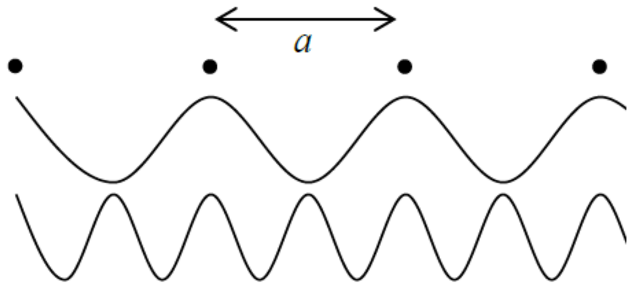
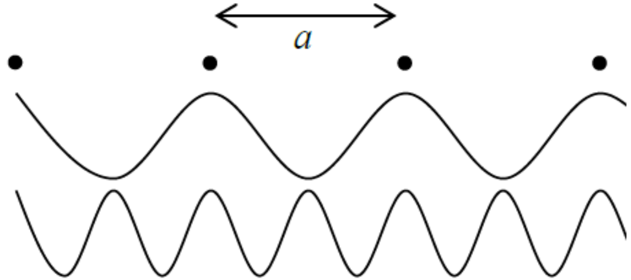
Rede Recíproca

Se há periodicidade, então devem haver vetores de onda do espaço de Fourier que definem as posições dos sítios na rede de Bravais



Rede Recíproca

Se há periodicidade, então devem haver vetores de onda do espaço de Fourier que definem as posições dos sítios na rede de Bravais



$$T_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{G}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$

$$e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$$

$$\mathbf{G}\cdot\mathbf{R} = 2\pi m \quad (m \text{ inteiro}).$$

Rede Recíproca

O conjunto de vetores {**G**} que satisfazem $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$ definem a **rede recíproca**

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{G} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3$$

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

Rede Recíproca

O conjunto de vetores {**G**} que satisfazem $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$ definem a **rede recíproca**

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{G} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3$$

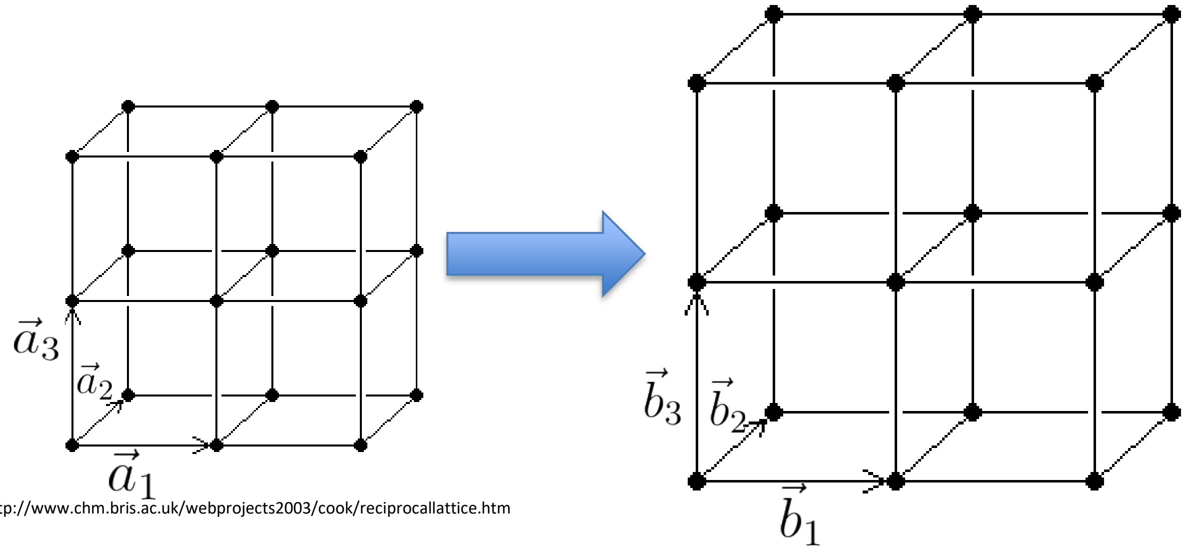
$$\vec{a}_j \cdot \vec{b}_i = 2\pi\delta_{ij}$$

- Vetores primitivos da rede recíproca:

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

Exemplos de Redes Recíprocas

- Rede Cúbica Simples



http://www.chm.bris.ac.uk/webprojects2003/cook/reciprocallattice.htm

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

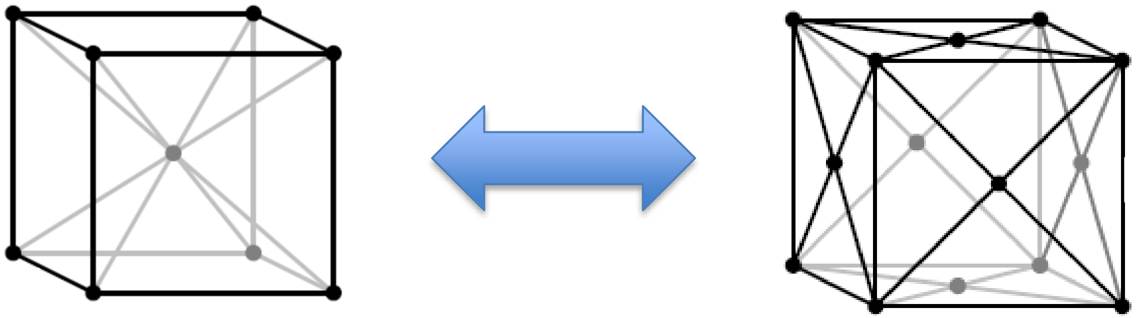
Exemplos de Redes Recíprocas

- Rede cúbica de corpo centrado (BCC) e de face centrada (FCC)

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$



LISTA!!

