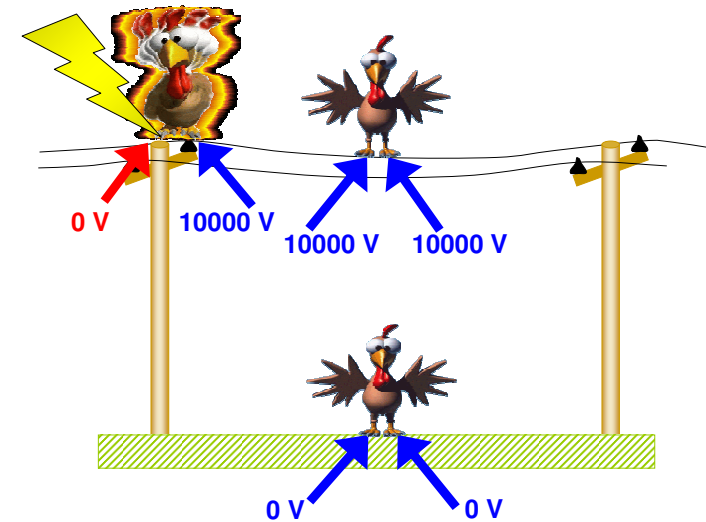




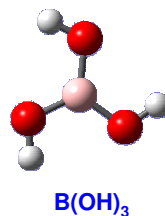
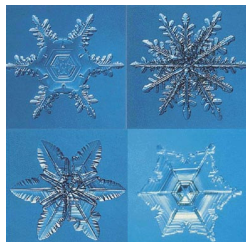
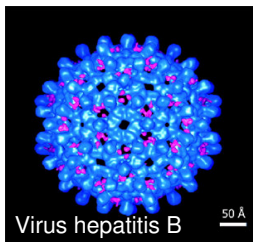
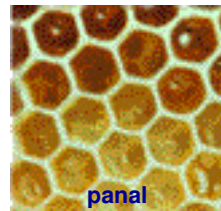
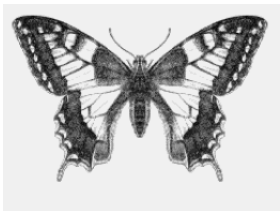
¿Por qué el rubí y la esmeralda tienen colores diferentes? La importancia de la simetría

Antonio Aramburu-Zabala
Departamento de Física de la Materia Condensada
Universidad de Cantabria

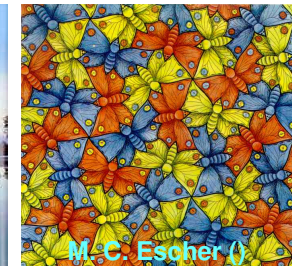
Importancia de la simetría



Simetrías espaciales en la naturaleza...



...y construidas por los humanos



- Tratamiento matemático: Teoría de Grupos
- Estudio microscópico de la materia (átomos, moléculas, sólidos): ayuda potentísima



Estructura microscópica de la materia

- **Agua gaseosa-líquida-sólida:** diferencia en fuerzas $\Rightarrow$ movimientos $\Rightarrow$ orden

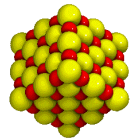


Esquema

Propiedades observables de moléculas y sólidos

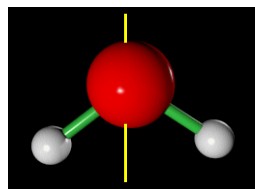
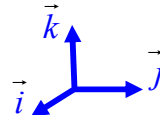
Simetría microscópica

- **Simetrías en moléculas:**
 - Grupos puntuales
 - Aplicaciones y ejercicios simples
- **Simetrías en sistemas periódicos:**
 - 2D: grupos planos
 - 3D: grupos de espacio
 - Ejercicios y aplicaciones
- **Diferencia de color entre el rubí y la esmeralda**

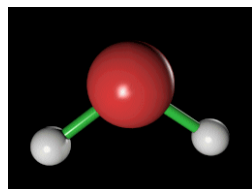


Operaciones puntuales de simetría

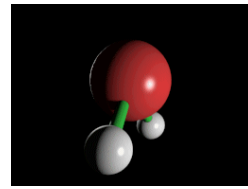
- **Operación de simetría, R:** transforma un objeto en otro indistinguible del inicial
 $R: \mathcal{R}^3 \rightarrow \mathcal{R}^3$ $\mathcal{R}^3$ base (i, j, k)
- **Operación puntual:** al menos un punto fijo
- **Operador de simetría:** elemento respecto al cual se hace la operación



Eje C₂: giro $2\pi/2 = \pi$



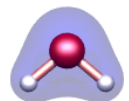
Plano de reflexión σ_v



Plano de reflexión σ_v'

