en la que un material responde al ambiente y a fuerzas externas.

- **Propiedades Eléctricas:** respuesta a campos eléctricos; conductividad, resistencia, etc.

-¿Por qué son algunos sólidos buenos conductores de la electricidad y otros no?

- ¿Qué hace que la resistencia de ciertos sólidos desaparezcan bajo ciertas condiciones de modo que se convierta en superconductores?



Estudio de las propiedades de la materia:

Forma en la que un material responde al ambiente y a fuerzas externas.

- **Propiedades Térmicas:** están relacionadas a la transmisión de calor y capacidad calórica.

-¿Qué hace que algunos sólidos sean buenos aisladores térmicos y algunos buenos conductores de calor?

- ¿Por qué algunos sólidos tienen una mayor capacidad de mantener y almacenar energía térmica?

- ¿Qué causa que algunos sólidos se fusionen a baja temperatura y otros a temperaturas mucho más altas?

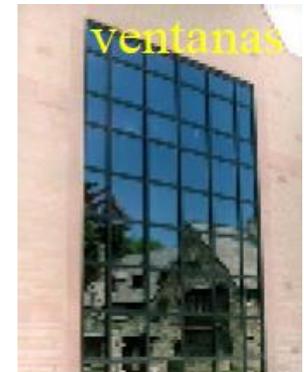
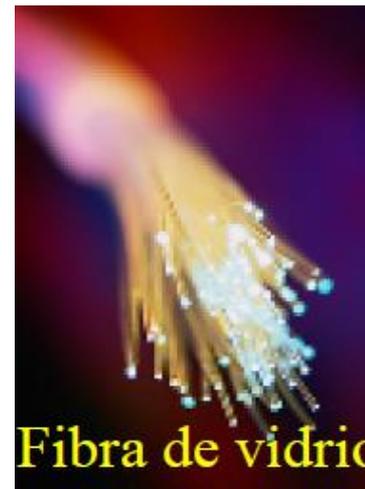
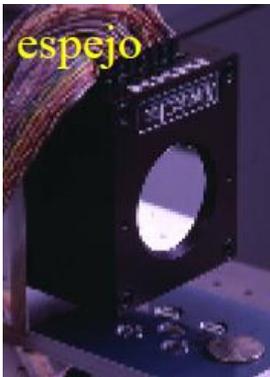


Estudio de las propiedades de la materia:

Forma en la que un material responde al ambiente y a fuerzas externas.

- **Propiedades Ópticas:** respuestas a campos electromagnéticos; absorción, transmisión y dispersión de luz.

*-¿Por qué son algunos sólidos transparentes y otros opacos?
-¿Qué causa el color de los sólidos?*

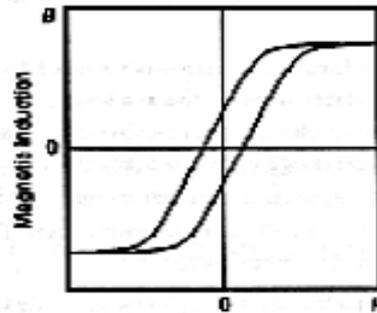


Estudio de las propiedades de la materia:

Forma en la que un material responde al ambiente y a fuerzas externas.

- **Propiedades Magnéticas:** respuesta a campos magnéticos; orden y desorden magnético: ferromagnetismo, paramagnetismo, etc.

- ¿Por qué hay elementos que forman imanes permanentes?
- ¿Cómo se modifican las propiedades combinando materiales de diferente característica magnética?

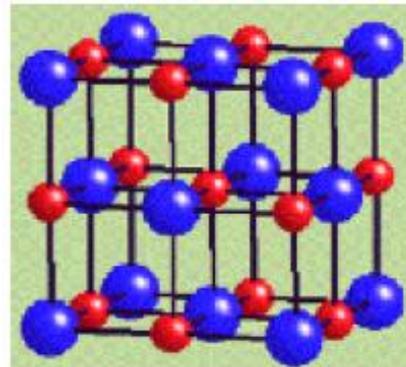


Estudio de las propiedades de la materia:

Forma en la que un material responde al ambiente y a fuerzas externas.

- **Propiedades Estructurales:** respuesta a las presiones que se ejercen sobre una estructura.

*-¿Qué causa la cohesión notable observada en la materia sólida?
- Muchos sólidos exhiben regularidades y correlaciones espaciales en grande escala, con espaciamiento inter-atómicos y simetrías regulares. ¿Qué causa esto?*



Física del Estado Sólido:

**Estudiar
Fenómenos:**

**Propiedades
mecánicas,
térmicas,
eléctricas,
magnéticas,
ópticas,
estructurales**

**Principios
que utiliza:**

**Leyes de Newton,
Leyes de Maxwell,
Mecánica cuántica,
Termodinámica y
mecánica estadística**



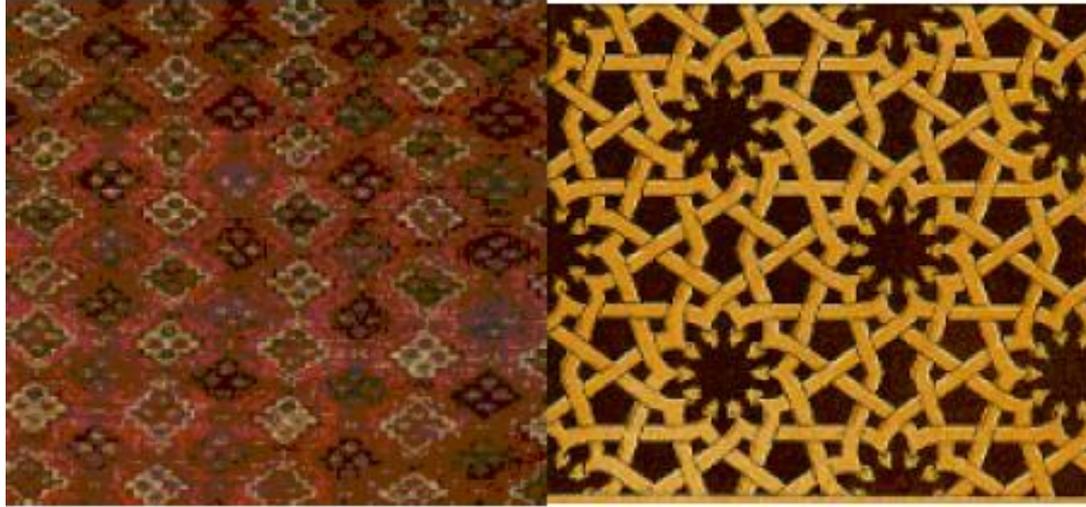
Sólidos: estructura cristalina

Un sólido cristalino se caracteriza por un ordenamiento *periódico* de átomos, iones o moléculas

- ¿Cómo se forma un sólido?
- Tipos de enlaces químicos:
 - Sólidos Moleculares: N_2 , CO_2 , S_8 .
 - Sólidos metálicos: Na, Fe, otros metales y aleaciones
 - Sólidos covalentes: C, SiO_2 , GaAs.
 - Sólidos iónicos: NaCl, CaO, CsAu



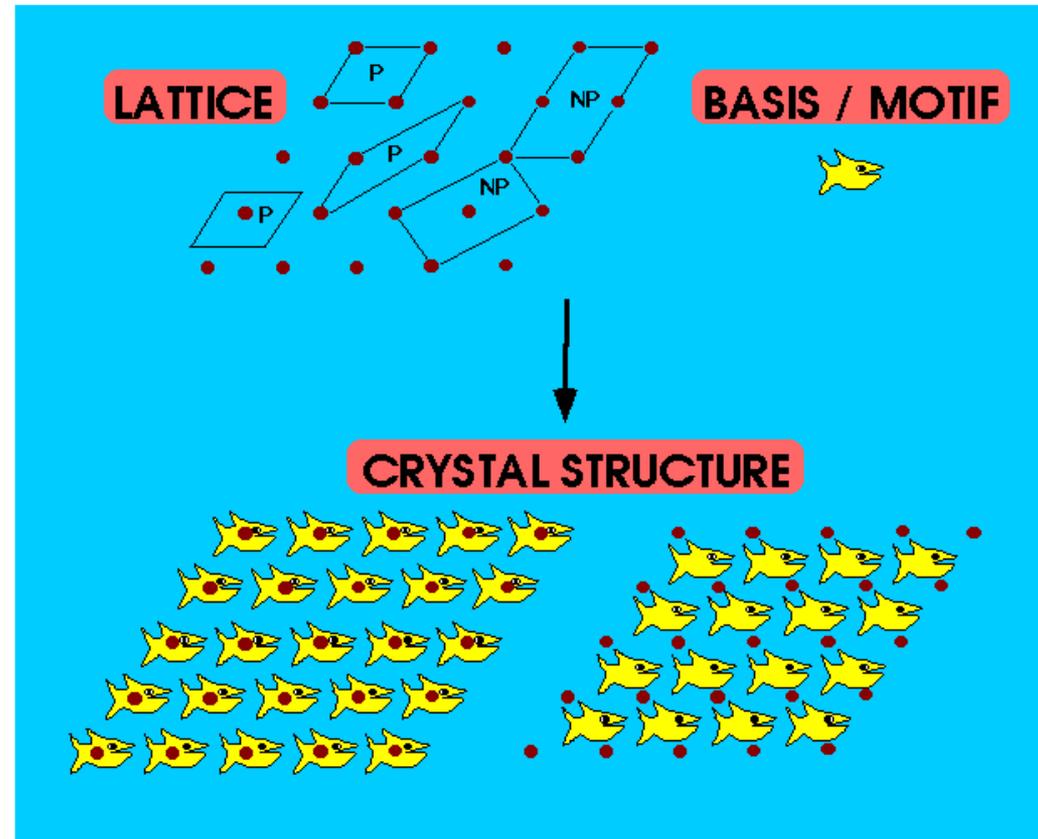
Para entender el concepto de *periodicidad* podemos pensar en los motivos de una alfombra oriental, en los dibujos de la Alhambra, ...



En estos dibujos hay siempre una fracción de los mismos que se repite. De la misma manera, en los cristales, los átomos, los iones o las moléculas se empaquetan dando lugar a *motivos* que se repiten (desde $\sim 3 \text{ \AA}$ hasta centenas de Å). Dicha repetitividad, en tres dimensiones, se denomina *red cristalina*. El conjunto que se repite, por traslación, genera toda la red (es decir, todo el cristal, si solapamientos ni espacios libres) se denomina *celda elemental o celda unidad*.

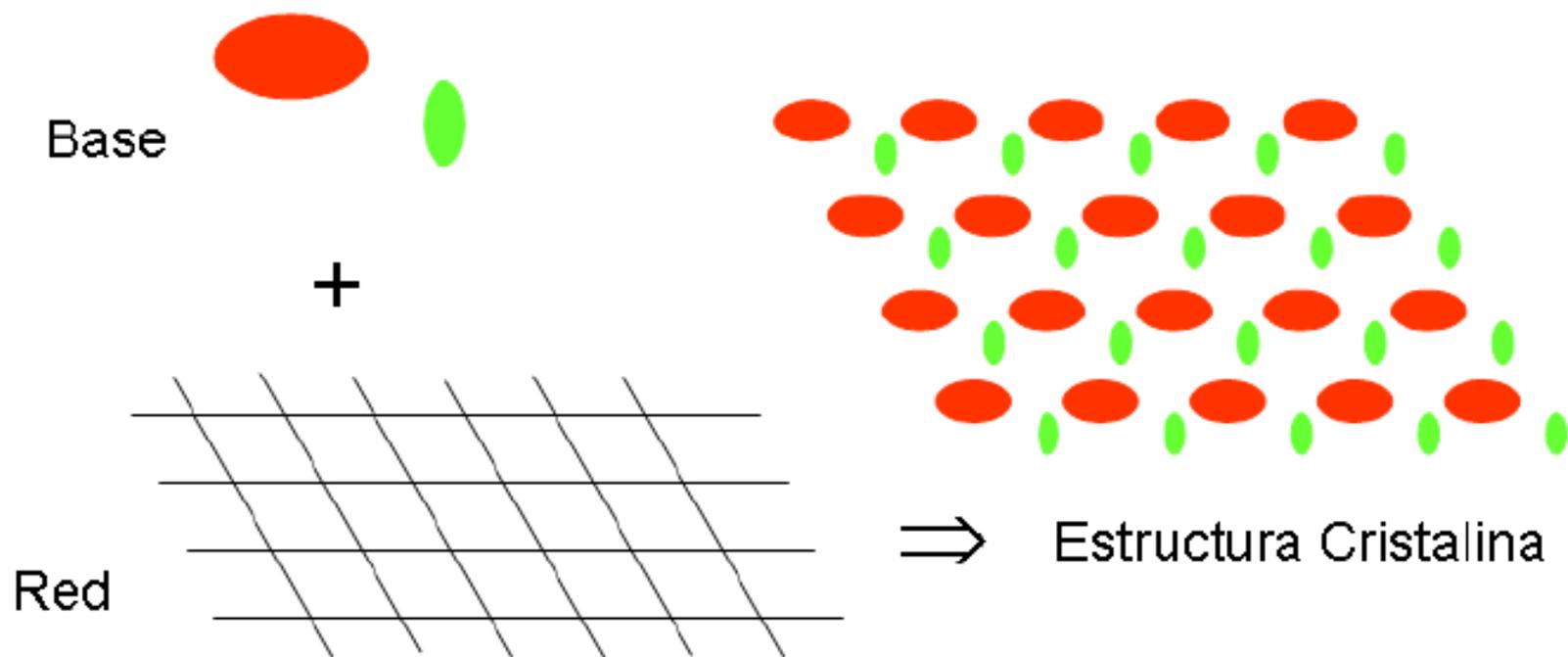
Algunas definiciones básicas

- **RED** = arreglo infinito de puntos en el espacio, donde *cada punto tiene un entorno idéntico a los otros*.
- **ESTRUCTURA CRISTALINA**
 - arreglo periódico de átomos (o moléculas) en un cristal (sólido)
 - Puede ser descripta asociando a cada punto de red un grupo de átomos llamado **BASE (MOTIVO)**