Zonas de Brillouin

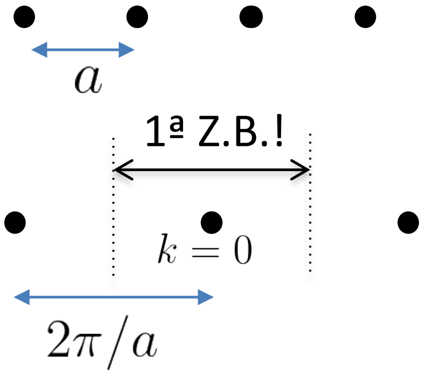
Zonas de Brillouin

A célula de Wigner-Seitz no espaço recíproco define a 1ª Zona de Brillouin

- Em 1D

Espaço Real

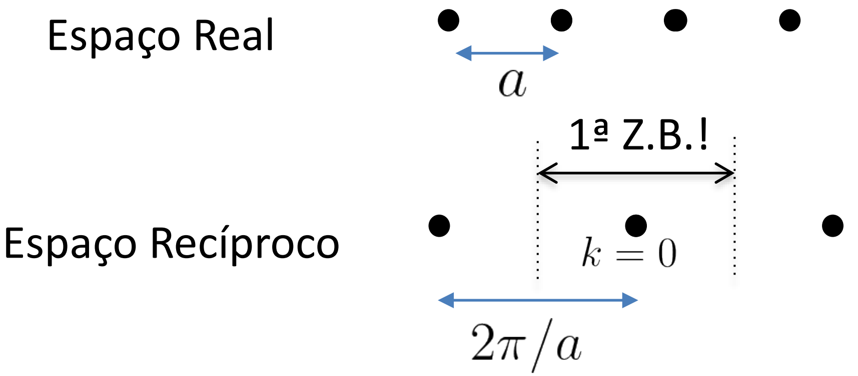
Espaço Recíproco



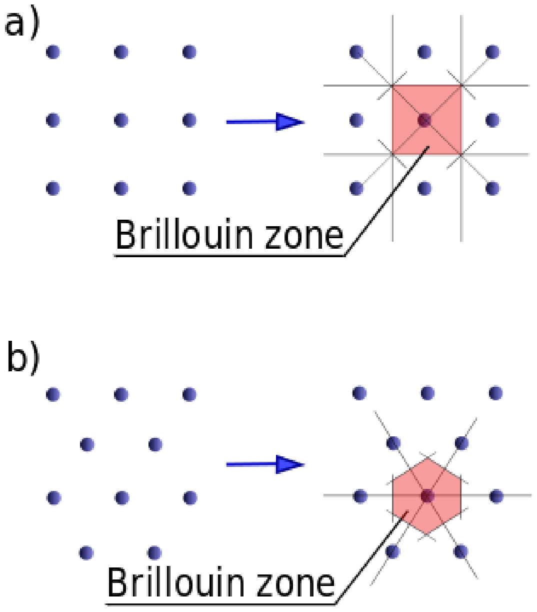
Zonas de Brillouin

A célula de Wigner-Seitz no espaço recíproco define a 1ª Zona de Brillouin

- Em 1D



- Em 2D



https://en.wikipedia.org/wiki/Brillouin_zone

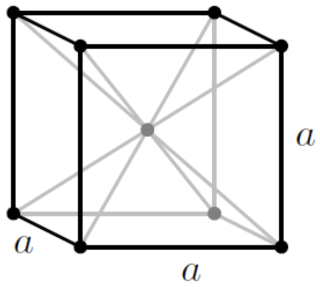
Zonas de Brillouin

A célula de Wigner-Seitz no espaço recíproco define a 1ª Zona de Brillouin

- Em 3D

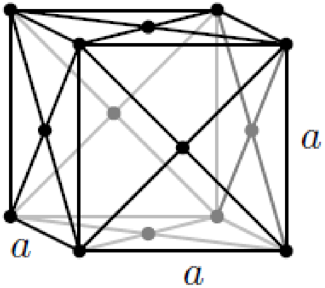
Rede direta

BCC



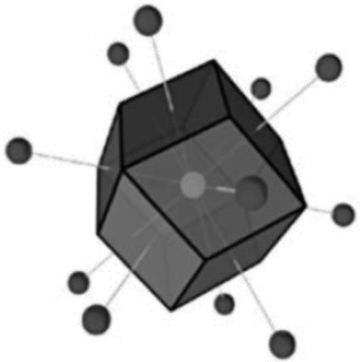
Rede direta

FCC



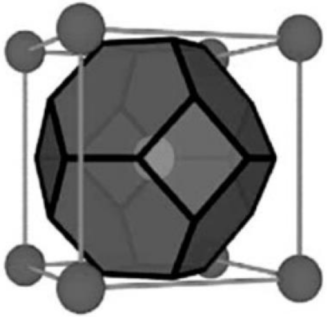
1ª Zona de Brillouin (no espaço recíproco)

FCC



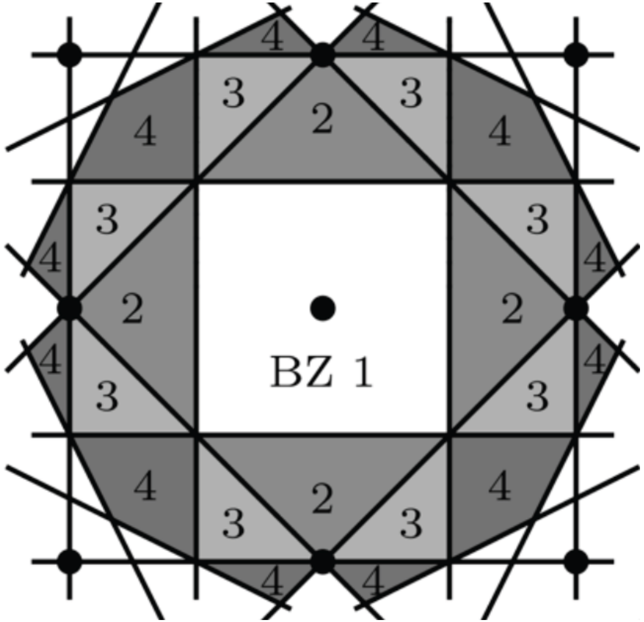
1ª Zona de Brillouin (no espaço recíproco)

BCC



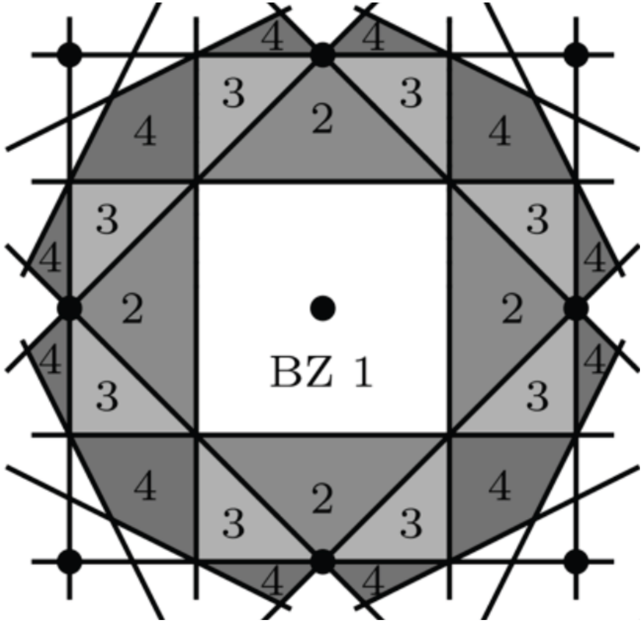
Zonas de Brillouin

- As regiões adjacentes à 1ª Zona de Brillouin definem a 2ª Zona de Brillouin;
- As regiões adjacentes à 2ª Zona de Brillouin definem a 3ª Zona de Brillouin;
- Assim sucessivamente



Zonas de Brillouin

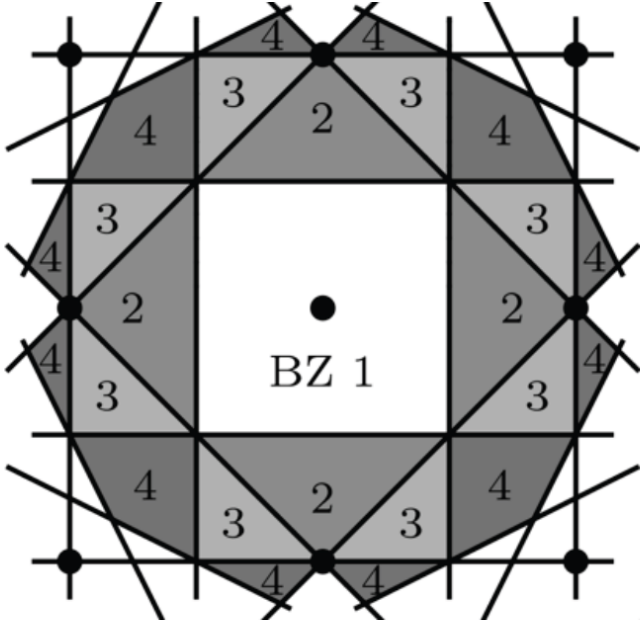
- As regiões adjacentes à 1ª Zona de Brillouin definem a 2ª Zona de Brillouin;
- As regiões adjacentes à 2ª Zona de Brillouin definem a 3ª Zona de Brillouin;
- Assim sucessivamente



Qual é o volume da 1ª Zona de Brillouin?

