

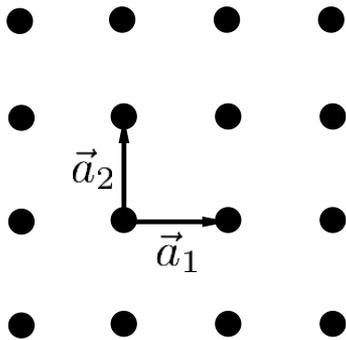
# *Introdução à Física do Estado Sólido*

*Lucy V. C. Assali*

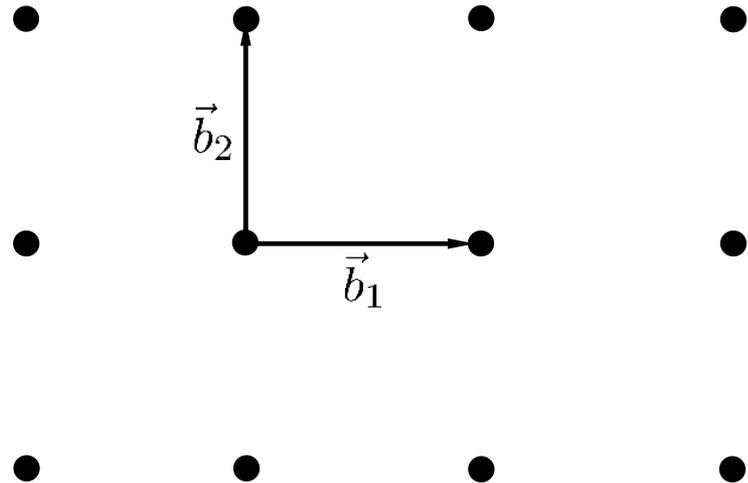
# Rede Recíproca: Zonas de Brillouin

**Exemplo:** Vamos encontrar as zonas de Brillouin de uma rede de Bravais bidimensional quadrada de parâmetro de rede  $a$ :

Vetores primitivos (espaço direto)  $\left\{ \begin{array}{l} \vec{a}_1 = a \hat{i} \\ \vec{a}_2 = a \hat{j} \end{array} \right.$

