

INTRODUÇÃO A CRISTALOGRAFIA APLICADA À DIFRAÇÃO DE ELÉTRONS PARA MATERIAIS SÓLIDOS

Aula 2 – “Pontos, direções e planos”

Ponto de rede uvw

- Todo ponto de rede é definido com respeito a origem da rede pelo vetor de translação:

$$\mathbf{t} = u.\mathbf{a} + v.\mathbf{b} + w.\mathbf{c}$$

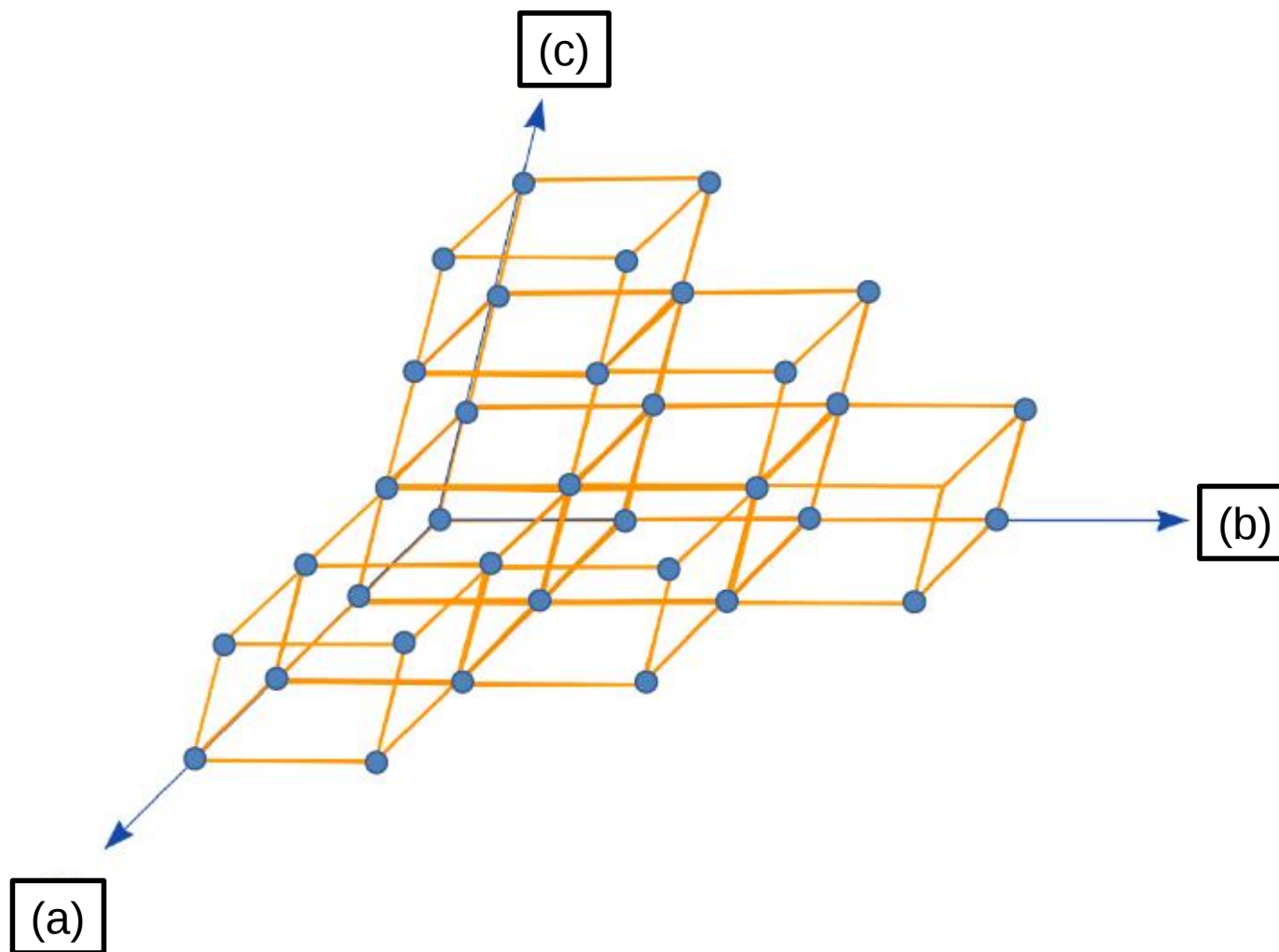
- a , b e c são os parâmetros de rede.
- Logo, apenas as coordenadas u, v, w precisam ser especificadas!

Ponto de rede uvw

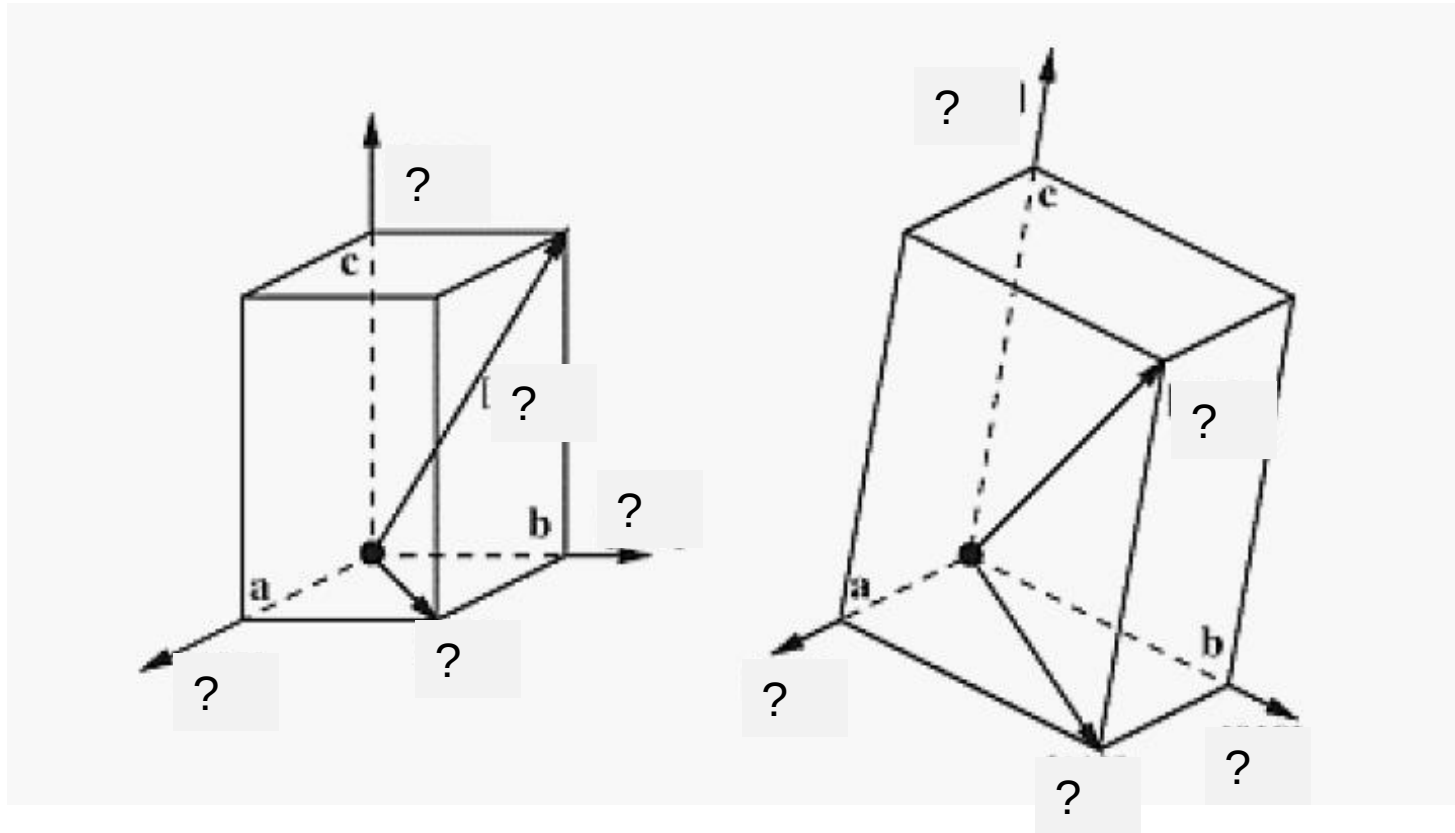
- Os pontos de rede são determinados usando-se os índices uvw

Qual o ponto 211?

E o 013?