Zonas de Brillouin

- As regiões adjacentes à 1ª Zona de Brillouin definem a 2ª Zona de Brillouin;
- As regiões adjacentes à 2ª Zona de Brillouin definem a 3ª Zona de Brillouin;
- Assim sucessivamente

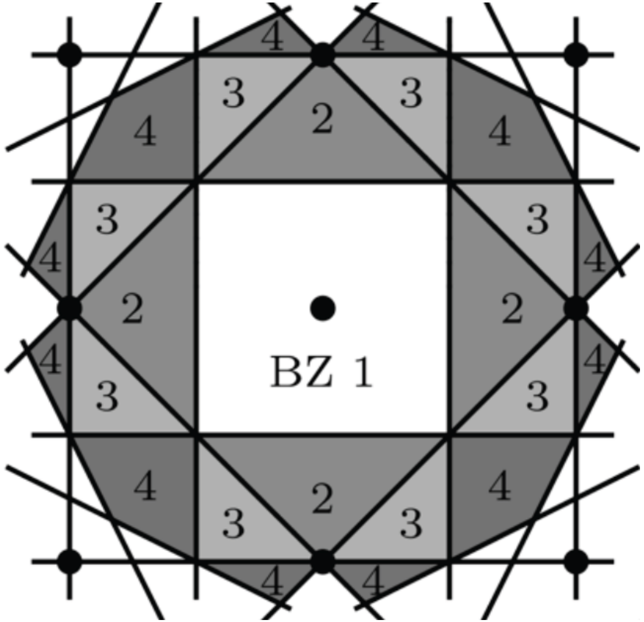


Qual é o volume da 1ª Zona de Brillouin?

$$\frac{(2\pi)^3}{v_c}$$

Zonas de Brillouin

- As regiões adjacentes à 1ª Zona de Brillouin definem a 2ª Zona de Brillouin;
- As regiões adjacentes à 2ª Zona de Brillouin definem a 3ª Zona de Brillouin;
- Assim sucessivamente



Qual é o volume da 1ª Zona de Brillouin?

$$\frac{(2\pi)^3}{v_c}$$

Qual é o volume da 2ª Zona de Brillouin?

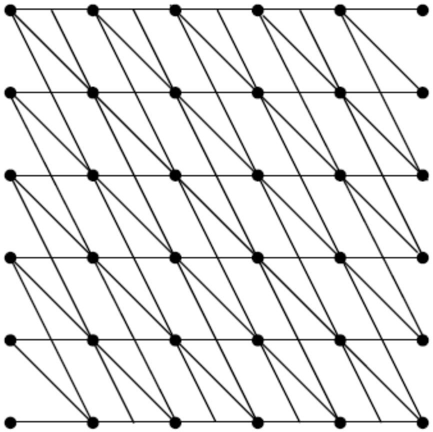
Qual é o volume da 3ª Zona de Brillouin?

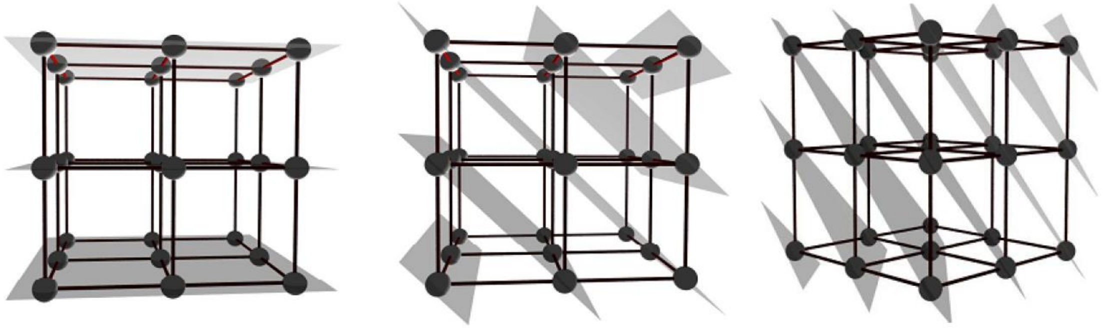
Planos cristalinos e índices de Miller

- **Definição:** São planos que contêm pelo menos três pontos não colineares (e, portanto, um número infinito) de pontos da rede.

Planos cristalinos e índices de Miller

- **Definição:** São planos que contêm pelo menos três pontos não colineares (e, portanto, um número infinito) de pontos da rede.

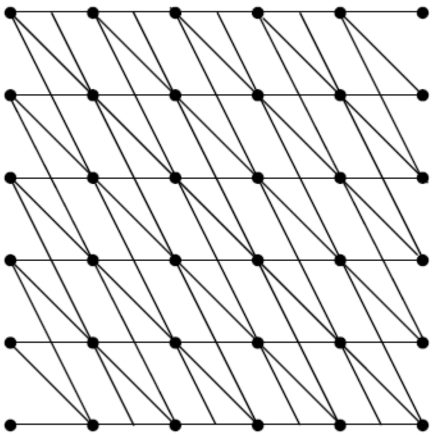


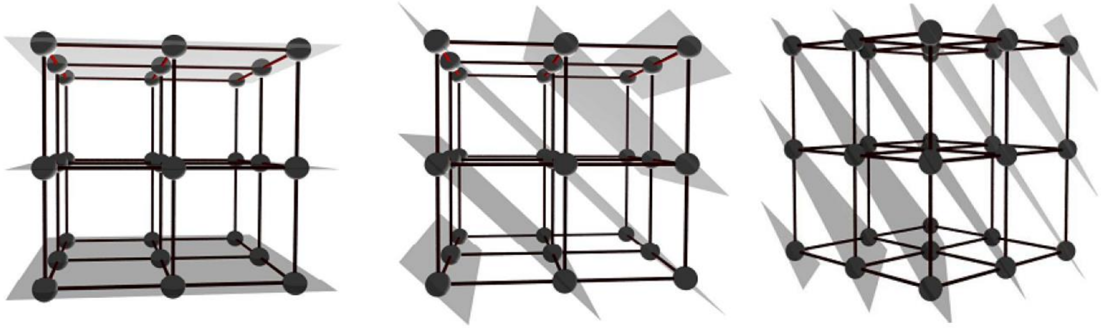


Um conjunto de planos da rede paralelos entre si que contenham todos os pontos da rede são chamados de **família de planos da rede**.