Propiedades de los grupos puntuales de simetría

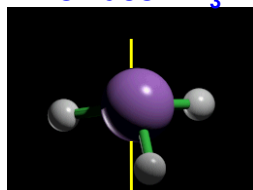
Grupo C_{2v} = {E, C₂, σ_v , σ_v' }



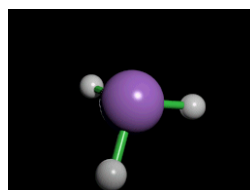
- **Operación interna:** producto de operaciones
 $\forall R_1, R_2 \in G \Rightarrow R_2 R_1 \in G$ $C_2 \sigma_v \in C_{2v}$
En general no conmutativo: $R_1 R_2 \neq R_2 R_1$
- Existe **elemento neutro E** (identidad)
 $\forall R \in G \quad RE = R$ $C_2 E = C_2$
- Cada elemento tiene **simétrico**
 $\forall R_1 \in G \quad \exists R_2 \in G \quad R_1 R_2 = E$ $C_2 C_2 = E$
- **Asociativa:**
 $\forall R_1, R_2, R_3 \in G \quad (R_1 R_2) R_3 = R_1 (R_2 R_3)$

Operaciones y grupos puntuales

- Amoníaco NH_3



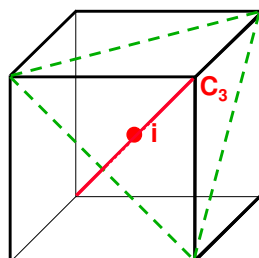
Eje C_3 : giros $2\pi/3 = 120^\circ$



Plano de reflexión σ_v

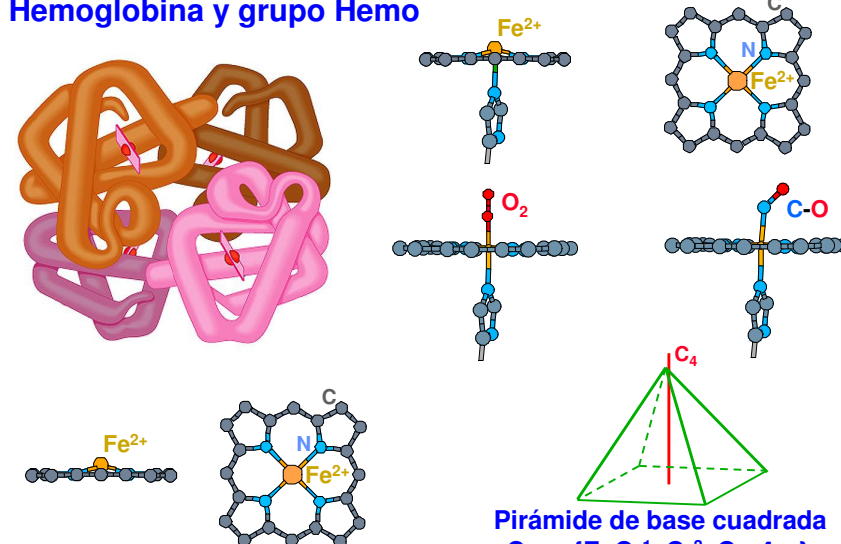
Grupo puntual $C_{3v} = \{E, C_3^1, C_3^2, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$

- Cubo



Ejercicios: operaciones puntuales

- Hemoglobina y grupo Hemo



Modos de vibración de H_2O (grupo C_{2v})

- 9 grados de libertad
- Base $(x_O, y_O, z_O, x_H, y_H, z_H, x_{H'}, y_{H'}, z_{H'})$ de V
- Matrices de operaciones R
 $R : V \rightarrow V$
- Grupo representación matricial

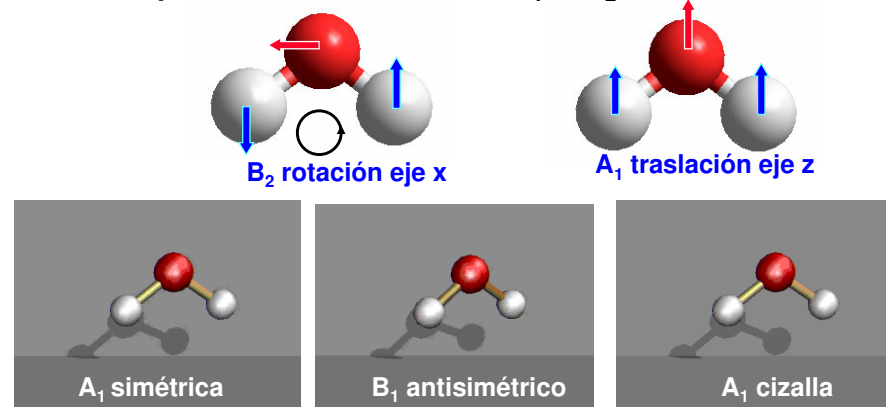
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \dots \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$E \quad C_2 \quad \sigma_v \quad \sigma_v'$

- Caracteres (trazas): 9 -1 3 1

Modos de vibración de H_2O (grupo C_{2v})

- Cambio de base: reducir V a suma directa de subespacios irreducibles, $V = V_1 \oplus V_2 \oplus \dots$



- Sólo 3 tipos de subespacios irreducibles A_1, B_1, B_2 :
3 tipos de simetría en grupo C_{2v}