- **No confundir átomos con puntos de la red**
- **Los puntos de la red no caen necesariamente en el centro de algún átomo**

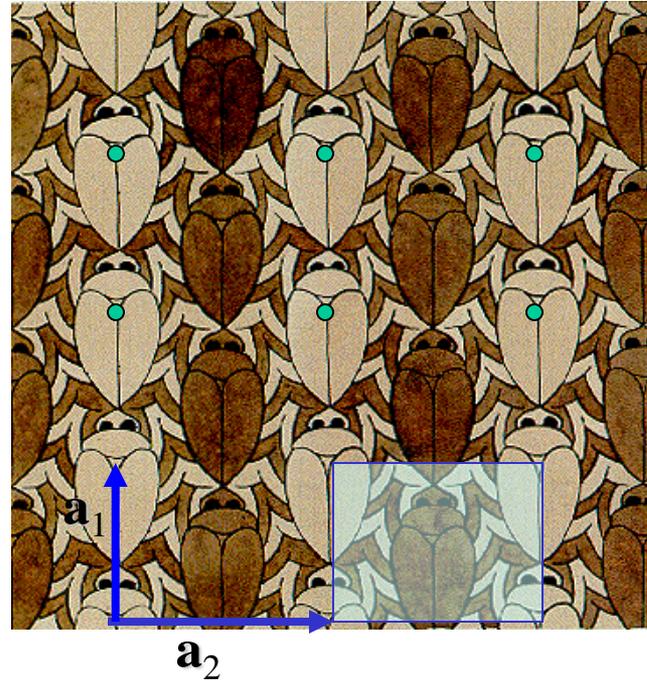
Base = grupo de átomos que forman la celda unidad:



Importancia de la celda unidad: A partir de ella podemos encontrar las propiedades del cristal en su conjunto. Por ejemplo, distancia entre átomos más próximos, número de átomos por metro cúbico, fuerzas que mantienen la red junta, propiedades mecánicas y eléctricas, etc.

Algunas definiciones básicas

- **CELDA UNITARIA** = componente más pequeño de un cristal que por traslación(*) puede reproducir todo el cristal.
- **CELDA PRIMITIVA (P)** celda unitaria que contiene un sólo punto de red



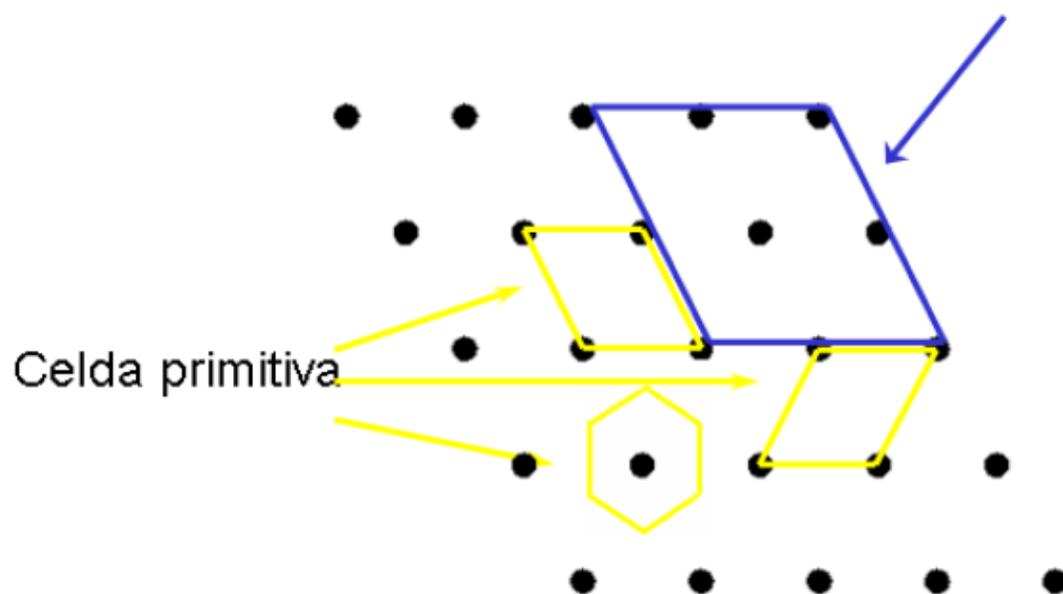
- (*) El esquema de traslación (repetición) está definido por 3 vectores en 3-D y por dos vectores en 2-D
- Sólo importa la magnitud y dirección de estos vectores por lo que no es importante la definición del origen
- Esta elección no es única
- Todos los puntos de la red deberán estar definidos por

$$\mathbf{R} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$$

Celda primitiva

Celda unidad de volumen mínimo

Celda convencional



Estructura cristalina del grafito

- **2-D**

- Ambas elecciones para la celda unitaria son

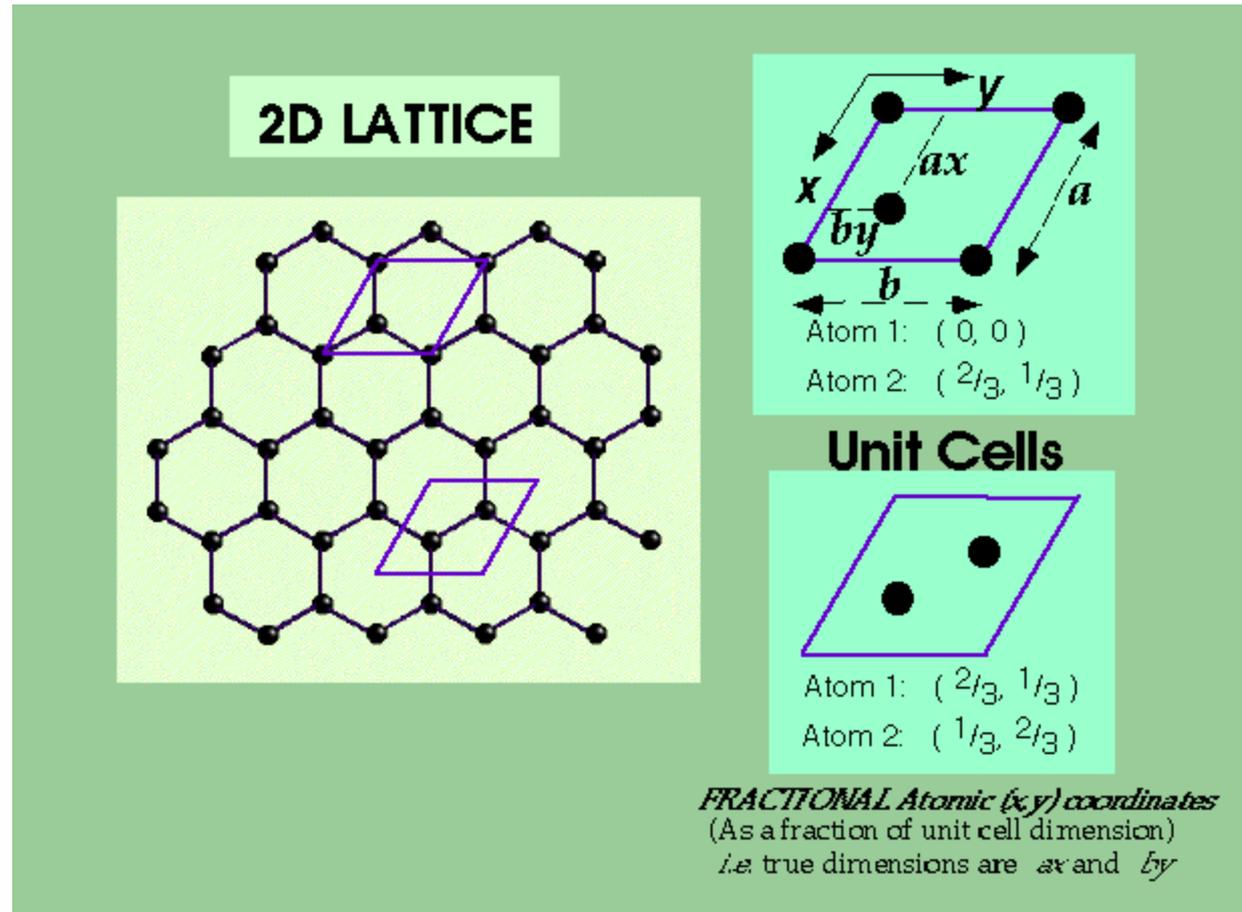
- **Primitivas (contienen 1 punto de la red)** pero contienen **2 átomos** en la base

- Para contar los átomos en 2-D dentro de cada celda:

- **esquina:** contribuyen con sólo $\frac{1}{4}$

- **lado:** contribuyen con $\frac{1}{2}$

- **adentro** contribuyen con **1**



Estructura cristalina del grafito

- **3-D**

- Ahora necesito tres vectores para definir la celda

- **Primitiva** y contiene **4 átomos** en la base

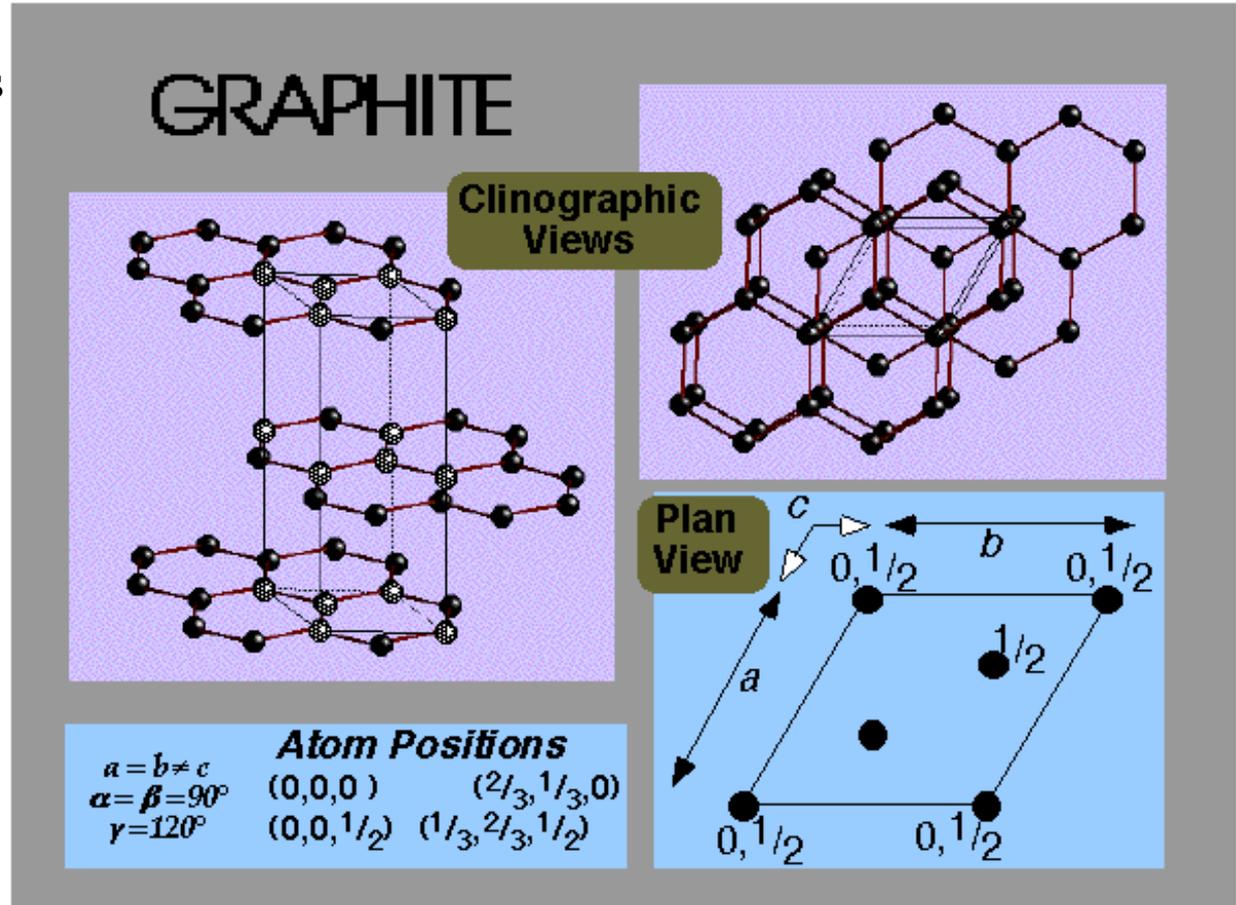
- Para contar los átomos en 3-D dentro de cada celda: si están ubicados en