Planos cristalinos e índices de Miller

- **Definição:** São planos que contêm pelo menos três pontos não colineares (e, portanto, um número infinito) de pontos da rede.

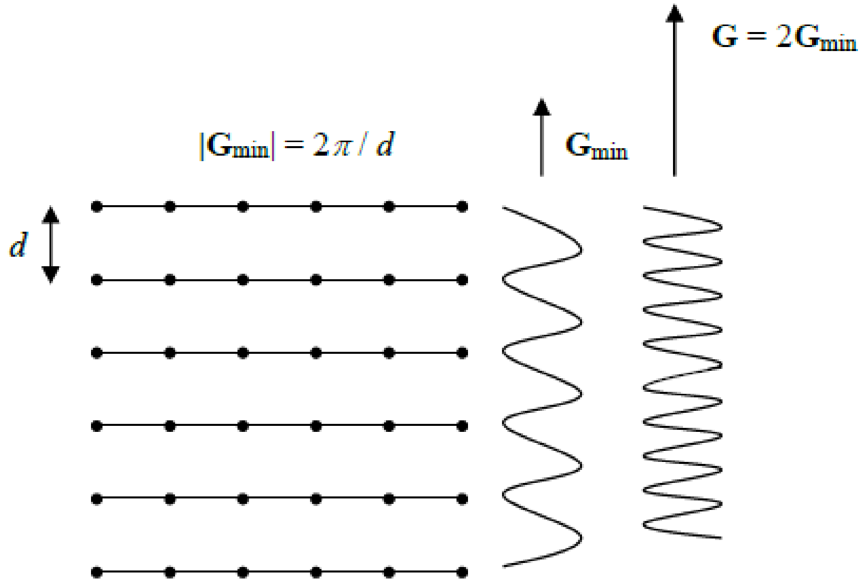




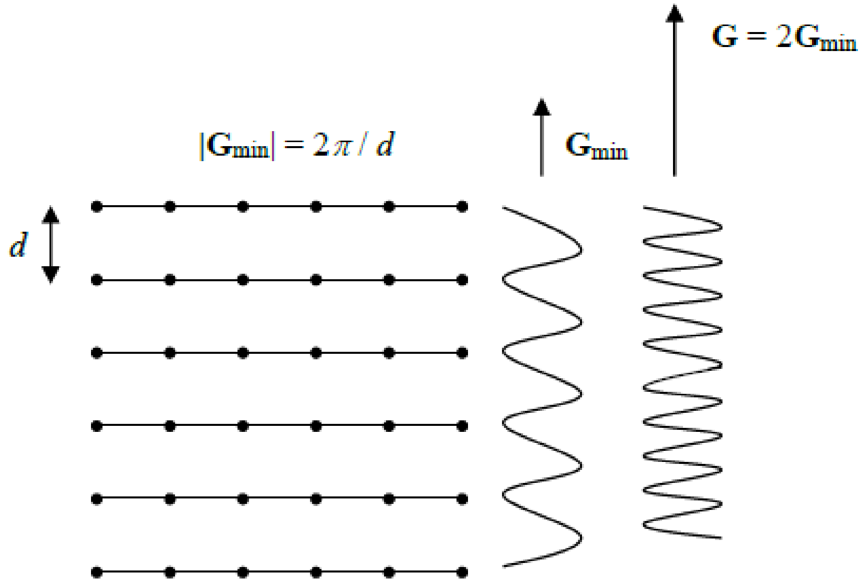
Um conjunto de planos da rede paralelos entre si que contenham todos os pontos da rede são chamados de **família de planos da rede**.

Como definer tais famílias de planos?

Planos cristalinos e índices de Miller



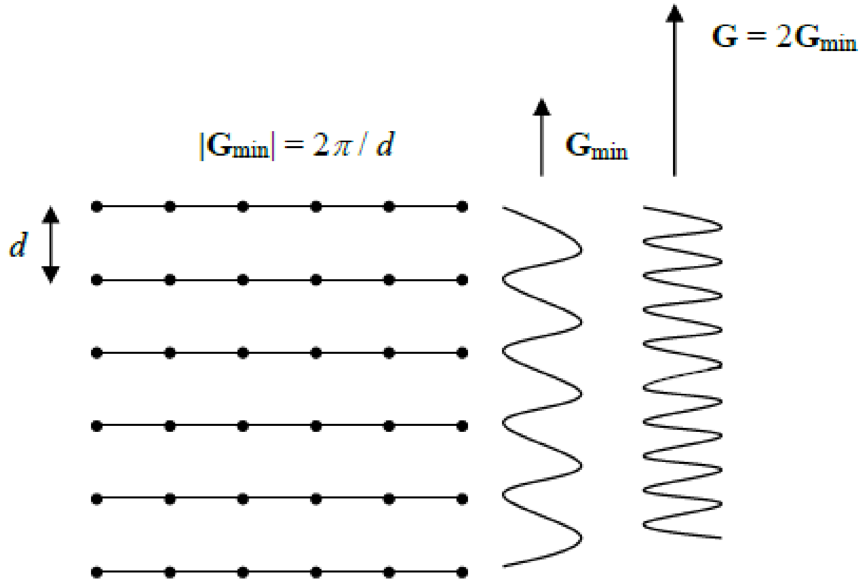
Planos cristalinos e índices de Miller



$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{min}|}$$

$\mathbf{G}_{min}$ é o vetor do espaço recíproco de menor módulo perpendicular à dada família de planos da rede.

Planos cristalinos e índices de Miller



$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{\min}|}$$

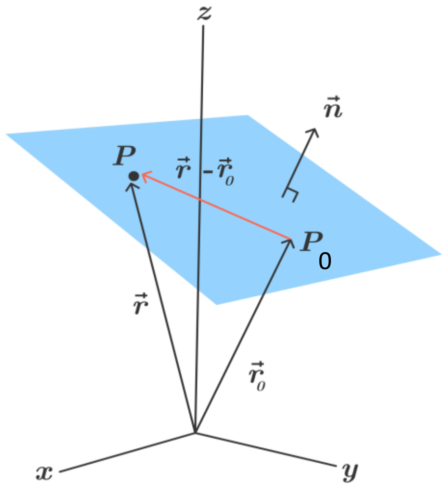
$\mathbf{G}_{\min}$ é o vetor do espaço recíproco de menor módulo perpendicular à dada família de planos da rede.

Geometria analítica: A equação de um plano!