Direções Cristalográficas

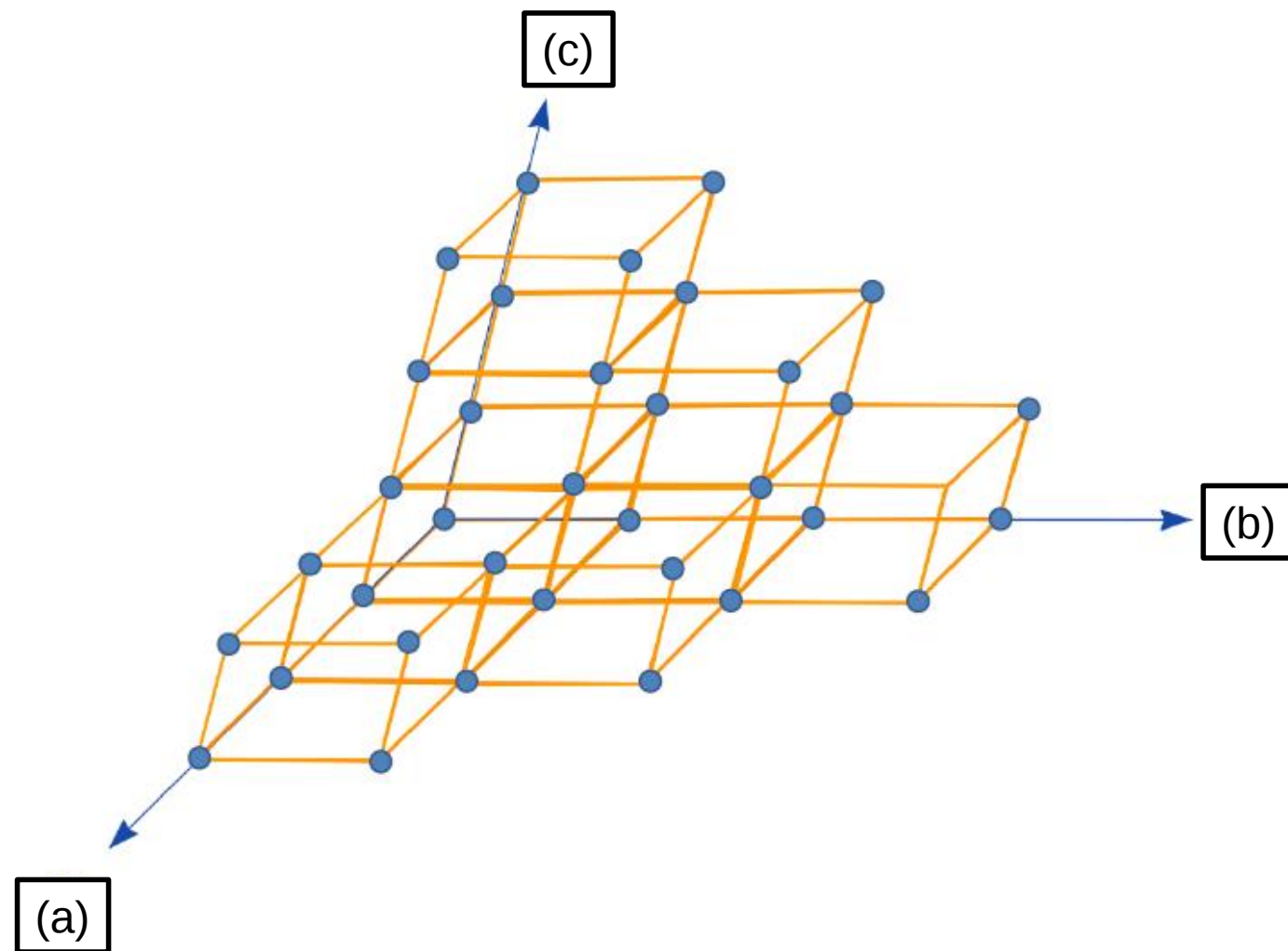


Direção $[uvw]$

- As direções cristalográficas podem ser especificadas em qualquer sistema, tomando-se 2 pontos de rede.
- Para definirmos uma direção, toma-se a origem como um desses pontos e a direção $[uvw]$ será dada pelos mesmos índices do segundo ponto de rede.

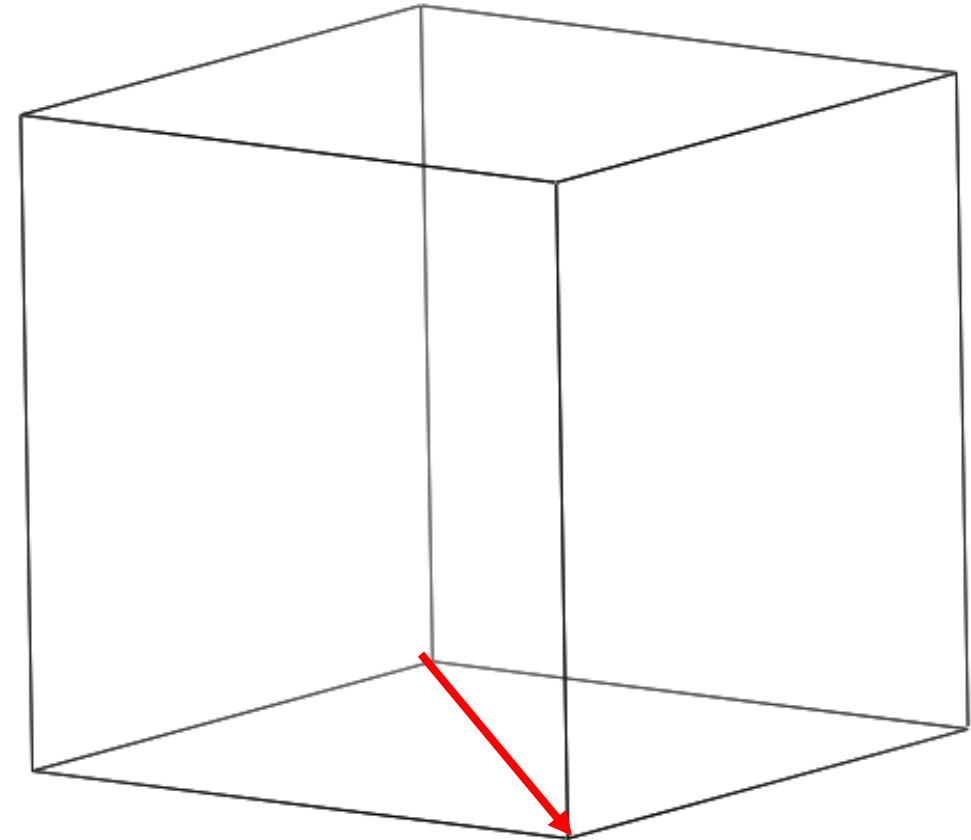
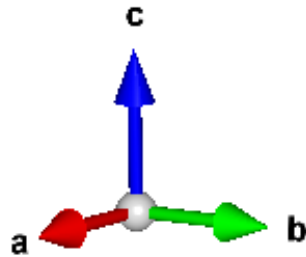
Direção $[uvw]$

- Qual a direção $[130]$?
- Qual a direção $[011]$?
- Qual a direção $[300]$?
- E a $[100]$?
- Veja que $[uvw]$ descreve não apenas uma direção mas um conjunto infinito de direções que são paralelas e com o mesmo sentido.



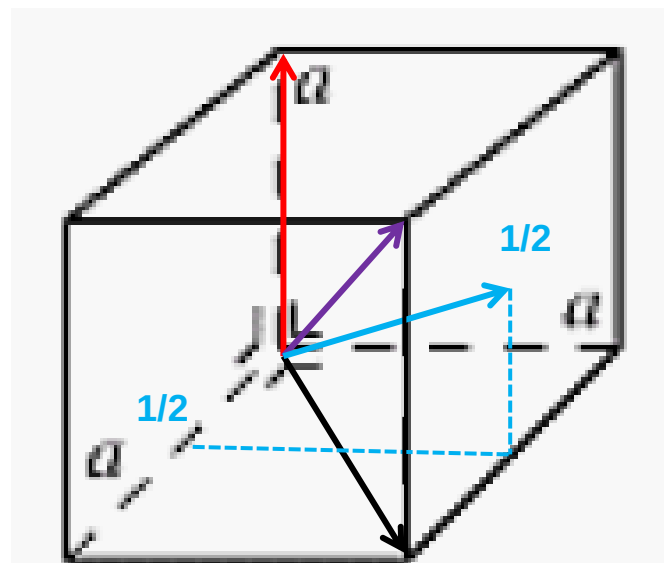
Direção $[uvw]$

- Vamos desenhar agora a direção $[110]$ no sistema cúbico ao lado.



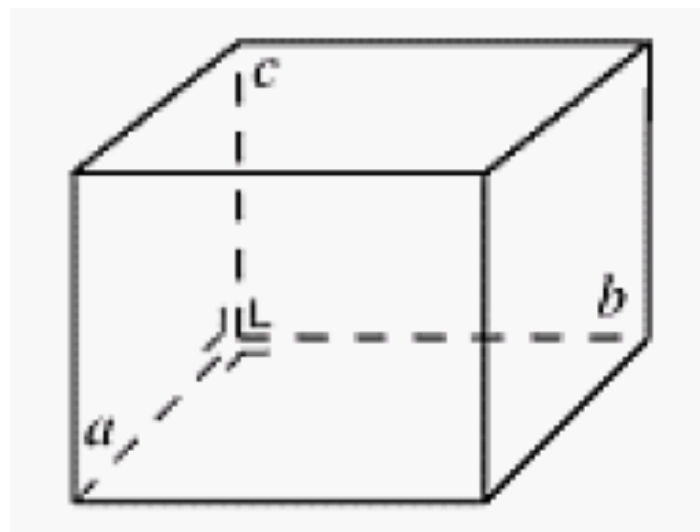
Direções Cristalográficas

- Exercício: Desenhe as direções $[001]$, $[110]$, $[111]$ e $[121]$ em uma célula cúbica.



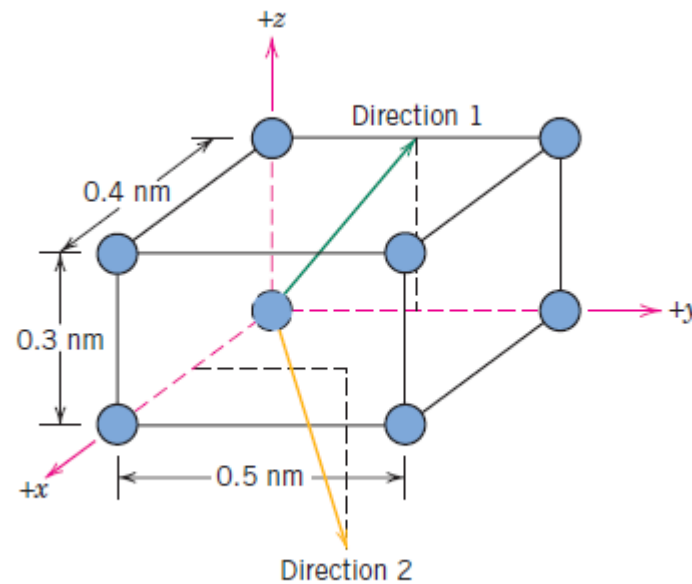
Direções Cristalográficas

- Exemplos: Desenhe a direção $[111]$ e $[12-1]$ para uma célula ortorrômbica.



Direções Cristalográficas

- Exemplos: Quais os índices para as direções indicadas?

