ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

Rede recíproca

PMT 3301 – Fundamentos de Cristalografia e Difração;

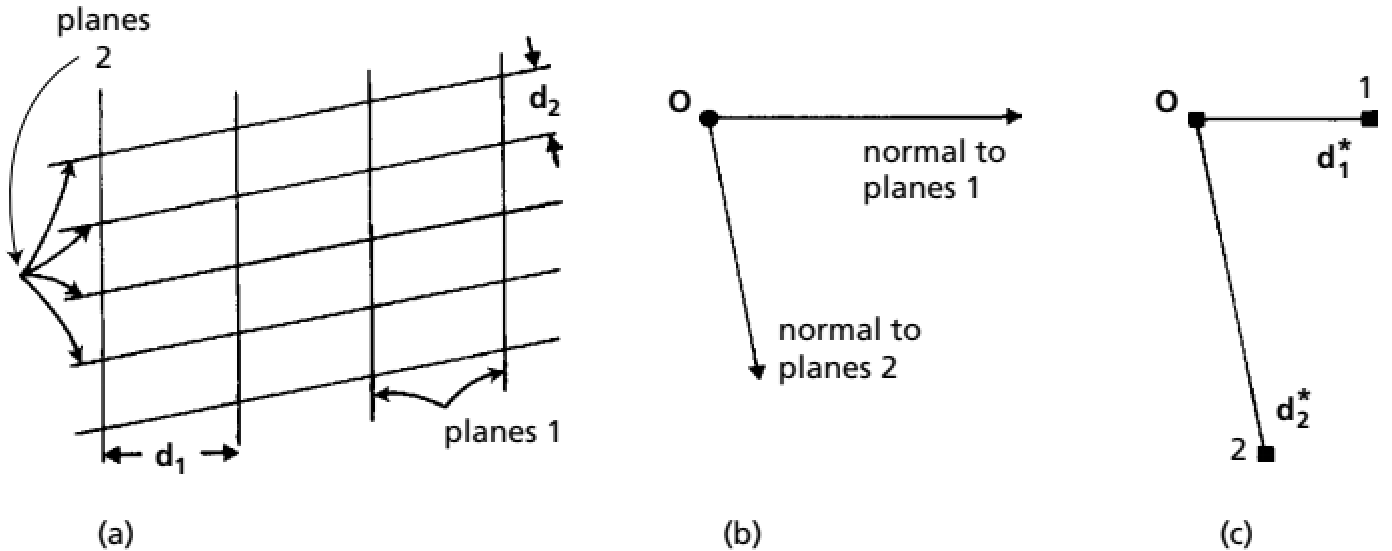
O que é rede recíproca?

- Embora seja um conceito muito abstrato;
- Ele será uma ferramenta simplificadora e que ajudará muito no estudo da difração;
- O espaço real e recíproco são formas complementares de se ver o espaço;
- A distância entre as bolas pode ser interpretada de duas formas:

- Distância entre as bolas em si;
- Bolas por comprimento.

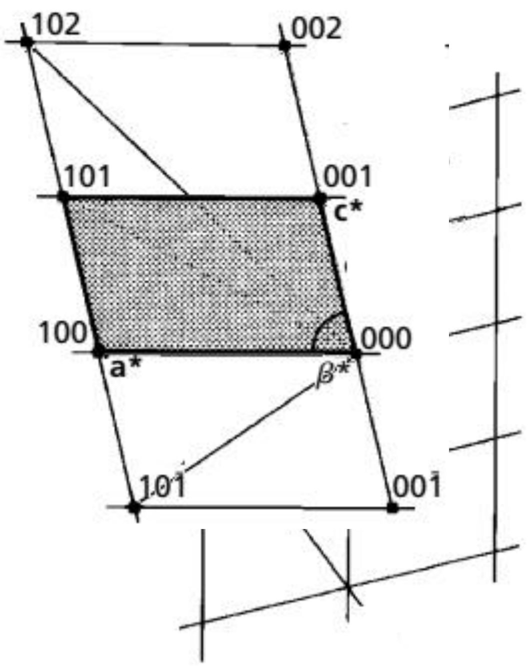
Conceito da rede recíproca

- Considere a rede planar obliqua com duas famílias de planos;
- Planos 1 e Planos 2;
- Para cada plano, é gerado um vetor perpendicular ao plano;
- O comprimento desse vetor é inversamente proporcional a distância interplanar;
- Estes vetores são chamados de “vetores de rede recíproca” – d_1^* e d_2^*;



