

# MT711 FÍSICA DE MATERIALES



## 0. INTRODUCCION

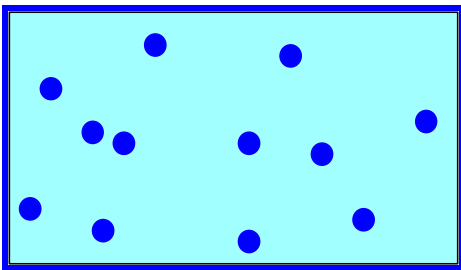
### 0.1 FASES

- **Definición:** porción de la materia con propiedades homogéneas
- La materia puede encontrarse en un gran número de fases.
- Las más conocidas están asociadas a sus estados de agregación:

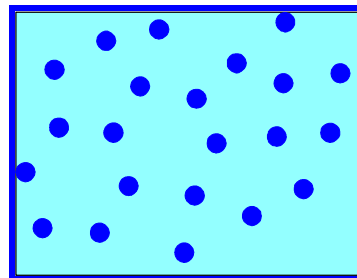
**Sólidos – Líquidos – Gases**

- **Estados de agregación:**
  - GASES
    - Llenan el recipiente
    - (Generalmente) poseen elevada compresibilidad
    - Moléculas ocupan posiciones al azar (salvo si están muy cercanas)
    - Estas posiciones varían rápidamente con el tiempo

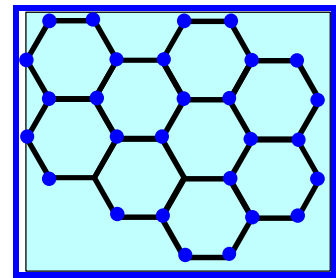
- **LÍQUIDOS**
  - Poseen volumen “propio” (poco compresibles)
  - Carecen de forma propia
  - Moléculas ocupan posiciones al azar
  - Estas posiciones varían en el tiempo,  $x=x(t,T,)$
  - Distancias intermoleculares no están al azar (son bastante constantes dentro de un estrecho margen)
- **SÓLIDOS**
  - Poseen volumen propio (poco compresibles)
  - Poseen forma propia
  - Átomos ocupan posiciones  $\pm$  fijas
  - Vibran en torno a posición de equilibrio y experimentan movimientos discontinuos (responsables de la difusión)



**S(gas)>**



**S(líquido)>**



**S(sólido)**

- 7LSRVGHV y QGRV□

- **CRISTALINOS**

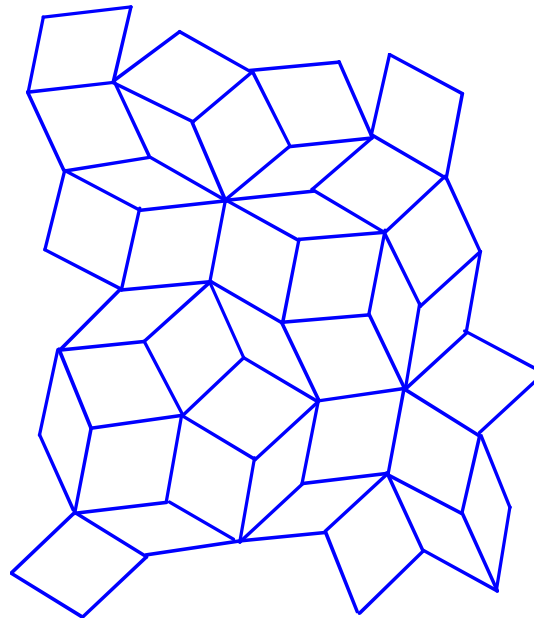
- Orden regular periódico

- **AMORFOS O VIDRIOS**

- Desordenado
- En muchos aspectos, equivalente a un líquido de alta viscosidad
- Posiciones:
  - Fijas, al azar
  - Pero, distancias interatómicas son  $\approx$  ctes.

- **CUASICRISTALINOS ( $\approx$ 1980)**

- Orden regular no periódico

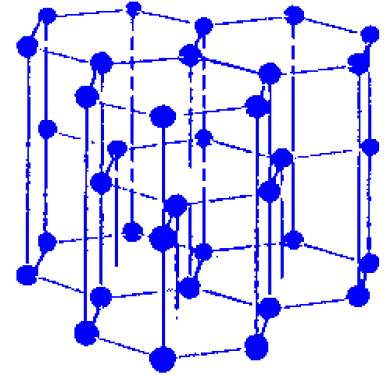


## 0.2 FASES CRISTALOGRÁFICAS

- Muchos materiales, incluyendo los elementos puros, pueden existir en distintas estructuras cristalográficas con propiedades muy distintas.

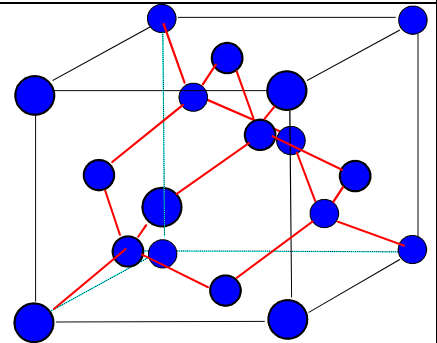
### GRAFITO

- Negro
- Conductor eléctrico
- Blando, se exfolia en láminas
- Estructura: plano anillos hexagonales unidos débilmente entre si
- Barato



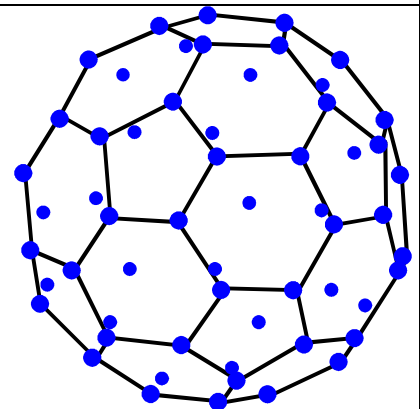
### DIAMANTE

- Transparente
- Muy aislante (eléctrico)
- Muy duro
- Estructura: red tetragonal
- Caro



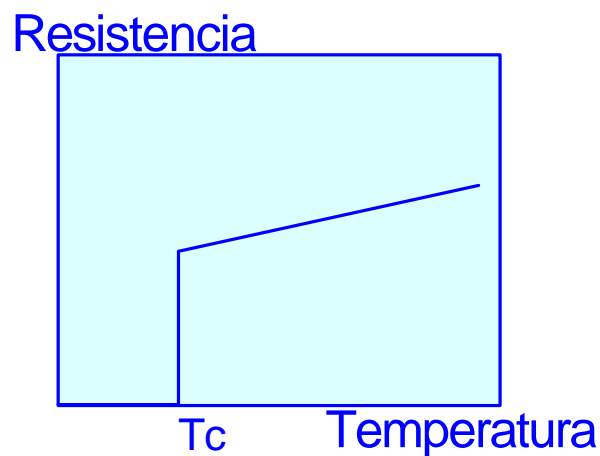
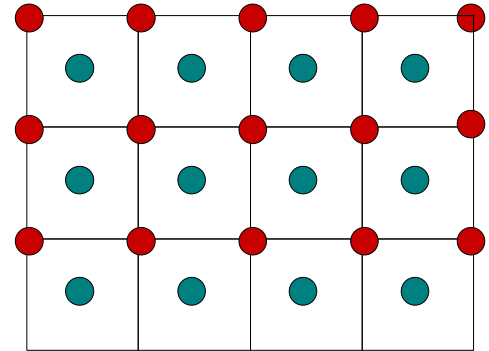
### BUCKMINSTERFULLERENO, FULLERENO O FUTBOLENO

- Aislante; impurezas lo hacen superconductor
- Esferas duras independientes (rodamientos ideales)
- Estructura: C<sub>60</sub>: polihedro cuyas caras son hexágonos y pentágonos con átomos de C en los vértices
- Carísimo



## 0.3 OTRAS FASES

- Orden-desorden
- **Completamente ordenada:**  
Cu: en los vértices  
Zn: en los centros  
(o exactamente al revés)
- **Completamente desordenada:**  
Cu y Zn indistintamente en  
vértices o centros
- **Parcialmente ordenada:**  
Cu: fracción  $x$  en los vértices  
Zn:  $(1-x)$  en los centros
- Superconductividad



- Ferroeléctrica a paraeléctrica
- Ferromagnética a paramagnética
- Etc.

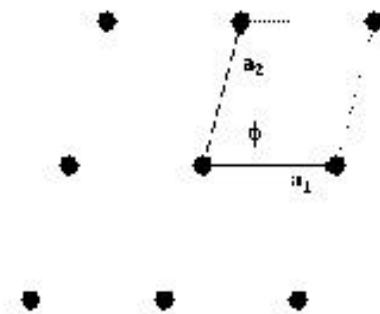
# 1. CRISTALOGRAFÍA

## 1.1 RED DE BRAVAIS

Es el conjunto de puntos tq cada punto se puede escribir como:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z} \quad \vec{a}_i \text{ l.i.}$$

donde los  $\vec{a}_i$  se llaman **vectores generadores de la red.**

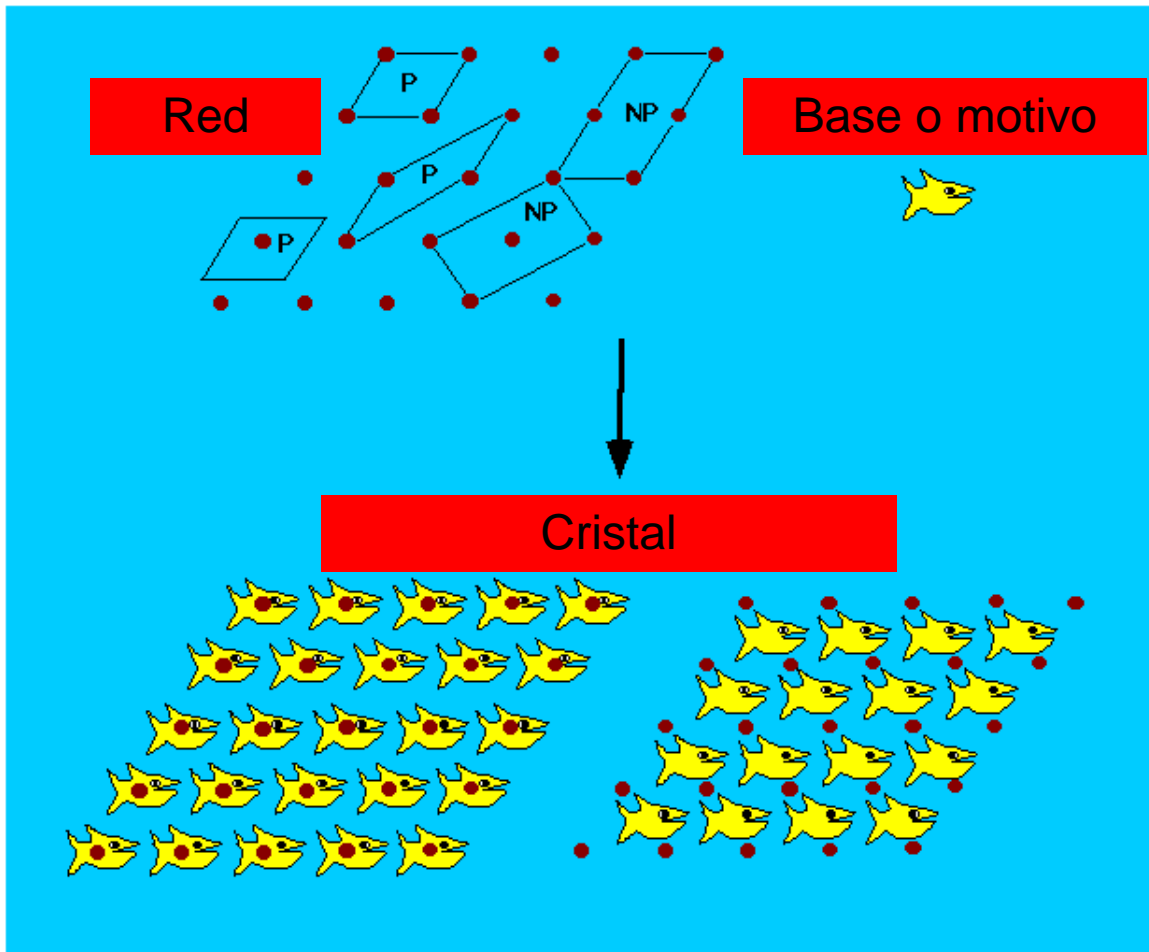


## 1.2 DEFINICIONES

- **Primeros vecinos:** puntos de la red más cercanos a un punto dado.
- **Nº de coordinación:** # de primeros vecinos (vecinos más cercanos).