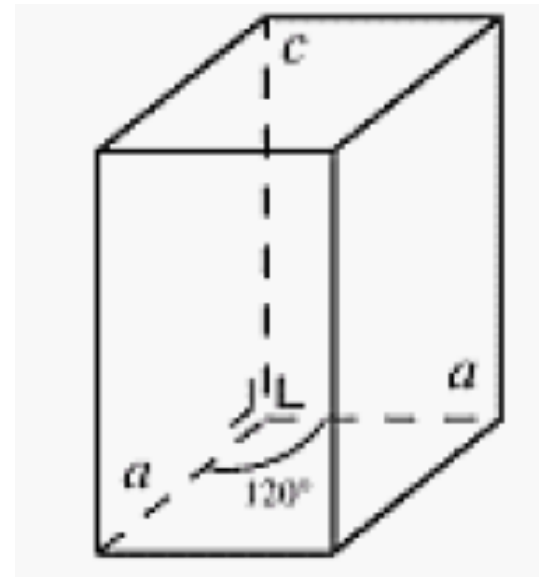
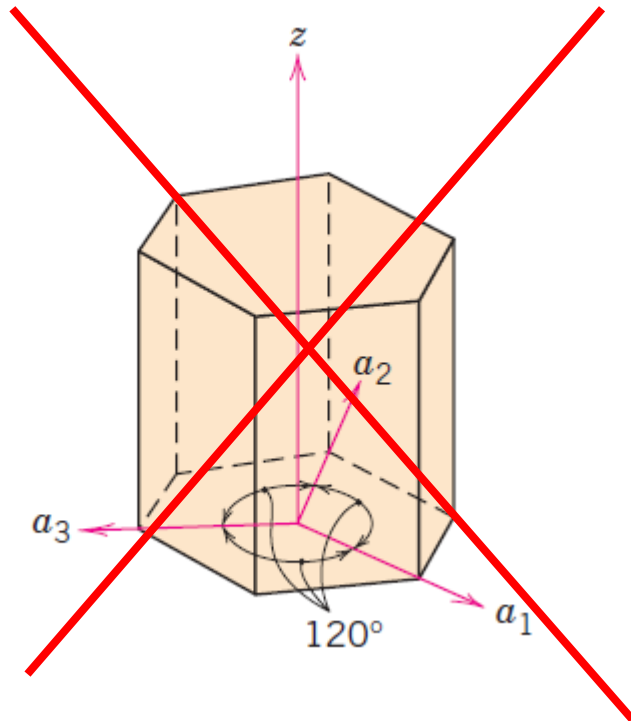


Direção 1 = [012]

Direção 2 = $[11\bar{2}]$

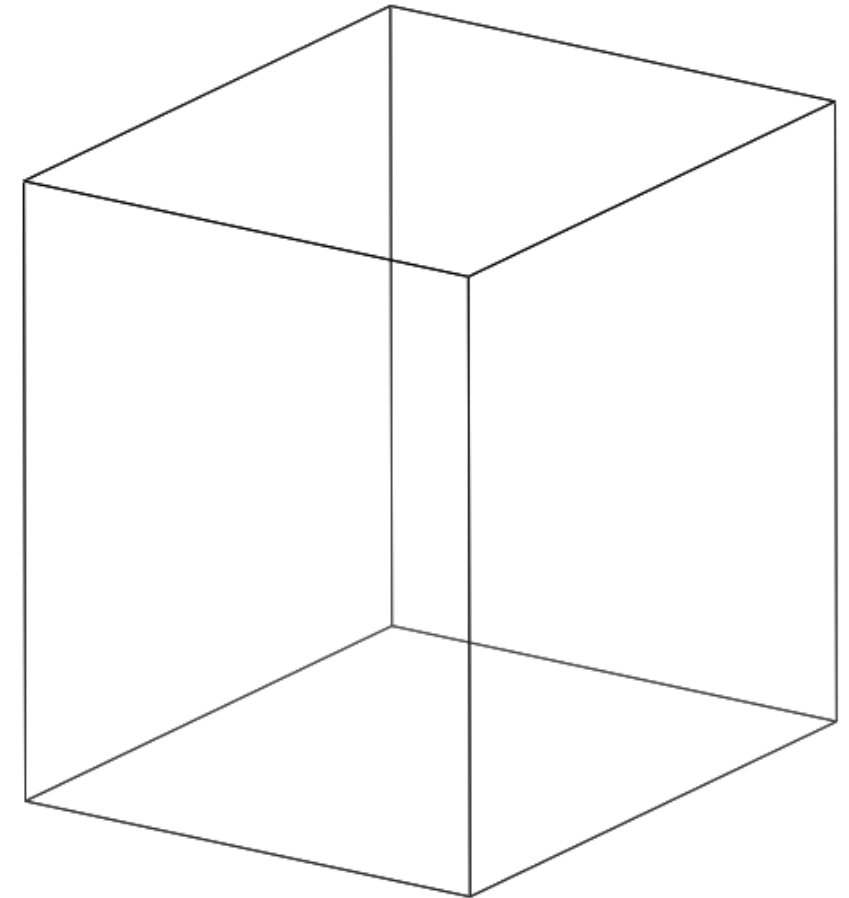
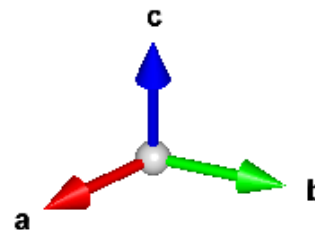
Direções Cristalográficas

Sistema hexagonal



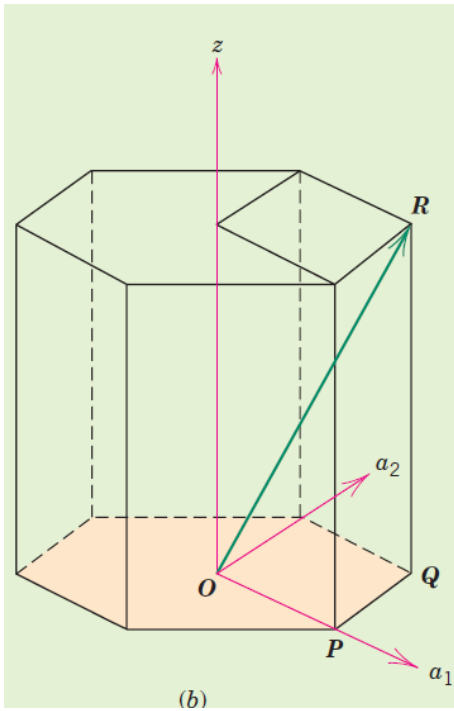
Direção $[uvw]$

- Vamos desenhar agora a direção $[110]$ e $[100]$ no sistema hexagonal ao lado.
- O procedimento é idêntico aos sistemas anteriores.
- Se quiser, a direção $[uvw]$ pode ser transformada para o sistema $[uvtw]$.



Direções Cristalográficas $[uvw]$

- Exemplo de conversão



$[111]$

$$[u'v'w'] \longrightarrow [uvw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2u' - v')$$

$$v = \frac{1}{3}(2v' - u')$$

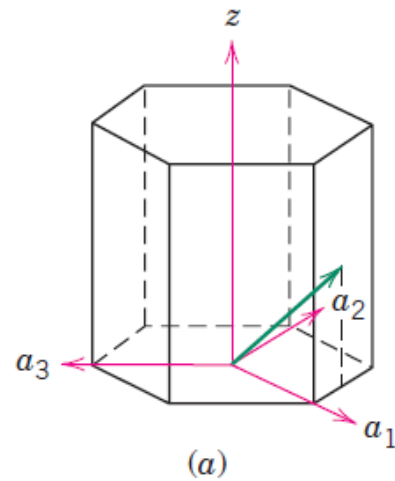
$$t = -(u + v)$$

$$w = w'$$

$[11\bar{2}3]$

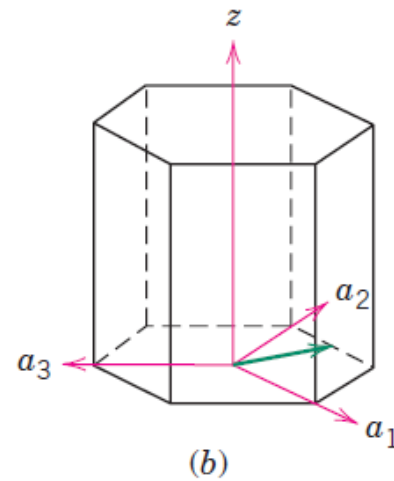
Direções Cristalográficas

- Exemplos: Quais os índices para as direções indicadas?



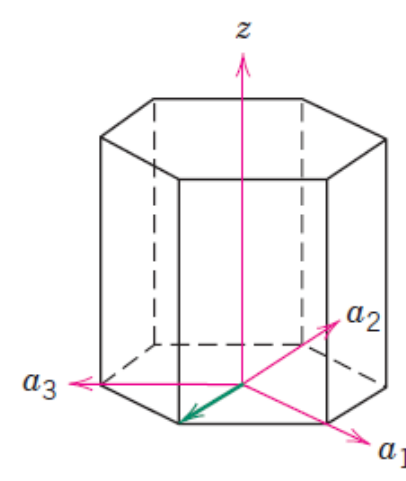
$$1,0,5,0,5=211$$

$$[\bar{1}0\bar{1}1]$$



$$0,5,1,0=120$$

$$[0\bar{1}\bar{1}0]$$



$$0-10$$

$$[\bar{1}2\bar{1}0]$$

Tensor Métrico

$$g_{\text{triclinic}} = \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ba \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \beta & cb \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix}, \quad g_{\text{hexagonal}} = \begin{bmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix},$$

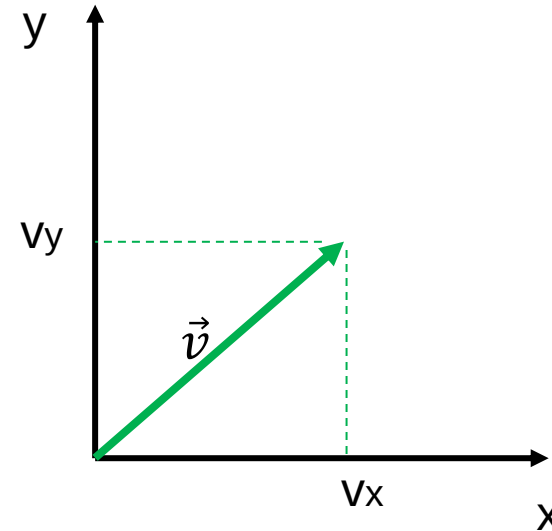
$$g_{\text{monoclinic}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & ac \cos \beta \\ 0 & b^2 & 0 \\ ac \cos \beta & 0 & c^2 \end{bmatrix}, \quad g_{\text{tetragonal}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix},$$

$$g_{\text{orthorhombic}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix}, \quad g_{\text{cubic}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix},$$

$$g_{\text{rhombohedral}} = \begin{bmatrix} a^2 & a^2 \cos \alpha & a^2 \cos \alpha \\ a^2 \cos \alpha & a^2 & a^2 \cos \alpha \\ a^2 \cos \alpha & a^2 \cos \alpha & a^2 \end{bmatrix}.$$

Como calculamos dimensão de um vetor?

- Qual o tamanho do vetor $\vec{v}$ ao lado inserido no sistema cartesiano de coordenadas?
- Nesse caso, podemos aplicar o teorema de Pitágoras.
- Porém, veja que isso só funciona pois estamos em um sistema cartesiano.



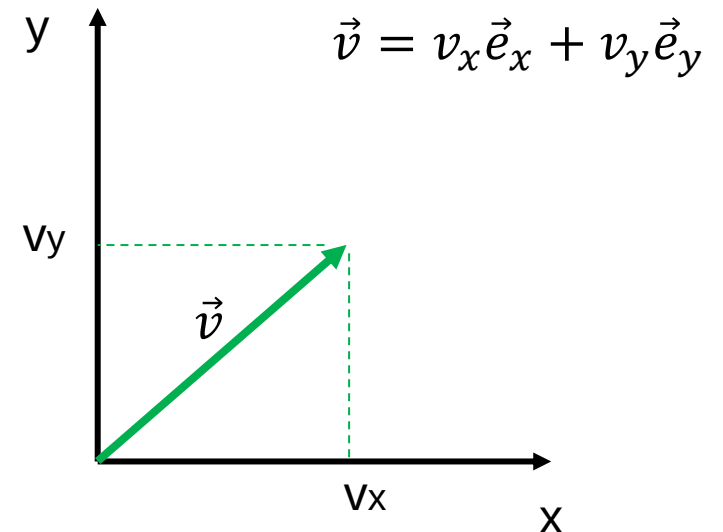
$$|\vec{v}| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$$

Como calculamos dimensão de um vetor?