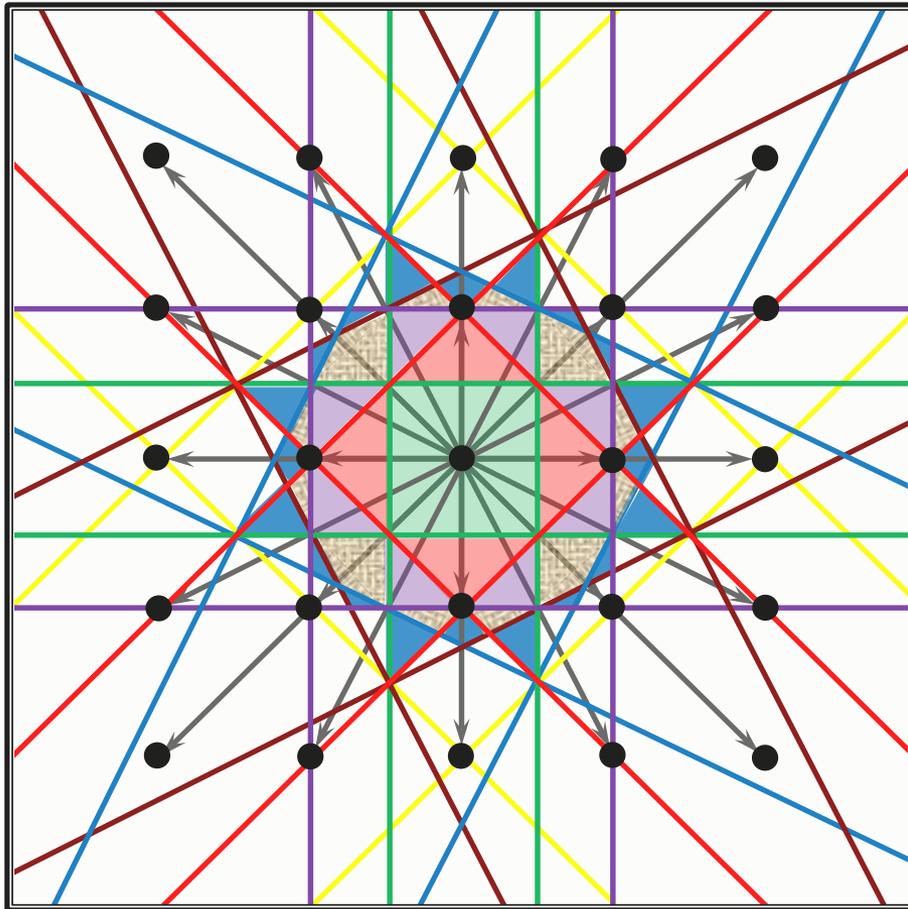


Vetores primitivos (espaço recíproco)  $\left\{ \begin{array}{l} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{i} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{j} \end{array} \right.$



$$A_R = \frac{(2\pi)^2}{a^2}$$

# Rede Recíproca: Zonas de Brillouin



1ª Zona de Brillouin

$$\begin{cases} -\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a} \\ -\frac{\pi}{a} \leq k_y \leq \frac{\pi}{a} \end{cases}$$

1ª Zona de Brillouin

não cruza nenhum plano de Bragg

2ª Zona de Brillouin

cruza um plano de Bragg

3ª Zona de Brillouin

cruza dois planos de Bragg

4ª Zona de Brillouin

cruza três planos de Bragg

5ª Zona de Brillouin

cruza quatro planos de Bragg

Área de cada uma das zonas de Brillouin:  $A = \frac{(2\pi)^2}{a^2}$

# Construção da 1ª Zona de Brillouin

A célula primitiva no espaço recíproco é obtida através da construção de Wigner-Seitz

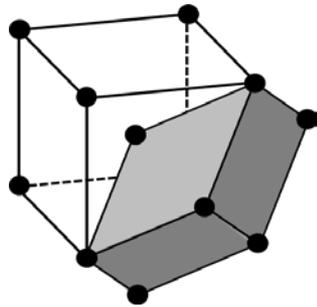


1ª Zona de Brillouin

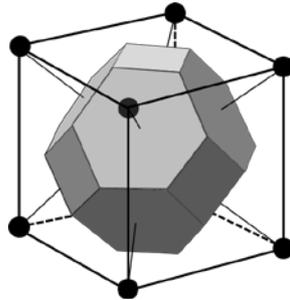


Redes CCC e CFC

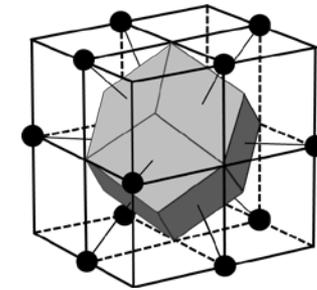
## Rede no espaço real



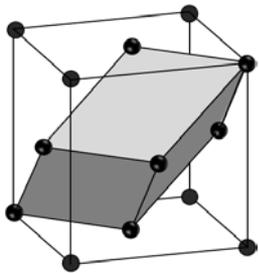
Célula P da CCC



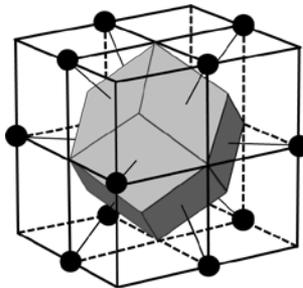
Célula de WS da CCC



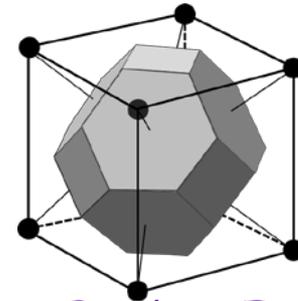
ZB da CCC  
(Célula CFC no espaço k)



Célula P da CFC



Célula de WS da CFC



ZB da CFC  
(Célula CCC no espaço k)