- **Celda unitaria:** volumen que al ser sometido a traslaciones que sean combinaciones lineales enteras de los vectores generadores ( $\vec{a}_i$ ), llenan el espacio sin dejar huecos ni traslaparse. **No es única en un cristal.**
- **Celda primitiva:** celda unitaria de volumen mínimo.
  - No es única.
  - Se elige para resaltar la simetría de la estructura cristalina
  - Existen 7 sistemas de estructura cristalina y 14 celdas de Bravais
- **Celda de Wigner-Seitz:** región más cercana a un punto dado de la red que a cualquier otro.
  - Es la mejor forma de definir la celda unitaria.
  - En materiales no cristalinos se llama *poliedro de Voronoi*; son distintos para cada punto.
- **Base:** conjunto de átomos de una celda primitiva.
  - No es necesariamente igual a la unidad química del cristal.
  - En general, su geometría y simetría son diferentes a las de la red.

- **Cristal: RED + BASE**



### 1.3 RED DE BRAVAIS

Sea  $\vec{R}$  una red de Bravais cualquiera.

Sea  $F(\vec{R})$  una función periódica del cristal  
(e.g., su densidad electrónica)

$$F(\vec{r} + \vec{R}) = F(\vec{r})$$



Es decir, siempre se podrá expresar  $F(\vec{R})$  como una serie de Fourier:

$$F(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

donde  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  es una onda plana. En general, esta onda plana no tendrá la periodicidad de la red de Bravais, pero en ciertos casos si la tendrá:

$$F(\vec{r} + \vec{R}) = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = F(\vec{r})$$

luego, la **red recíproca** se puede caracterizar por el conjunto  $\{\vec{K}\}$  de vectores de  $\vec{k}$  que cumplen:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1 \quad \forall \vec{R} \in \{\vec{R}\}$$

Notar que la red recíproca se define c/r a una red de Bravais particular. A esta se le llama **red directa**.

La red se llama recíproca sólo si el conjunto de vectores  $\{\vec{R}\}$  es una red de Bravais.

## Periodic Functions and Fourier Analysis

- Any periodic function can be expressed in terms of its periodic Fourier components (harmonics).
- Example of density  $n(x)$  in 1 D crystal:

$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos (2\pi p x/a) + S_p \sin (2\pi p x/a) ]$$

- Easier expression:

$$n(x) = \sum_p n_p \exp( i 2\pi p x/a)$$

(easier because  $\exp( a + b ) = \exp( a ) \exp( b )$  )

- Expression for Fourier Components:

$$n_p = \int_0^a dx n(x) \exp( - i 2\pi p x/a)$$

Physics 389 F 2000 Lect 4

11

## Periodic functions and Fourier Analysis

- Define vector position  $r = (x,y)$  (2D),  $r = (x,y,z)$  (3D).
- Fourier analysis

$$f(r) = \sum_G f_G \exp( i G \cdot r)$$

where the  $G$ 's are vectors, i.e.,

$$\exp( i G \cdot r ) = \exp( i (G_x x + G_y y + G_z z) )$$

- A periodic function satisfies

$$f(r) = f(r + T) \text{ where } T \text{ is any translation}$$

$$T(n_1, n_2, \dots) = n_1 a_1 + n_2 a_2 (+ n_3 a_3 \text{ in 3-d}),$$

where the  $n$ 's are integers

- Thus

$$f(r + T) = \sum_G f_G \exp( i G \cdot r ) \exp( i G \cdot T ) = f( r )$$

$$\Rightarrow \exp( i G \cdot T ) = 1 \Rightarrow G \cdot T = 2\pi \times \text{integer}$$

Physics 389 F 2000 Lect 4

12

## Reciprocal Lattice and Translations

- Note: Reciprocal lattice is defined **only** by the vectors

$\mathbf{G}(m_1, m_2, \dots) = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2$  (+  $m_3 \mathbf{b}_3$  in 3-d),  
where the m's are integers and

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}, \text{ where } \delta_{ij} = 1, \delta_{ij} = 0, i \neq j$$

- The **only** information about the actual basis of atoms is in the quantitative values of the Fourier components  $f_{\mathbf{G}}$  in the Fourier analysis

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f_{\mathbf{G}} \exp(i \mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

- Inversion:

$$f_{\mathbf{G}} = \int_{\text{cell}} d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \exp(-i \mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

Physics 389 F 2000 Lect 4

14

## Reciprocal Lattice and Fourier Analysis in 1D

- In 1D,  $b = 2\pi/a$
- Periodic function  $f(x)$ :

$$f(x) = \sum_p f_p \exp(i 2\pi p x/a) \\ = \sum_p f_p \exp(i p b), p = \text{integer}$$

- The set of all integers  $\times b$  are the **reciprocal lattice**



Physics 389 F 2000 Lect 4

15

## Propiedades de la red de Bravais:

1)  $\{\vec{K}\}$  es una red de Bravais.

2) Si los vectores  $\vec{a}_i$  generan  $\{\vec{R}\}$ , la red recíproca es generada por

$$\vec{b}_i = \frac{\prod_j \mathbf{e}_{ijk} a_j \times a_k}{a_i \cdot (a_j \times a_k)}$$

3)  $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$

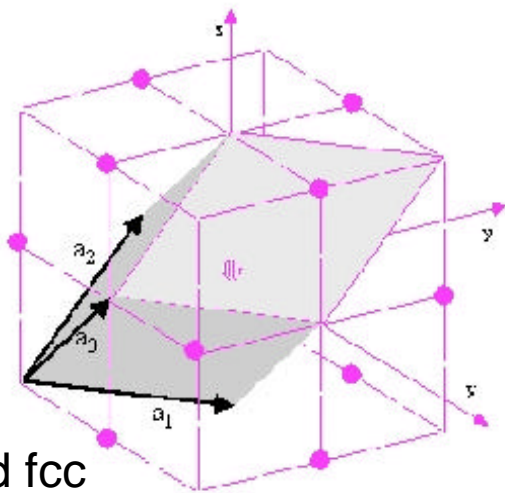
4) La red recíproca de la recíproca es la directa.

5) Si  $V$  es el volumen de la celda primitiva en  $\{\vec{R}\}$  y  $\Omega$  es el volumen de una celda primitiva en  $\{\vec{K}\}$ , entonces  $\Omega V = 2\pi^3$ .

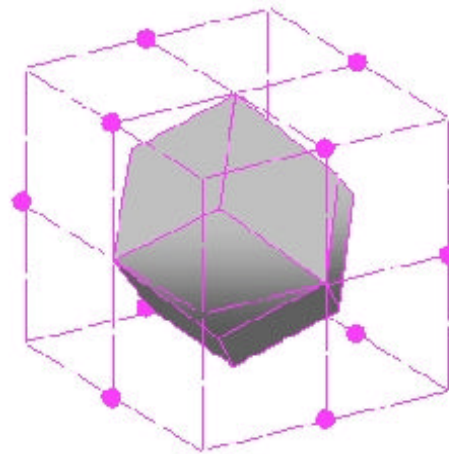
## **Definición: PRIMERA ZONA DE BRILLOUIN**

Es la celda de Wigner-Seitz en la red recíproca.

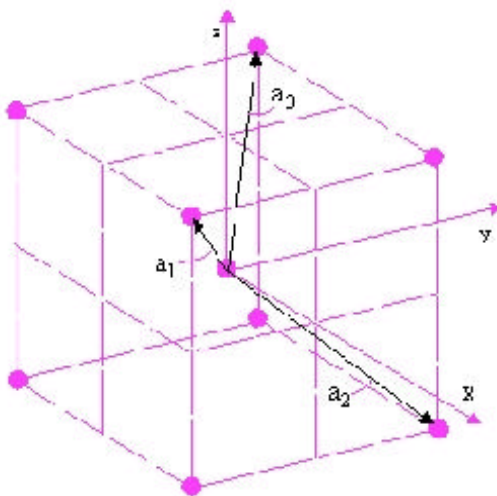
- Existen zonas de Brillouin de orden mayor.
- Como  $\{\vec{K}\}$  de red *bcc* es *fcc*, la 1ª zona de Brillouin de la red *bcc* es la celda de Wigner-Seitz de la red *fcc*.



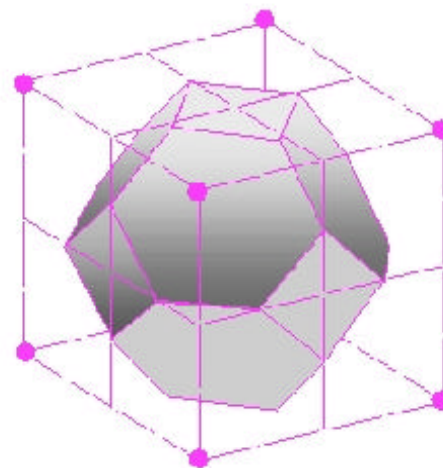
Red fcc  
celda primitiva



Celda de Wigner-Seitz fcc

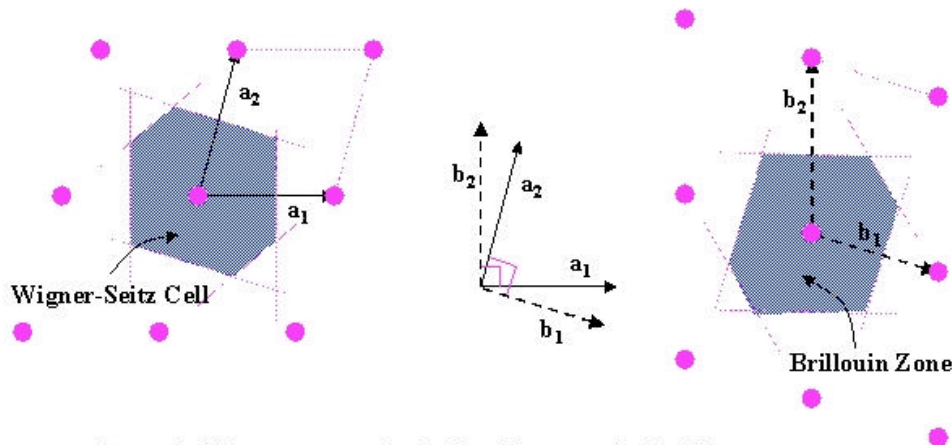


Red bcc  
celda primitiva



Celda de Wigner-Seitz bcc

## Real & Reciprocal lattices in 2 D



- Two lattices associated with crystal lattice
- $b_1$  perpendicular to  $a_2$ ;  $b_2$  perpendicular to  $a_1$
- Wigner-Seitz Cell of Reciprocal lattice called the “First Brillouin Zone” or just “Brillouin Zone”

Physics 389 F 2000 Lect 4

17

## Reciprocal Lattice in 3D

- The primitive vectors of the reciprocal lattice are defined by the vectors  $b_i$  that satisfy

$$b_i \cdot a_j = 2\pi \delta_{ij}, \text{ where } \delta_{ij} = 1, \delta_{ij} = 0, i \neq j$$

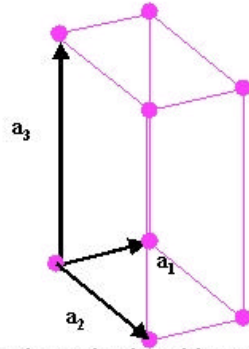
- **How to find the b's?**
- Note:  $b_1$  is orthogonal to  $a_2$  and  $a_3$ , etc.
- In 3D, this is found by noting that  $(a_2 \times a_3)$  is orthogonal to  $a_2$  and  $a_3$
- Also volume of primitive cell  $V = |a_1 \cdot (a_2 \times a_3)|$
- Then  $b_i = (2\pi / V) (a_j \times a_k)$ , where  $i \neq j \neq k$

Physics 389 F 2000 Lect 4

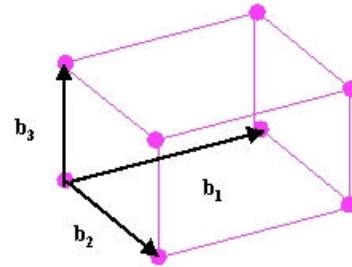
18



## Three Dimensional Lattices Simplest examples



Simple Orthorhombic Bravais Lattice  
with  $a_3 > a_2 > a_1$



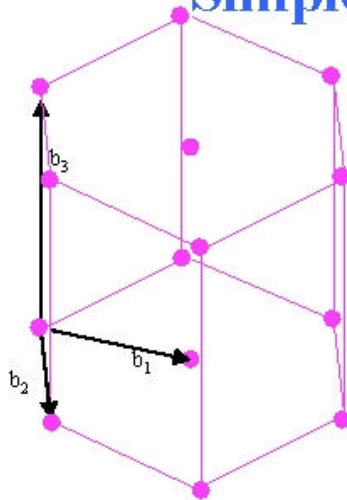
Reciprocal Lattice  
Note:  $b_1 > b_2 > b_3$

- Long lengths in real space imply short lengths in reciprocal space and vice versa