- Podemos chegar no mesmo resultado através de álgebra vetorial:

$$\vec{v} \cdot \vec{v} = |\vec{v}| |\vec{v}| \cos 0 = |\vec{v}|^2$$

$$|\vec{v}| = \sqrt{\vec{v} \cdot \vec{v}} = \sqrt{v_x^2 \vec{e}_x \cdot \vec{e}_x + v_y^2 \vec{e}_y \cdot \vec{e}_y + 2v_x v_y \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y}$$



No sistema cartesiano:

$$\vec{e}_x \cdot \vec{e}_x = \vec{e}_y \cdot \vec{e}_y = 1$$

$$\vec{e}_x \cdot \vec{e}_y = 0$$



$$|\vec{v}| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$$

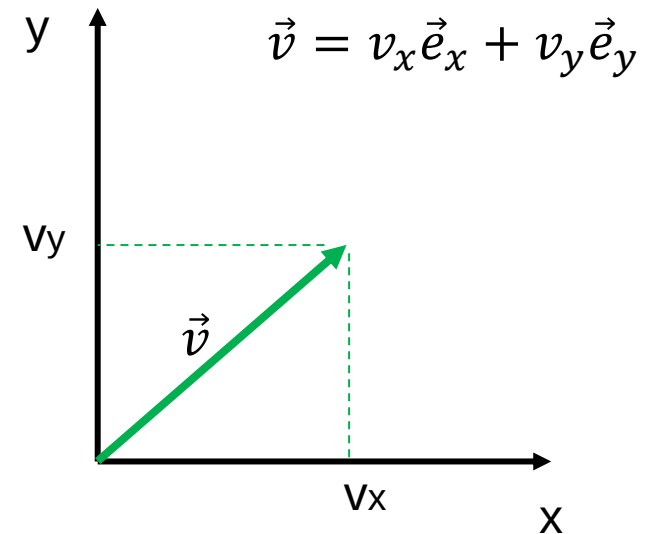
Como calculamos dimensão de um vetor?

- Veja que a equação abaixo é geral e vale para qualquer sistema de coordenadas:

$$|\vec{v}| = \sqrt{\vec{v} \cdot \vec{v}} = \sqrt{v_x^2 \vec{e}_x \cdot \vec{e}_x + v_y^2 \vec{e}_y \cdot \vec{e}_y + 2v_x v_y \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y}$$

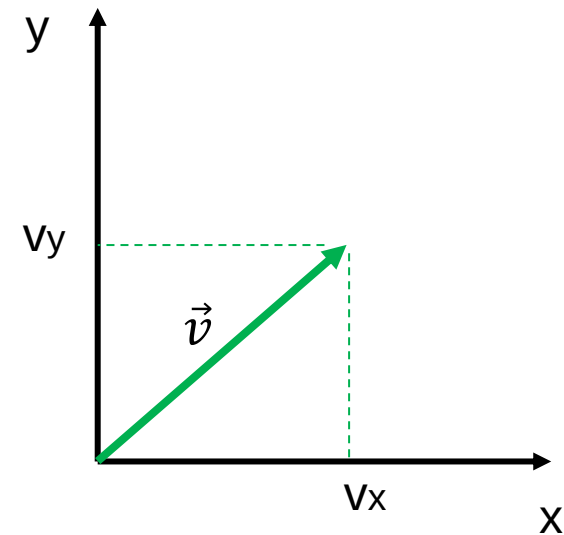
- Podemos reescrever a equação acima, da seguinte forma:

$$|\vec{v}| = \sqrt{\begin{bmatrix} v_x & v_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{e}_x \cdot \vec{e}_x & \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \\ \vec{e}_y \cdot \vec{e}_x & \vec{e}_y \cdot \vec{e}_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix}}$$



Tensor Métrico

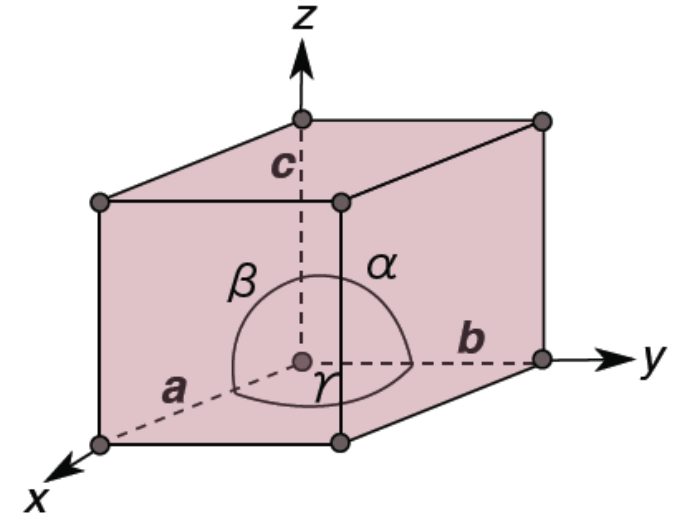
- Calculando a matriz dos produtos escalares entre os vetores-base de um sistema de coordenadas, podemos calcular a dimensão de um vetor em qualquer sistema.
- Essa matriz é chamada também de **tensor métrico**.



$$|\vec{v}| = \sqrt{\begin{bmatrix} v_x & v_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_x \cdot e_x & e_x \cdot e_y \\ e_y \cdot e_x & e_y \cdot e_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix}}$$

Tensor Métrico

- Podemos agora estender o tensor métrico para uma sistema de coordenadas de 3 dimensões, como os encontrados nos 7 sistemas cristalinos. Vamos denominar “G” o tensor métrico.

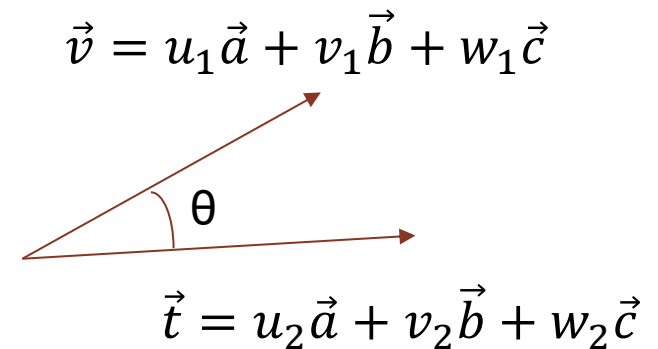


$$G = \begin{bmatrix} a \cdot a & a \cdot b & a \cdot c \\ b \cdot a & b \cdot b & b \cdot c \\ c \cdot a & c \cdot b & c \cdot c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ba \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \beta & cb \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix}$$

Tensor Métrico

- O tensor métrico pode ser usado para calcular o produto escalar entre 2 vetores (duas direções cristalográficas) pertencentes ao mesmo sistema cristalino da seguinte forma:

$$\vec{v} \cdot \vec{t} = |\vec{v}| |\vec{t}| \cos \theta = [u_1 \quad v_1 \quad w_1] G \begin{bmatrix} u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{bmatrix}$$

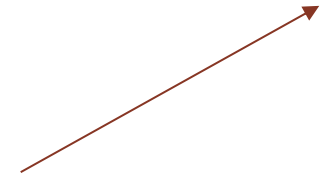


Tensor Métrico

- Da mesma forma, podemos usar o tensor métrico para calcular a dimensão de qualquer vetor dentro de rede cristalina:

$$\vec{v} \cdot \vec{v} = |\vec{v}|^2 = [u \quad v \quad w] G \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

$$\vec{v} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

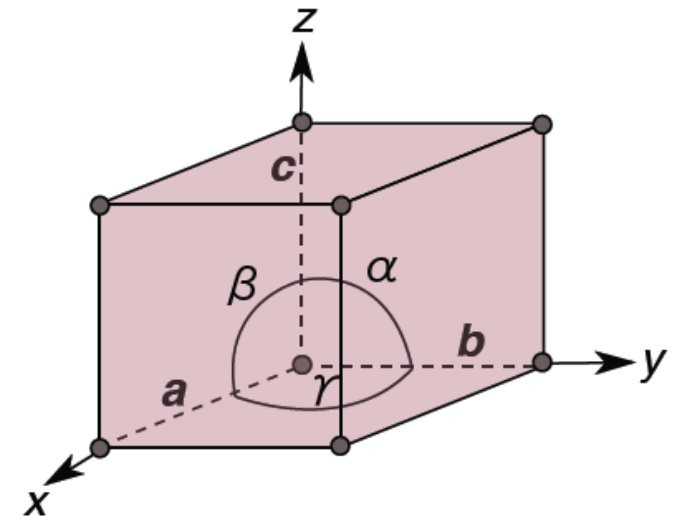


Tensor Métrico

- Exemplo: Calcule uma equação que determine a dimensão da diagonal de uma célula unitária qualquer.

$$\vec{v} \cdot \vec{v} = |\vec{v}|^2 = [u \quad v \quad w] G \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

$$G = \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ba \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \beta & cb \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix}$$



Tensor Métrico

- O vetor que liga a origem ao ponto (1,1,1) é [111] (lembre-se da nossa primeira aula).

$$\vec{v} \cdot \vec{v} = |\vec{v}|^2 = [u \quad v \quad w] G \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

$$\text{Dimensão da diagonal} = \sqrt{[1 \quad 1 \quad 1] \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ba \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \beta & cb \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}}$$

$\text{Dimensão da diagonal} = a^2 + b^2 + c^2 + 2ab \cos \gamma + 2ac \cos \beta + 2bc \cos \alpha$
--

Tensor Métrico

$$g_{\text{triclinic}} = \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ba \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \beta & cb \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix}, \quad g_{\text{hexagonal}} = \begin{bmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix},$$

$$g_{\text{monoclinic}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & ac \cos \beta \\ 0 & b^2 & 0 \\ ac \cos \beta & 0 & c^2 \end{bmatrix}, \quad g_{\text{tetragonal}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix},$$