- **Vértice** compartido por **8** celdas $\Rightarrow 1/8$ átomo por celda

- **Lado** compartido por **4** celdas $\Rightarrow 1/4$ átomo por celda

- **Cara** compartido por **2** celdas $\Rightarrow 1/2$ átomo por celda

- **Cuerpo** no compartido $\Rightarrow 1$ átomo por celda

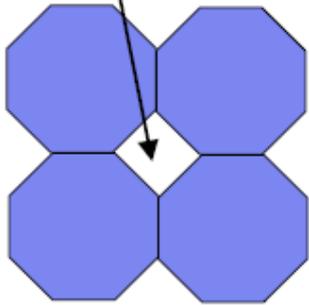


RED DE BRAVAIS: Arreglo infinito de puntos discretos en el espacio, con una dada disposición y orientación que aparenta ser la misma desde cualquier punto de la red de donde se lo mire (**todos los puntos de la red “ven” el mismo entorno**)

Matemáticamente la red de Bravais se describe como una operación de traslación de vectores: $\mathbf{R} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$

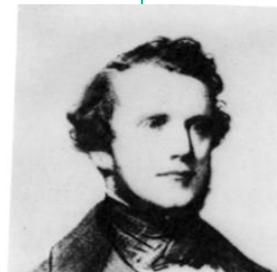
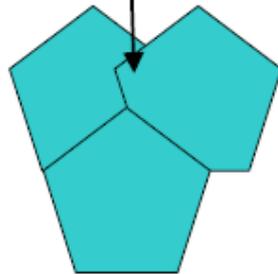
ESTRUCTURA CRISTALINA = Red de Bravais + Base

Espacio vacío no permitido

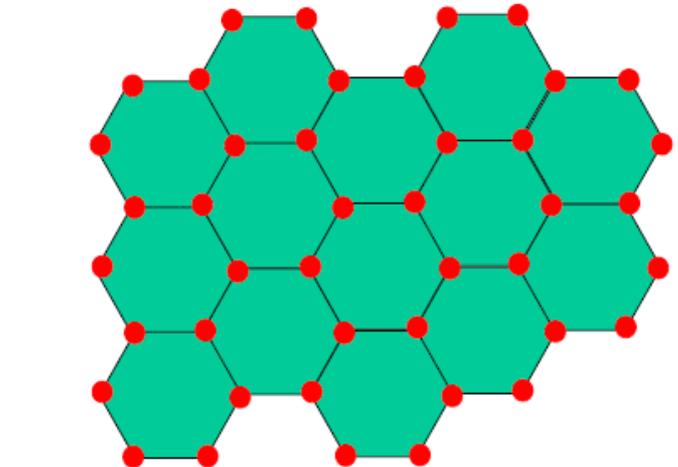


Estas no son Redes

Superposición no permitida

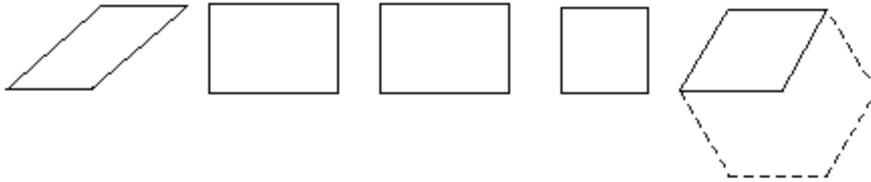


Auguste Bravais
(1811-1863)



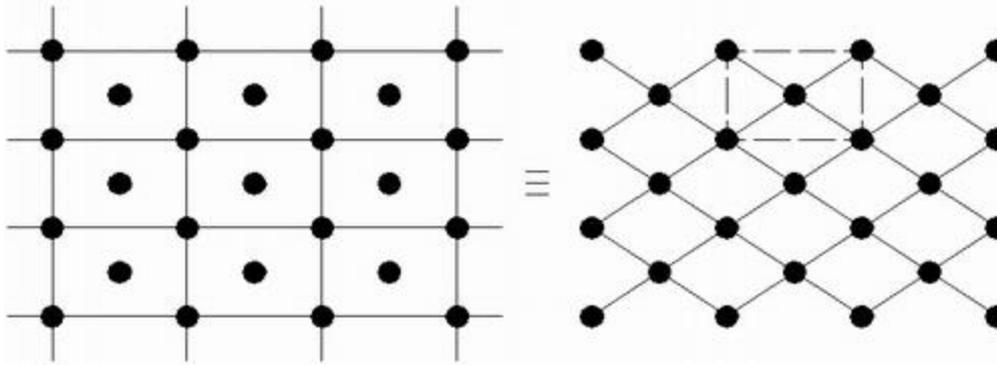
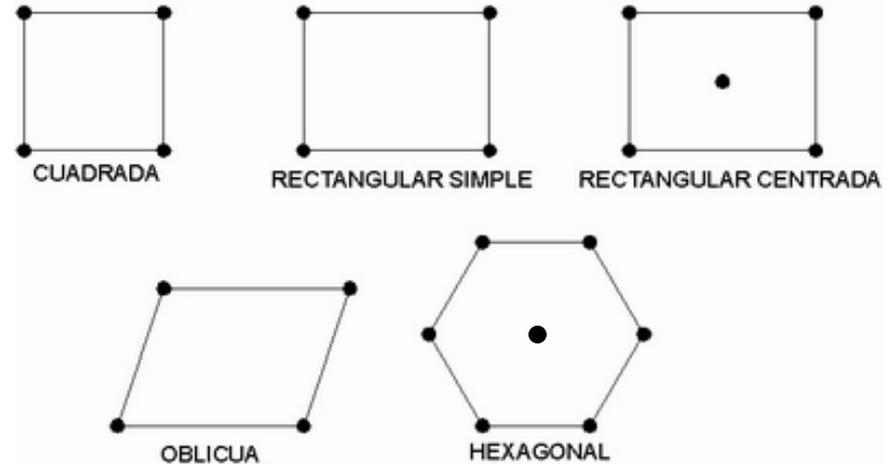
Esta no es una Red de Bravais

Hay 5 Redes de Bravais en 2-D



La elección de la celda unitaria busca que exhiba la simetría de la red cristalina

oblicua	p	$a \neq b, \alpha \neq 90^\circ$
rectangular	p	$a \neq b, \alpha = 90^\circ$
rectangular	c	$a \neq b, \alpha = 90^\circ$
cuadrada	p	$a = b, \alpha = 90^\circ$
hexagonal	p	$a = b, \alpha = 120^\circ$

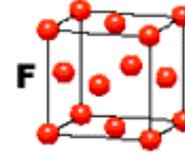
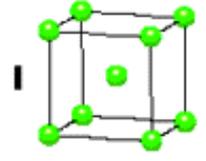
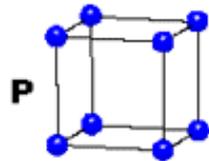


Las redes planas rectangular centrada y rómbica son idénticas.

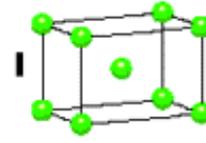
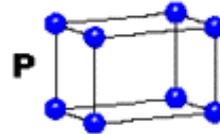
Hay 14 Redes de Bravais en 3-D

7 sistemas
cristalinos

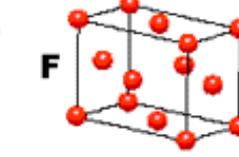
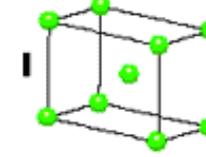
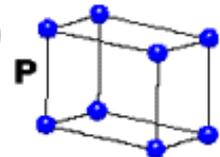
CÚBICO
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



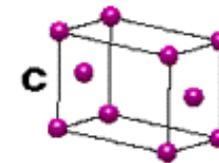
TETRAGONAL
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



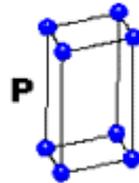
ORTORÓMBICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



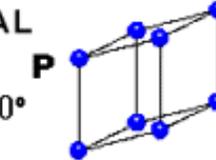
Las elección de la celda unitaria busca que exhiba la simetría de la red cristalina



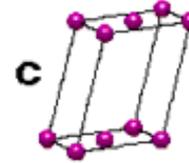
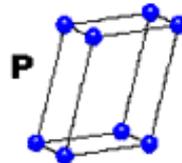
HEXAGONAL
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma = 120^\circ$



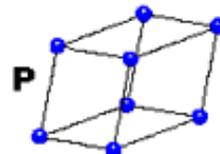
TRIGONAL
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



MONOCLÍNICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ$
 $\beta \neq 90^\circ$



TRICLÍNICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



Tipos de celdas:

P = Primitiva

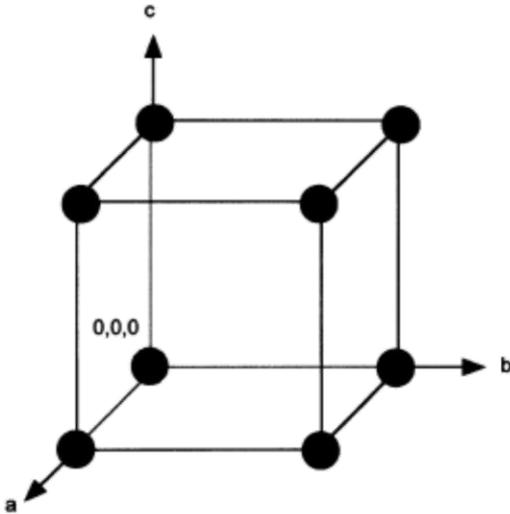
I = Centrada en interior

F = Centrada en todas las caras

C = Centrada en dos caras

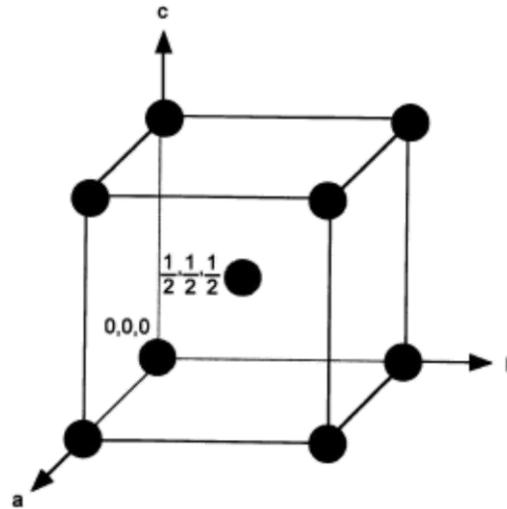
14 redes de Bravais

Estructuras cristalinas, ejemplos



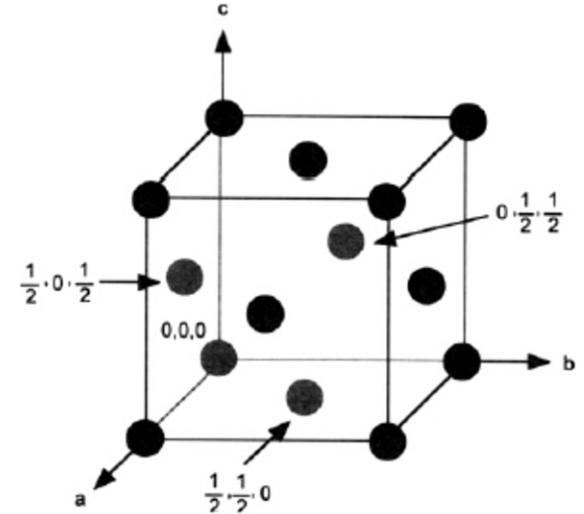
Cúbica simple

1 átomo por celda,
en (0,0,0)



**Centrada en el
cuerpo (bcc)**

2 átomos por celda,
en (0,0,0) y $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