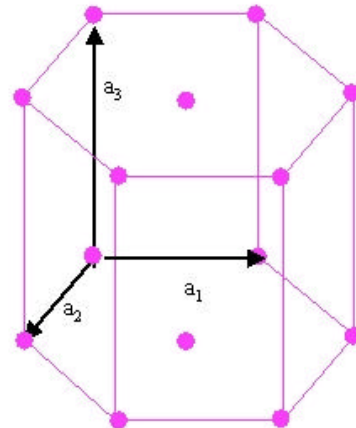
Physics 389 F 2000 Lect 4

19

## Three Dimensional Lattices Simplest examples



Reciprocal Lattice

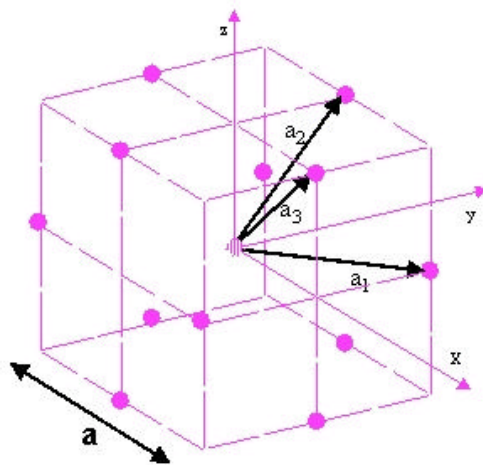


Hexagonal Bravais Lattice

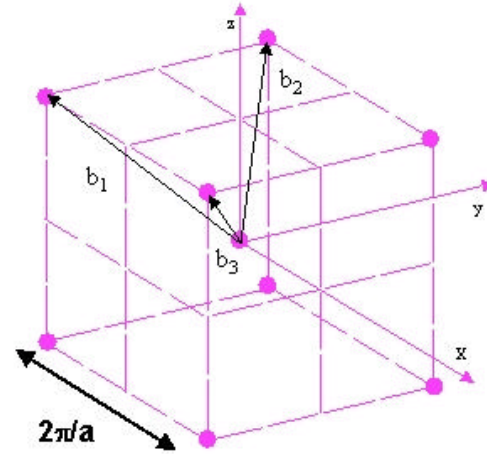
- Reciprocal lattice is also hexagonal, but rotated
- See homework problem in Kittel [Physics 389 F 2000 Lect 4](#)

20

## Face Centered - Body Centered Cubic Reciprocal to one another



Primitive vectors and the  
conventional cell of fcc lattice

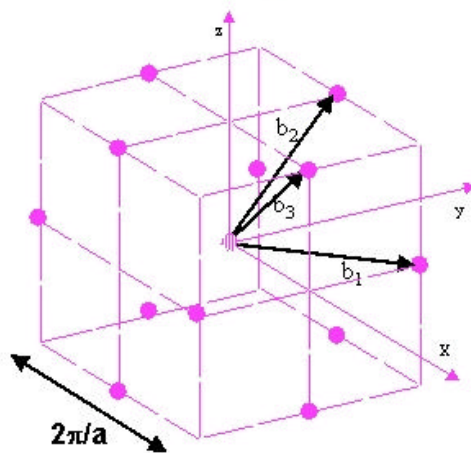


Reciprocal lattice is  
Body Centered Cubic

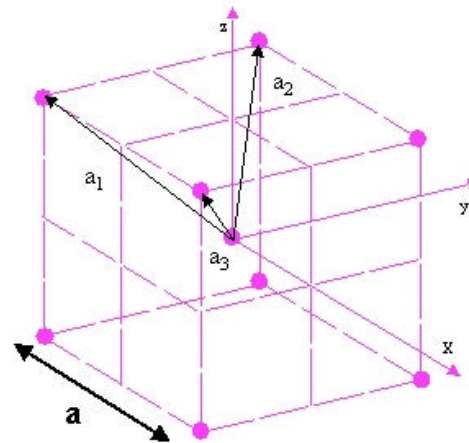
Physics 389 F 2000 Lect 4

21

## Face Centered - Body Centered Cubic Reciprocal to one another



Reciprocal lattice is  
Face Centered Cubic



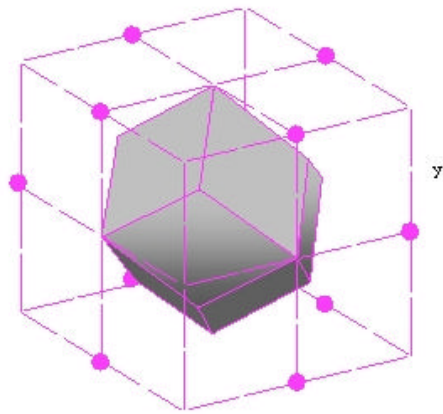
Primitive vectors and the  
conventional cell of bcc lattice

Physics 389 F 2000 Lect 4

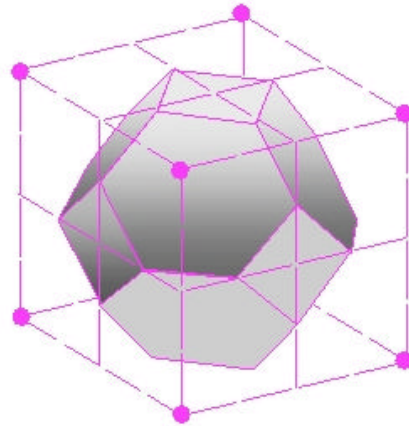
22



## Face Centered Cubic



Wigner-Seitz Cell for  
Face Centered Cubic Lattice

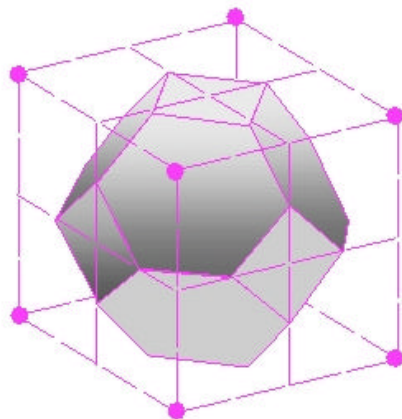


Brillouin Zone =  
Wigner-Seitz Cell for  
Reciprocal Lattice

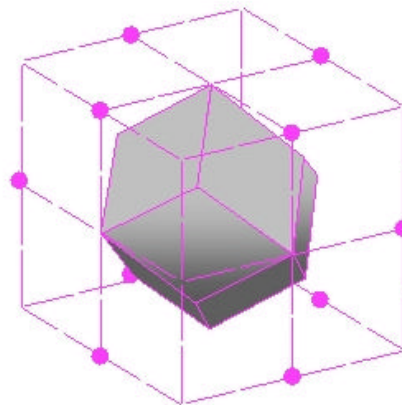
Physics 389 F 2000 Lect 4

23

## Body Centered Cubic



Wigner-Seitz Cell for  
Body Centered Cubic Lattice



Brillouin Zone =  
Wigner-Seitz Cell for  
Reciprocal Lattice

Physics 389 F 2000 Lect 4

24

**Factor de empaquetamiento:** porción del espacio de una celda unitaria que está lleno de átomos esféricos

$$FE = \frac{N \times V_N}{V_C}$$

N = número de átomos/celda

$V_N$  = volumen de cada átomo

$V_C$  = volumen de la celda

➤ **Densidad:** porción del espacio de una celda unitaria que está lleno de átomos esféricos

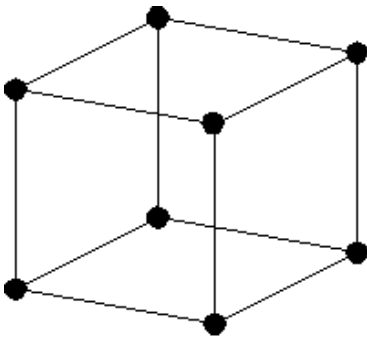
$$r = \frac{N \times M_A}{V_C}$$

$M_A$  = masa de 1 átomo

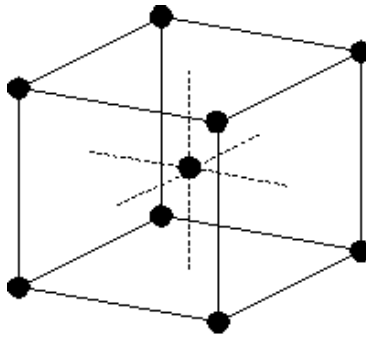
## 1. CUBICO

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

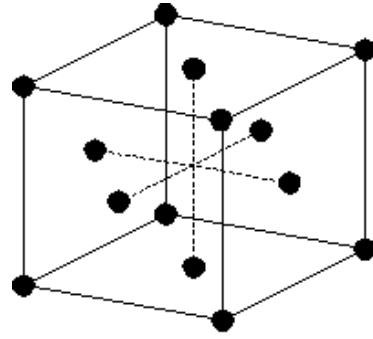
$$a = b = c$$



Cúbico simple  
(CS)



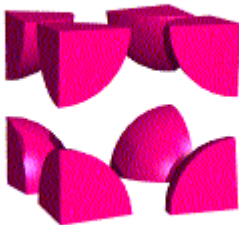
Cúbico centrado  
en el cuerpo  
(CC o bcc)



Cúbico centrado  
en las caras  
(CCC o fcc)

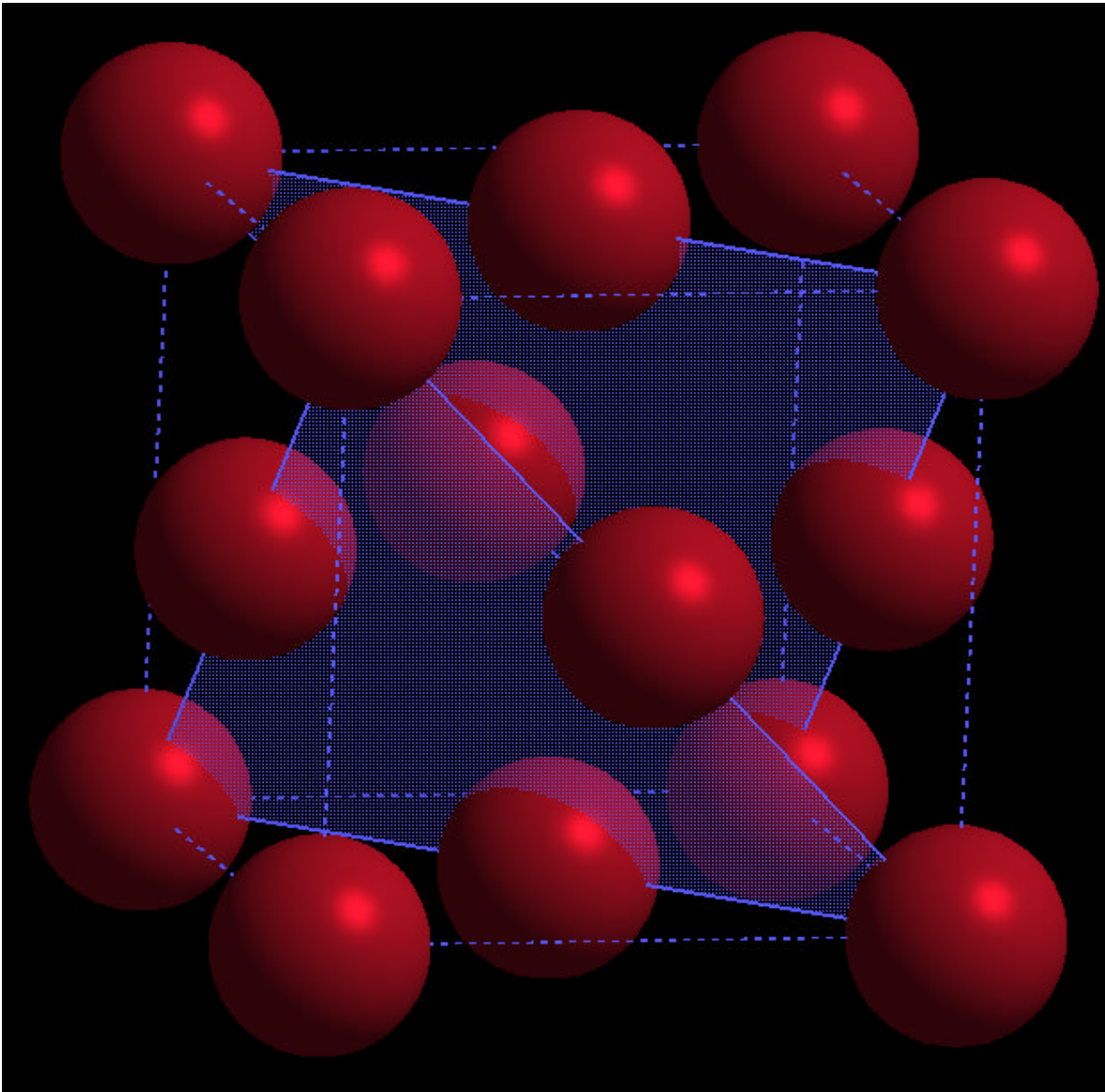
- CS: estructura más simple
- CCC: estructura más densa