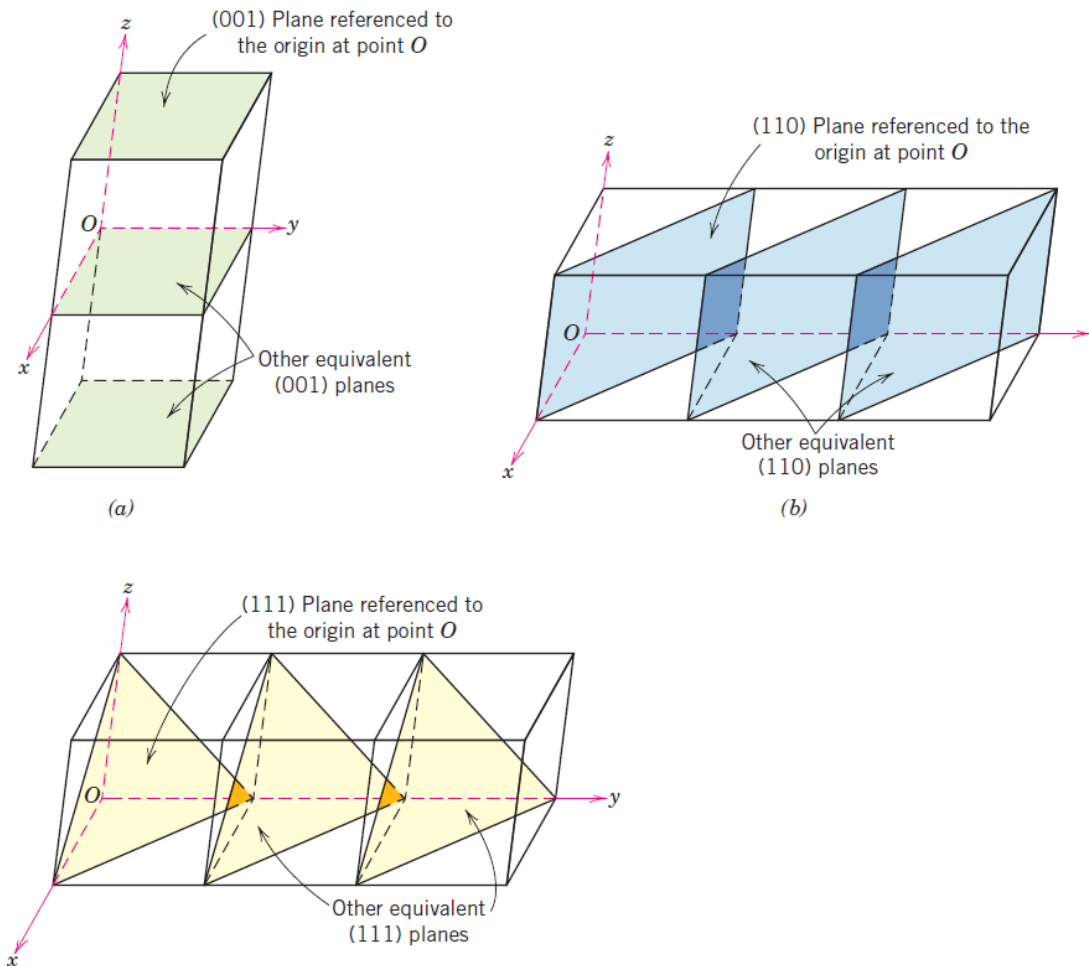
$$g_{\text{orthorhombic}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix}, \quad g_{\text{cubic}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix},$$

$$g_{\text{rhombohedral}} = \begin{bmatrix} a^2 & a^2 \cos \alpha & a^2 \cos \alpha \\ a^2 \cos \alpha & a^2 & a^2 \cos \alpha \\ a^2 \cos \alpha & a^2 \cos \alpha & a^2 \end{bmatrix}.$$

Exercícios

- Para um cristal com os seguintes parâmetros de rede: $a=3$, $b=4$, $c=6$, $\alpha=90^\circ$, $\beta=120^\circ$ e $\gamma=90^\circ$ calcule o comprimento do vetor $[111]$.
- Para um cristal com os seguintes parâmetros de rede: $a=2$, $b=2$, $c=3$, $\alpha=90^\circ$, $\beta=90^\circ$ e $\gamma=90^\circ$. Calcule a distância entre dois átomos que estão posicionados nos seguintes locais da célula: $(1/2, 1/3, 1/4)$ e $(1/3, 1/2, 3/4)$.
- Em um cristal cúbico com parâmetro de rede “ a ”, um átomo de oxigênio está localizado na origem. Esse átomo está ligado a dois átomos de titânio, um localizado em $(1/2, 1/2, 0)$ e o outro em $(1/2, 0, 1/2)$. Calcule o ângulo entre as duas ligações.

Planos Cristalográficos



$(hkl) \rightarrow$ Símbolo para planos cristalográficos

Planos (hkl)

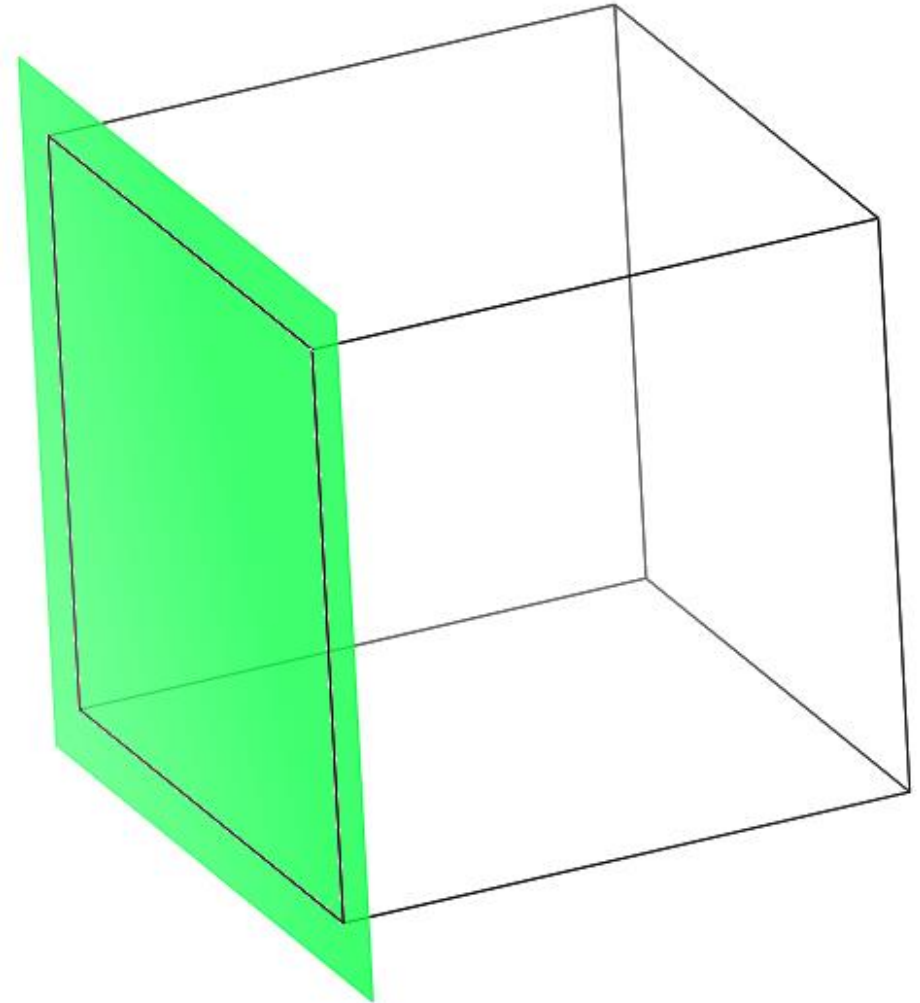
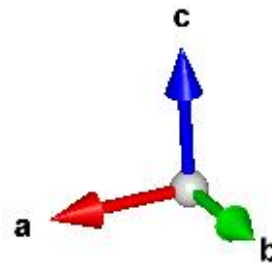
- Os valores (hkl) são chamados de índices de Miller.
- São definidos através dos menores múltiplos inteiros dos recíprocos de intercepção do plano dos eixos a, b e c.
- Os valores de (hkl) representam não apenas um único plano, mas um conjunto infinito de planos paralelos com espaçamento interplanar constante.

Planos Cristalográficos

- Para se obter os índices de Miller (hkl) dos planos:
 - Se o plano passa pela origem do sistema, construa outro plano paralelo passando pela célula unitária.
 - Após isso, o plano ou vai interceptar cada um dos 3 eixos ou será paralelo a algum dos eixos.
 - O plano vai interceptar os eixos em determinados valores de a, b e c. Se ele for paralelo a algum eixo, o valor da interceptação será infinito.
 - Toma o recíproco dos valores de a, b e c. **Os menores inteiros referentes a esses 3 valores são os índices de Miller***.**

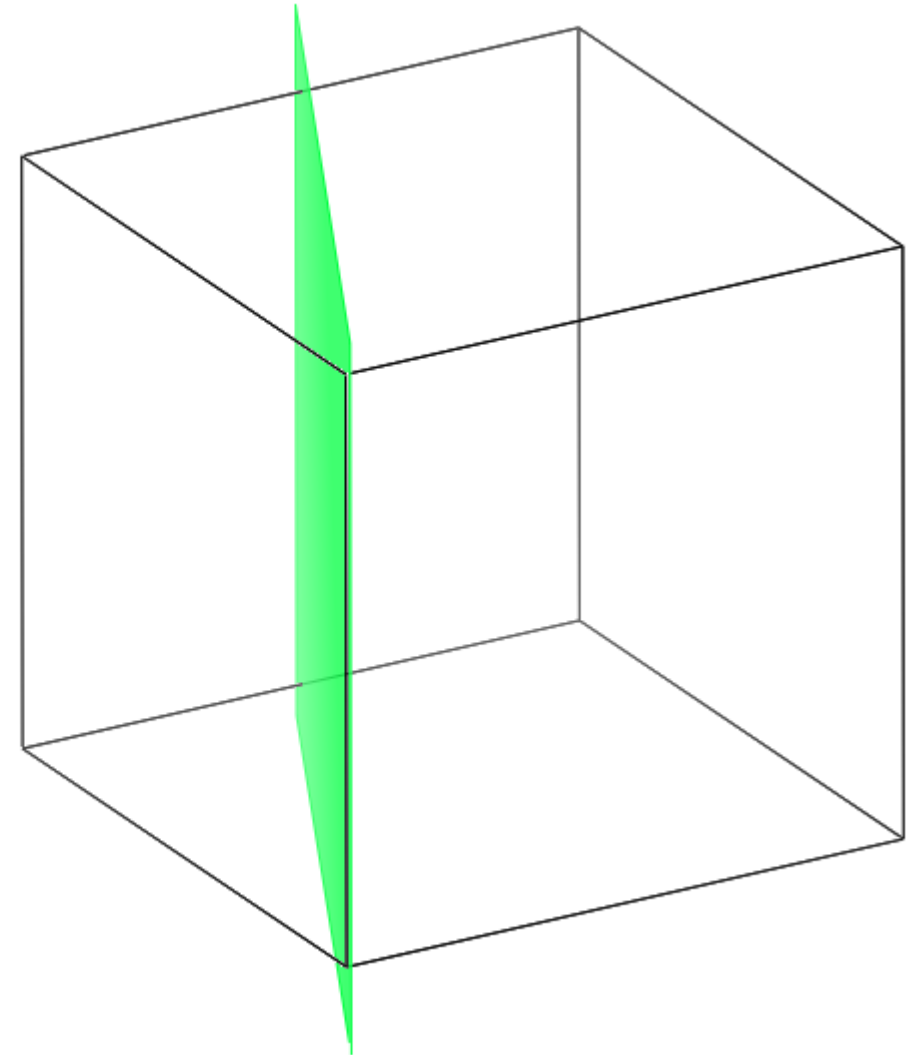
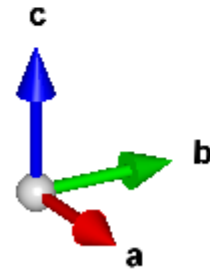
Planos (hkl)

- Defina os índices de Miller do plano verde desenhado em um sistema cúbico.