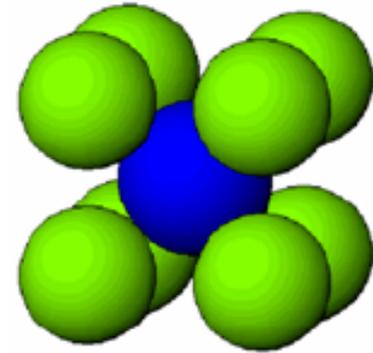
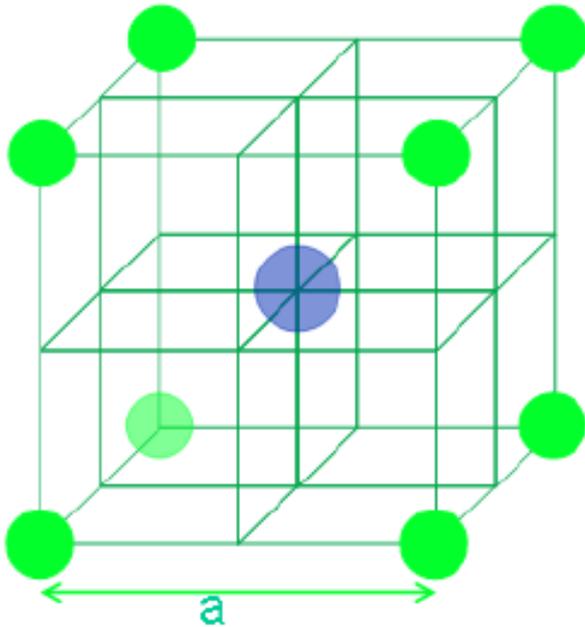


**Centrada en las
caras (fcc)**

4 átomos por celda,
en (0,0,0), $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

Dos átomos diferentes por punto de red

Estructura CsCl



Red: cúbica

Base: consiste de 2 átomos

Cs: (0,0,0) ●

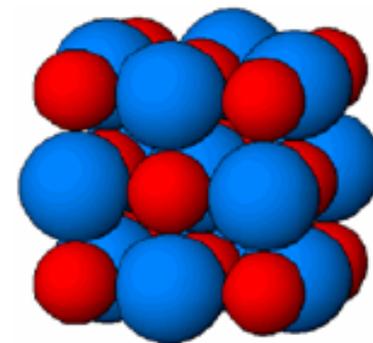
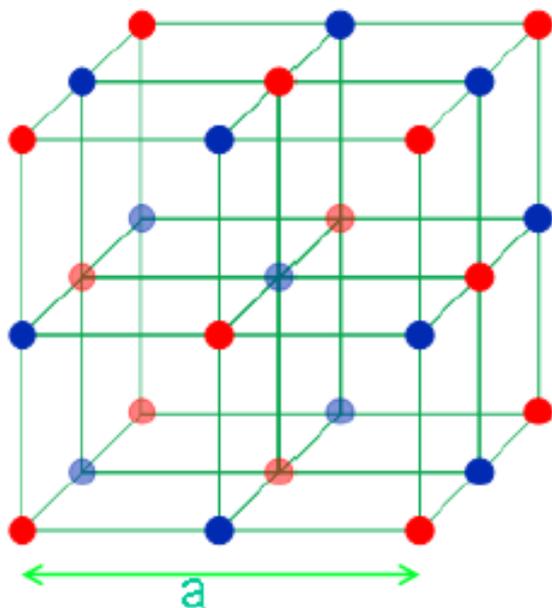
Cl: $a(1/2, 1/2, 1/2)$ ●

Ejem.: CuZn, CsBr, LiAg.

OBS.: No confundir con bcc (son dos **átomos diferentes** en este caso)

Dos átomos diferentes por punto de red

Estructura NaCl



Red: FCC

Base: consiste de 2 átomos

Na: $(0,0,0)$ ●

Cl: $a(1/2, 1/2, 1/2)$ ●

Ejem.: LiH, KCl, PbS, AgBr, MgO, MnO, KBr.

Estructuras compactas

- Una estructura compacta tiene el volumen máximo de la celda unidad ocupado por átomos.
- La fracción de la celda unidad ocupada por átomos se puede determinar calculando el **factor de empaquetamiento atómico (FEA ó APF)**:

$$APF = \frac{N \times V_{at}}{V_{CU}} \rightarrow$$

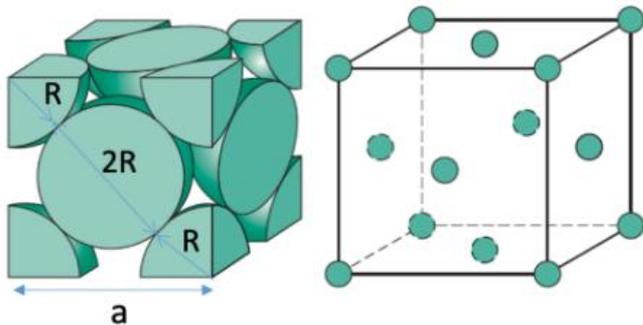
Donde:

N = número de átomos por celda

V_{at} = volumen de un átomo

V_{CU} = volumen de la celda unidad

Ejemplo: calcular APF para la estructura fcc ($N=4$; $V_{at}=(4/3)\pi r^3$; $V_{CU}=a^3$).

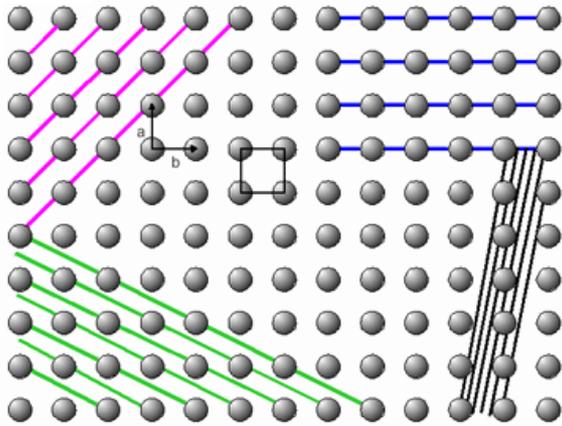


Escribimos el parámetro de red a en función del radio iónico r , asumiendo que los átomos de “tocan” a lo largo de la diagonal de una cara: $\sqrt{2}a = 4r$

$$APF_{fcc} = \frac{4 \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{(2\sqrt{2}r)^3} = 0.74 \rightarrow$$

Máximo valor posible para empaquetar esferas del mismo tamaño

Planos cristalográficos: índices de Miller



- Estos índices corresponden a los inversos de los puntos de corte del plano que queremos caracterizar con cada uno de los ejes de coordenadas, y se representan entre paréntesis sin comas (hkl).
- Los *índices de Miller* pueden representar a un plano o a toda una familia de planos paralelos que tienen la misma orientación. Para calcular los *índices de Miller* hemos de hacerlo siempre sobre un plano de la familia que no pase por el origen.

–**Paso 1:** Identificar dónde corta los ejes X , Y y Z . Este plano no corta ni el eje Z ni el eje Y , los corta en el infinito, en cambio el eje X lo corta, por ejemplo en a .

$$a, \infty, \infty$$

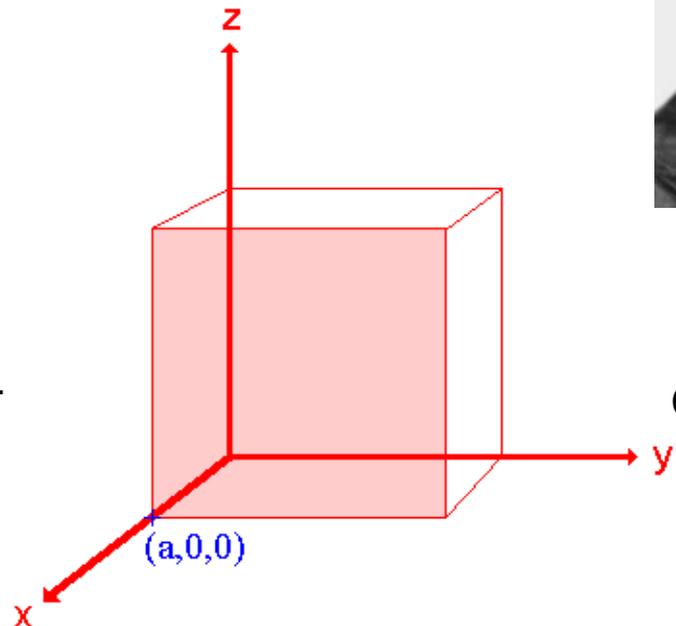
–**Paso 2:** Especificar estas intersecciones en fracciones de las coordenadas de la celda. Por ejemplo, para un punto (x,y,z) en una celda unitaria de dimensiones $a \times b \times c$ será $(x/a, y/b, z/c)$.

$$(a/a, \infty/b, \infty/c) \text{ o sea } (1, \infty, \infty)$$

–**Paso 3:** Tomar los recíprocos de estos valores para obtener los *índices de Miller*.

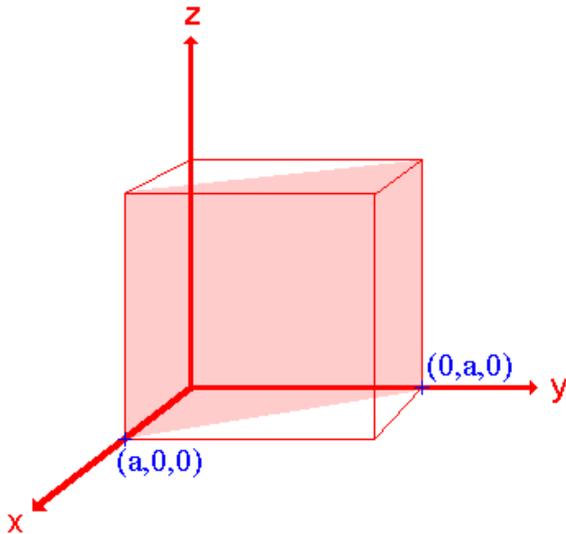
$$(100)$$

Ejemplo: índices del plano ZY .



William
Hallows
Miller
(1801-1880)

Más ejemplos de índices de Miller



Paso 1 : Intersección con ejes a, a, ∞

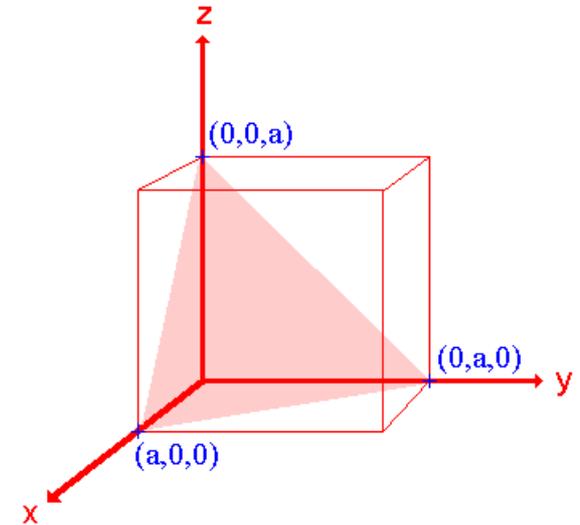
Paso 2 : Fracciones de coordenadas : $1, 1, \infty$

Paso 3 : Índices de Miller : **(110)**

Paso 1 : Intersección con ejes a, a, a

Paso 2 : Fracciones de coordenadas : $1, 1, 1$

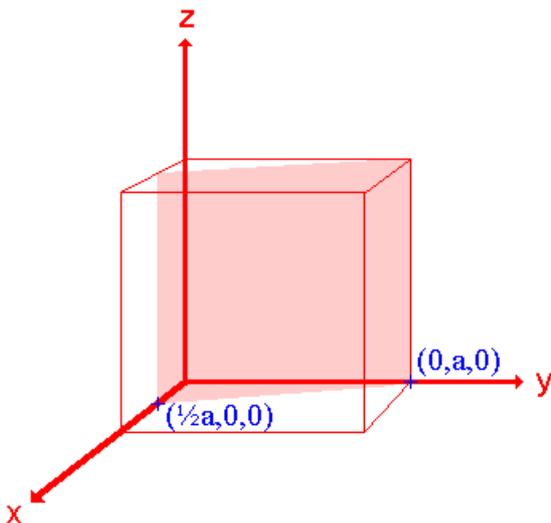
Paso 3 : Índices de Miller : **(111)**



Paso 1 : Intersección con ejes $a/2, a, \infty$

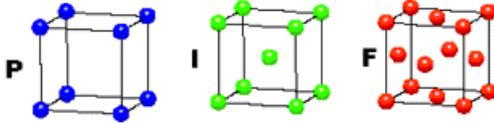
Paso 2 : Fracciones de coordenadas : $1/2, 1, \infty$