➤ 2 formas de mostrar la celda unitaria de una estructura cubica simple (CS)



	# átomos/celda unitaria
CS	$8 \times 1/8 = 1$
CC (bcc)	$1 + 8 \times 1/8 = 2$
CCC (fcc)	$6 \times 1/2 + 8/1/8 = 4$

	# Coord	# ats/ celda	FE	Propiedades mecánicas
CS	6	1	0,52	No hay
CC (bcc)	8	8	0,68	Duro
CCC (fcc)	12	4	0,74	Dúctil
hcp	12	2	0,74	Frágil



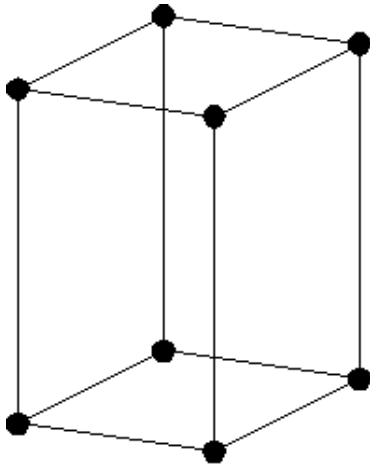
➤ Ejemplos:

- sc: no hay
- fcc: cobre, plata, paladio, oro
- bcc: metales de transición (vanadio, tungsteno, molibdeno, cromo)

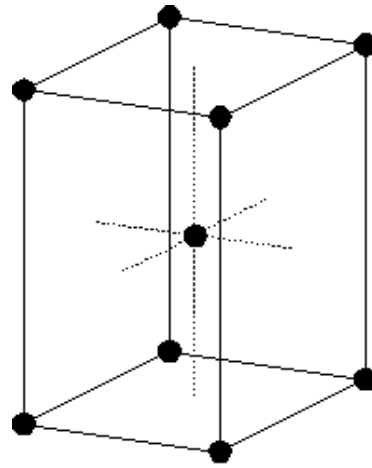
## 2. TETRAGONAL

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$a = b \neq c$$



Simple

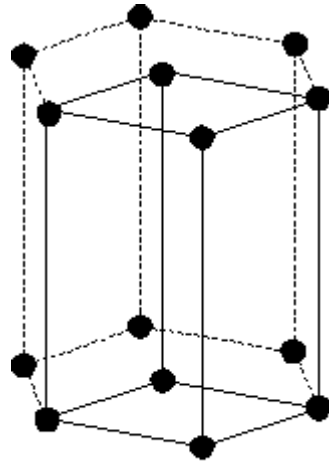


Centrado en el cuerpo

### 3. HEXAGONAL

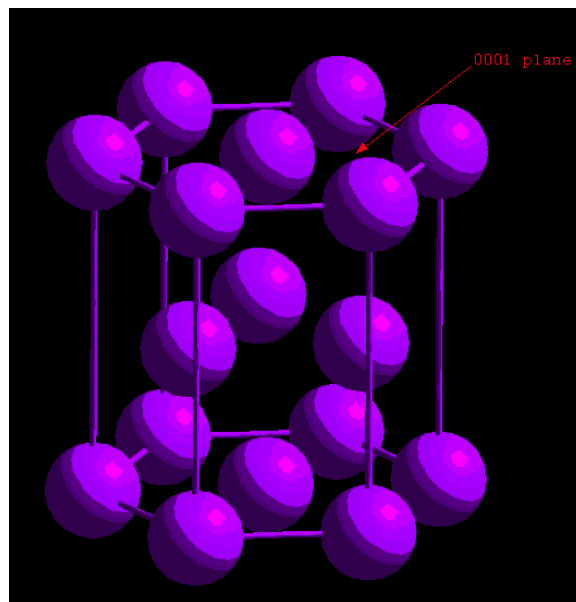
$$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$$

$$a = b \neq c$$



- **Hexagonal compacta:**

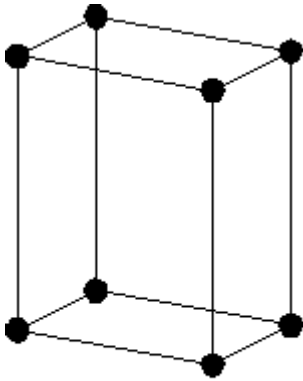
- Caso especial de hexagonal
- Estructura hexagonal con capas alternadas
- Es más compacta que la hexagonal
- Ejemplos: berilio, magnesio, zinc, cadmio