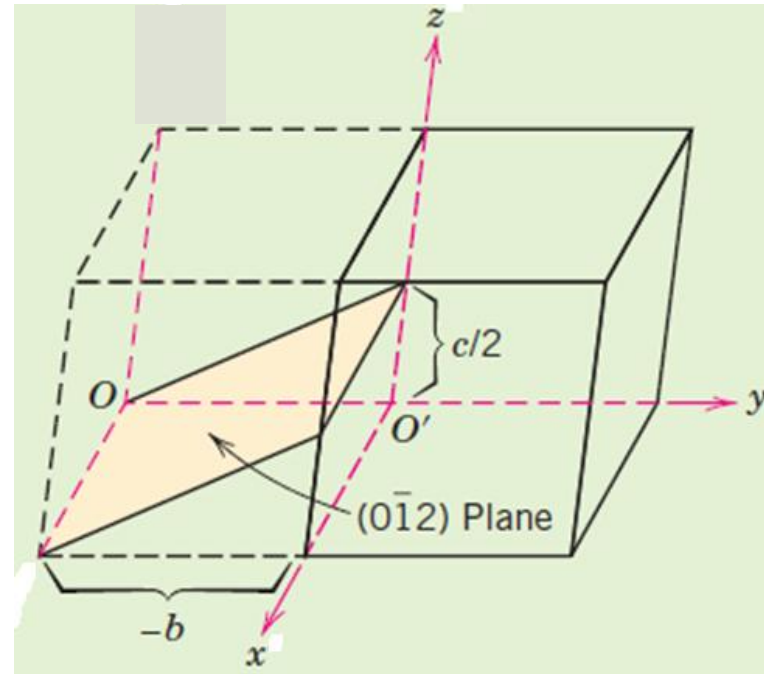
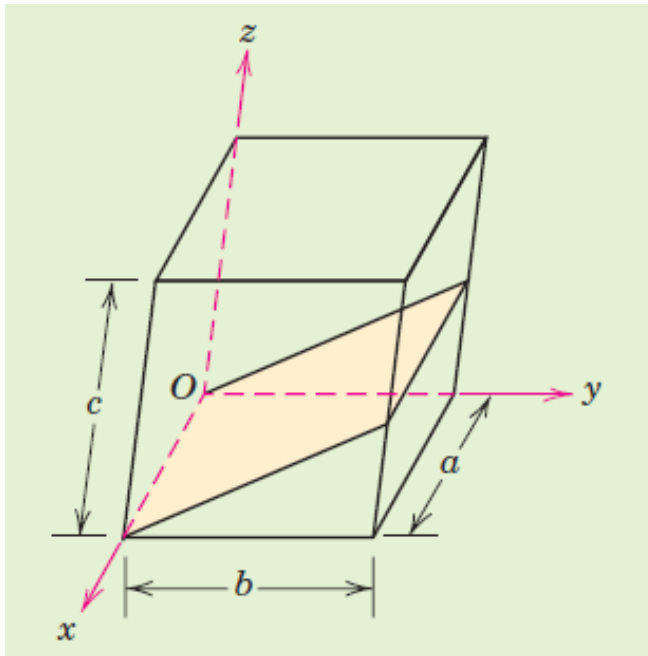
Planos (hkl)

- Defina os índices de Miller do plano verde desenhado em um sistema cúbico.



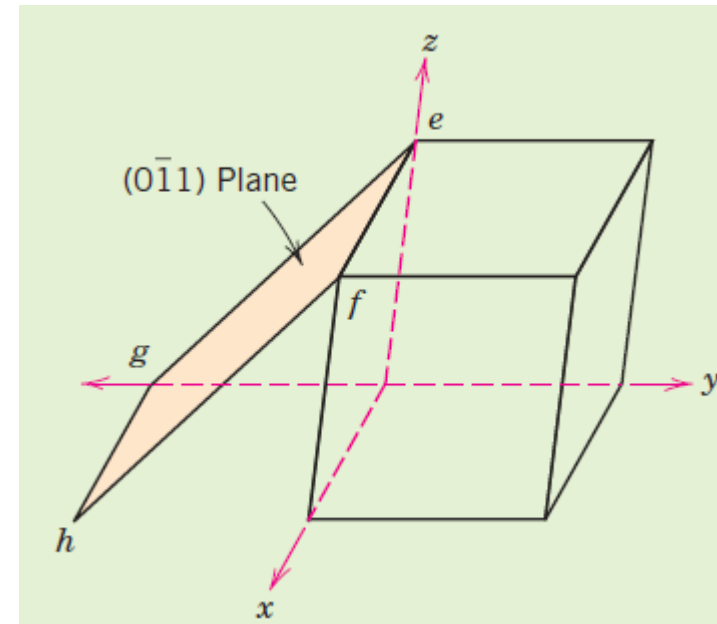
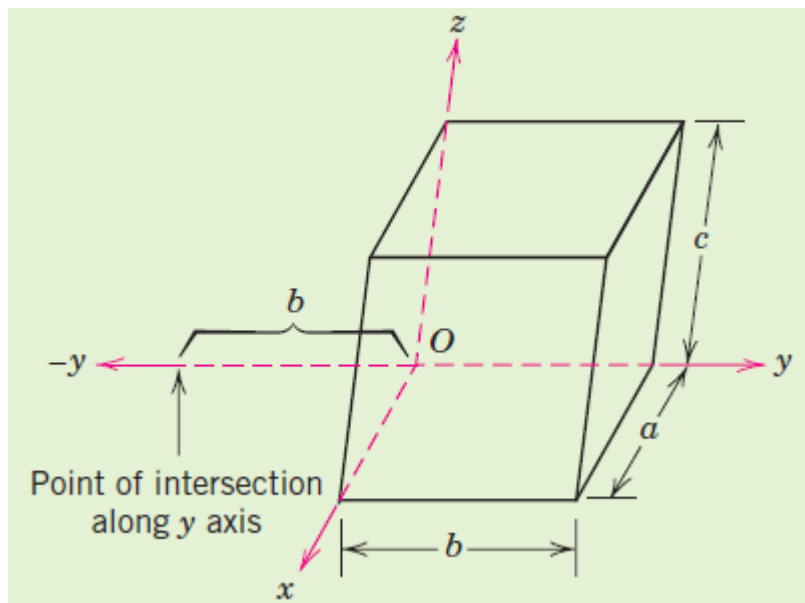
Planos Cristalográficos

- Exercício: Determine os índices de Miller para o plano abaixo:



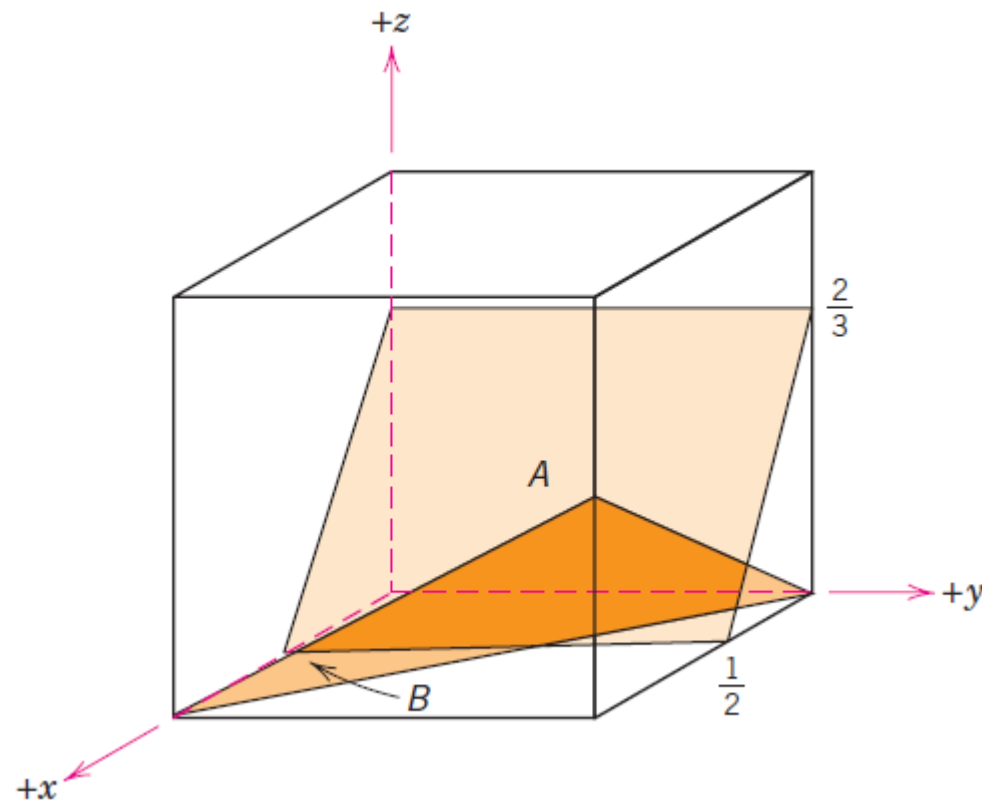
Planos Cristalográficos

- Exercício: Desenhe o plano $(0\bar{1}1)$:



Planos Cristalográficos

- Exercício: Determine os planos abaixo.