Momento dipolar eléctrico

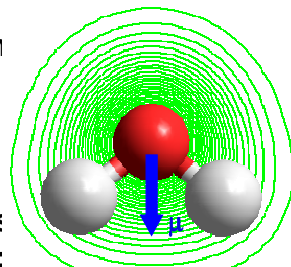
- **Principio general:** propiedades deben ser compatibles con la simetría

- **Momento dipolar eléctrico**

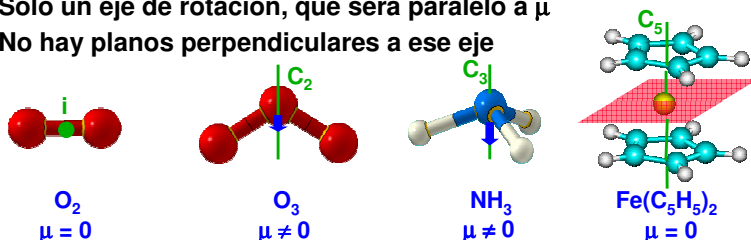
$$\mu = \sum_i q_i R_i$$

- Operaciones de simetría, compatibles con existencia de una flecha (vector):

- No hay centro de simetría, i
- Sólo un eje de rotación, que será paralelo a μ
- No hay planos perpendiculares a ese eje

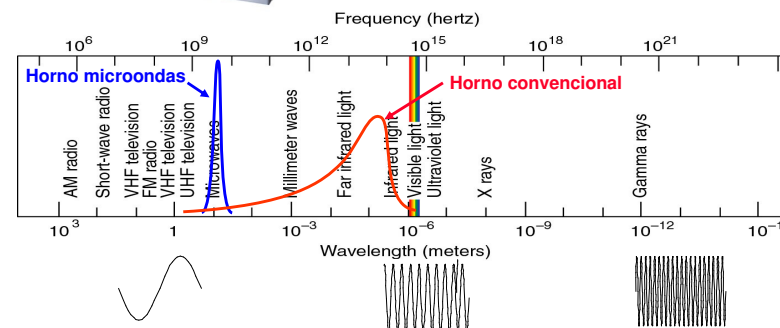
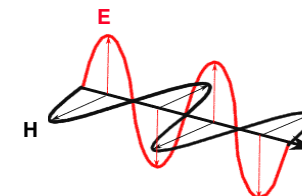


H₂O dipolo eléctrico



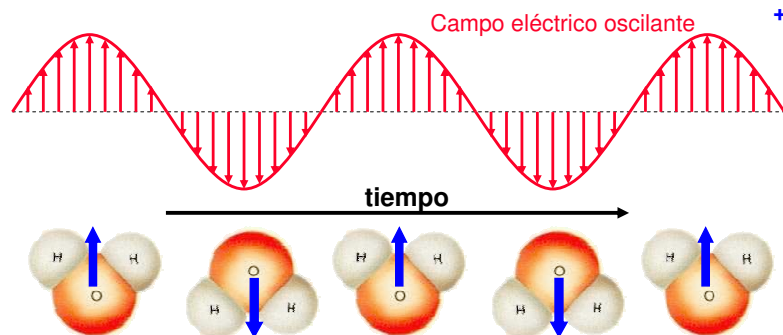
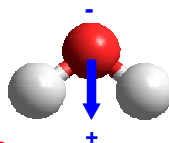
Horno de microondas

- Radiación electromagnética



Horno de microondas

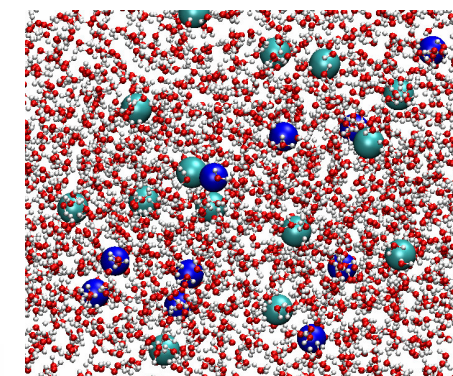
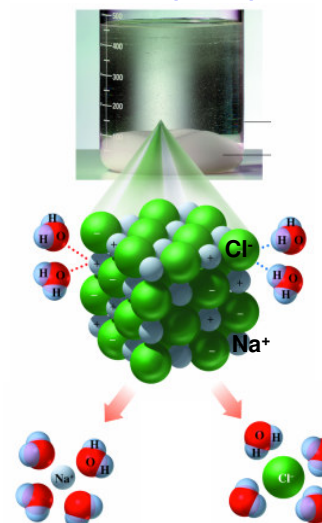
- Alimentos: **agua**, H₂O molécula polar $\mu \neq 0$