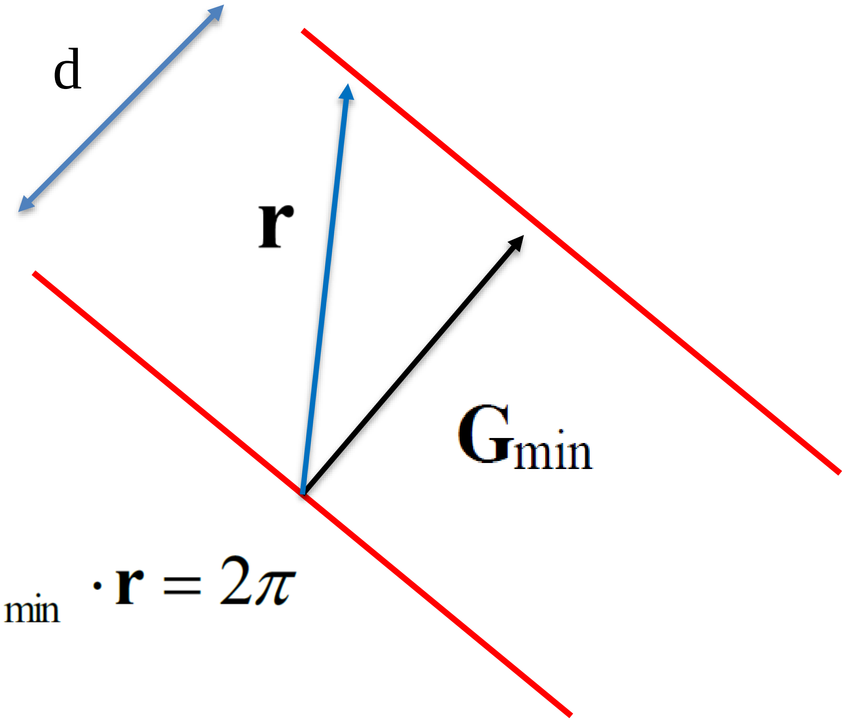
$$(\vec{r} - \vec{r}_0) \cdot \hat{n} = 0$$

$$\vec{r} \cdot \hat{n} = \text{constante}$$

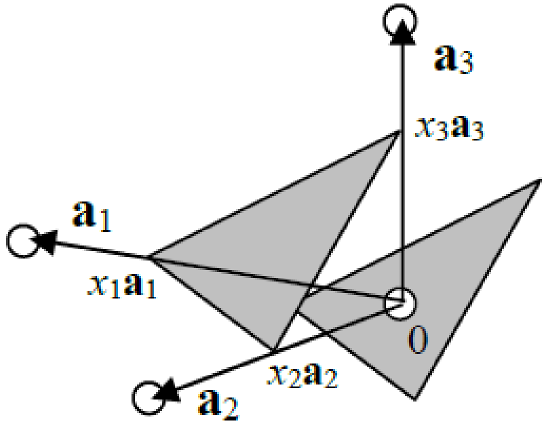
$$\mathbf{G}_{\min} \cdot \mathbf{r} = 2\pi$$



Planos cristalinos e índices de Miller



$$\mathbf{G}_{\min} \cdot \mathbf{r} = 2\pi$$



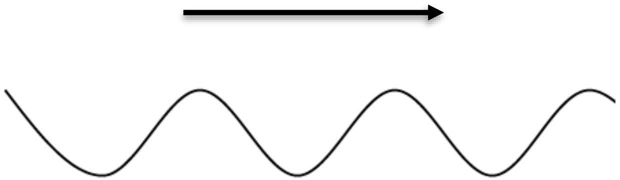
$$x_1 = \frac{1}{h},\ x_2 = \frac{1}{k} \text{ e } x_3 = \frac{1}{l}$$