P = Primitiva    WS = Wigner-Seitz    ZB = 1ª Zona de Brillouin

# Análise de Fourier da Base: fator de estrutura e fator de forma atômico

Quando a condição de difração  $\Delta\vec{k} = \vec{G}$  for satisfeita, a amplitude de espalhamento, para um cristal com  $N$  células, é

$$\mathbb{A} = N \int_{\text{Célula}} n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} dV = N \mathcal{S}_{\vec{G}},$$

onde  $\mathcal{S}_{\vec{G}}$  é denominado fator de estrutura e é dado por

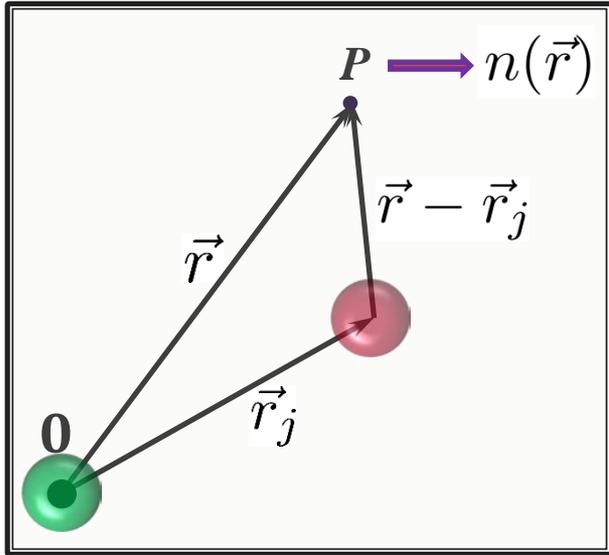
$$\mathcal{S}_{\vec{G}} = \int_{\text{Célula}} n(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} dV$$

contém  $\vec{r} = 0$  em um dos seus vértices

## Considerando a base na estrutura:

Se a base tem mais de um átomo, é útil escrever a densidade eletrônica  $n(\vec{r})$  como uma superposição de funções de densidade eletrônica  $n_j(\vec{r})$ , associadas a cada átomo  $j$  da base. Assim, se  $\vec{r}_j$  for o vetor posição do átomo  $j$ , na célula, então  $n_j(\vec{r} - \vec{r}_j)$  define a contribuição daquele átomo para a densidade eletrônica em  $\vec{r}$ .

# Fator de estrutura e fator atômico



A densidade eletrônica total, em  $\vec{r}$ , devida a todos os átomos da base ( $s$ ), na célula, será:

$$n(\vec{r}) = \sum_{j=1}^s n_j(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

onde  $\vec{r}_j = x_j \vec{a}_1 + y_j \vec{a}_2 + z_j \vec{a}_3$ , com  $0 \leq x_j, y_j, z_j < 1$ .

Com isso, o Fator de Estrutura passa a ser escrito como:

$$S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s \int_{\text{Célula}} n_j(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dV$$

# Fator de estrutura e fator atômico

Definindo  $\vec{\rho} \equiv \vec{r} - \vec{r}_j$  ( $\vec{r} = \vec{\rho} + \vec{r}_j$ ), então o fator de estrutura se escreve

$$S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} \int_{\text{Célula}} n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}} dV$$

e como  $\vec{\rho}$  independe da origem, essa integral é estendida sobre o espaço todo e é chamada fator de forma atômico:

$$f_j = \int n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}} dV$$

e o fator de estrutura fica:

$$S_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$$

# Fator de estrutura e fator atômico

Se o cristal for descrito como formado por planos paralelos, então os vetores de translação do espaço recíproco podem ser escritos em função dos índices de Miller da família de planos  $\{hkl\}$ , e teremos

$$\vec{G} \cdot \vec{r}_j = (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3) \cdot (x_j\vec{a}_1 + y_j\vec{a}_2 + z_j\vec{a}_3) = 2\pi(x_jh + y_jk + z_jl)$$

e o fator de estrutura fica

$$\mathcal{S}(hkl) = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i2\pi(x_jh + y_jk + z_jl)}$$

Em geral, na análise do espectro de difração, utiliza-se, para o cálculo do fator de estrutura, as células de Bravais convencionais. A intensidade da onda espalhada é proporcional a  $|\mathcal{S}|^2 = \mathcal{S}^* \mathcal{S}$  e, assim, o fator de estrutura não precisa, necessariamente, ser um número real. O valor nulo de  $\mathcal{S}$  indica que não há espalhamento para o dado  $\vec{G}$ , mesmo que este vetor de translação seja um vetor da rede recíproca ( $\Delta\vec{k} = \vec{G}$ ). Isto só indica que a amplitude é nula, mesmo para estas reflexões permitidas, pois ao escolhermos a célula convencional, os planos  $\{hkl\}$  não são os da célula primitiva.