- Rotación rápida (10¹⁰ giros/seg) ⇒ calentamiento por fricción

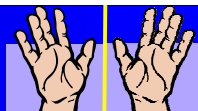
Agua como disolvente

- Sal común (NaCl) en agua

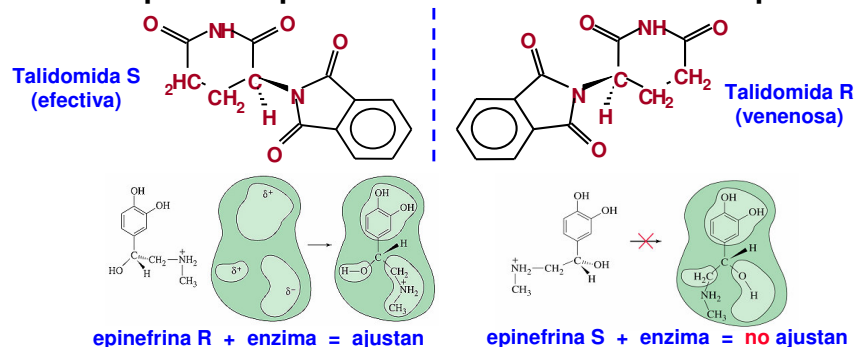


Simulación computacional

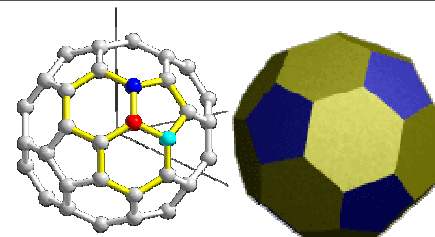
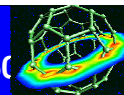
Quiralidad



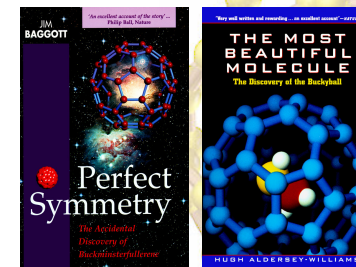
- **Quiral:** no superponible con su imagen especular
- Sistemas vivos son quirales: manos, pies, enzimas,...
- No puede tener centro de inversión, i
- **Enantiómeros:** moléculas isómeros especulares
- Giran plano de polarización de la luz de forma opuesta



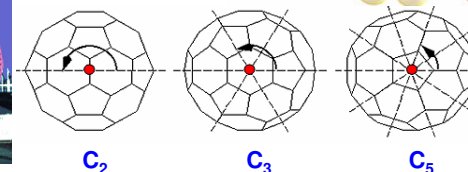
La molécula más simétrica: C₆₀



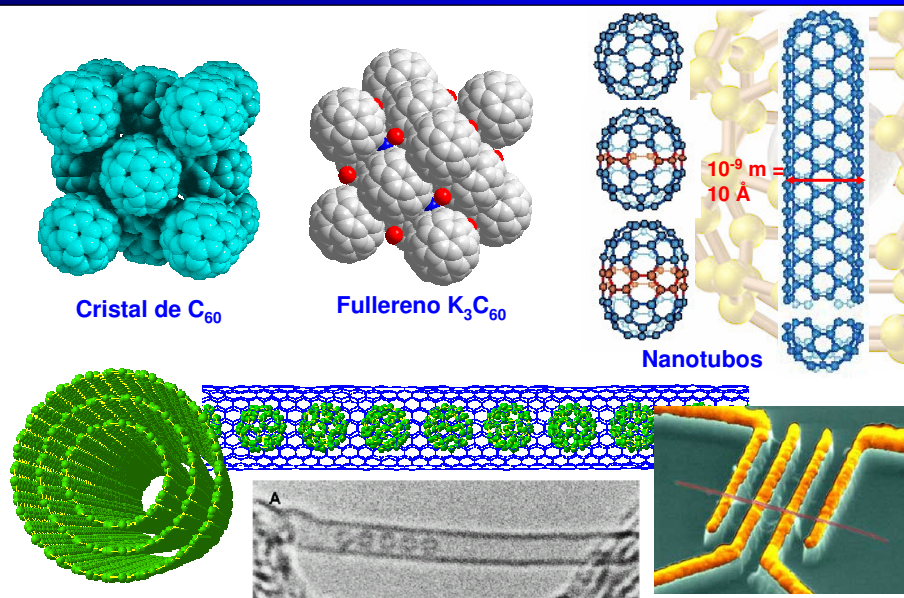
Kroto, Smalley (1984)