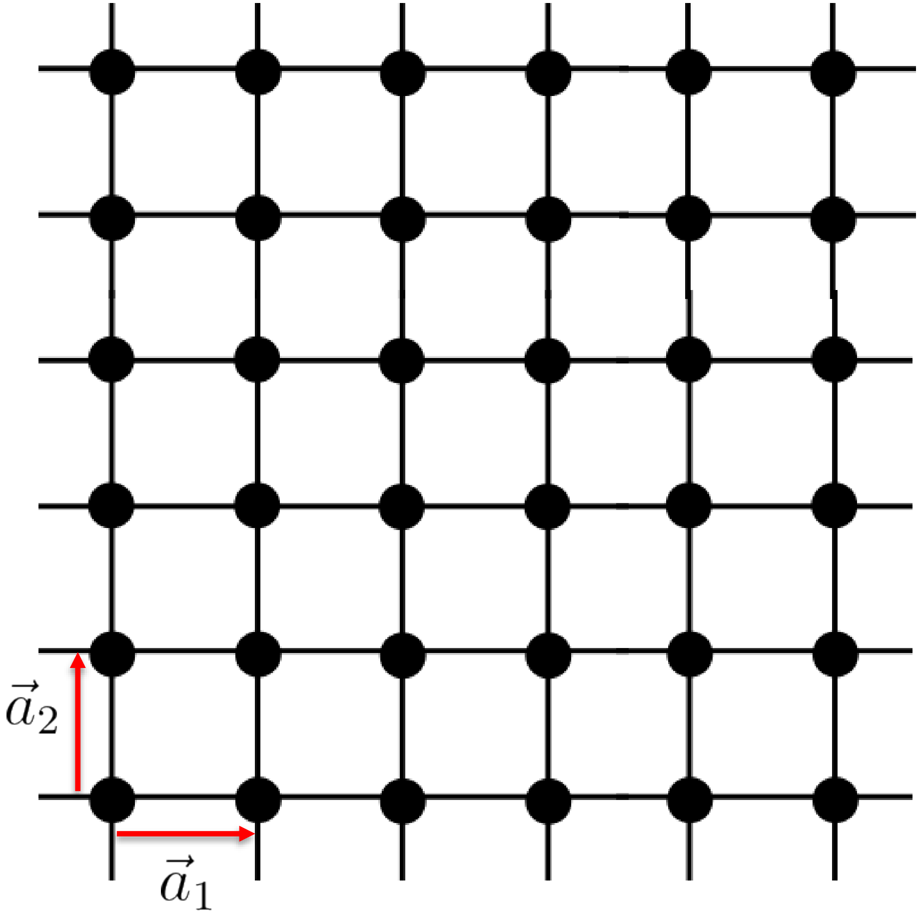
Podemos escrever

$$\mathbf{G}_{\min} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$

Planos cristalinos e índices de Miller

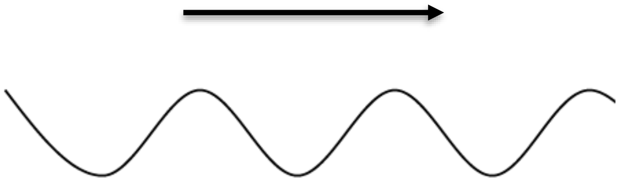
Exemplo





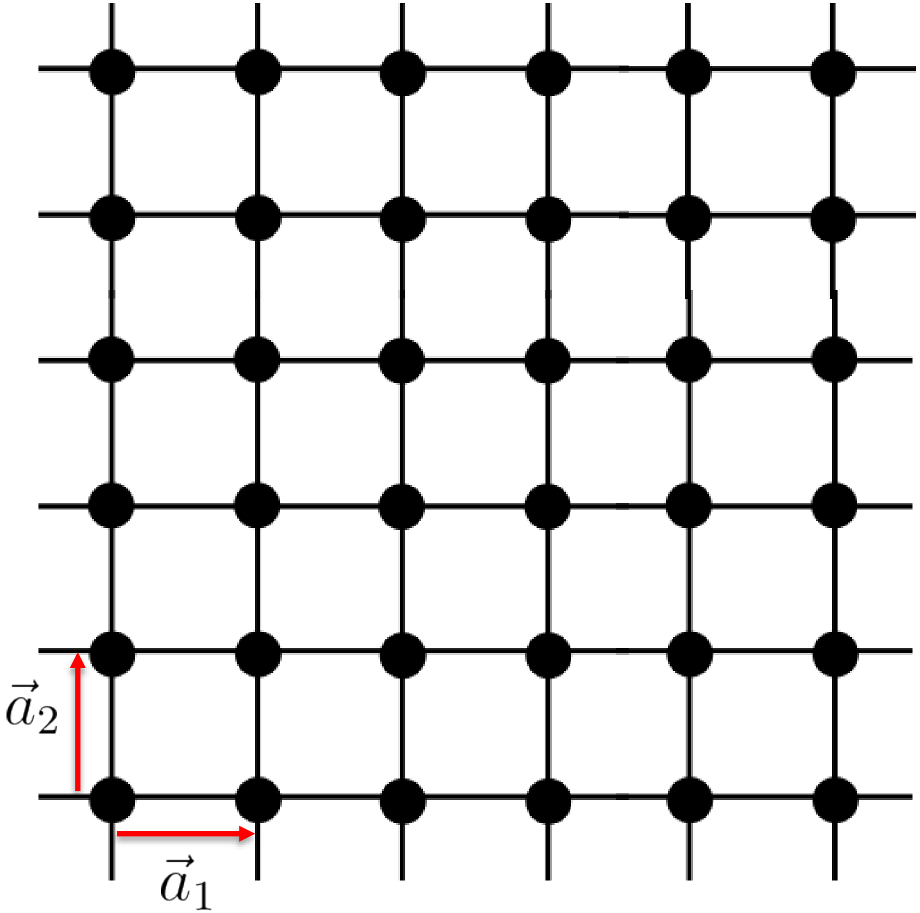
Planos cristalinos e índices de Miller

Exemplo



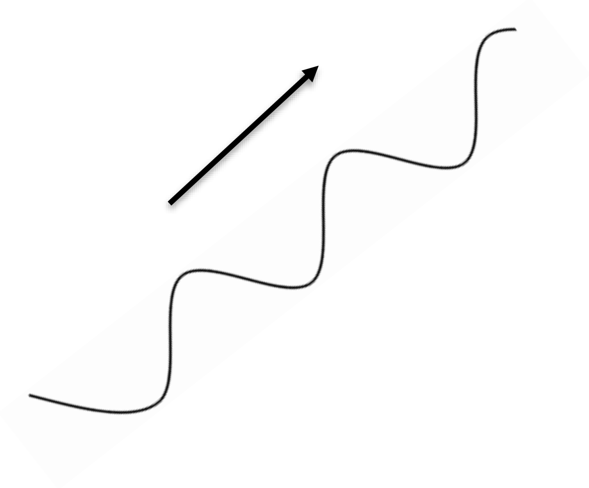
$$\vec{G}_{min} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \vec{b}_1$$

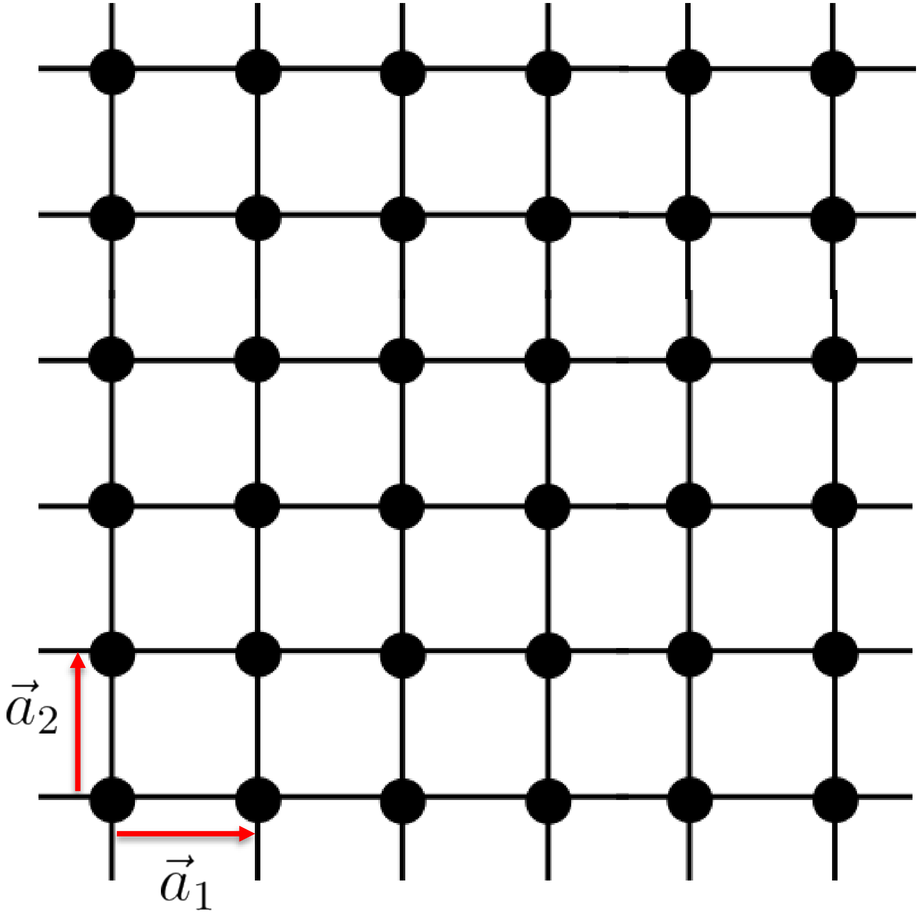
(h,k,l) = (1,0,0)