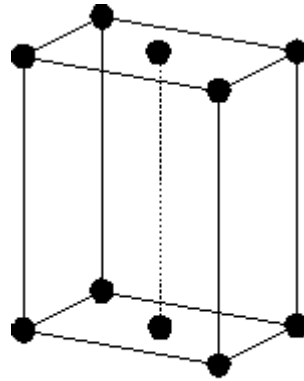
## 4. ORTORROMBICA

$$\alpha=\gamma=90^\circ; \beta=90^\circ$$

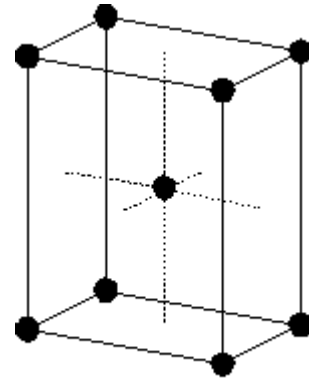
$$a\neq b\neq c$$



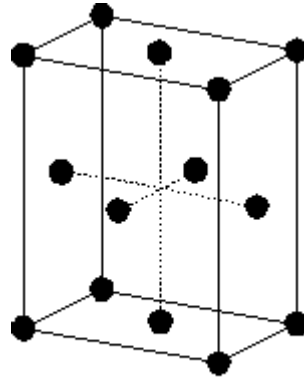
Simple



Centrada en las bases



Centrada en las caras



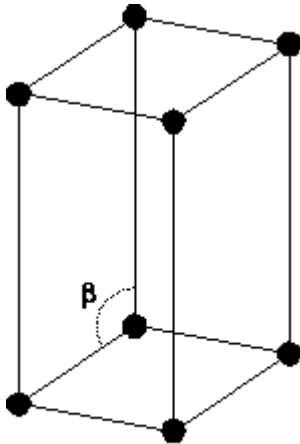
Centrada en las caras



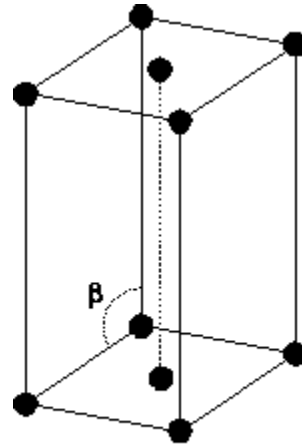
## 5. MONOCLINICA

$$\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$$

$$a \neq b \neq c$$



Simple

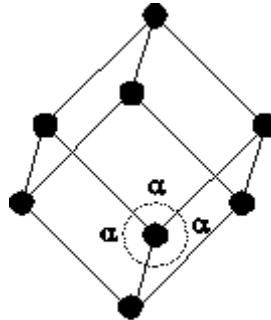


Centrado en las bases

## 6. ROMBOÉDRICA

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

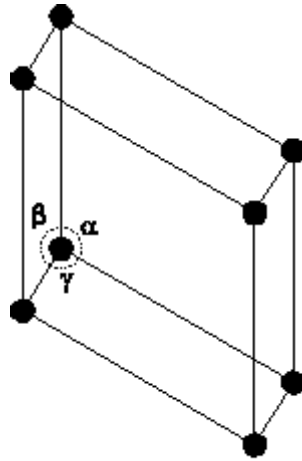
$$a = b = c$$



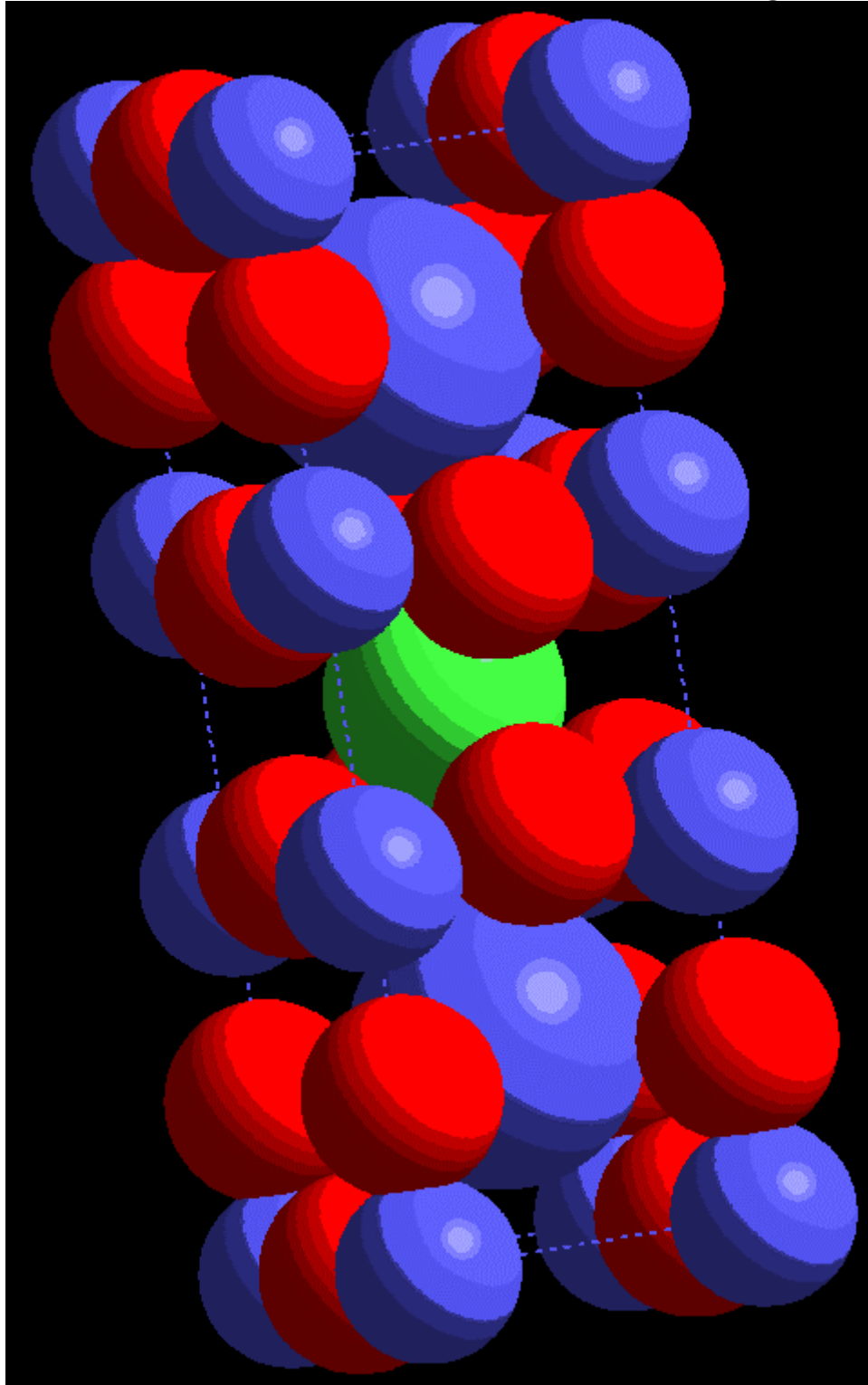
## 7. TRICLINICA

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

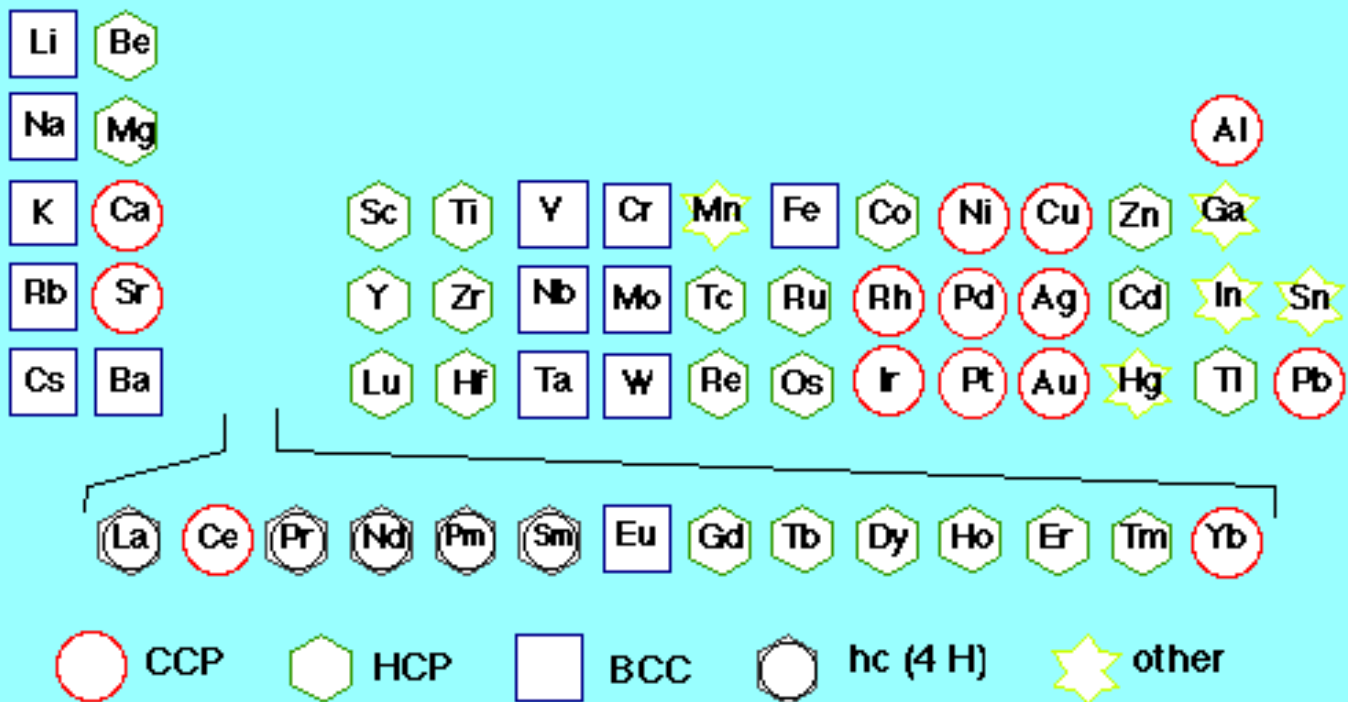
$$a \neq b \neq c$$



- Superconductor 123:  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ 
  - A temperatura ambiente: ortorrómbico
  - A alta temperatura ( $>600^\circ\text{C}$ ): tetragonal



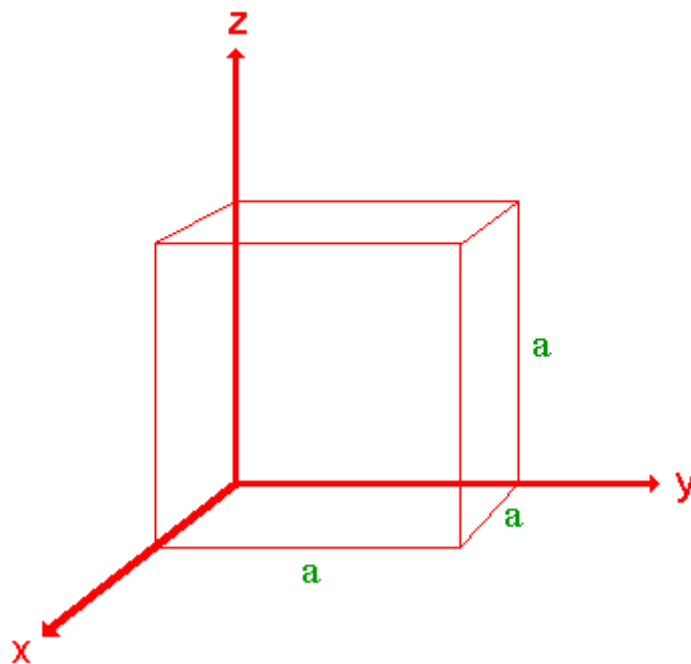
# Periodic Table of Metal Structures



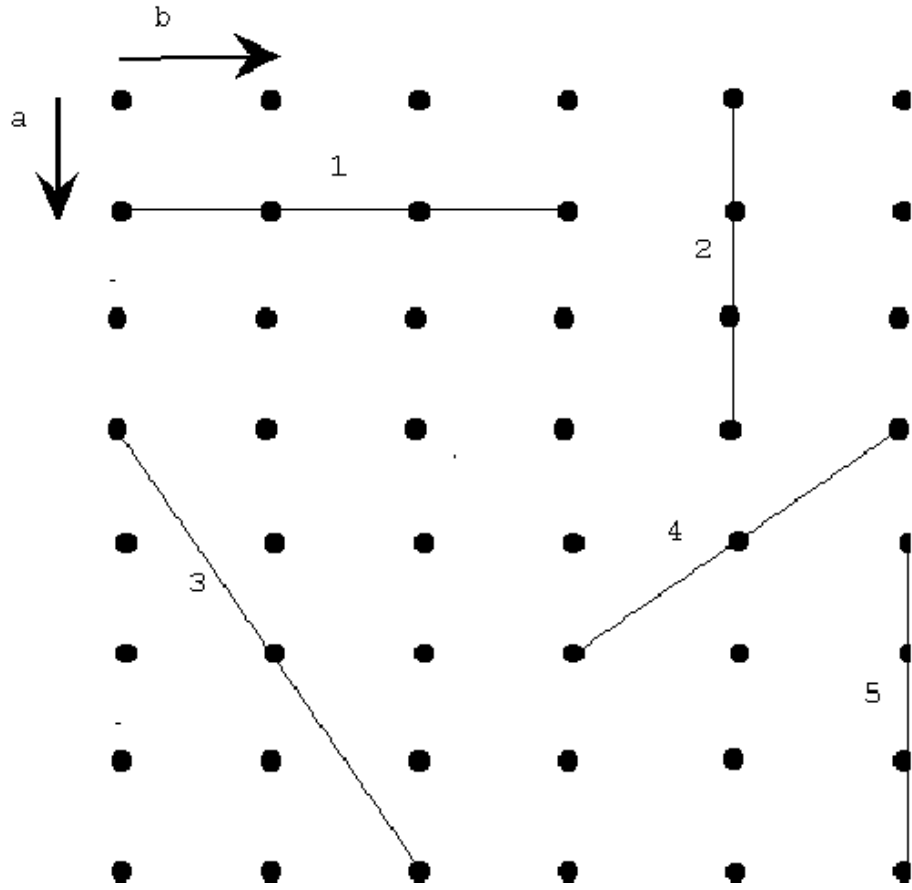
## 1.2 PLANOS Y DIRECCIONES

### a) Indices de Miller

- Coordenadas (hkl): distancia se mide en términos del parámetro de red

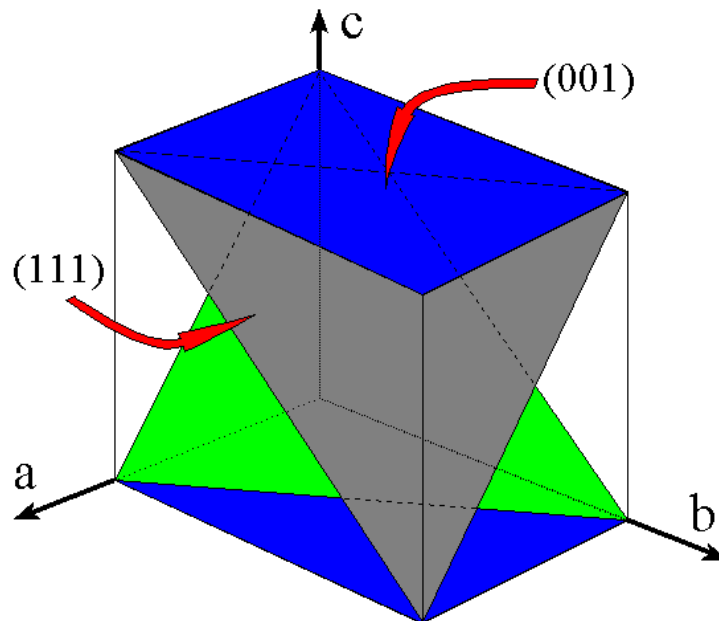
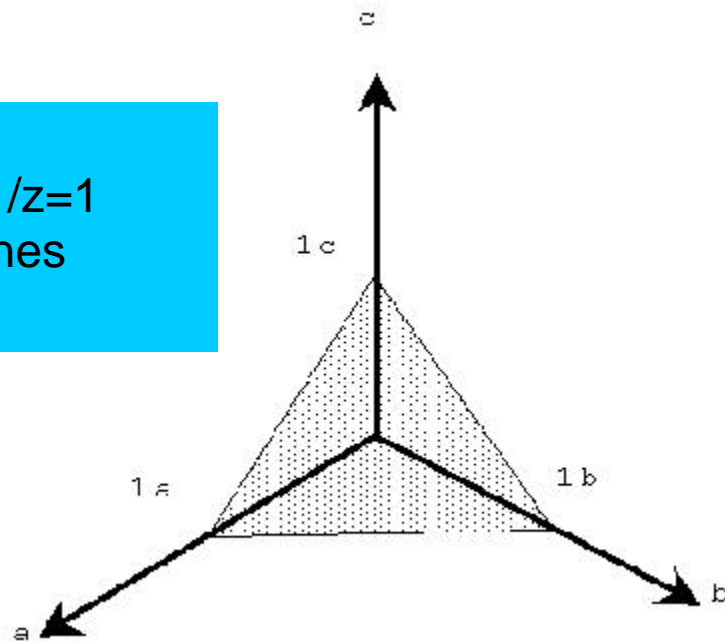


- Direcciones en la celda unitaria:
  - No se usan fracciones
  - Ejemplos:  $[111] \neq [\bar{1}11]$
  - Múltiplos son idénticos

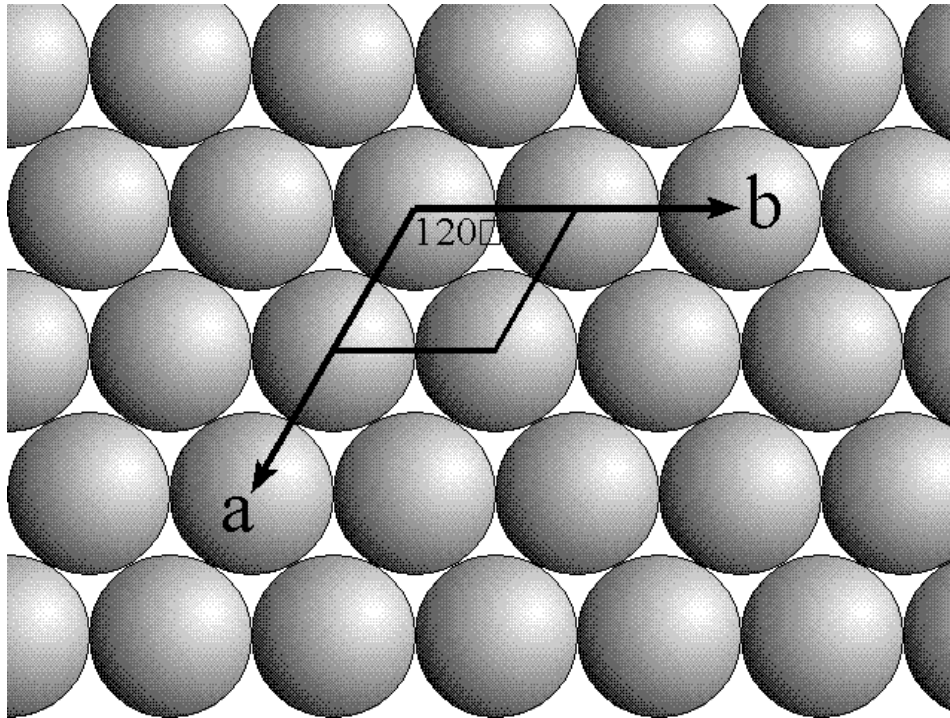


- Planos en la celda unitaria:
  - Son importantes: metales se deforman a lo largo de planos que están más estrechamente unidos.
  - No se usan fracciones
  - Ejemplo:

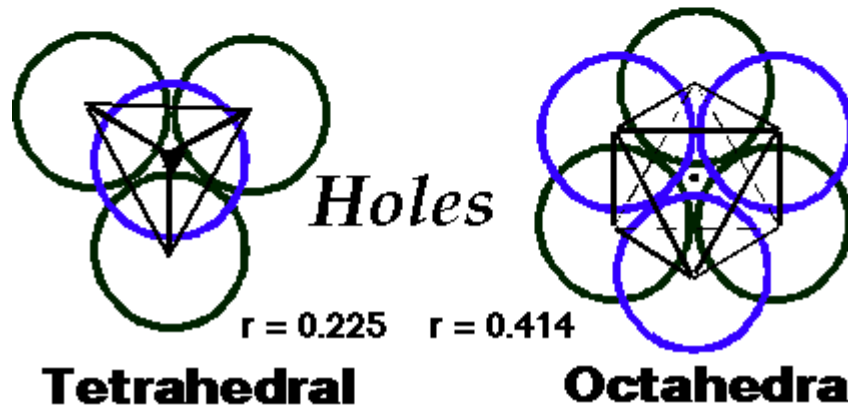
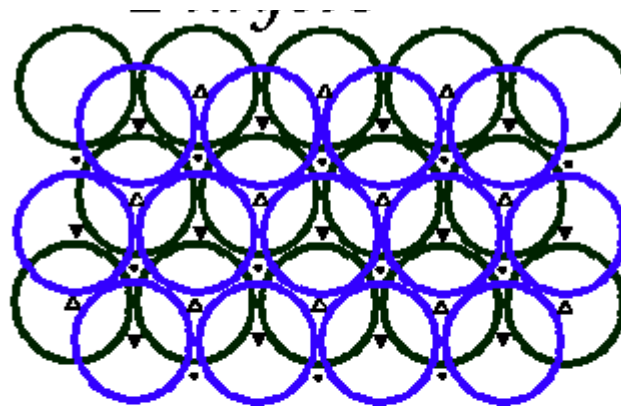
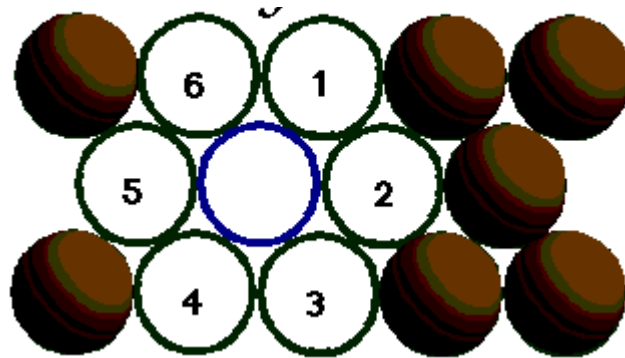
- $x=1, y=1, z=1$
- $1/x=1, 1/y=1, 1/z=1$
- no hay fracciones  
 $\Rightarrow (111)$



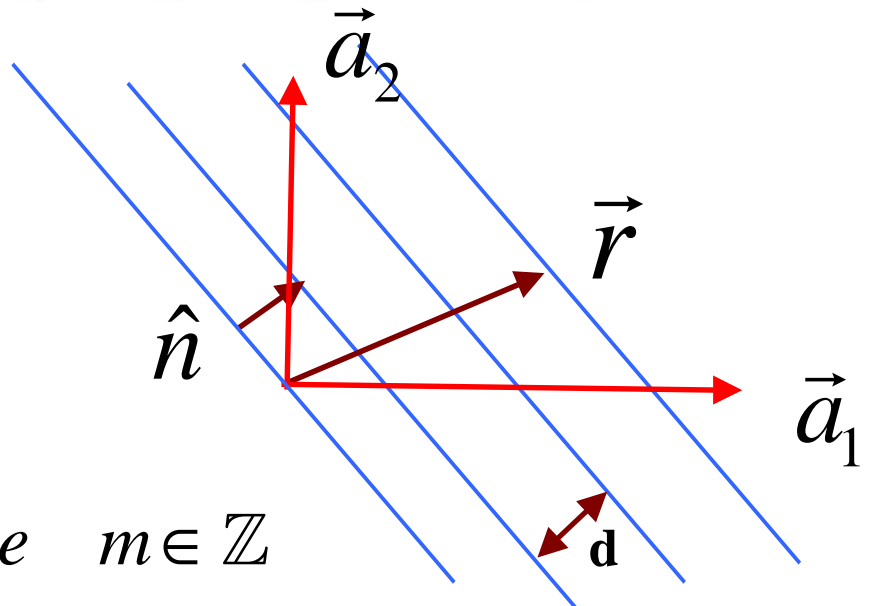
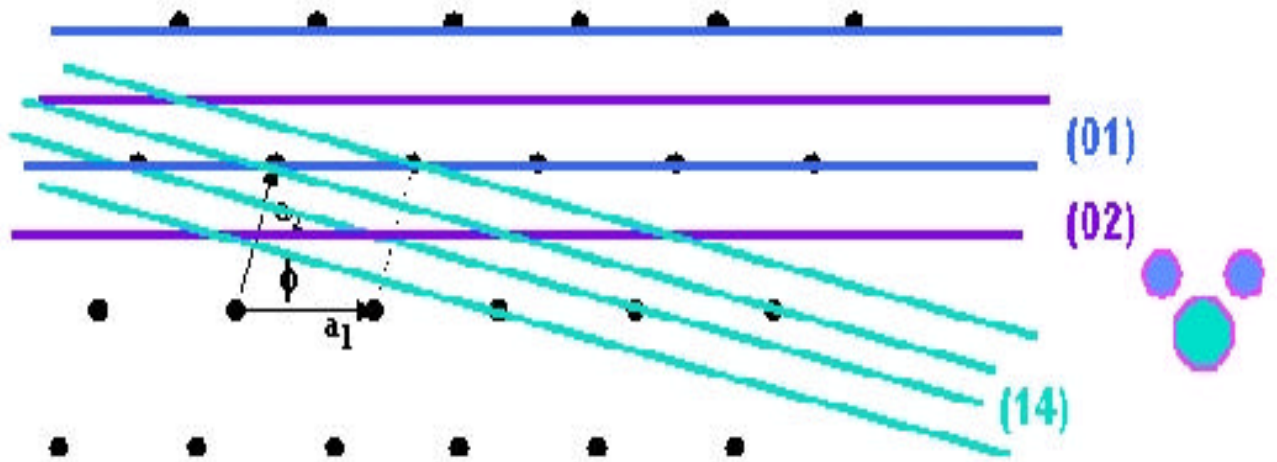
- **Indices de Miller en celdas hexagonales:**
  - Simetría singular
  - Se usan 4 ejes coordenados (1 es redundante): (hkli)
  - Coordenada  $l = -(h+k)$







## FAMILIA DE PLANOS: conjunto de planos paralelos



$$\vec{r} \cdot \hat{n} = md = cte \quad m \in \mathbb{Z}$$

Sea  $\vec{k} = \frac{2\mathbf{p}}{d} \hat{n}$  (i.e. es perpendicular al plano), luego

$\vec{r} \cdot \vec{k} = 2\mathbf{p}$ , por lo tanto se cumple que  $e^{\vec{r} \cdot \vec{k}} = 1$ .

**Conclusión:** a todo plano cristalino le corresponde un vector  $\mathbf{k}$  de la red recíproca (en realidad, infinitos  $\mathbf{k}$ )

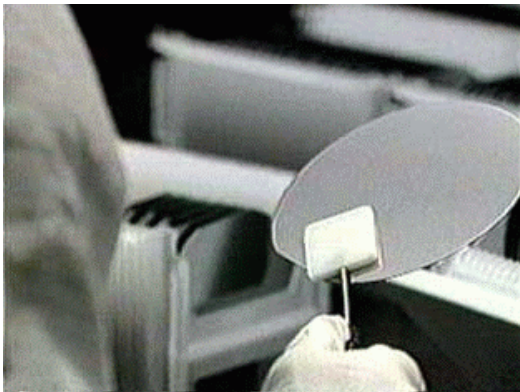
## RESUMEN

- Planos:  $(hkl)$
- Direcciones:  $[hkl]$
- Familia de direcciones:  $\langle hkl \rangle$
- Familia de planos:  $\{hkl\}$

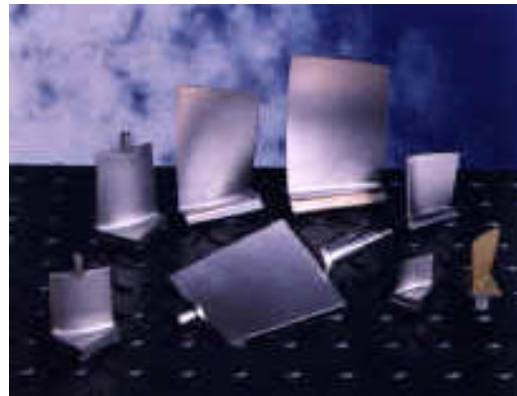
### b) Variaciones estructurales

- **Monocristales**

Algunos materiales pueden existir como monocristales grandes (macroscópicos)



- Si en semiconductores



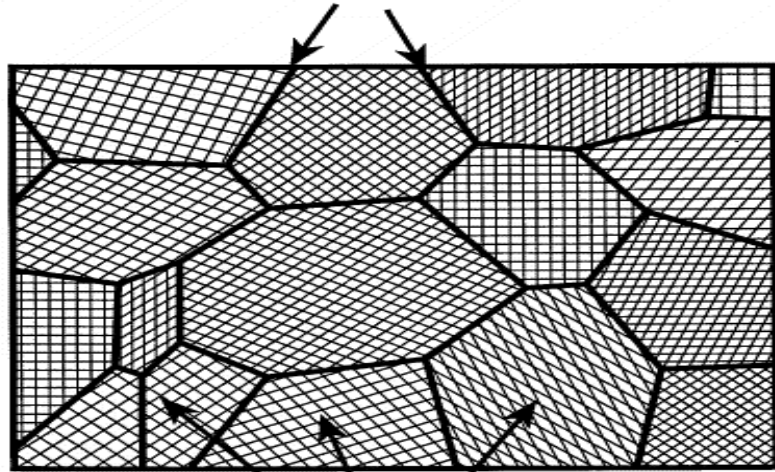
- Alabes de turbinas

- **Policristales (estructuras policristalinas)**

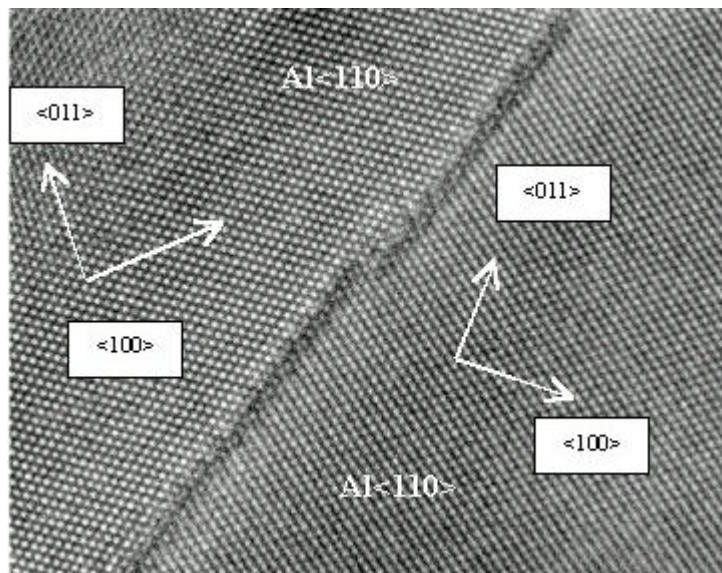
La mayoría de los materiales son un conjunto continuo de pequeños cristales.

Bordes de grano son la interfaz entre cristales individuales.