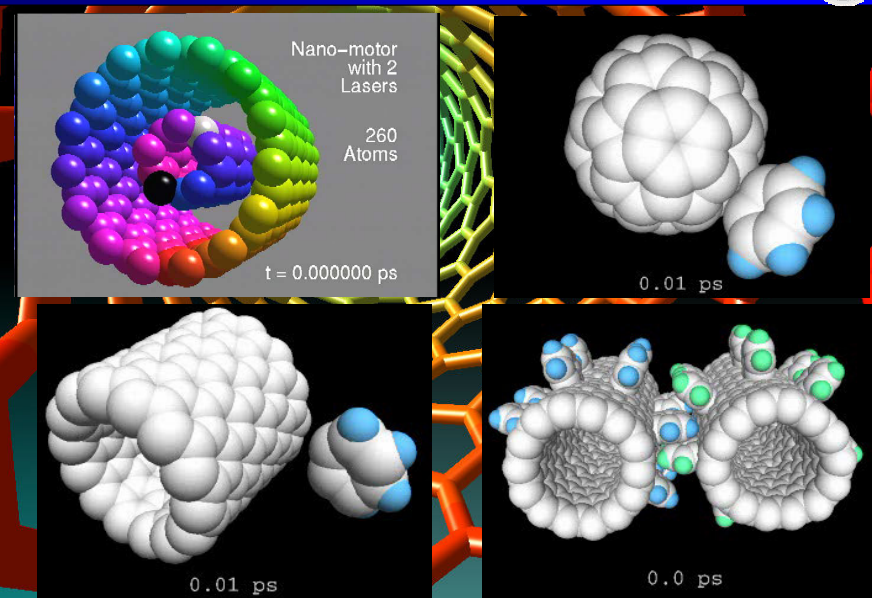
R. Buckminster Fuller
Montreal, 1967



Derivados de C₆₀: nanotecnologías



Nanomotores y nanoengranajes

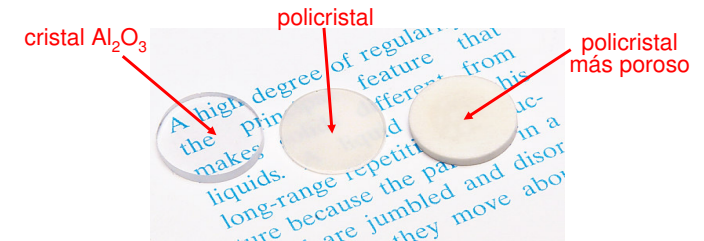
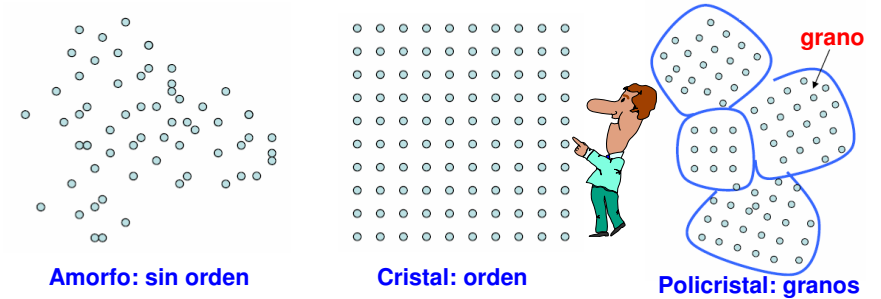


Materiales sólidos

● Materiales y civilización

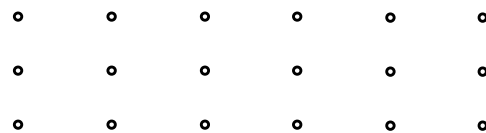
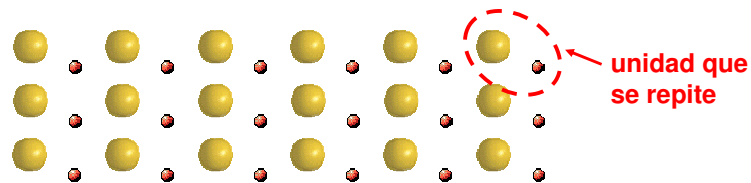


Materiales sólidos cristalinos



Estructura de un cristal

● Átomos que se repiten periódicamente en el espacio



Red: distribución de puntos con periodicidad espacial

+



Motivo: átomos colocados sobre todos los puntos de la red

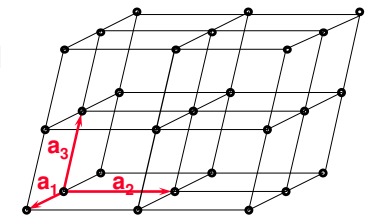
Red cristalina



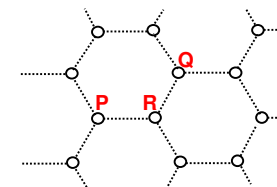
● Espacio vectorial, conjunto de infinitos puntos discretos con el mismo entorno

● Base $\{a_1, a_2, a_3\}$

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \quad n_i \in \mathbb{Z}$$



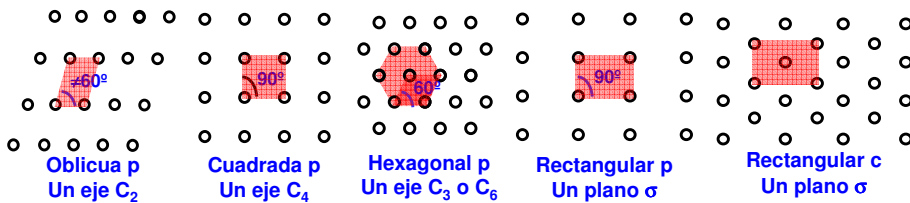
● Ejercicio: ¿es una red de cristalina 2D?