Conceito da rede recíproca

- Considere a seção da rede monoclínica perpendicular ao eixo saindo do plano;

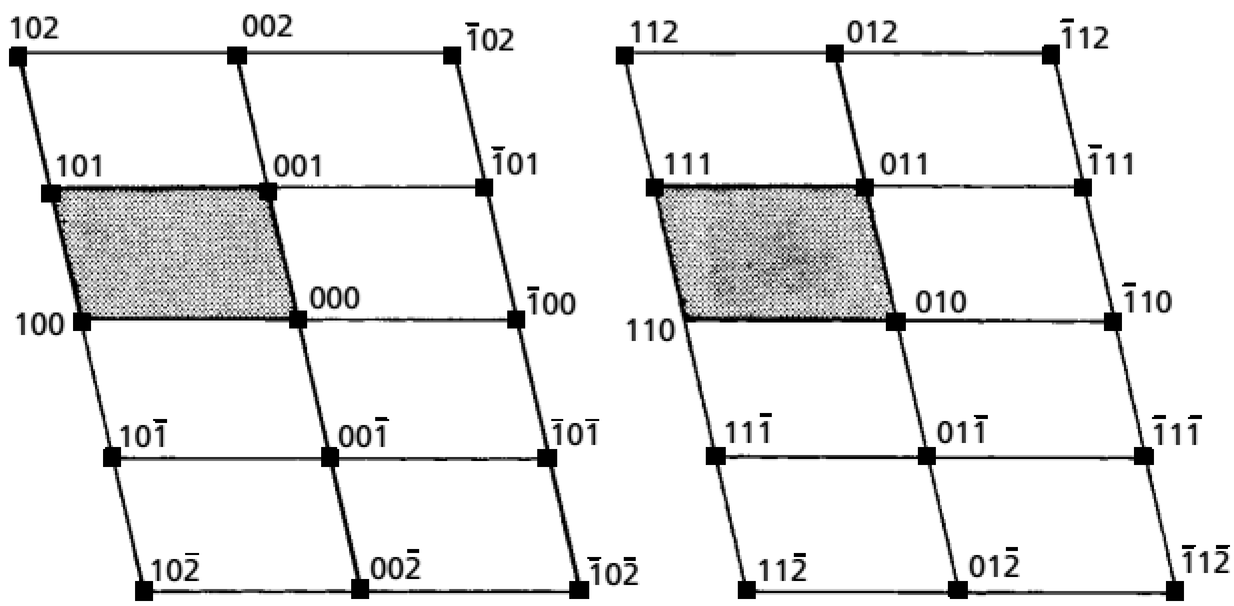


(a)

- Por essa razão todos os planos são definidos como (*h*0*l*);
- A célula unitária está definida pelos vetores a, c e β;
- Para cada plano, é gerado um vetor perpendicular ao plano;
- E o comprimento desse vetor é o inverso da distância interplanar;
- É possível ver que os pontos da rede recíproca também formam uma célula unitária da rede recíproca;

Conceito da rede recíproca

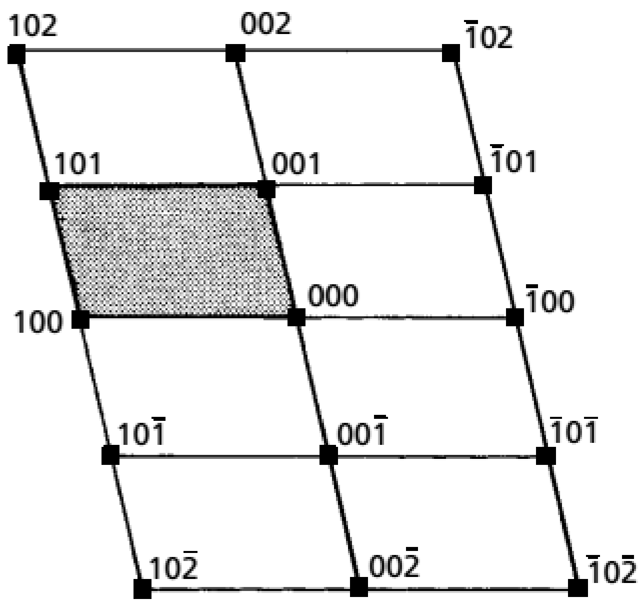
- A geração da rede recíproca pode ser estendido para outros planos;
- Também na seção (*h1l*);