Planos cristalinos e índices de Miller

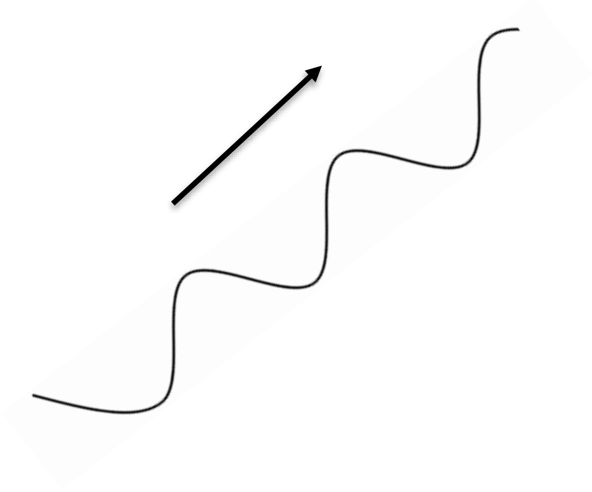
Exemplo

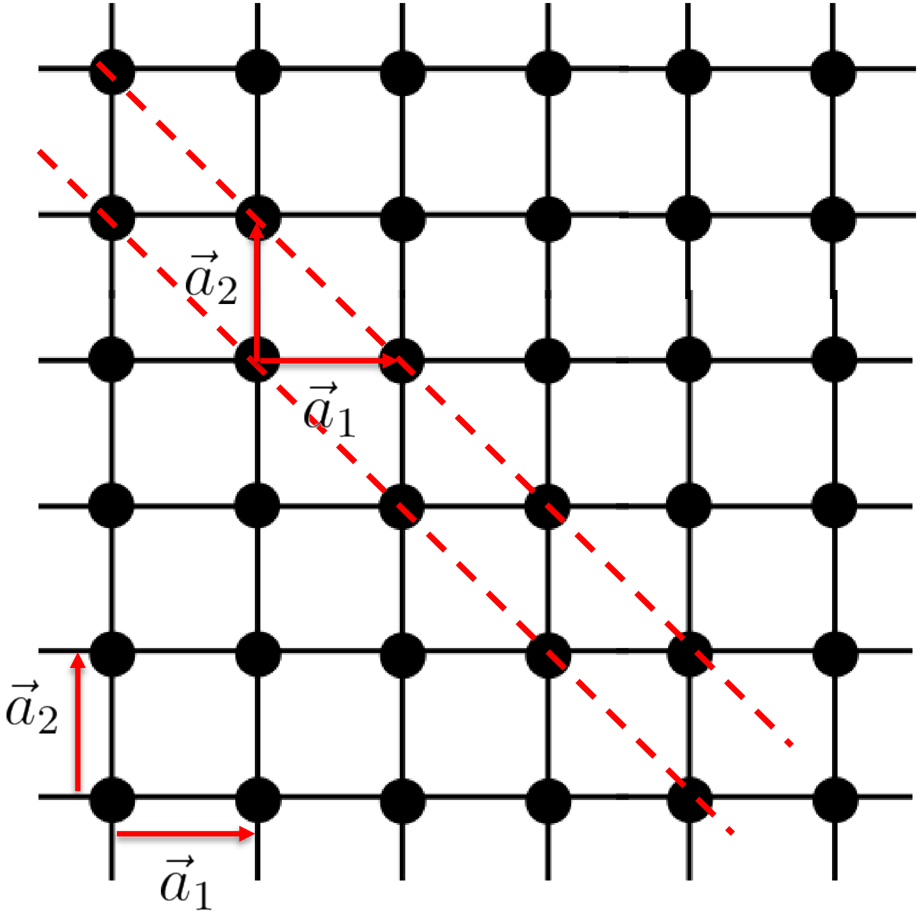




Planos cristalinos e índices de Miller

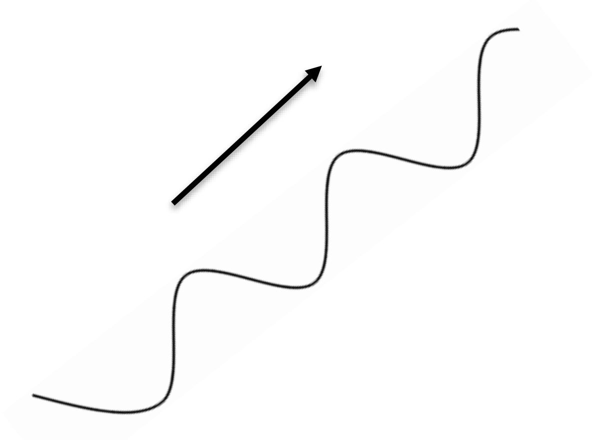
Exemplo

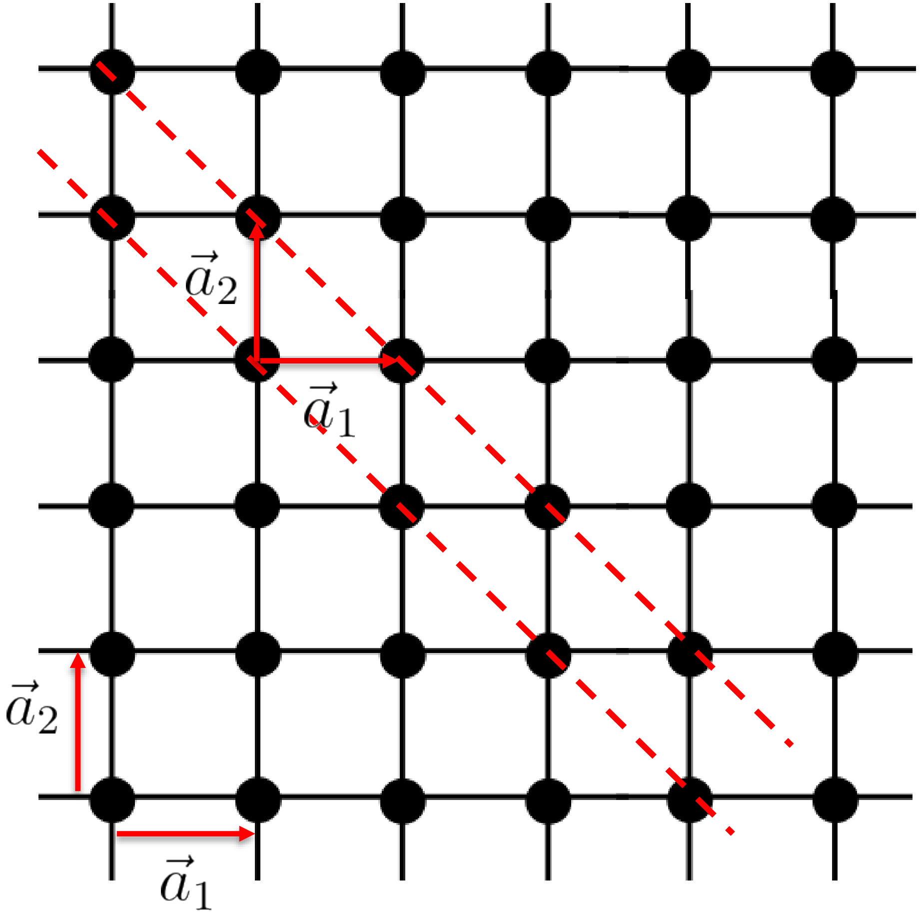




Planos cristalinos e índices de Miller

Exemplo



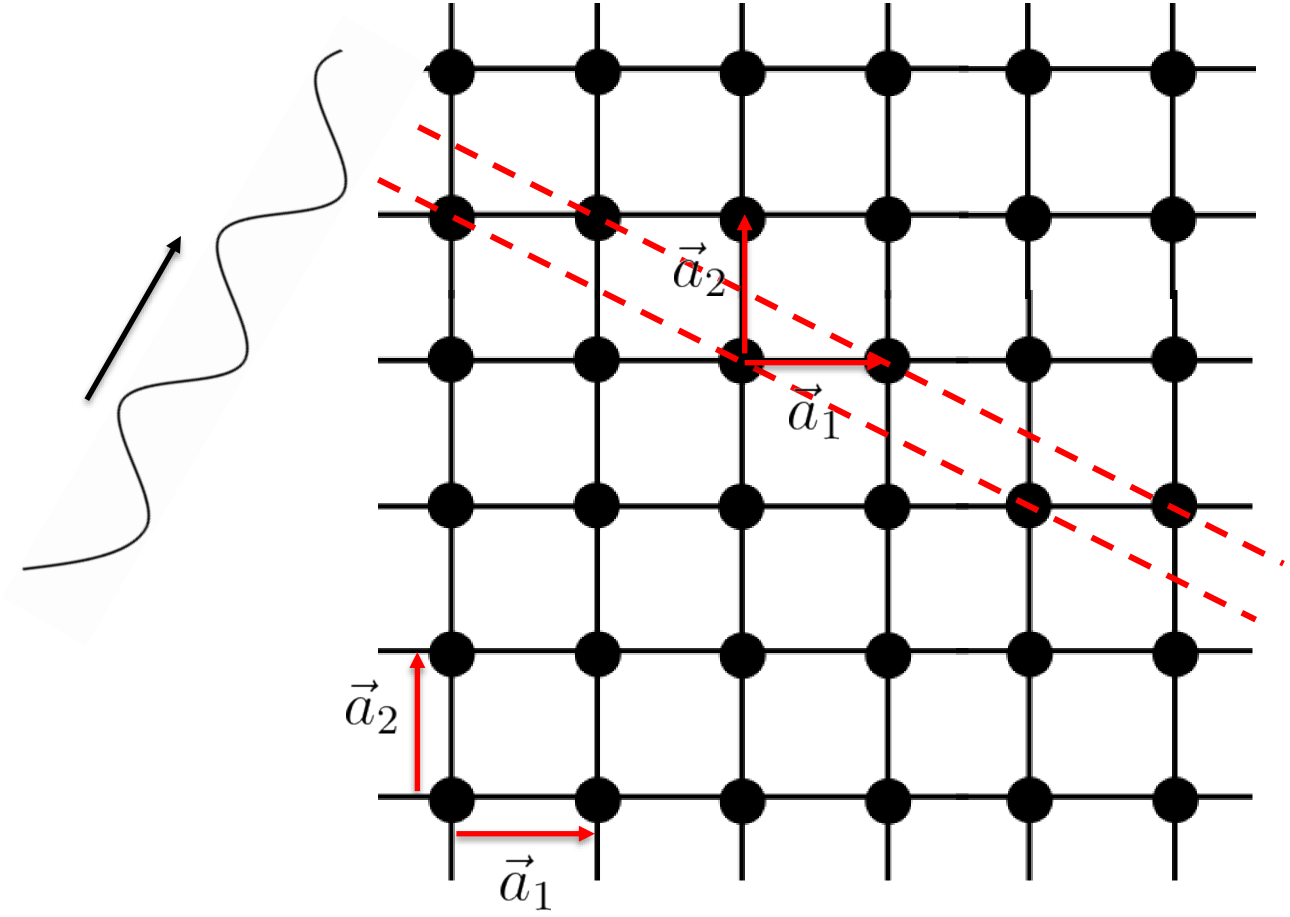