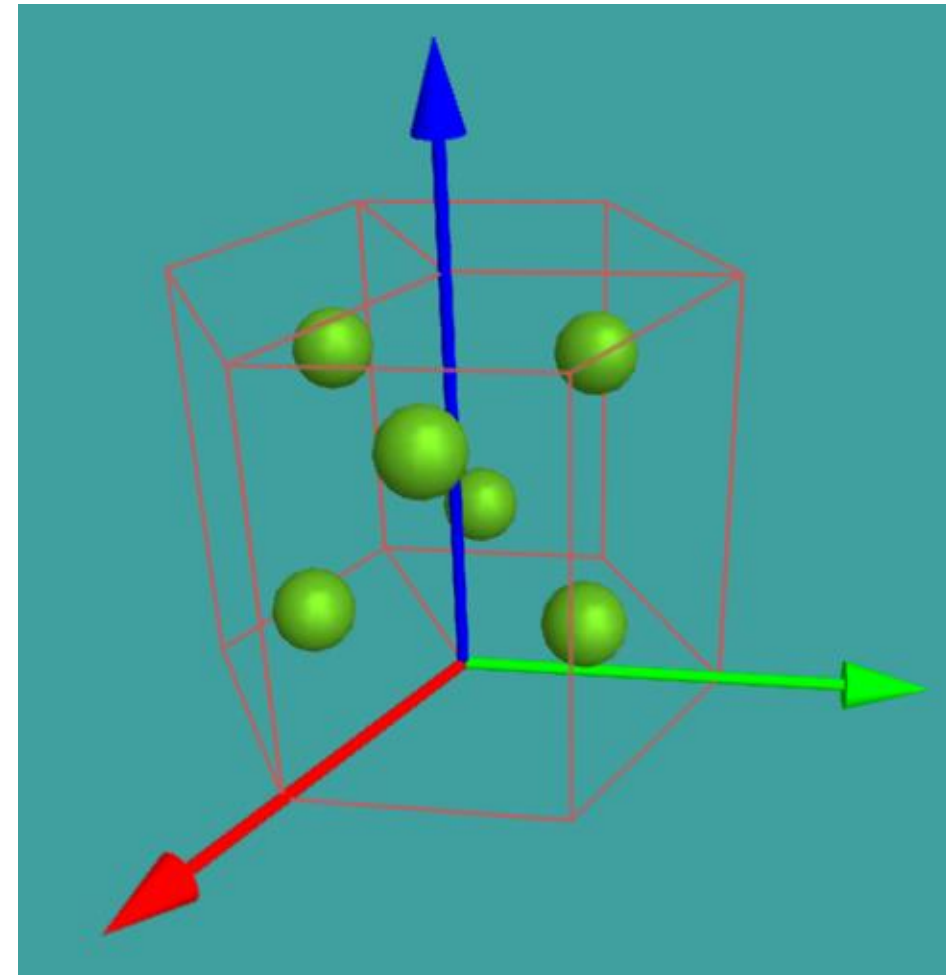


$$A=(403)$$

$$B=\overline{(112)}$$

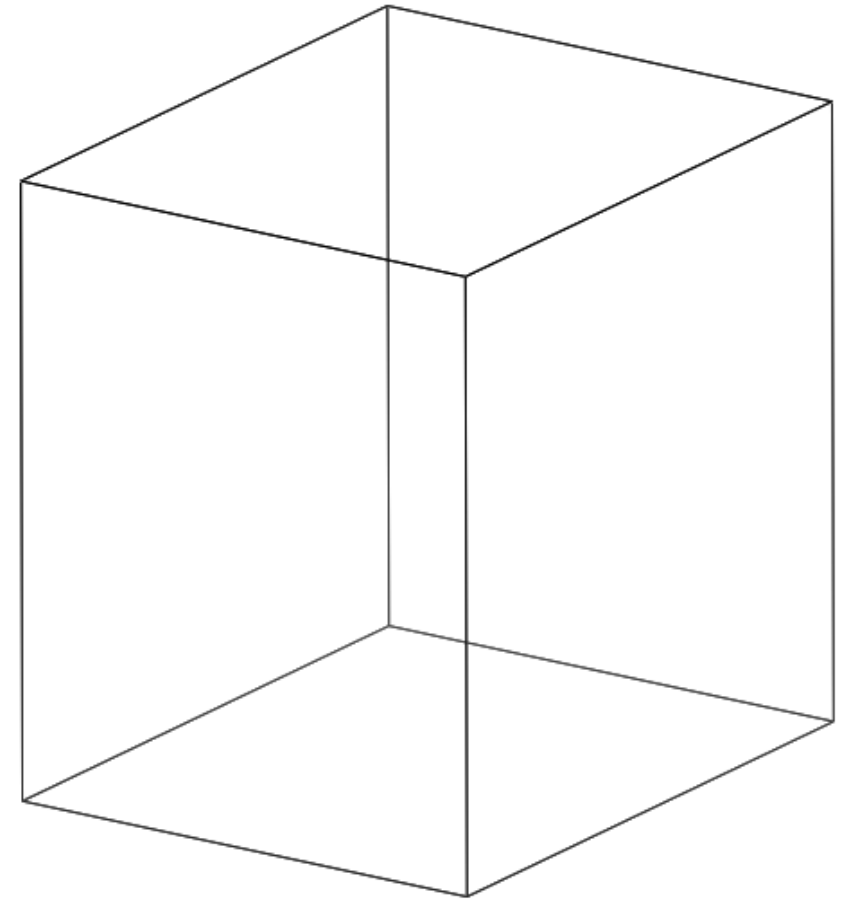
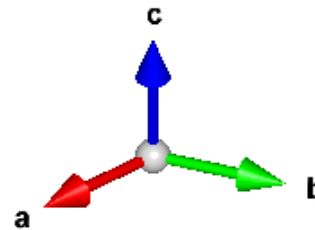
Planos (hkl)

- No sistema hexagonal....
- Usamos o mesmo procedimento.
- Caso seja necessário (hkl) pode virar (hkil).



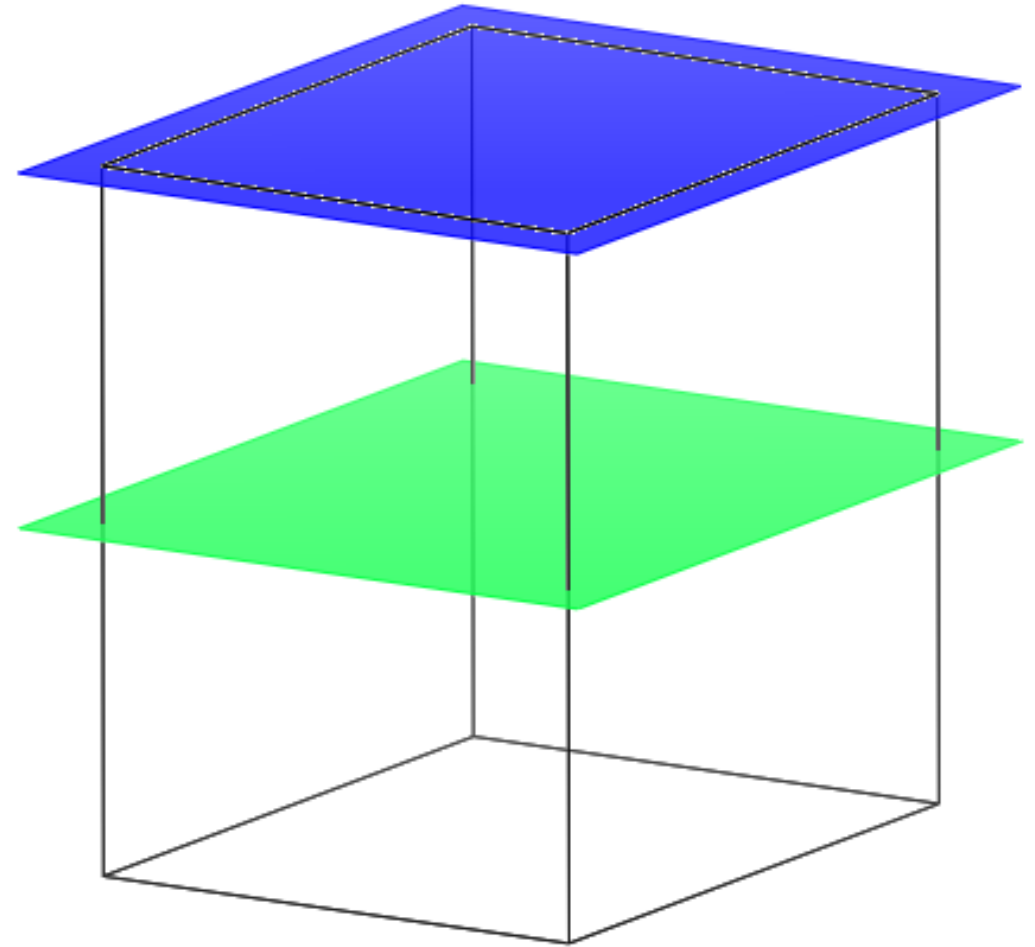
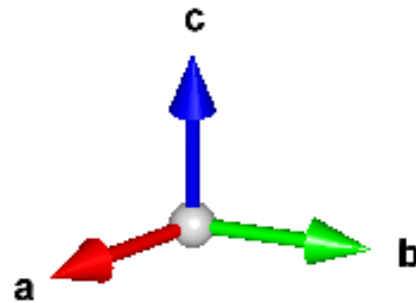
Planos (hkl)

- No sistema hexagonal....
- Usamos o mesmo procedimento.
- Caso seja necessário (hkl) pode virar (hkil).

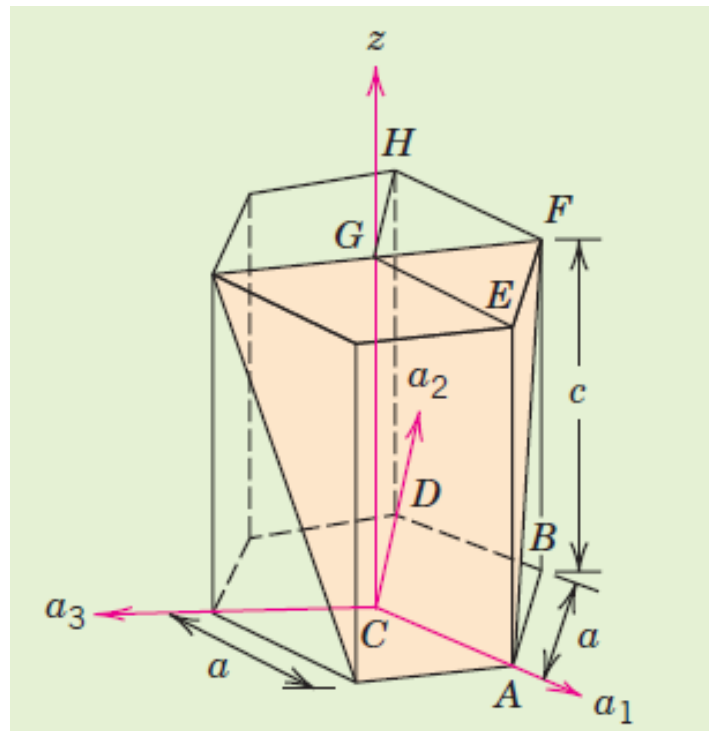


Planos (hkl)

- Defina os índices de Miller para os planos verde e azul ao lado.