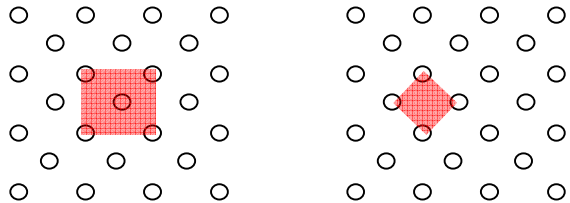
5 redes cristalinas 2D



- Celdas representativas de las 5 redes 2D



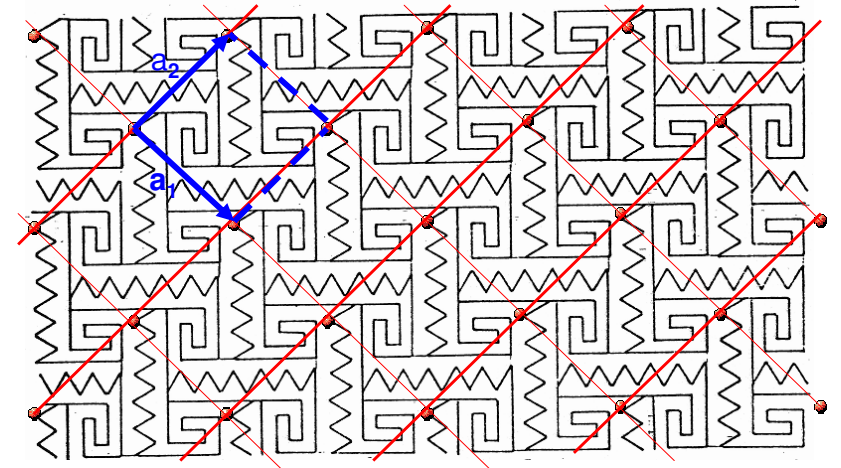
- ¿Por qué no se considera una red cuadrada centrada?



Relieve precolombino Mitla (México)

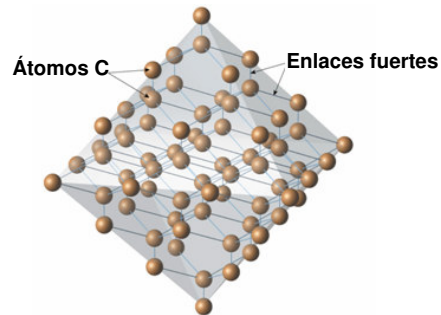


- Obtén el tipo de red, motivo y celda representativa

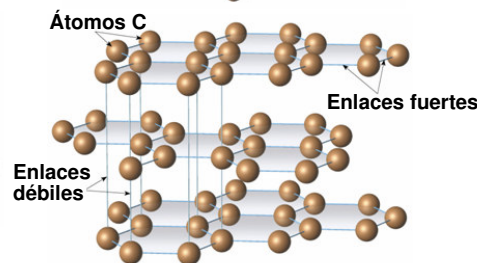


Diamante y grafito

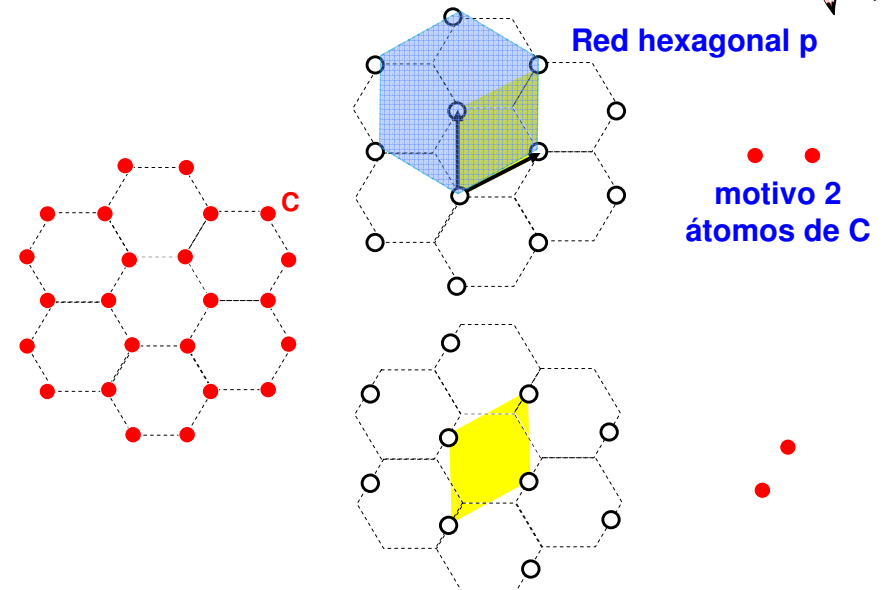
Diamante



Grafito



Red y motivo del grafito 2D



Diferencia de color rubí-esmeralda



PHYSICAL REVIEW B 72, 113104 (2005)