# Fator de estrutura e fator atômico

**Exemplo 1:** Vamos encontrar o fator de estrutura de um cristal monoatômico que possui uma rede de Bravais CCC. Em relação à célula convencional, descrevemos este cristal como uma rede cúbica simples com uma base de dois átomos posicionados em:  $\{(0,0,0);(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})\}$ , com o mesmo valor para o fator de forma atômico. Assim, o fator de estrutura fica:

$$S(hkl) = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i2\pi(x_j h + y_j k + z_j \ell)} = f \left\{ 1 + e^{-i\pi(h+k+\ell)} \right\}$$

$$\text{Se } \begin{cases} h + k + \ell = \text{inteiro ímpar} & \implies e^{-i\pi(h+k+\ell)} = -1 \\ h + k + \ell = \text{inteiro par} & \implies e^{-i\pi(h+k+\ell)} = 1 \end{cases}$$

$$\therefore S(hkl) = \begin{cases} 0 & \text{se } h + k + \ell = \text{inteiro ímpar} \\ 2f & \text{se } h + k + \ell = \text{inteiro par} \end{cases}$$

célula convencional cúbica

# Fator de estrutura e fator atômico

O  $\alpha$ -Fe, é um cristal monoatômico que possui uma rede de Bravais CCC. Então, as reflexões permitidas satisfazem a relação

$$S_{hkl} = 2f \text{ se } h + k + l \rightarrow \text{inteiro par}$$

Assim, o espectro de difração deste cristal não contém linhas tais como (100), (300), (111) ou (221). Estão presentes, por exemplo, linhas de difração do tipo (200), (110), (211)... OBS.:  $(hkl)$  da célula convencional

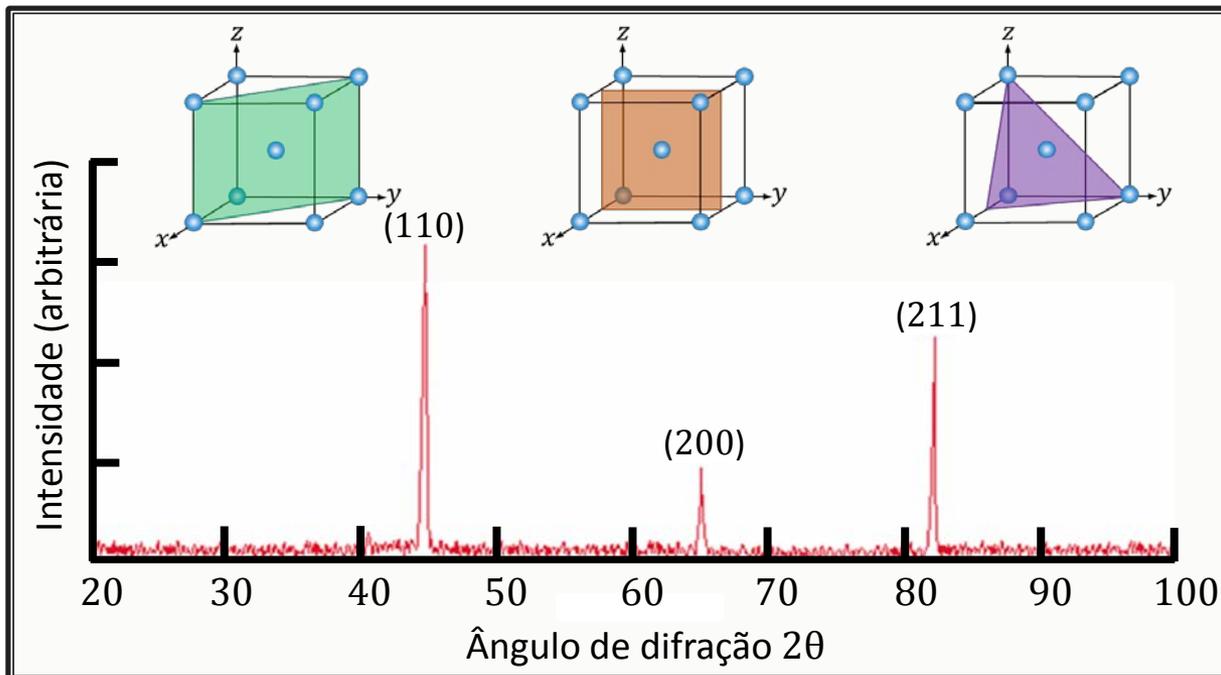
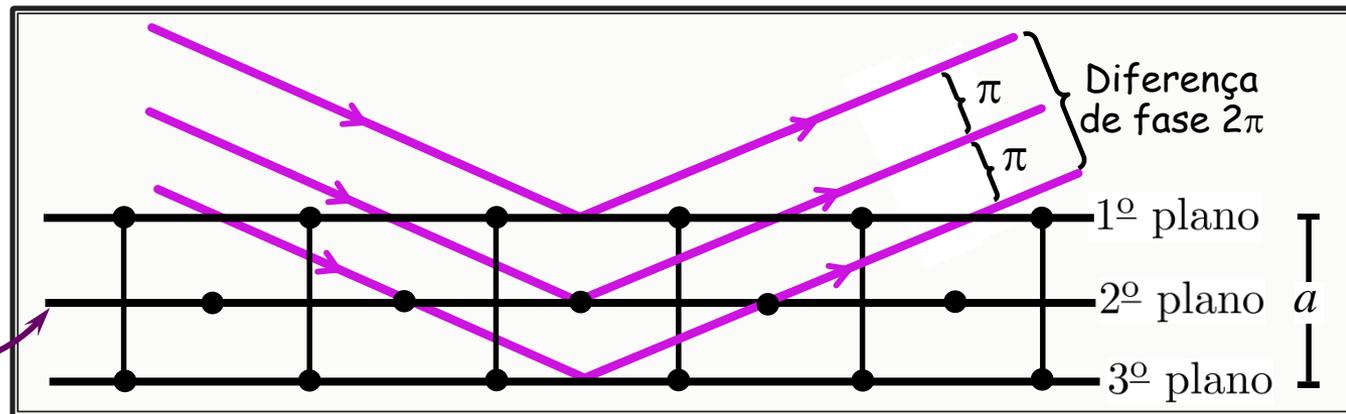
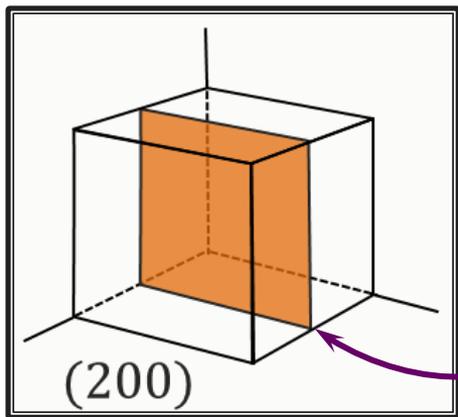