### BORDES DE GRANO

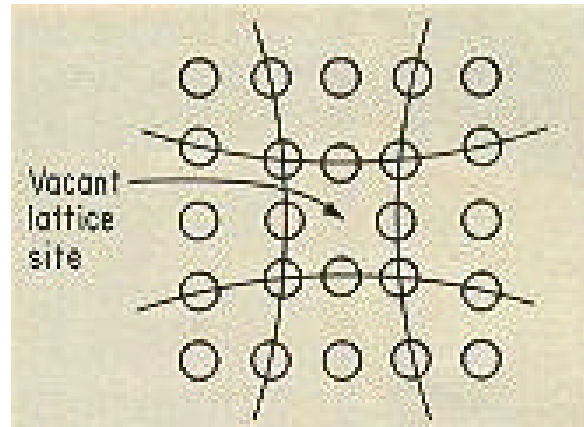


### GRANOS

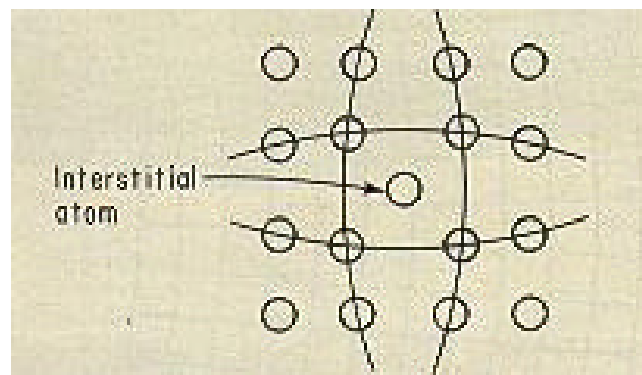


- Imperfecciones:

- Vacantes: sitios vacíos

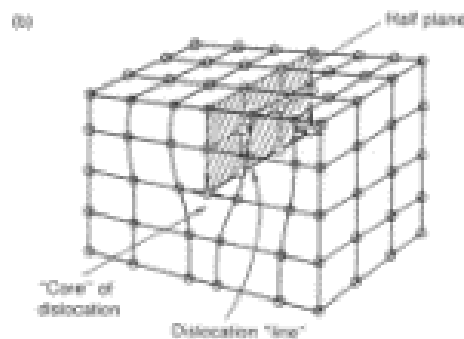
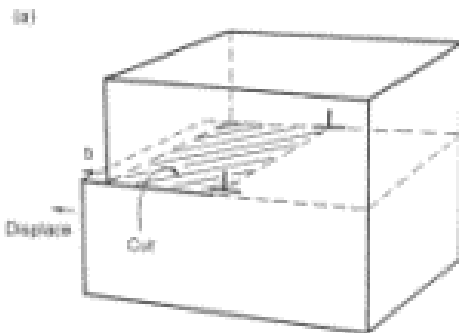
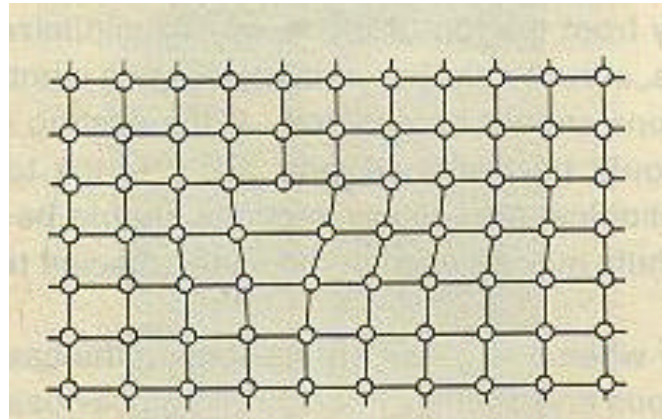


- Intersticiales:

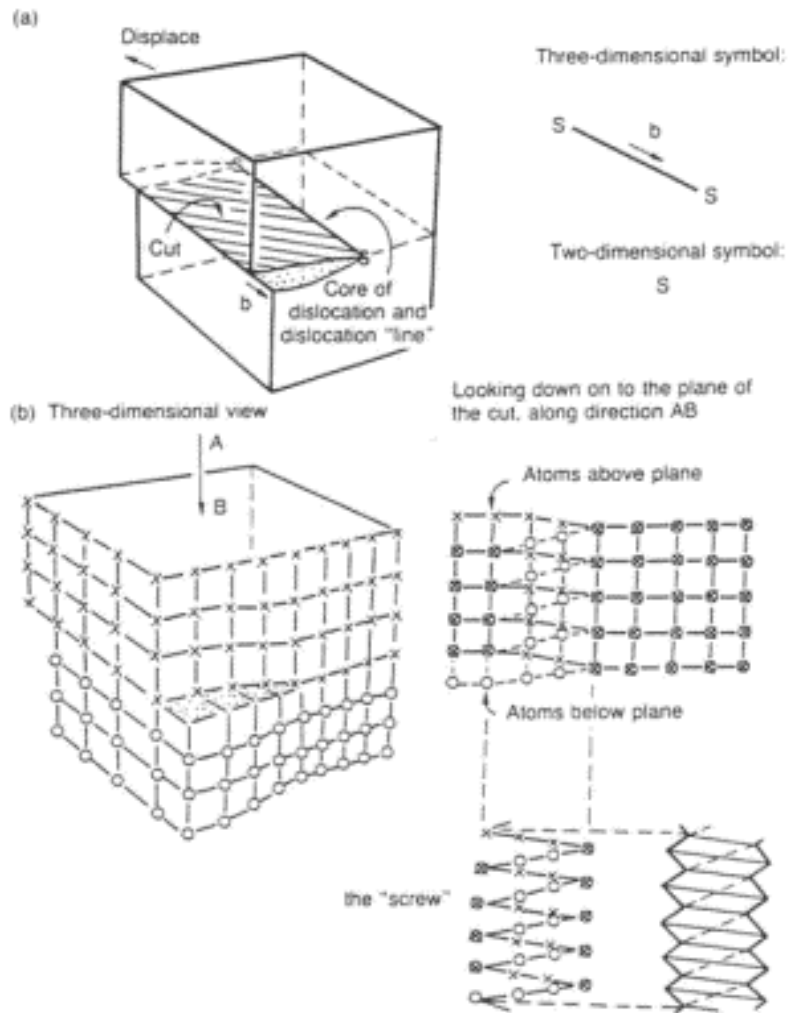
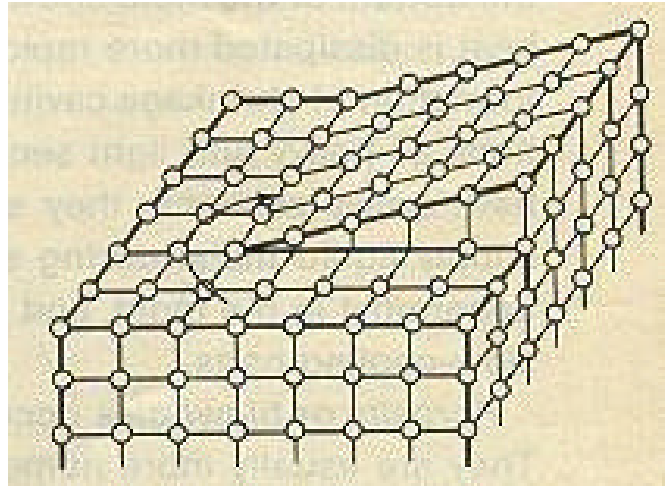


**Dislocaciones:** Región perturbada entre 2 áreas sustancialmente perfectas del cristal. Es un defecto lineal con algunos átomos desalineados.

- **Dislocación de borde**



- **Dislocación de tornillo**





- **Isotropía vs. anisotropía**

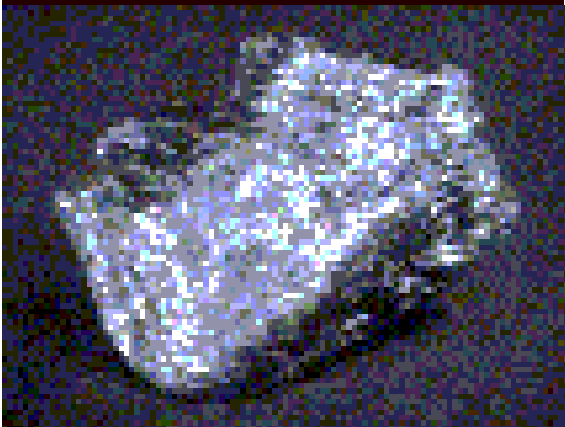
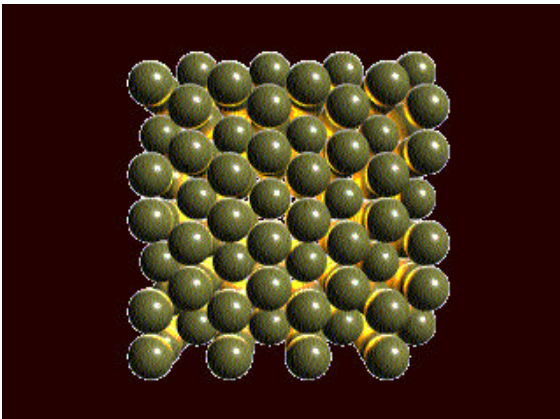
- i) **Materiales isótropos:** policristales orientados aleatoriamente **P** propiedades físicas similares en todas las direcciones.
- ii) **Materiales anisótropos:** orientación no aleatoria de los ejes cristalográficos **P** propiedades físicas pueden variar en función de la dirección en el material.

<b>Módulo de elasticidad de metales en Función de orientaciones cristalográficas</b>			
Metal	Módulo de elasticidad (MPa x 10 <sup>3</sup> )		
	<b>[100]</b>	<b>[110]</b>	<b>[111]</b>
<b>Aluminio</b>	63,7	72,6	76,1
<b>Cobre</b>	66,7	130,3	191,1
<b>Hierro</b>	125,0	210,5	272,7
<b>Tungsteno</b>	384,6	384,6	384,6

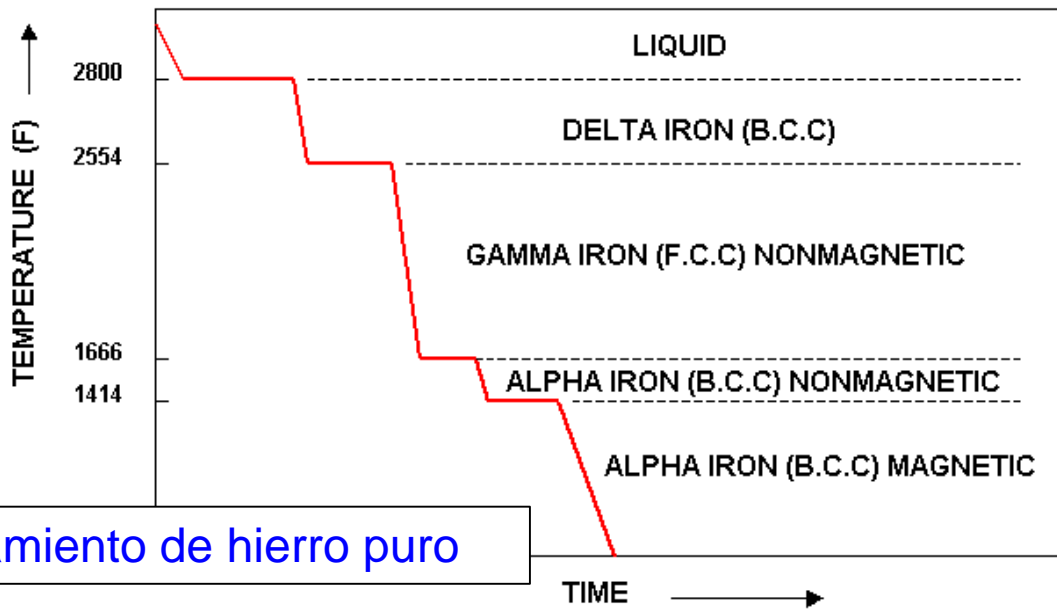


## 1.3 ESTRUCTURAS ALOTRÓPICAS

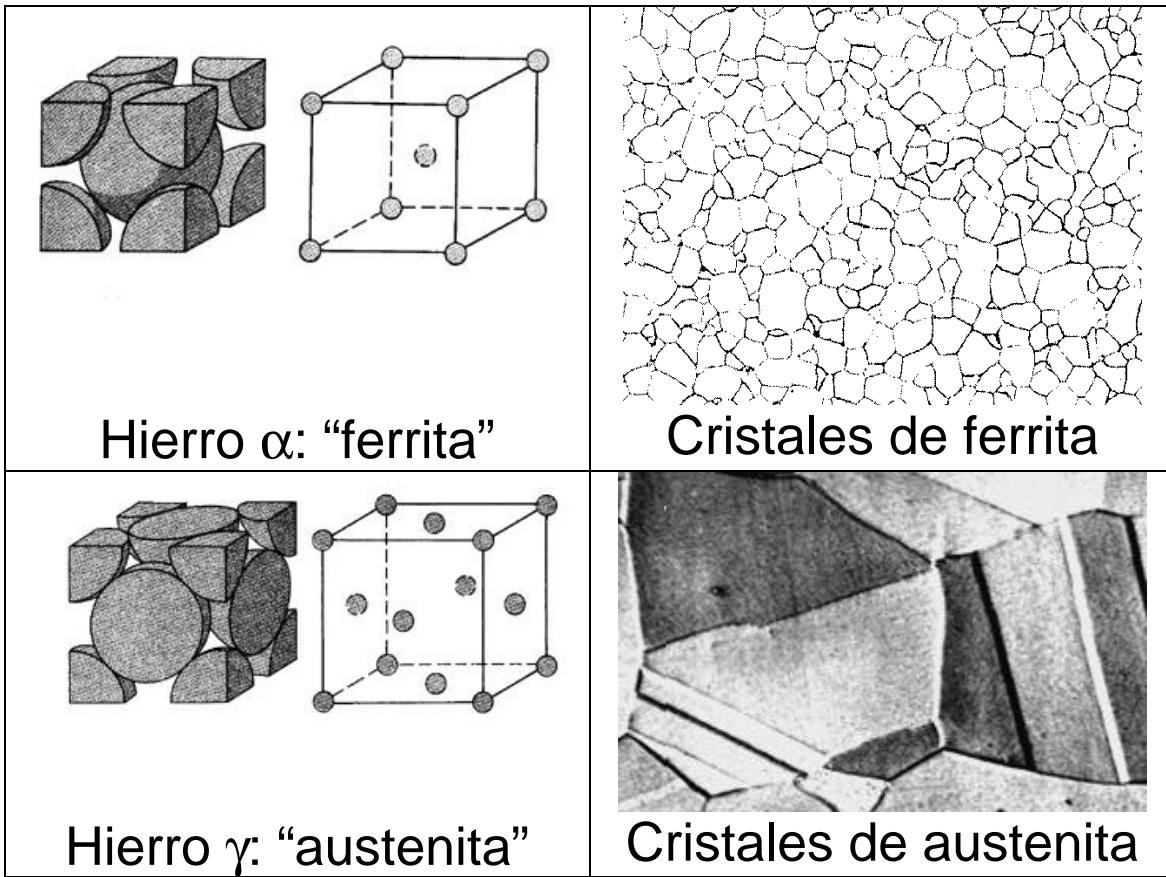
- Materiales alotrópicos: poseen más de una estructura cristalina
- Ejemplos:
  - Superconductor 123:  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$
  - Carbono:
    - GRAFITO
      - Negro
      - Blando
    - DIAMANTE
      - Transparente
      - Tenaz
      - Duro
  - Excelente lubricante