Origin of the different color of ruby and emerald

J. M. García-Lastra,¹ M. T. Barriuso,¹ J. A. Aramburu,² and M. Moreno²
¹Departamento de Física Moderna, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain
²Departamento de Ciencias de la Tierra y Física de la Materia Condensada, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain
 (Received 26 April 2005; revised manuscript received 10 June 2005; published 7 September 2005)



EL PAÍS, miércoles 26 de octubre de 2005

Futuro

FÍSICA / Sólidos cristalinos

Científicos españoles descubren la razón del diferente color del rubí y la esmeralda

PROTAGONISTAS

Investigación a dos colores

Científicos de la Universidad de Cantabria descubren por qué el rubí es rojo y la esmeralda verde

ROSA M. RUIZ/SANTANDER

El rubí y la esmeralda son dos de las piedras preciosas más importantes y que más curiosidad han despertado en los últimos años.



STIGADORES: Los autores de la obra de Juan María García-Lastra.



PHYSICAL REVIEW B 74, 115118 (2006)

Optical properties of Cr^{3+} -doped oxides: Different behavior of two centers in alexandrite

J. M. García-Lastra,¹ J. A. Aramburu,² M. T. Barriuso,¹ and M. Moreno²
¹Departamento de Física Moderna, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain
²Departamento de Ciencias de la Tierra y Física de la Materia Condensada, Universidad de Cantabria, 39005 Santander, Spain
 (Received 29 May 2006; published 21 September 2006)



Diferencia de color rubí-esmeralda



Rubí

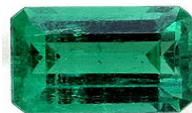
=



Alúmina Al_2O_3

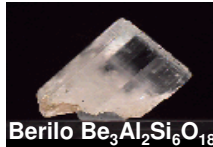
+ Cr^{3+}

Impurezas responsables del color



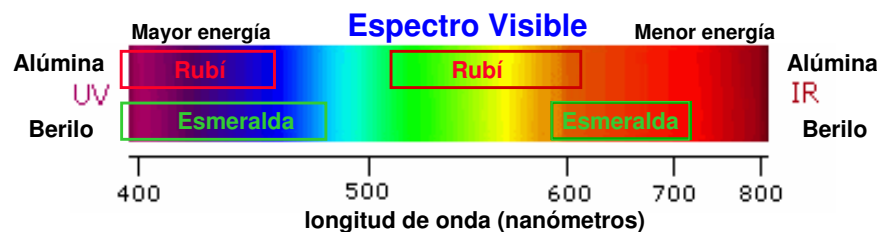
Esmeralda

=



Berilo $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$

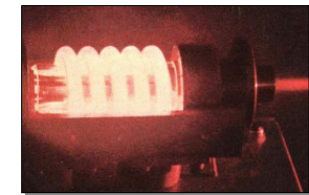
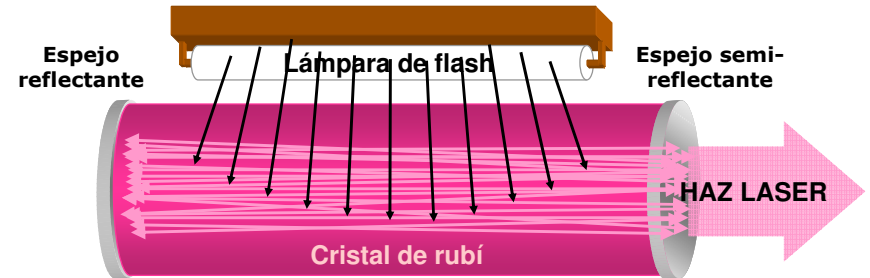
+ Cr^{3+}