Gráfico da intensidade dos raios-X espalhados, em função do ângulo de difração  $2\theta$ , do  $\alpha$ -Fe. As representações dos planos de Miller associados aos picos de difração estão mostrados.

# Fator de estrutura e fator atômico

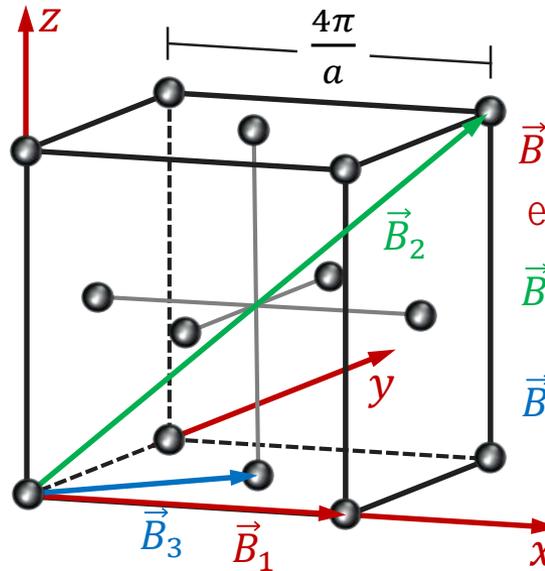
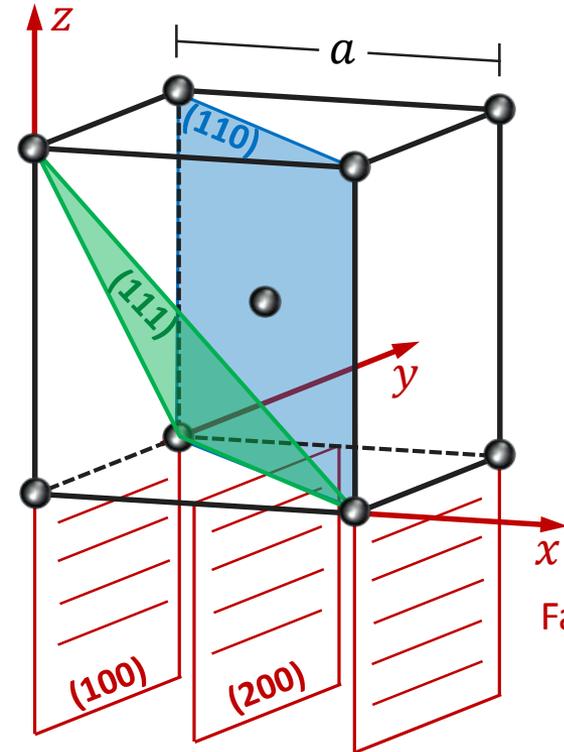
Qual é a interpretação física do resultado que mostra que as reflexões (100) dão intensidades nulas? As reflexões (100) ocorrem normalmente quando reflexões referentes aos planos que definem a célula cúbica simples têm uma defasagem de  $2\pi$ . Na rede CCC, descrita como uma rede CS com uma base de dois átomos, existe um átomo em  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ , definindo um plano intermediário de átomos, o plano (200), rotulado de segundo plano na figura de difração, o qual tem o mesmo poder de difração que os planos das faces do cubo. No entanto, como está situado na metade do caminho entre os planos das faces, ele dá origem a uma reflexão com uma fase retardada de  $\pi$  em relação aos planos das faces, cancelando as contribuições desses planos (amplitude é nula). O cancelamento das reflexões dos planos (100) ocorre na rede CCC porque os planos são idênticos em composição (hcp idem).



# Fator de estrutura

$\alpha$ -Fe: CCC

RR: CFC



$\vec{B}_1 = \frac{4\pi}{a} [100] \rightarrow$  vetor de translação do espaço recíproco, perpendicular a  $\{100\}$

$\vec{B}_2 = \frac{4\pi}{a} [111] \rightarrow$  vetor perpendicular a  $\{111\}$

$\vec{B}_3 = \frac{4\pi}{a} \left[ \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right] \rightarrow$  vetor perpendicular a  $\{110\}$

Família (100):  $d_1 = \frac{2\pi}{|\vec{B}_1|} = \frac{2\pi}{4\pi} a = \frac{a}{2}$  Família (111):  $d_2 = \frac{2\pi}{|\vec{B}_2|} = \frac{2\pi}{4\pi\sqrt{3}} a = \frac{\sqrt{3}}{6} a$

Família (110):  $d_3 = \frac{2\pi}{|\vec{B}_3|} = \frac{2\pi}{2\pi\sqrt{2}} a = \frac{\sqrt{2}}{2} a$

Como seriam indicados estes planos se os índices de Miller se referissem aos vetores primitivos da rede CCC?

$$\left. \begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} [110] \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} [101] \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a} [011] \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \vec{B}_1 &= \frac{4\pi}{a} [100] = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 - \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \{ [110] + [101] + [0\bar{1}\bar{1}] \} = \frac{2\pi}{a} [200] = \frac{4\pi}{a} [100] \\ \vec{B}_2 &= \frac{4\pi}{a} [111] = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \{ [110] + [101] + [011] \} = \frac{2\pi}{a} [222] = \frac{4\pi}{a} [111] \\ \vec{B}_3 &= \frac{4\pi}{a} \left[ \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right] = \frac{2\pi}{a} [110] = \vec{b}_1 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \{100\}_{\text{cartesiana}} \rightarrow \{111\}_{\vec{b}_i} \quad \{111\}_{\text{cartesiana}} \rightarrow \{111\}_{\vec{b}_i} \quad \{110\}_{\text{cartesiana}} \rightarrow \{100\}_{\vec{b}_i}$$

# Fator de estrutura e fator atômico

**Exemplo 2:** Vamos encontrar o fator de estrutura dos cristais de KCl e KBr, que apresentam a estrutura cristalina do NaCl, que é uma rede de Bravais CFC + base  $\{(0,0,0);(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})\}$ . Em relação à célula convencional, descrevemos estes cristais como uma rede cúbica simples com uma base de oito átomos:

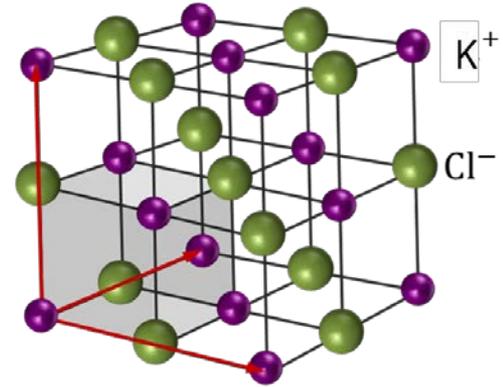
$$\text{K}^+ \begin{cases} (0, 0, 0) \\ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) \\ (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) \\ (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{cases} \quad \text{Br}^- \text{ ou } \text{Cl}^- \begin{cases} (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ (\frac{1}{2}, 0, 0) \\ (0, \frac{1}{2}, 0) \\ (0, 0, \frac{1}{2}) \end{cases}$$


$$\mathcal{S}(hkl) = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i2\pi(x_j h + y_j k + z_j \ell)}$$

# Fator de estrutura e fator atômico

$$S(hkl) = f \left\{ 1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)} \right\} \\ + f' \left\{ e^{-i\pi(h+k+l)} + e^{-i\pi h} + e^{-i\pi k} e^{-i\pi l} \right\}$$

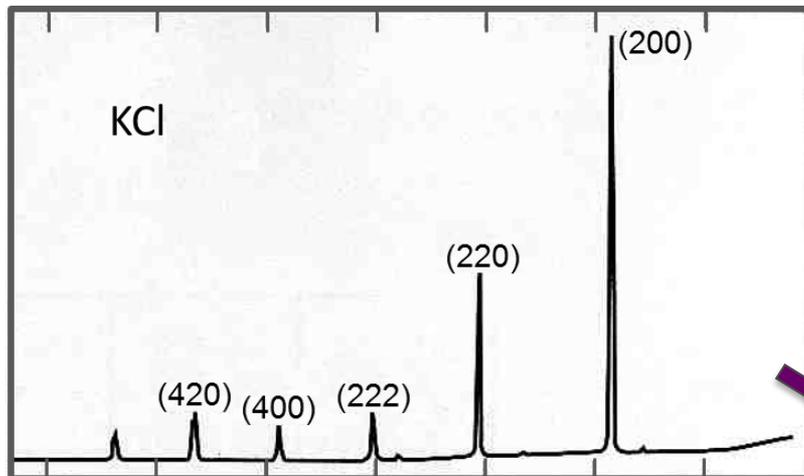
$$\therefore S(hkl) = \begin{cases} 4f + 4f' & \text{se } h, k, l \rightarrow \text{ todos pares} \\ 4f - 4f' & \text{se } h, k, l \rightarrow \text{ todos ímpares} \\ 0 & \text{se } h, k, l \rightarrow \text{ parcialmente pares ou} \\ & \text{parcialmente ímpares} \end{cases}$$



Os fatores atômicos do K<sup>+</sup> e do Br<sup>-</sup> são diferentes. Assim, para o KBr as amplitudes de espalhamento serão nulas para os índices de difração  $h, k, l$  representados por números inteiros ou todos pares ou todos ímpares, com a intensidade dos índices pares maior que a dos índices ímpares.