Paso 3 : Índices de Miller : **(210)**

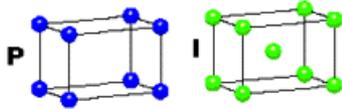


Cálculo de la distancia interplanar d_{hkl}

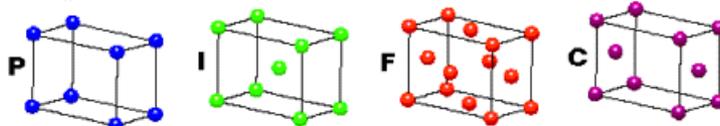
CÚBICO
 $a=b=c$
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



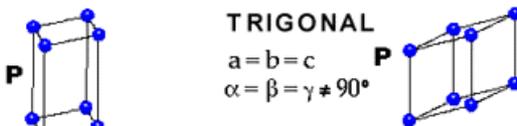
TETRAGONAL
 $a=b \neq c$
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



ORTORÓMBICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

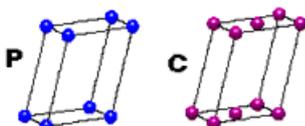


HEXAGONAL
 $a=b \neq c$
 $\alpha=\beta=90^\circ$
 $\gamma=120^\circ$

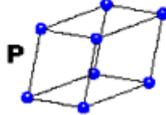


TRIGONAL
 $a=b=c$
 $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$

MONOCLÍNICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha=\gamma=90^\circ$
 $\beta \neq 120^\circ$



TRICLÍNICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



Tipos de celdas:
P = Primitiva
I = Centrada en interior
F = Centrada en todas las caras
C = Centrada en dos caras
14 redes de Bravais

Orthorhombic, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Tetragonal, $a = b$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Cubic, $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

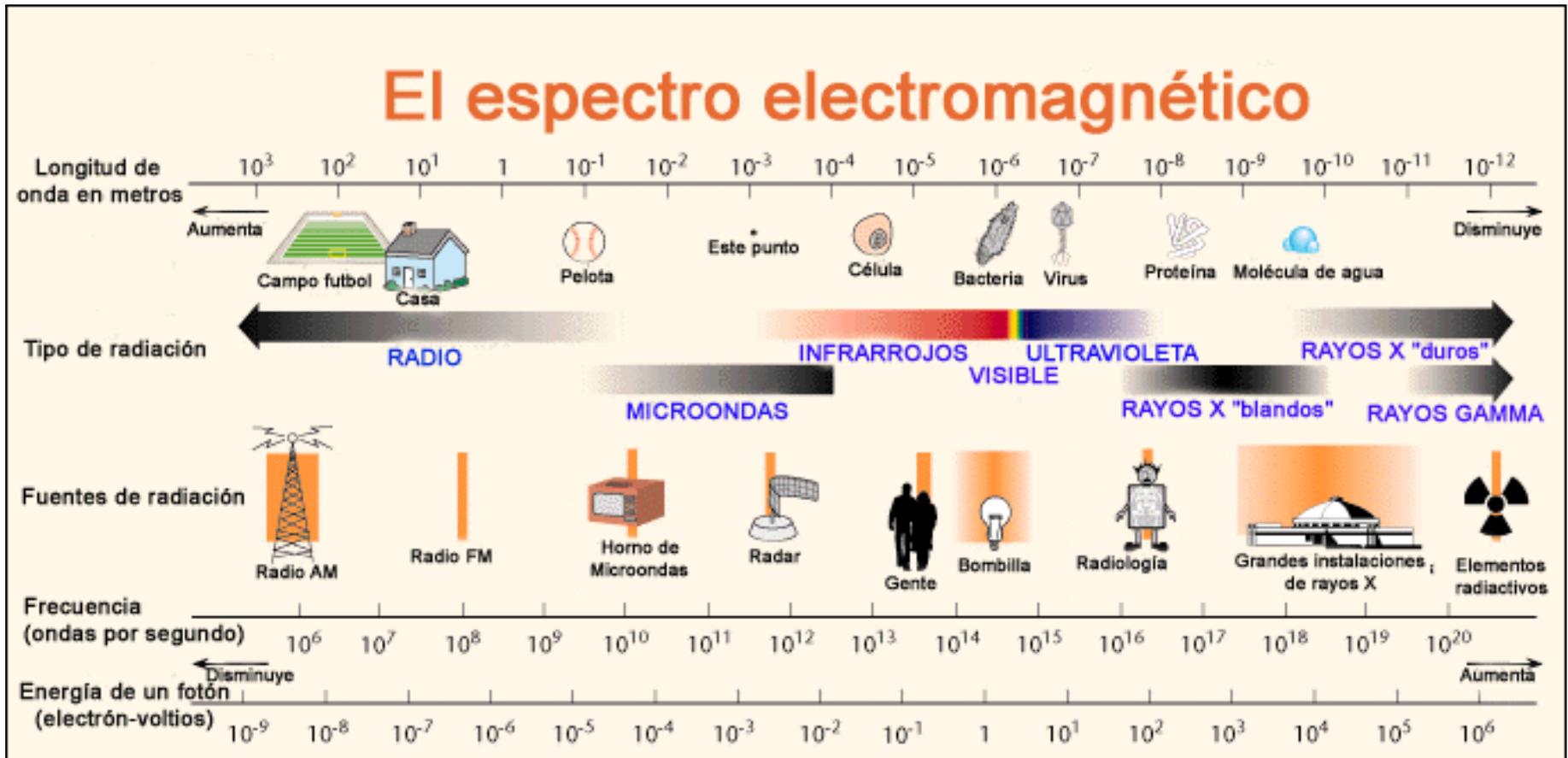
Hexagonal, $a = b$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}$$

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{1}{(1 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma)} \times \left\{ \frac{h^2 \sin^2 \alpha}{a^2} + \frac{k^2 \sin^2 \beta}{b^2} + \frac{l^2 \sin^2 \gamma}{c^2} + \frac{2hk}{ab} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) + \frac{2kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + \frac{2lh}{ac} (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) \right\}$$

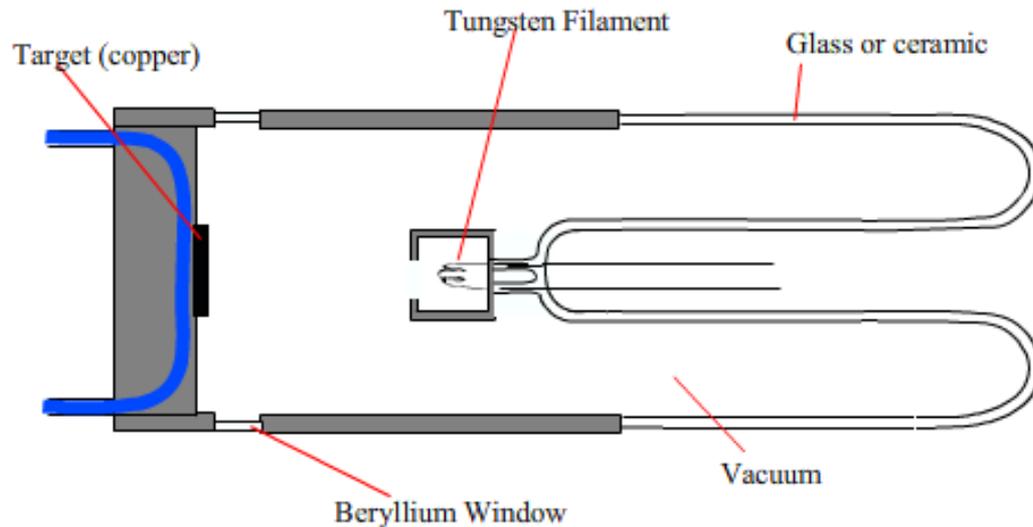
Estudio de estructuras cristalinas por difracción de rayos-X

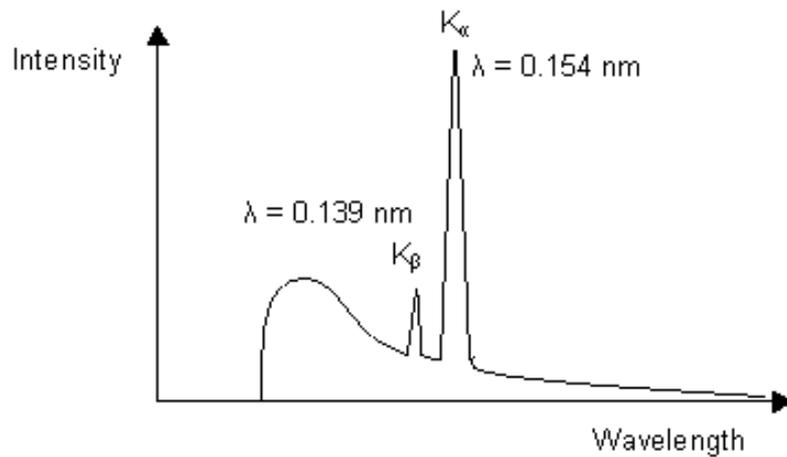
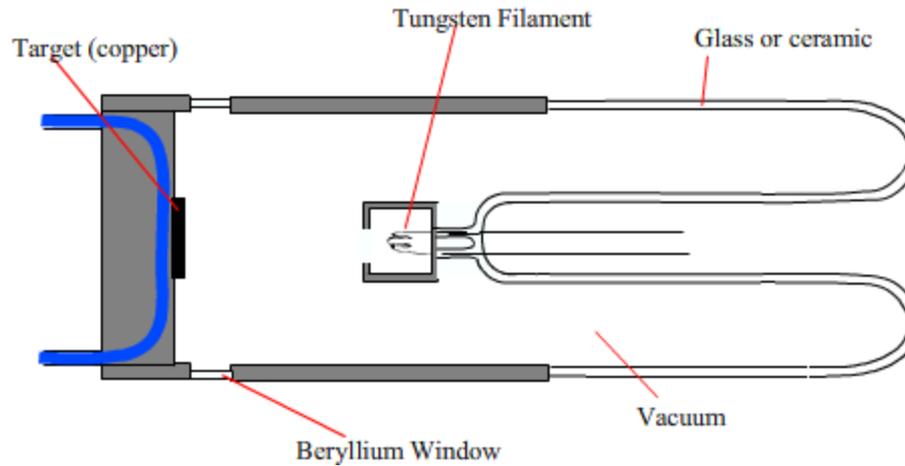
Los rayos-X son ondas electromagnéticas con una longitud de onda en el rango 0.01-1.0 nm



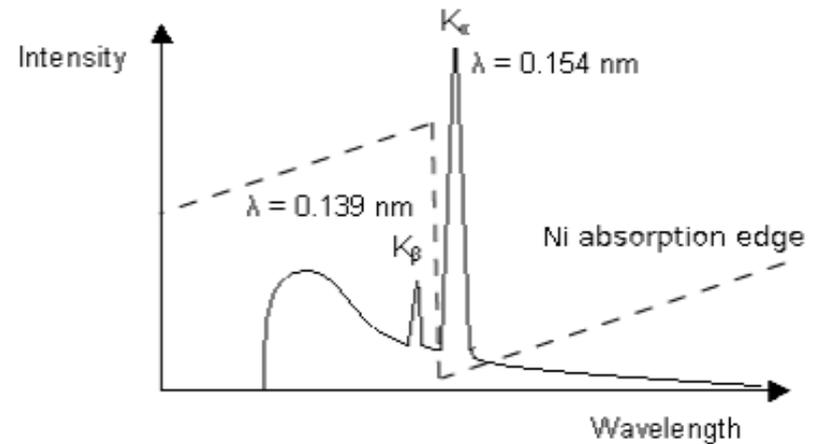
Producción de rayos-X en el laboratorio

- Una fuente de rayos-X utiliza un frente de electrones de alta energía generados por un filamento incandescente.
- Los electrones son acelerados mediante una diferencia de potencial (típicamente decenas de kV) desde el filamento hacia el blanco metálico.
- La energía cinética de los electrones se convierte principalmente en calor, pero un pequeño porcentaje es emitido desde el blanco en forma de fotones de rayos-X



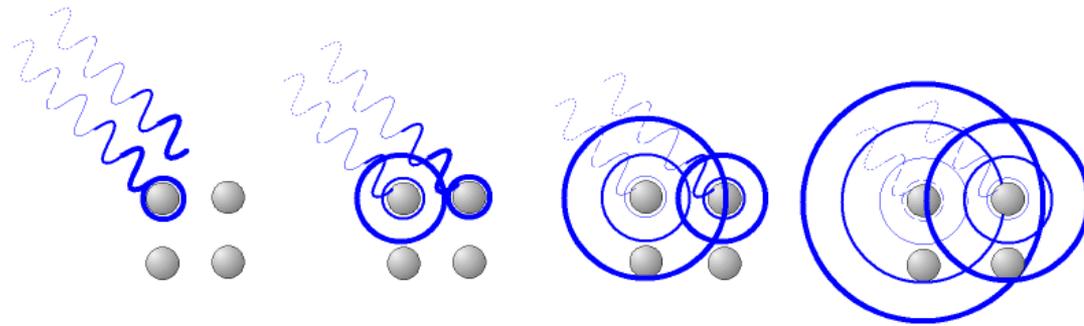


Espectro característico de emisión de rayos-X obtenido a partir de un blanco de cobre ($\lambda=0.154$ nm)