- Metales de importancia industrial: Fe, Ti, Co



Enfriamiento de hierro puro



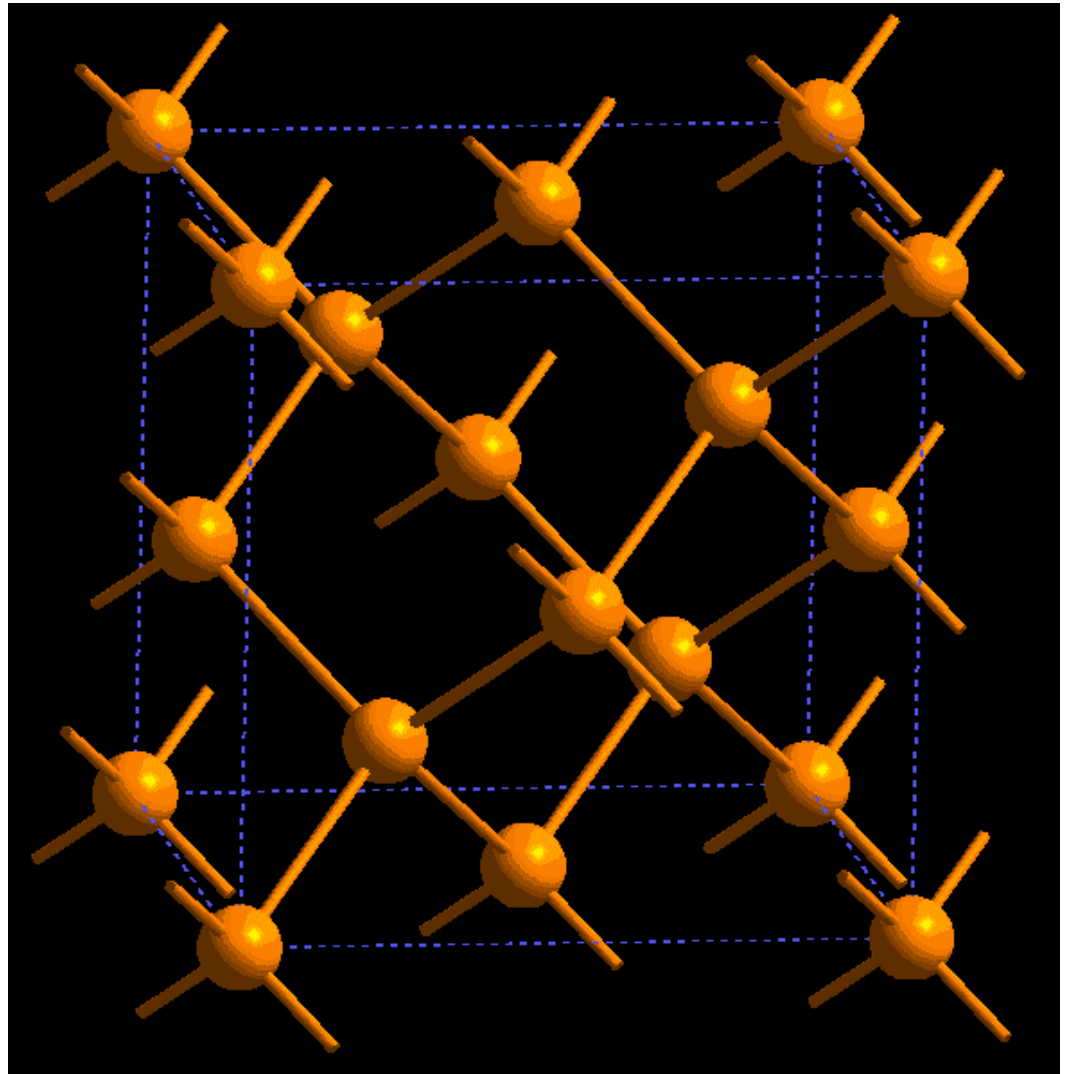
<b>Metal</b>	<b>Estructura Cristalina a temperatura ambiente</b>	<b>A otras temperaturas</b>
Ca	FCC	BCC (>447 °C)
Co	HCP	FCC (>427 °C)
Hf	HCP	BCC (>1742 °C)
Fe	BCC	FCC (912-1394 °C)
		BCC (>1394 °C)
Li	BCC	HCP (<-193 °C)
Na	BCC	HCP (<-233 °C)
Tl	HCP	BCC (> 234 °C)
Ti	HCP	BCC (>833 °C)
Y	HCP	BCC (>1481 °C)
Zr	HCP	BCC (>872 °C)

## 1.4 ESTRUCTURAS COMPLEJAS

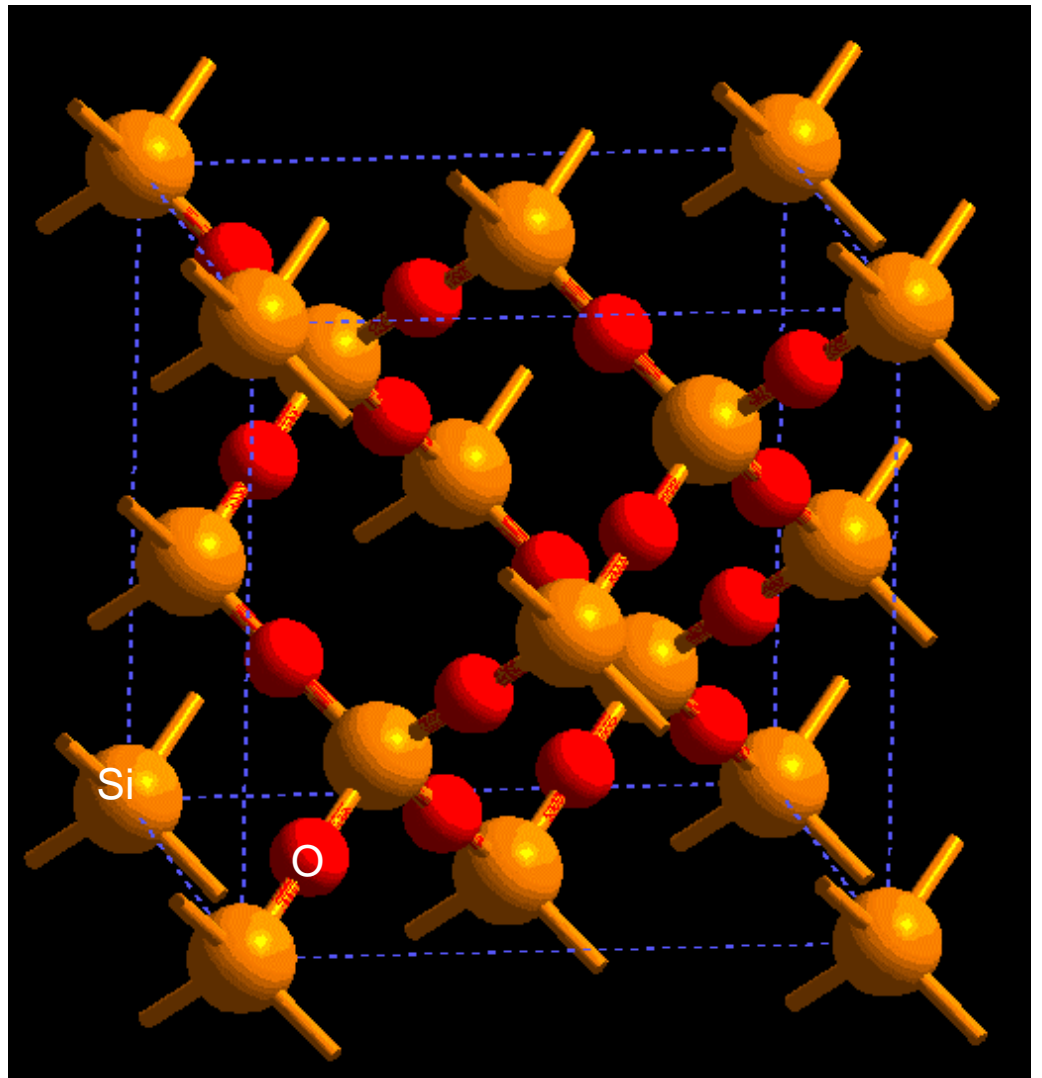
- **Metales:** enlace no direccional (deslocalizado)  
⇒ estructuras simples
- **Enlaces iónicos y covalentes:** enlace localizado  
⇒ estructuras más complejas
  - Átomos de distintos tamaños
  - Átomos con cargas eléctricas diferentes (balance de fuerzas)
  - Muchos iones no son esféricos: empaquetamiento en varias direcciones
- Ejemplos:
  - Estructura cúbica del diamante (covalente)
  - Estructuras del NaCl y CsCl (iónico)

- Estructura cúbica del diamante:
  - Si, SiO<sub>2</sub>, Ge, C
  - 4 enlaces covalentes
  - CCC especial: 2 áts/vértice

Si

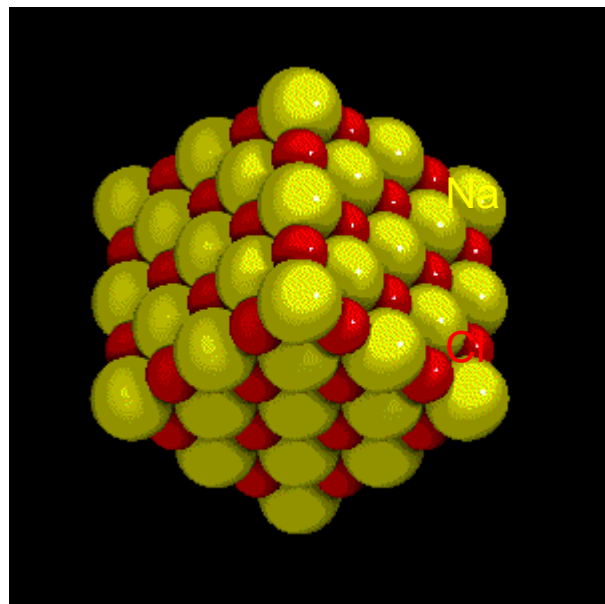
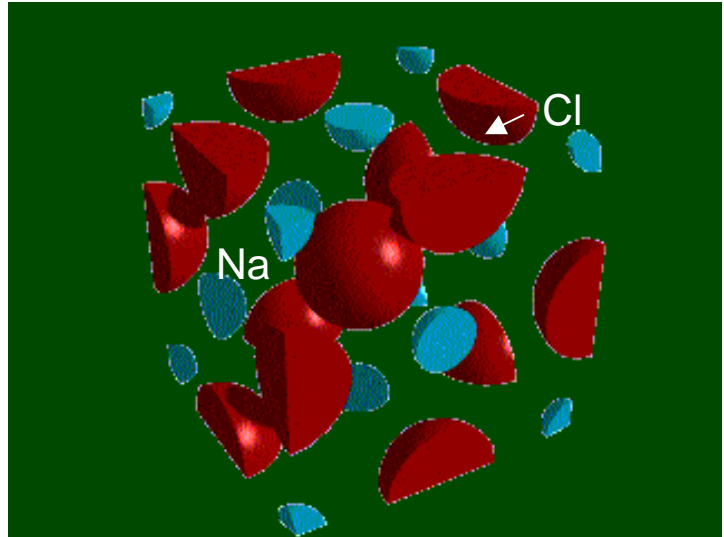


- ⊗ Calcular el factor de empaquetamiento.
- ⊗ Calcular la densidad.



- Estructura del NaCl y CsCl:
  - Iónicos: estructura cristalina debe asegurar neutralidad eléctrica
  - NaCl: CCC con 2 iones por nodo
  - ClCs: CS con 2 iones por nodo

NaCl



- ⊗ Calcular el factor de empaquetamiento.
- ⊗ Calcular la densidad.

CsCl