Planos Cristalográficos



Use apenas os eixos a_1 , a_2 e c

$$h=1$$

$$k=-1$$

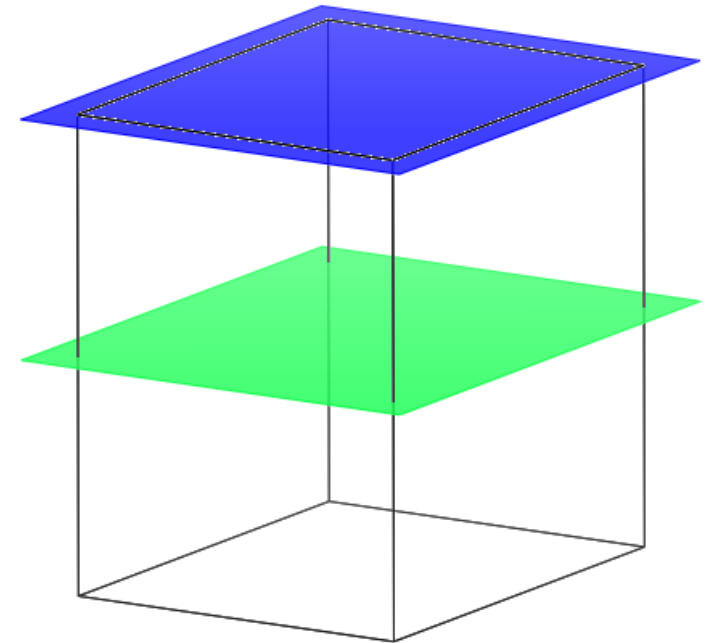
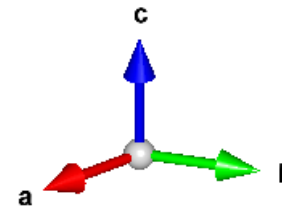
$$l=1$$

$$i=-(1+(-1))=0$$

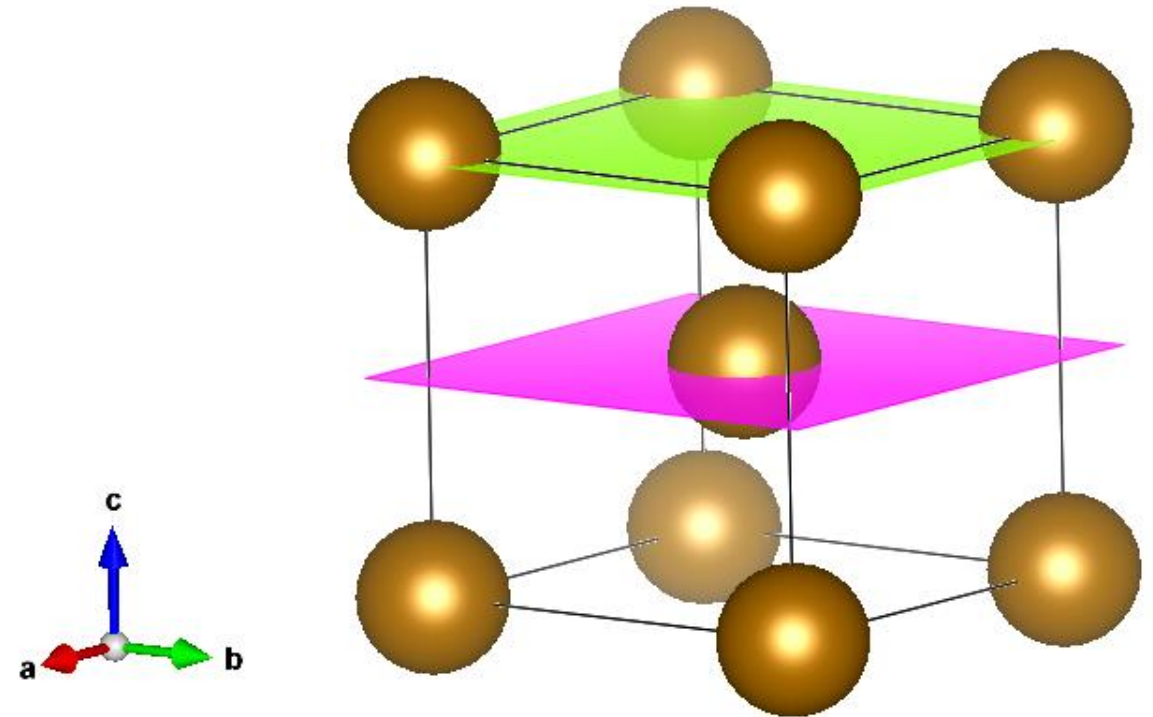
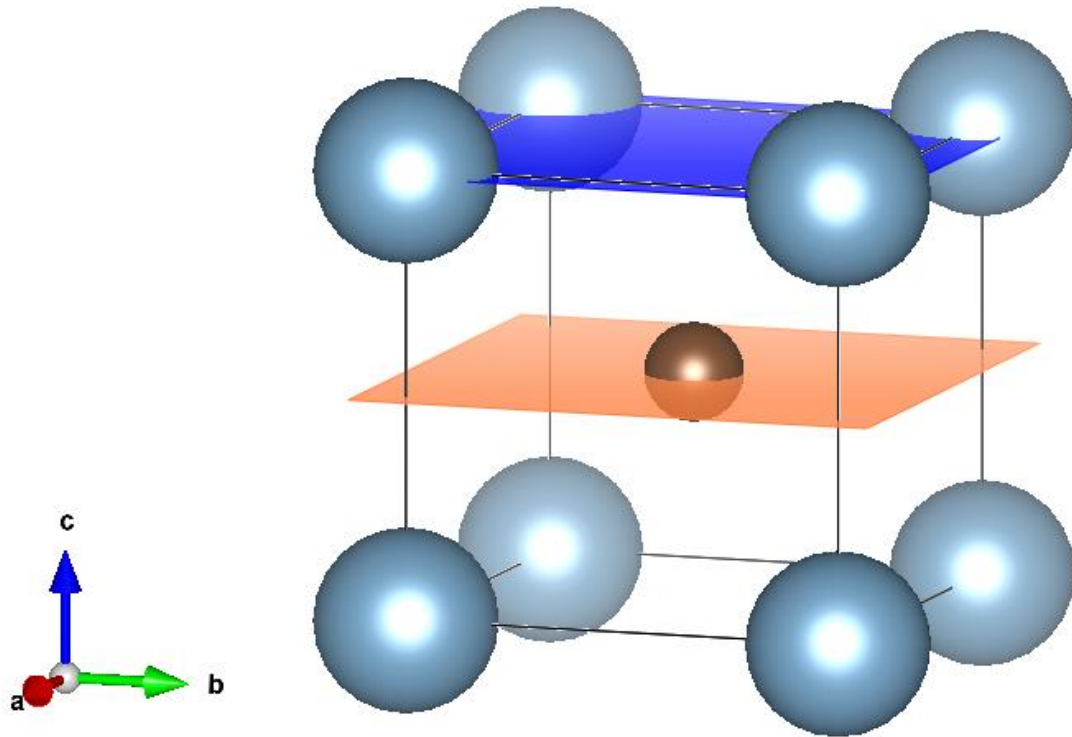
$$\overline{(1101)}$$

Planos (hkl)

- Uma questão: Se na definição dos valores de (hkl) dissemos que são tomados os “*menores múltiplos inteiros dos recíprocos de interceptação*”, qual o motivo então de usarmos os índices (001) para o plano azul e (002) para o plano verde?
- Além disso, já vimos que (hkl) representa não apenas 1, mas sim “*infinitos planos paralelos igualmente espaçados*”.



Planos (hkl)



Planos e direções equivalentes

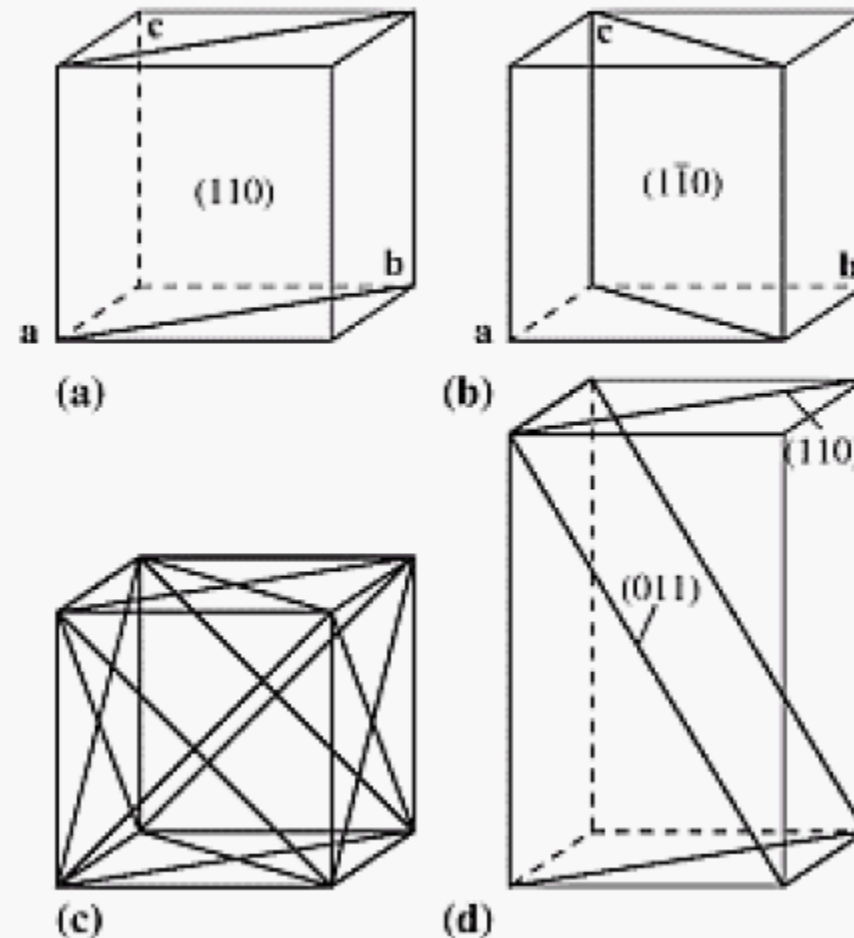


Fig. 5.4. Equivalence of the $\{110\}$ planes in a cubic crystal; in (d) the lattice is tetragonally distorted, and the (110) and (011) planes are no longer equivalent.

Planos e direções equivalentes

Fig. 5.5. The eight $\langle 111 \rangle$ directions in the cubic crystal system.