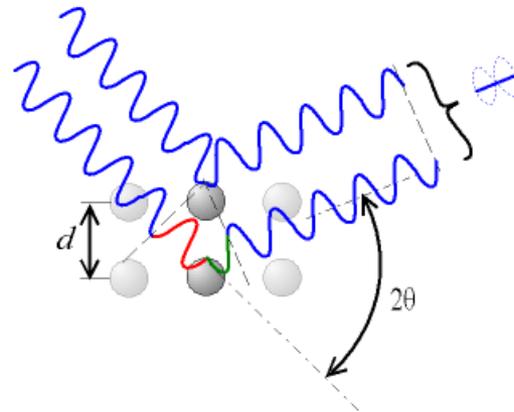
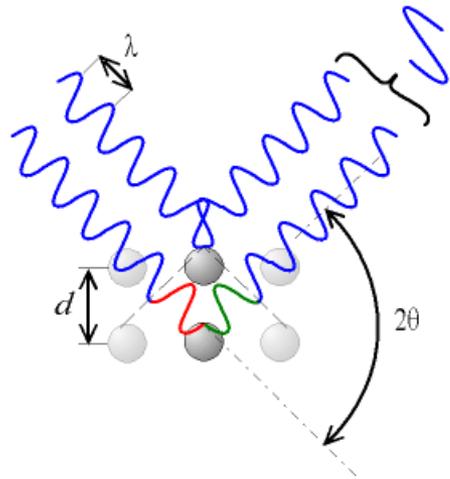
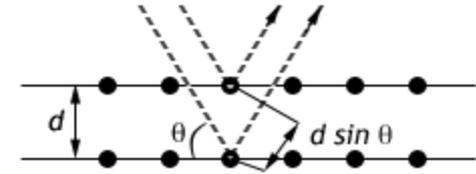


Se utilizan filtros para seleccionar la longitud de onda deseada (para ánodo de Cu se usa filtro de Ni).

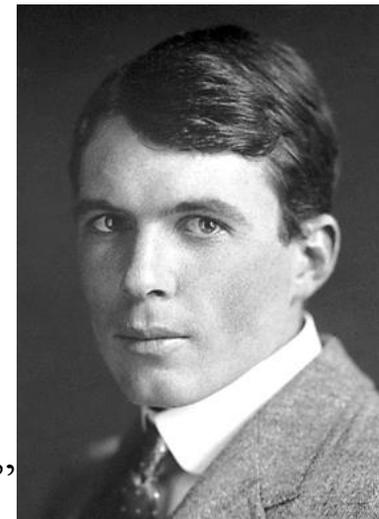
Difracción de materiales cristalinos: Ley de Bragg

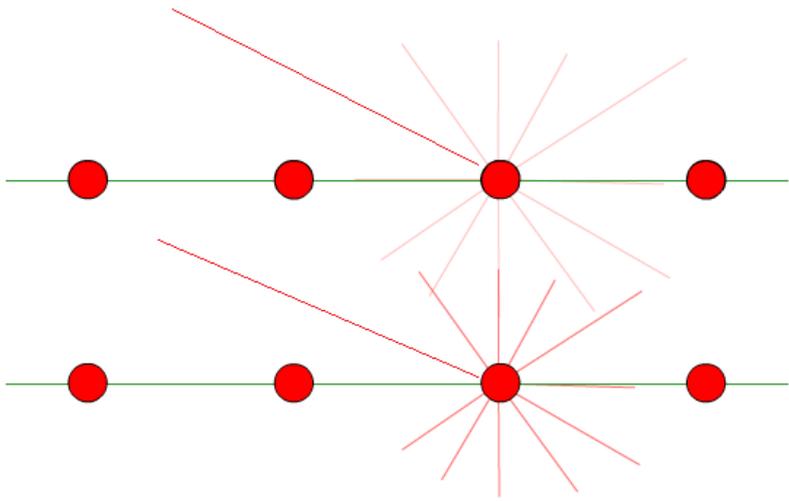


$$2 d \sin \theta = \lambda$$



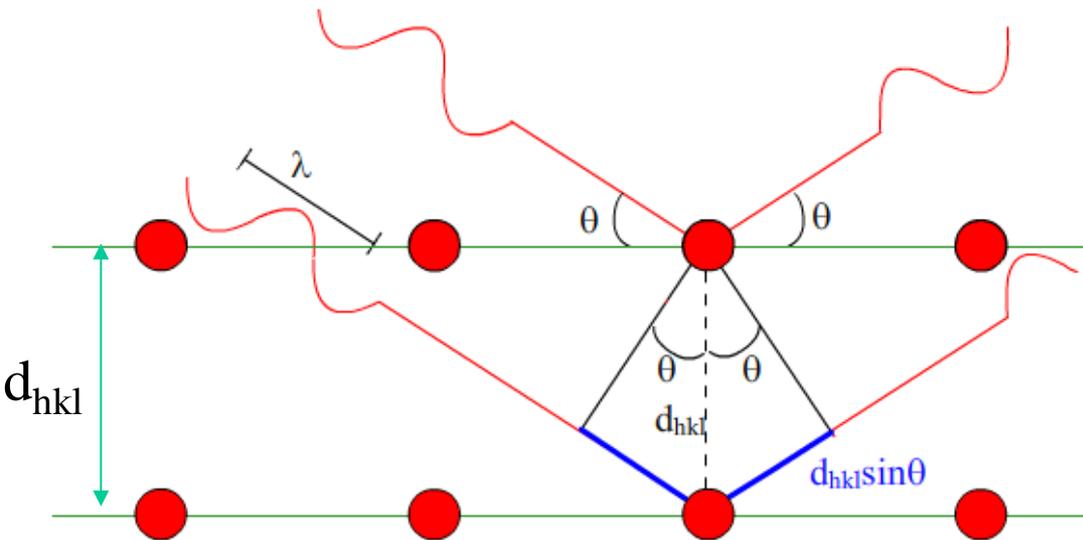
William Lawrence Bragg (1890-1971):
Premio Nobel de Física en 1915 junto con
su padre William Henry Bragg “por sus
contribuciones a la cristalografía de rayos X”





Los electrones de los átomos del material dispersarán los rayos-X incidentes en todas direcciones

Ley de Bragg: Sólo nos interesan los haces que interfieran constructivamente.

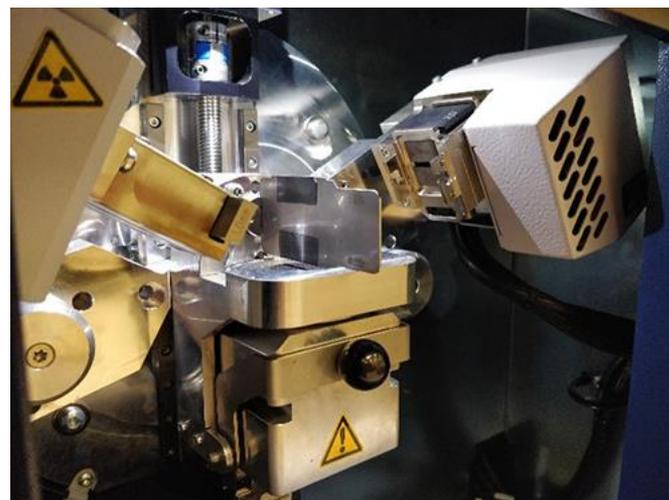
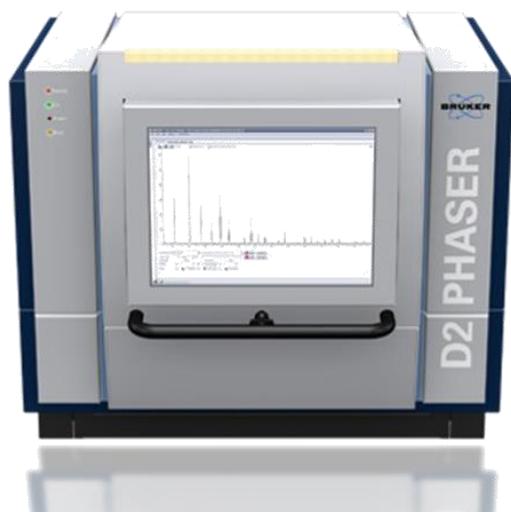
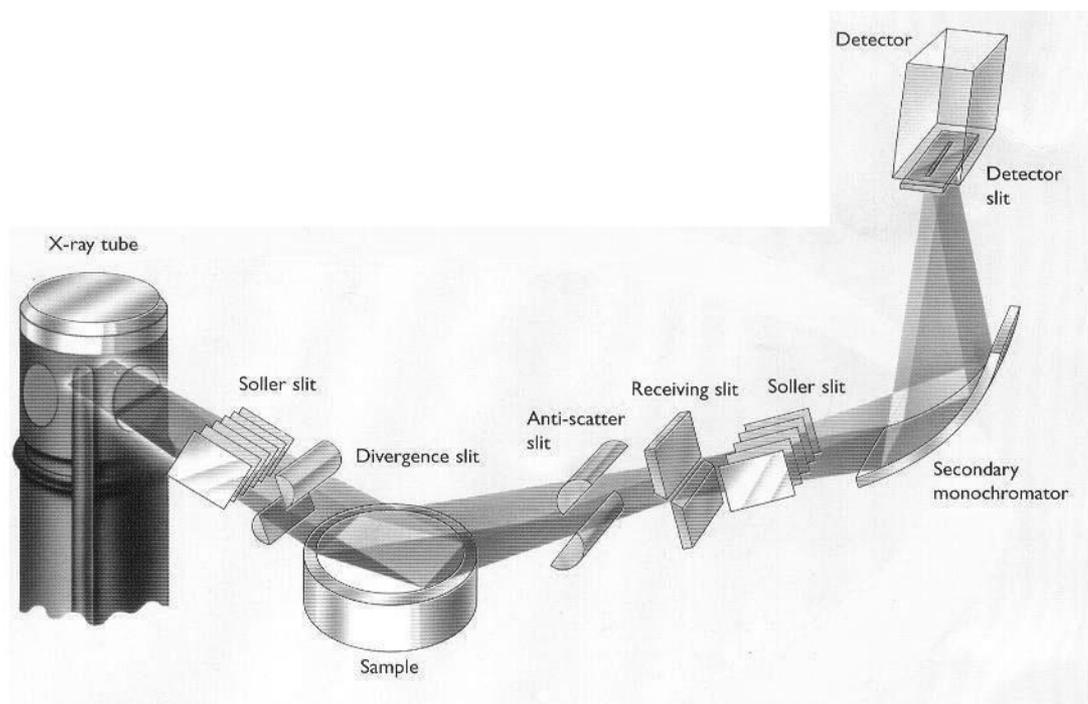