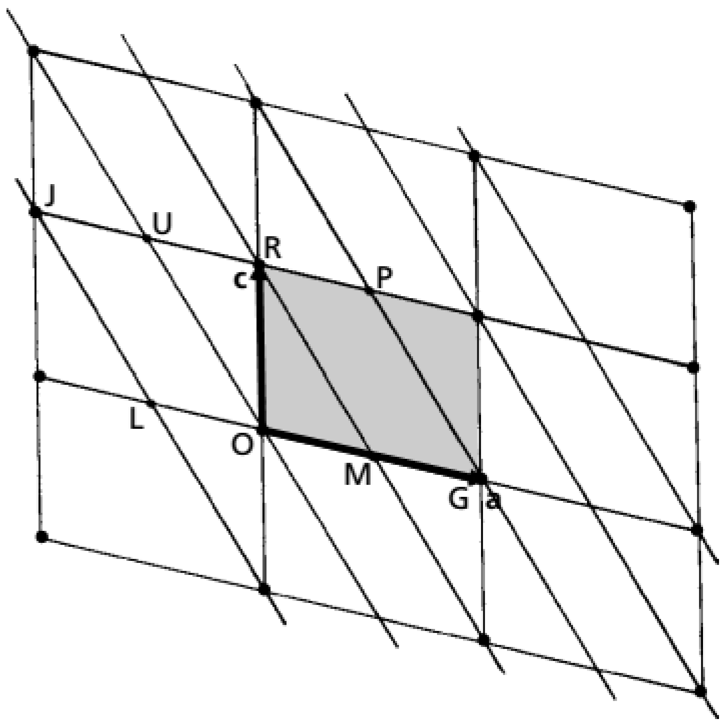
(a) *h0l* section (b) *h1l* section

Principais ferramentas geradas pela rede recíproca

- É possível representar qualquer conjunto de planos de um cristal usando um único ponto da rede recíproca;

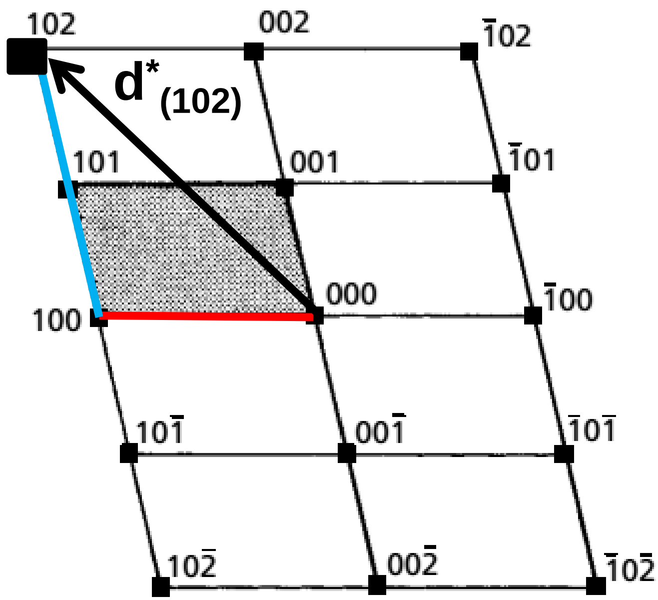


(a) *h0l* section



Principais ferramentas geradas pela rede recíproca

- Os índices dos planos representam as coordenadas dos eixos da rede recíproca;



(a) *h0l* section

$$\mathbf{d}^*_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*.$$

- Por exemplo, os planos (102) pode ser localizada pelo vetor;

- d_{hkl}*= 1a* + 0b* + 2c*;

Tensores e planos

- De maneira análoga ao cálculo de vetor, é possível usar os tensores no espaço recíproco;
- Serve para calcular a distância interplanar ou ângulo entre planos;
- A análise é muito semelhante ao caso das direções cristalográficas;
- O mesmo pode ser representado por:

$$= \begin{bmatrix} a^{*2} & a^* b^* \cos\gamma^* & a^* c^* \cos\beta^* \\ b^* a^* \cos\gamma^* & b^{*2} & b^* c^* \cos\alpha^* \\ c^* a^* \cos\beta^* & c^* b^* \cos\alpha^* & c^{*2} \end{bmatrix},$$