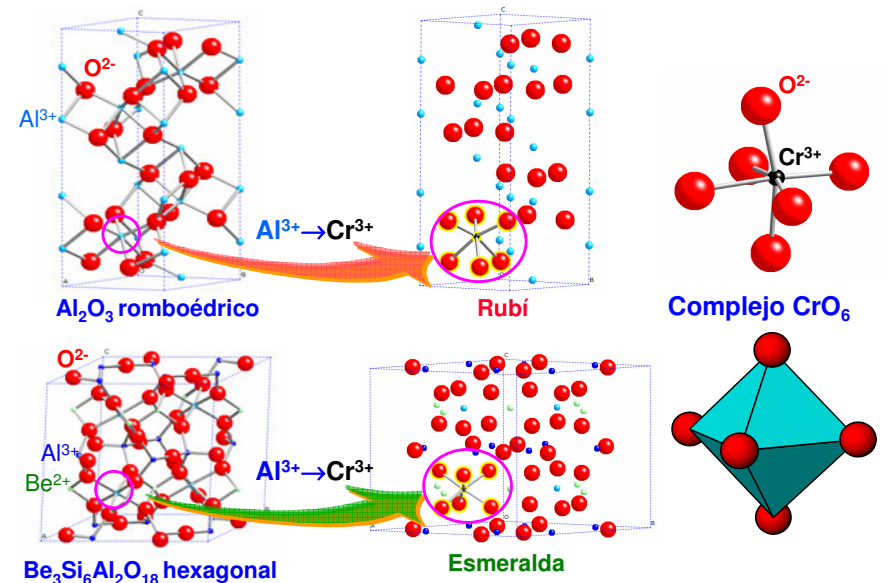
Importancia del rubí



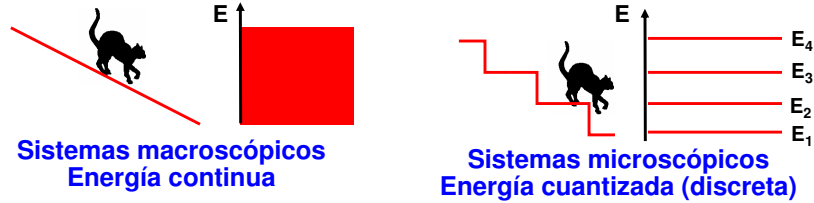
- Maiman, Nature (1960): primer laser



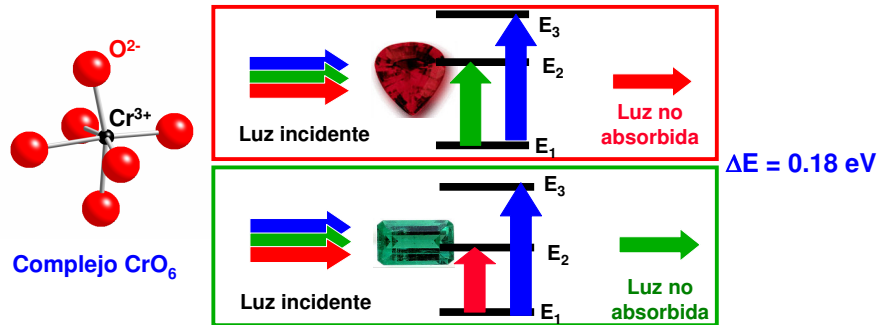
Estructura de los átomos



Color y complejo CrO_6



Niveles de energía del complejo CrO_6



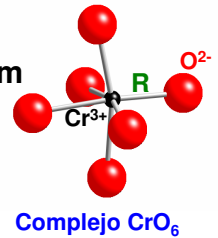
Diferencias en los complejos CrO_6

L. Orgel (Nature, 1952): $E \propto R^{-5}$

$$\Delta E(\text{rubí-esmeralda}) = 0.18 \text{ eV}$$

$$R \approx 197 \text{ pm}$$

$$\Delta R \approx 5 \text{ pm}$$



¡Qué raro! Rubí y esmeralda son materiales muy duros



E. Gaudry et al. (2004): medidas Absorción Rayos X (EXAFS)

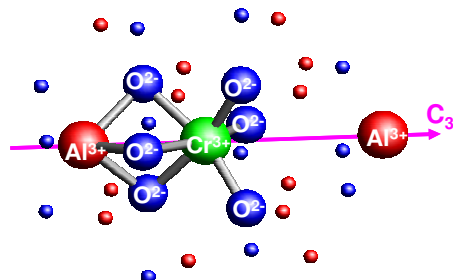
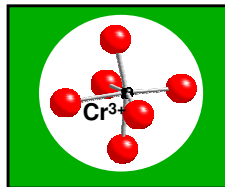
$$R(\text{rubí}) = R(\text{esmeralda}) = 197 \pm 1 \text{ pm}$$



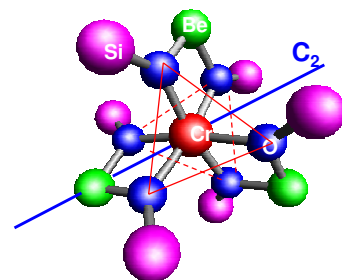
García Lastra et al. (2005)



- Enormes campos eléctricos creados por iones en interior del cristal: $\epsilon \sim 10^8 \text{ V/cm}$
- Campo del resto de cristal sobre Cr en CrO_6



Rubí: $\epsilon \neq 0$
Simetría $C_3 = \{E, C_3\}$

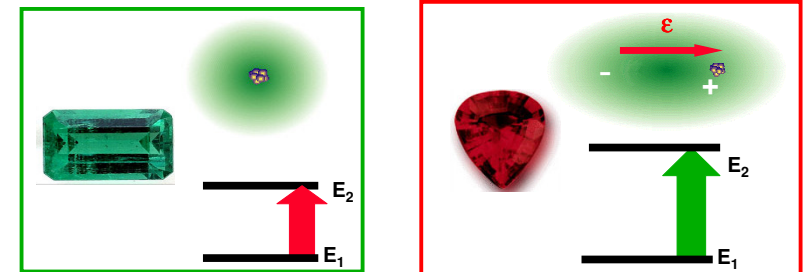


Esmeralda: $\epsilon = 0$
Simetría $D_3 = \{E, C_3, 3C_2\}$

García Lastra et al. (2005)



- Rubí: $\epsilon \neq 0$ polariza los electrones



- Confirmado por cálculos muy precisos