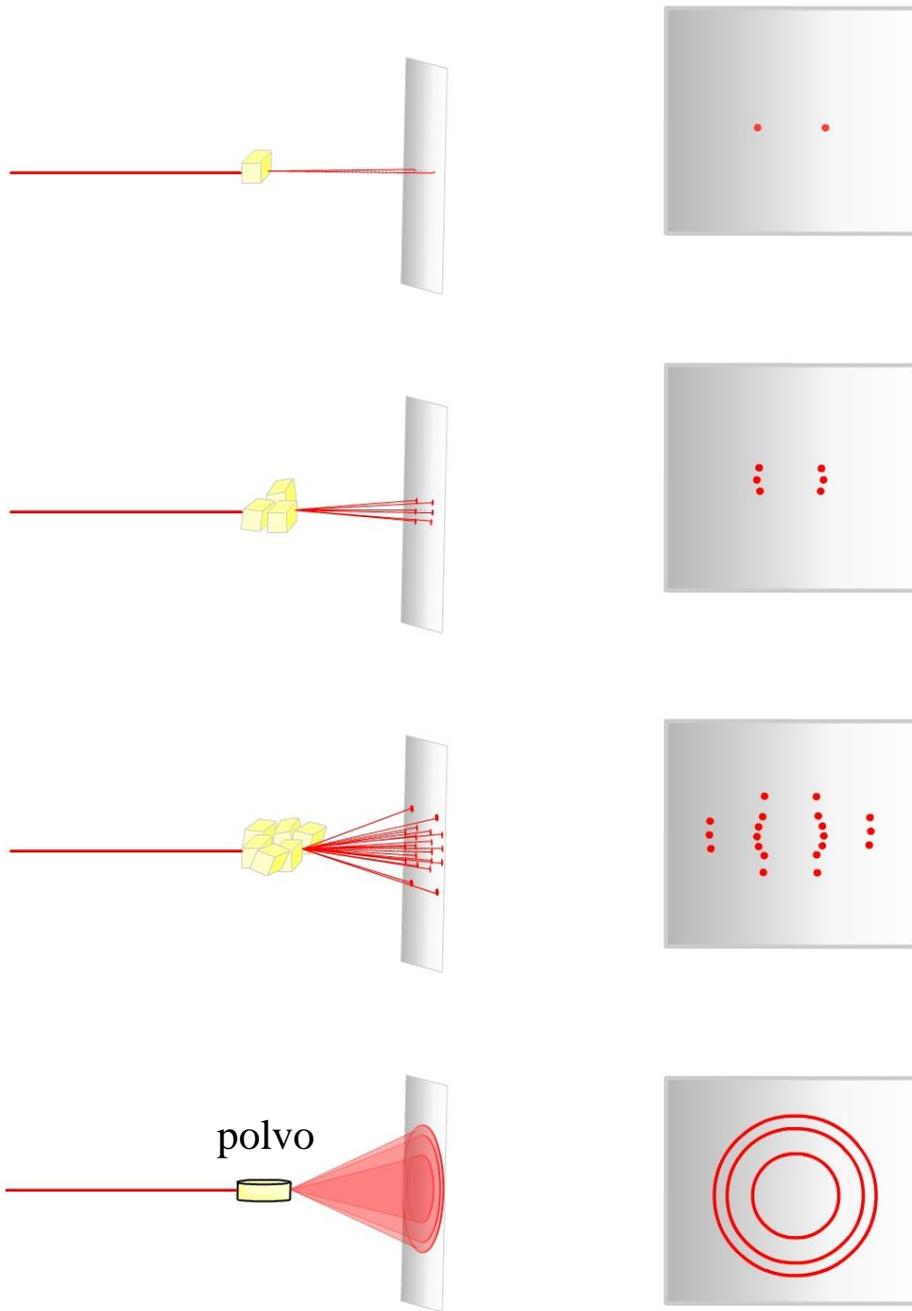
Calculamos la diferencia de camino recorrido.



$$2 d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

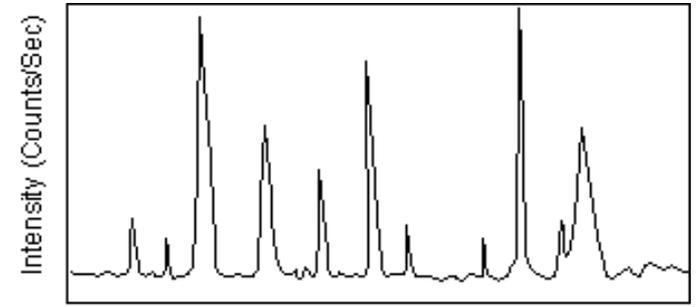
Difracción de polvos





Aumenta el número de cristales

Si utilizamos un difractómetro de polvos:



Factor de estructura: F

Describe el efecto de la estructura cristalina en la intensidad del haz difractado.

Para ciertas estructuras, algunas **reflexiones** estarán **ausentes** del patrón de difracción. Se conocen como **reflexiones prohibidas**.

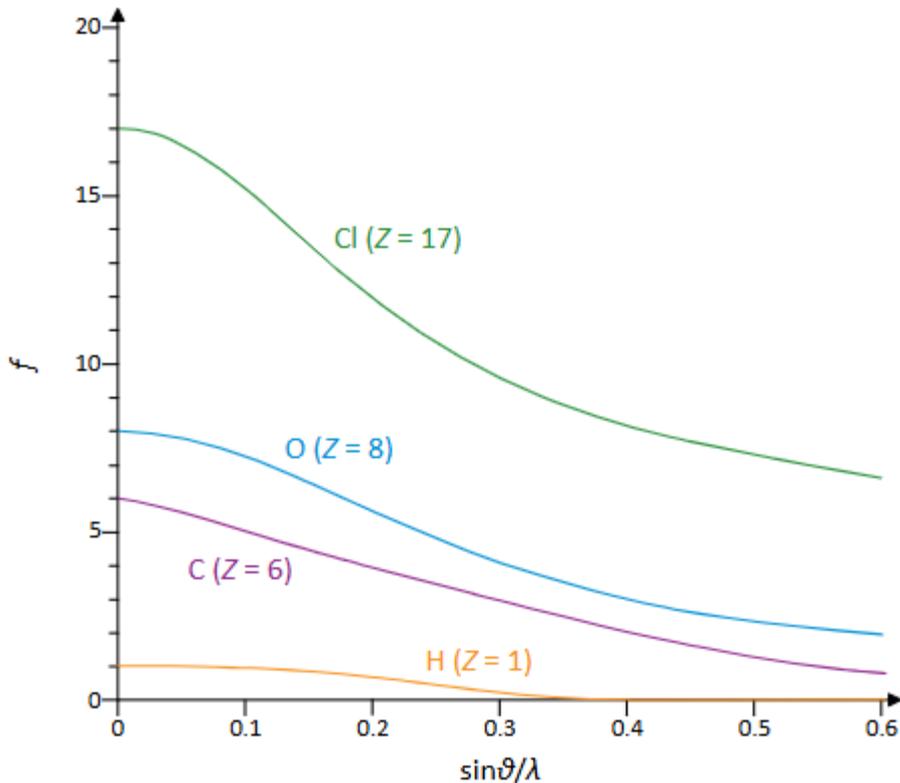
La intensidad del haz difractado por todos los átomos en la celda unitaria es proporcional a F^2 .

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j e^{(2\pi i \bar{r}_j \cdot (h, k, l))}$$

Donde:

- f factor de scattering atómico
- \mathbf{r}_j es el vector que marca la posición del átomo en la celda unidad
- (h, k, l) son los índices de Miller.

f indica cuán eficiente es un átomo en producir scattering en una dada dirección.



- Los rayos X se dispersan desde la nube electrónica de un átomo; por lo tanto, **f aumenta con el número atómico (Z)**.
- Por otro lado, **f disminuye a medida que aumenta el ángulo θ** . Para $\theta = 0$, $f = Z$ (todas las ondas dispersadas están en fase).
- Para θ fijo, **f disminuye si λ disminuye**.

Ejemplos:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j e^{(2\pi i \bar{r}_j \cdot (h, k, l))}$$

1) Cúbica simple: 1 átomo por celda, ubicado en (0,0,0)

$$F = f e^{2\pi i(0)} = f \longrightarrow \text{Todas las reflexiones están permitidas, independientemente de } h, k, l$$

2) Estructura fcc: 4 átomos por celda unidad, en (0,0,0), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2) y (0, 1/2, 1/2).

$$F = f \left[e^{2\pi i(0)} + e^{2\pi i(\frac{h}{2} + \frac{k}{2})} + e^{2\pi i(\frac{h}{2} + \frac{l}{2})} + e^{2\pi i(\frac{k}{2} + \frac{l}{2})} \right]$$

$$F = \begin{cases} 4f & \text{si } h, k, l \text{ son } \mathbf{todos} \text{ pares o impares} \\ 0 & \text{si } h, k, l \mathbf{ están mezclados} \end{cases}$$

3) Pensar qué pasa para el NaCl: red fcc con dos átomos en la base, con un Na en (0,0,0) y un Cl en (1/2, 1/2, 1/2).

$$F = \begin{cases} 4(f_{Na} + f_{Cl}) & \text{si } h, k, l \text{ son } \mathbf{pares} \\ 4(f_{Na} - f_{Cl}) & \text{si } h, k, l \text{ son } \mathbf{impares} \\ 0 & \text{si } h, k, l \text{ están } \mathbf{mezclados} \end{cases}$$

Difracción de polvos (XRD)

Usos de XRD

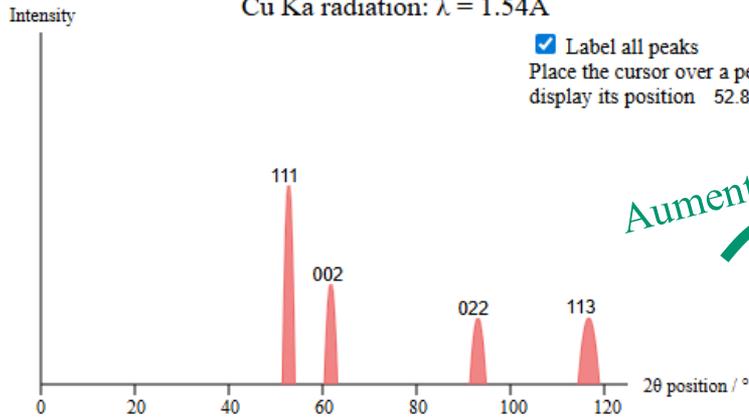
- Identificación de compuestos cristalinos usando su patrón de difracción.
 - Identificación de las fases presente en un material (*single-phase*, minerales, cerámicos u otros).
 - Identificación de fases múltiples en mezclas microcristalinas (ej. rocas)
 - Determinación de la estructura cristalina de los materiales identificados
 - Reconocimiento de fases amorfas
-
- Análisis cristalográfico y cálculo de celda unitaria
 - Análisis cuantitativo de mezclas cristalinas (por intensidades relativas o por refinamiento de los difractogramas)
 - Determinación del tamaño de cristalita y de tensiones internas usando el ancho de los picos
 - Estudios de expansión térmica o de transiciones de fase usando equipos que tengan tratamiento térmico *in-situ*

FCC Lattice: First 4 Peaks

Cu Ka radiation: $\lambda = 1.54\text{\AA}$

Label all peaks
Place the cursor over a peak to display its position 52.8 °

Aumento parám. red



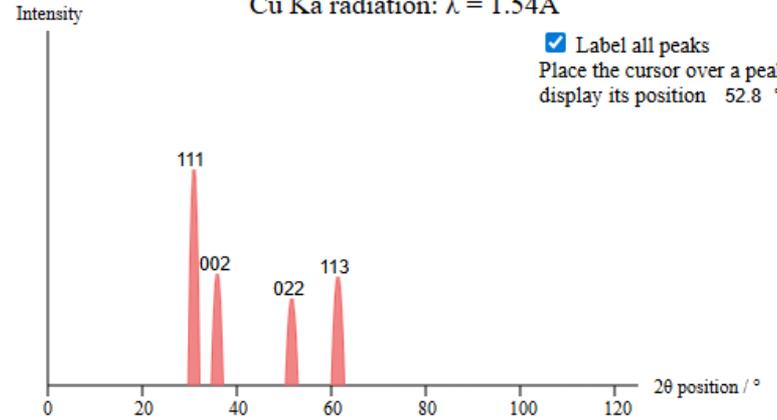
Lattice parameter 3 Å
Crystallite size 75 Å
Atomic number 100
 Amorphous

The breadth of a peak (in radians) is related to the crystallite size by the equation:
 $\beta = \lambda/L\cos\theta$ (Scherrer equation)

FCC Lattice: First 4 Peaks

Cu Ka radiation: $\lambda = 1.54\text{\AA}$

Label all peaks
Place the cursor over a peak to display its position 52.8 °



Lattice parameter 5 Å
Crystallite size 75 Å
Atomic number 100
 Amorphous

The lattice spacing is related to theta by the Bragg equation.
 $d = \lambda/(2\sin\theta)$

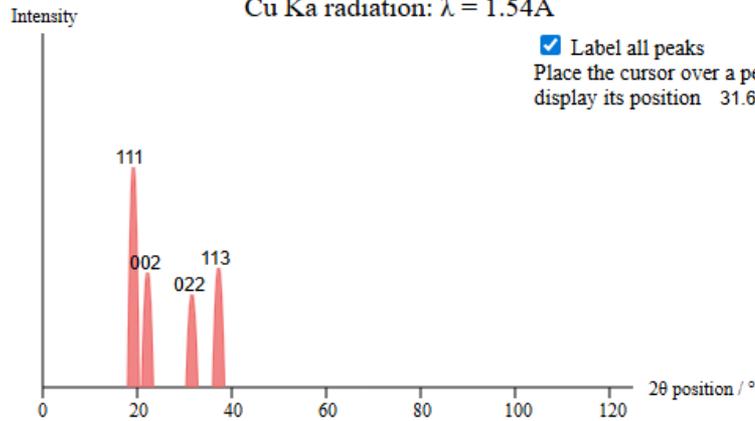
Disminuyo tamaño de cristalita

Aumento parám. red

FCC Lattice: First 4 Peaks

Cu Ka radiation: $\lambda = 1.54\text{\AA}$

Label all peaks
Place the cursor over a peak to display its position 31.6 °



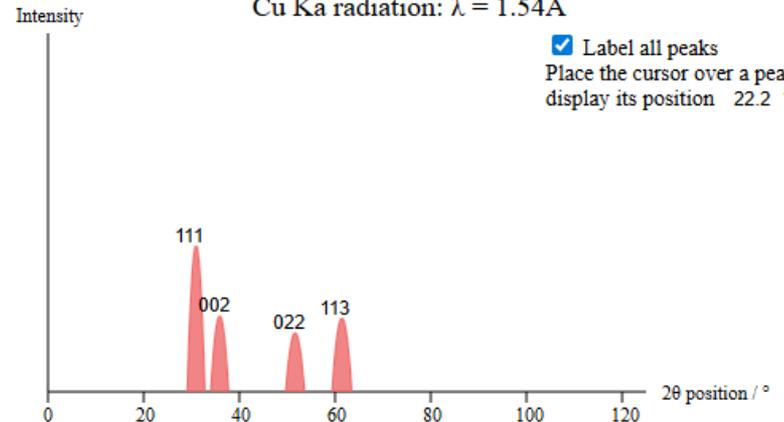
Lattice parameter 8 Å
Crystallite size 75 Å
Atomic number 100
 Amorphous