Tensores e planos

- De maneira análoga ao cálculo de vetor, é possível usar os tensores no espaço recíproco;

$$|g_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

$$|g_{hkl}| = \sqrt{g_i^* g_{ij}^* g_j^*}$$

- Sabemos que o módulo de um vetor corresponde ao comprimento do mesmo;
- O módulo do vetor da rede recíproca corresponde ao inverso da distância interplanar;
- O símbolo * corresponde que o vetor está na rede recíproca apenas

Tensores e planos

$$g^*_{\text{cubic}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a^2} \end{bmatrix}$$

$$g^*_{\text{tetragonal}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$$

$$g^*_{\text{orthorhombic}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$$

$$g^*_{\text{hexagonal}} = \begin{bmatrix} \frac{4}{3a^2} & \frac{2}{3a^2} & 0 \\ \frac{2}{3a^2} & \frac{4}{3a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$$

$$g^*_{\text{monoclinic}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2 \sin^2 \beta} & 0 & -\frac{\cos\beta}{ac \sin^2 \beta} \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ -\frac{\cos\beta}{ac \sin^2 \beta} & 0 & \frac{1}{c^2 \sin^2 \beta} \end{bmatrix}$$

Tensores e planos

$$g^*_{\text{triclinic}} = \frac{1}{V^2}\begin{bmatrix} b^2c^2\sin^2\alpha & abc^2\mathcal{F}(\alpha,\beta,\gamma) & ab^2c\mathcal{F}(\gamma,\alpha,\beta) \\ abc^2\mathcal{F}(\alpha,\beta,\gamma) & a^2c^2\sin^2\beta & a^2bc\mathcal{F}(\beta,\gamma,\alpha) \\ ab^2c\mathcal{F}(\gamma,\alpha,\beta) & a^2bc\mathcal{F}(\beta,\gamma,\alpha) & a^2b^2\sin^2\gamma \end{bmatrix}$$

$$W^2 = a^2(1+\cos\alpha - 2\cos^2\alpha)$$

$$g^*_{\text{rhombohedral}} = \frac{1}{W^2}\begin{bmatrix} 1+\cos\alpha & -\cos\alpha & -\cos\alpha \\ -\cos\alpha & 1+\cos\alpha & -\cos\alpha \\ -\cos\alpha & -\cos\alpha & 1+\cos\alpha \end{bmatrix}$$

$$\mathcal{F}(\alpha,\beta,\gamma) = \cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma$$

$$g^*_{\text{triclinic}} = \frac{1}{V^2}\begin{bmatrix} b^2c^2\sin^2\alpha & abc^2\mathcal{F}(\alpha,\beta,\gamma) & ab^2c\mathcal{F}(\gamma,\alpha,\beta) \\ abc^2\mathcal{F}(\alpha,\beta,\gamma) & a^2c^2\sin^2\beta & a^2bc\mathcal{F}(\beta,\gamma,\alpha) \\ ab^2c\mathcal{F}(\gamma,\alpha,\beta) & a^2bc\mathcal{F}(\beta,\gamma,\alpha) & a^2b^2\sin^2\gamma \end{bmatrix}$$

$$V^2 = a^2b^2c^2(1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)$$

Exercício

- Calcule a distância entre os planos (102) para um cristal monoclínico {a = 1, b = 1, c = 1, $\alpha = 90^\circ, \beta = 45^\circ, \gamma = 90^\circ$}.

Exercício

- Calcule para um cristal cúbico {a = 2, b = 2, c = 3, $\alpha = 90°, \beta = 90°, \gamma = 90°$} a distância entre os planos (110);

Exercício

- Também é possível calcular o ângulo entre a normal dos planos;
- Basta determinar o vetor normal ao plano;
- Usa-se a coordenada do plano da rede recíproca.

$$g.h = |\mathrm{g}||\mathrm{h}|\cos\alpha$$

Rede recíproca

Exercício

- Calcule para um cristal monoclínico {a = 4, b = 6, c = 5, $\alpha = 90°, \beta = 120°,$ $= 90°$} o ângulo entre a normal dos planos (110) e (201);