(h,k,l) = (1,1,0)

$$\vec{G}_{min} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$$

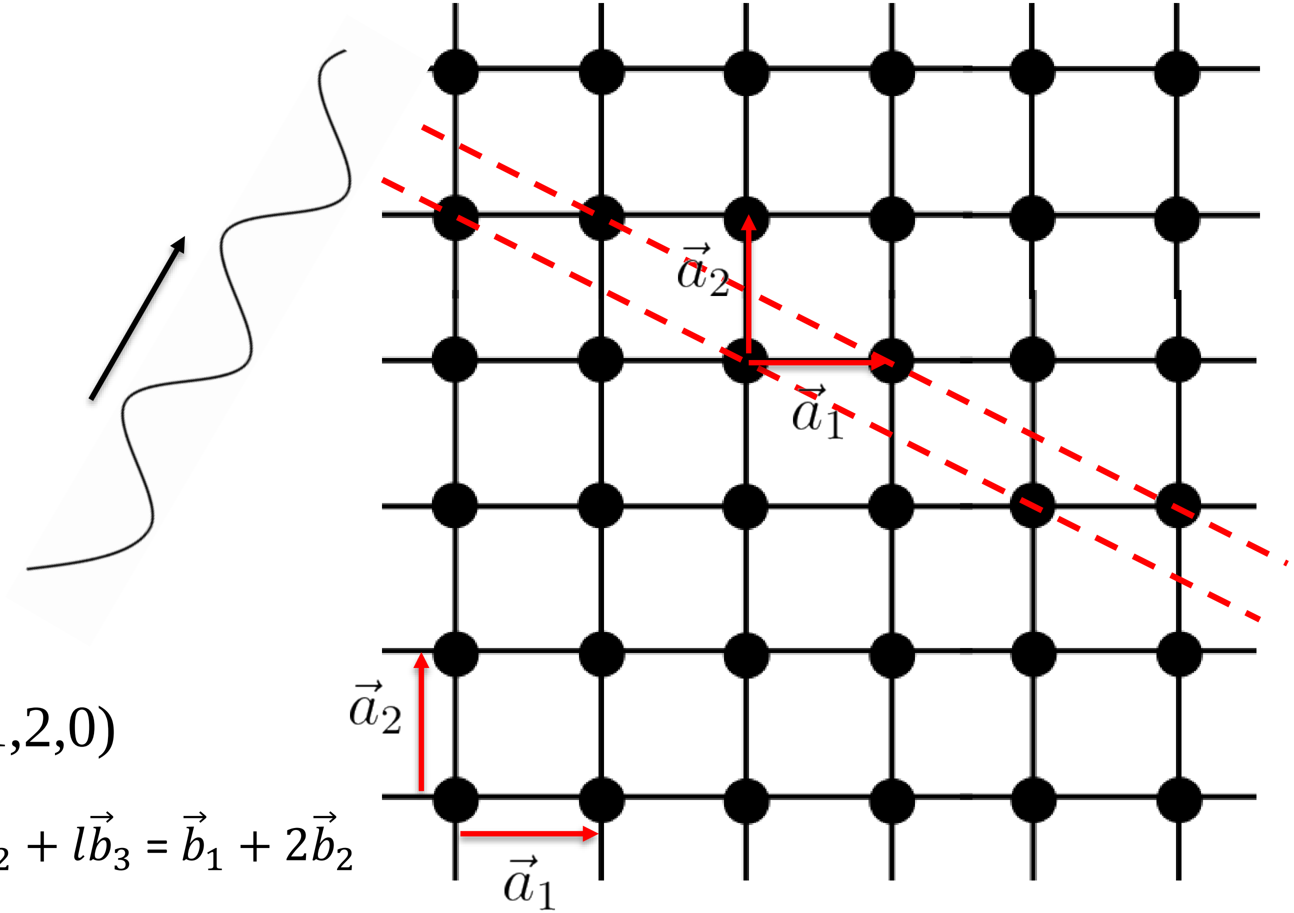
Planos cristalinos e índices de Miller

Exemplo



Planos cristalinos e índices de Miller

Exemplo



(h,k,l) = (1,2,0)

$$\vec{G}_{min} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + 2\vec{b}_2$$