The lattice spacing is related to theta by the Bragg equation.
 $d = \lambda/(2\sin\theta)$

FCC Lattice: First 4 Peaks

Cu Ka radiation: $\lambda = 1.54\text{\AA}$

Label all peaks
Place the cursor over a peak to display its position 22.2 °



Lattice parameter 50 Å
Crystallite size 75 Å
Atomic number 100
 Amorphous

The breadth of a peak (in radians) is related to the crystallite size by the equation:
 $\beta = \lambda/L\cos\theta$ (Scherrer equation)

Ejemplos: Si

Name and formula

Reference code: 00-027-1402
Mineral name: Silicon, syn
PDF index name: Silicon
Empirical formula: Si
Chemical formula: Si

Crystallographic parameters

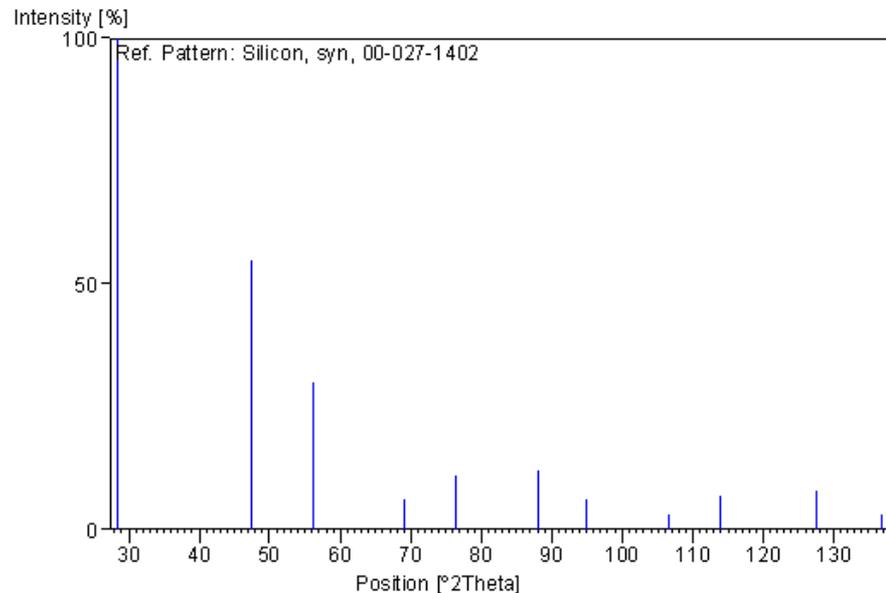
Crystal system: Cubic
Space group: Fd3m
Space group number: 227

a (Å): 5,4309
b (Å): 5,4309
c (Å): 5,4309
Alpha (°): 90,0000
Beta (°): 90,0000
Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 2,33
Volume of cell (10⁶ pm³): 160,18
Z: 8,00

Comments

Color: Gray
General comments: Reflections calculated from precision measurement of a₀.
Sample source: This sample is NBS Standard Reference Material No. 640.
Additional pattern: To replace 5-565 and 26-1481.
Temperature: Pattern taken at 25(1) C.

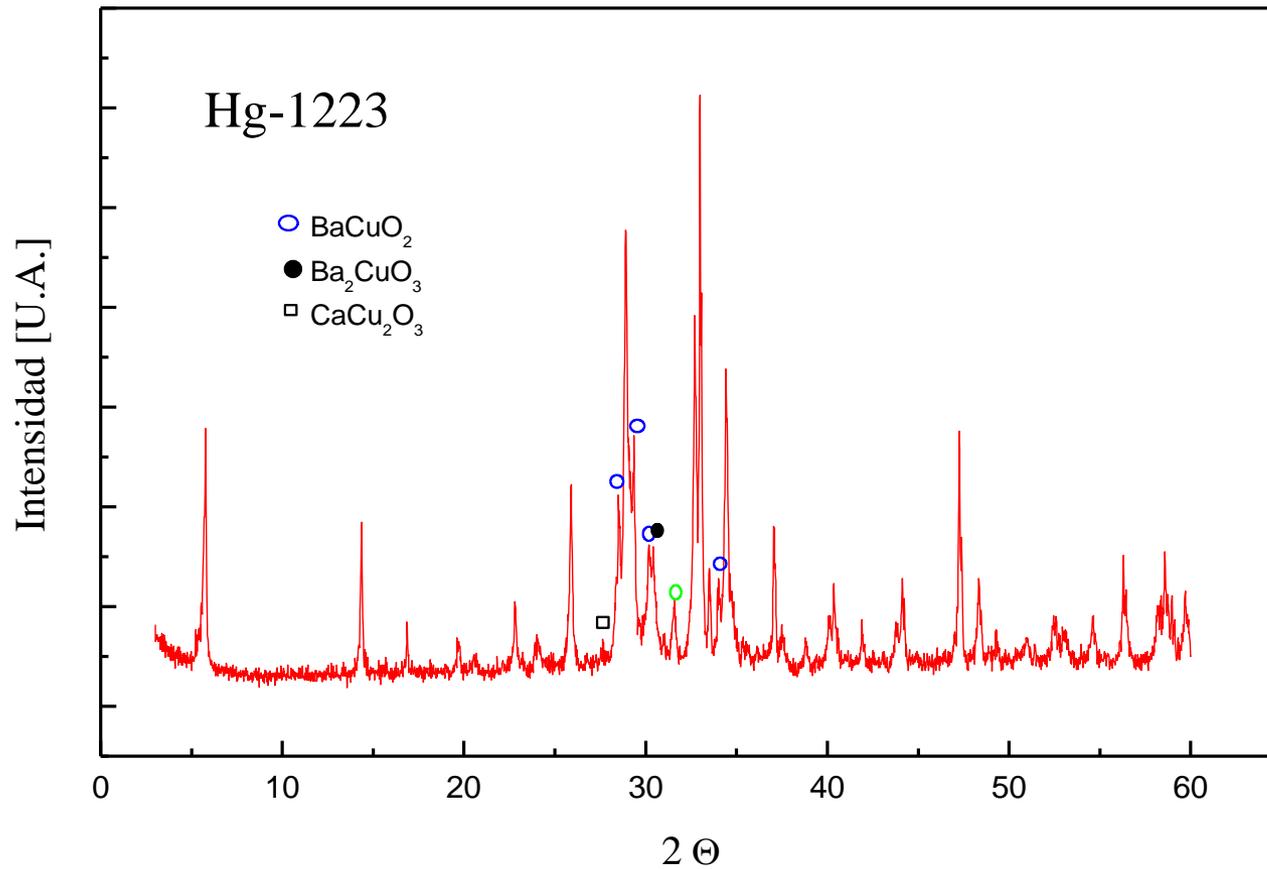


Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta[deg]	I [%]
1	1	1	1	3,13550	28,443	100,0
2	2	2	0	1,92010	47,304	55,0
3	3	1	1	1,63750	56,122	30,0
4	4	0	0	1,35770	69,132	6,0
5	3	3	1	1,24590	76,380	11,0
6	4	2	2	1,10860	88,029	12,0
7	5	1	1	1,04520	94,951	6,0
8	4	4	0	0,96000	106,719	3,0
9	5	3	1	0,91800	114,092	7,0
10	6	2	0	0,85870	127,547	8,0
11	5	3	3	0,82820	136,898	3,0

Ejemplos

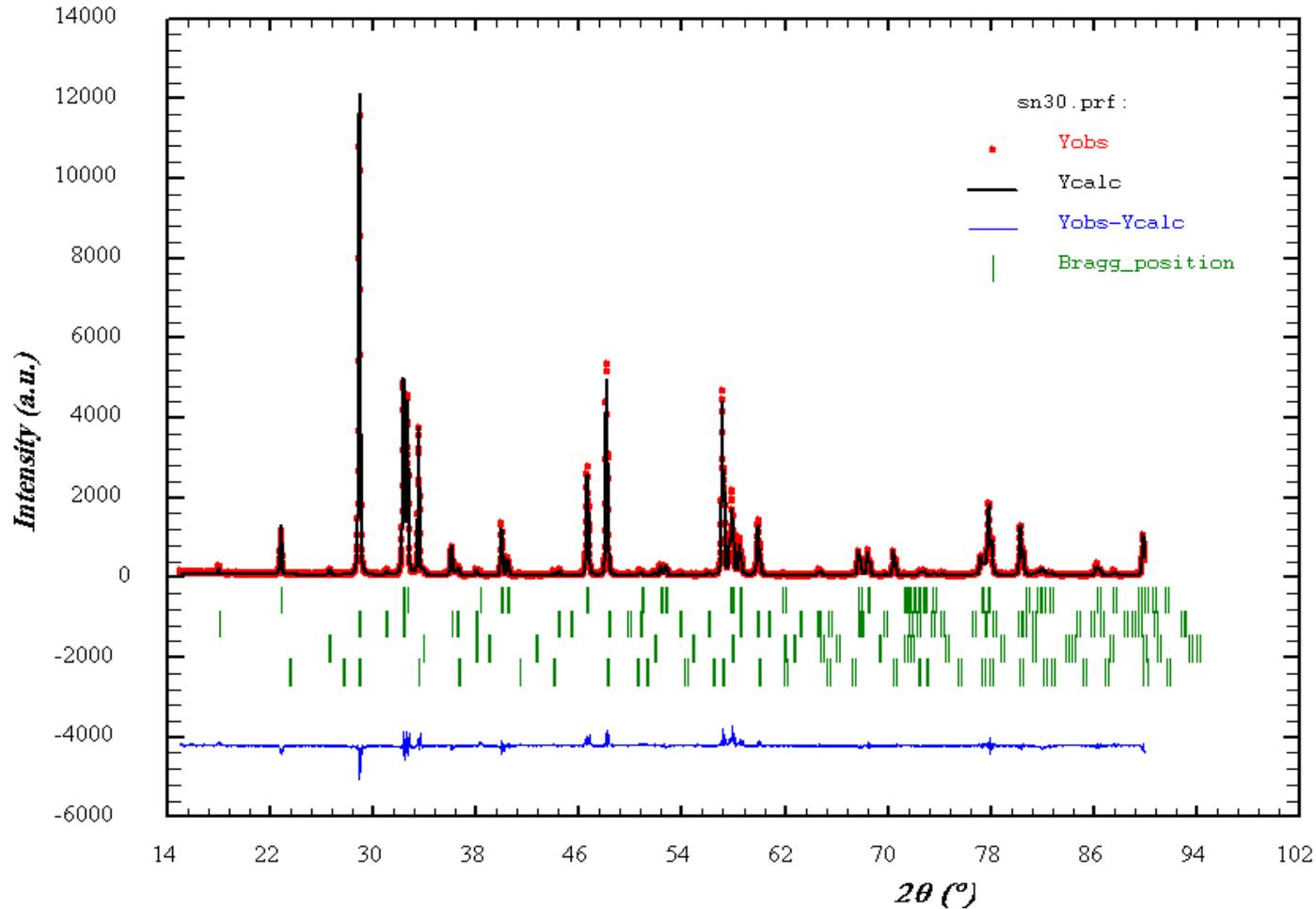
2) Identificación de fases



Ejemplos

2) Análisis cuantitativo de fases

Sn_{0.3} La_{0.7} Mn₁ O₃, Mn₃ O₄ and SnO₂



Algunas fuentes bibliográficas consultadas:

- C. Kittel: “*Introduction to Solid State Physics*”
- C. Hammond: “*Introduction to crystallography*”
- C. Suryanarayana & M. Grant Norton: “*X-Ray Diffraction. A Practical Approach*”, Springer Science, 1998.
- <https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/xray-diffraction/index.php> (03/08/2025)
- J. J. Andrade Gamboa, “*Introducción a la cristalografía, un enfoque didáctico*”, Ediunc, 1ª edición, 2023
- Notas de la Dra. Adriana Serquis, Fis. Exp. III, IB, U.N. Cuyo
- <https://lampz.tugraz.at/~hadley/ss1/crystalldiffraction/atomicformfactors/formfactors.php> (03/08/2025)