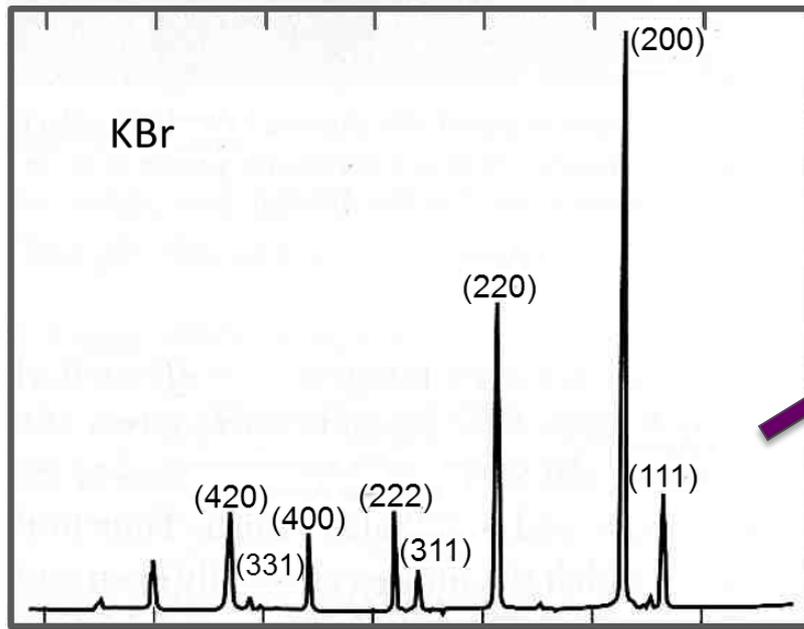
Os fatores atômicos do K<sup>+</sup> e do Cl<sup>-</sup> são iguais. Assim, para o KCl as amplitudes de espalhamento mostram resultados como se a rede fosse monoatômica CS com constante de rede  $a$ . As amplitudes de espalhamento só serão não nulas para os índices de difração  $h, k, l$  representados por números inteiros todos pares.

# Fator de estrutura e fator atômico



Gráficos da intensidade dos raios-X espalhados, em função do ângulo de difração  $2\theta$ , produzidos por pós de cristais de KCl e KBr.

$f_{K^+} = f_{Cl^-} \Rightarrow$  Intensidade  $\neq 0$   
para  $h, k, \ell$  todos pares



$f_{K^+} \neq f_{Br^-} \Rightarrow$  Intensidade  $\neq 0$   
para  $h, k, \ell$  todos pares  
ou todos ímpares

80° 70° 60° 50° 40° 30° 20°  
←  $2\theta$

(C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*)

*Lucy V. C. Assali*

# Fator de Debye-Waller:

## Dependência das linhas de reflexão com a temperatura

**Aumento da temperatura**  $\Rightarrow$  intensidade dos feixes refletidos decresce enquanto a largura angular da linha não se altera  $\Rightarrow$  agitação térmica ou deslocamento dos átomos da rede.

**Considerar**  $\Rightarrow$  a posição do átomo, nominalmente situado em  $\vec{r}_j$ , em uma dada temperatura  $T$ , varia de acordo com  $\vec{r}_j = \vec{r} + \vec{u}(t)$ , onde  $\vec{u}(t)$  são as flutuações térmicas, aleatórias, da posição de equilíbrio do átomo, em função do tempo. Assim, a média térmica do fator de estrutura terá termos da forma:

$$S_{\vec{g}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} \underbrace{\langle e^{-i\vec{G}\cdot\vec{u}} \rangle}_{\text{média em temperatura}}$$

desenvolvendo a exponencial em série:  $\langle e^{-i\vec{G}\cdot\vec{u}} \rangle = 1 - i \underbrace{\langle \vec{G}\cdot\vec{u} \rangle}_{=0} - \frac{1}{2} \underbrace{\langle (\vec{G}\cdot\vec{u})^2 \rangle}_{= G^2 \langle u^2 \rangle \langle \cos^2 \theta \rangle} + \dots$   
 $= \frac{1}{3} \langle u^2 \rangle G^2$

Deslocamento médio quadrático de um átomo

$$\therefore \langle e^{-i\vec{G}\cdot\vec{u}} \rangle = 1 - \frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2 + \dots \equiv e^{-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2}$$

# Fator de Debye-Waller:

## Dependência das linhas de reflexão com a temperatura

Como a intensidade  $I$  da onda espalhada é proporcional a  $|\mathcal{S}_{\vec{g}}|^2$ , temos:

$$I = I_0 e^{-\frac{1}{3}\langle u^2 \rangle G^2}$$

fator de Debye-Waller

intensidade da onda espalhada pela rede rígida

Classicamente, a energia potencial média de um oscilador harmônico em 3D é:  
 $\langle U \rangle = \frac{3}{2}k_B T$ . Assim:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2}C\langle u^2 \rangle = \frac{1}{2}M\omega^2\langle u^2 \rangle = \frac{3}{2}k_B T \Rightarrow \langle u^2 \rangle = \frac{3k_B T}{C} = \frac{3k_B T}{M\omega^2}$$

onde  $C$  é a constante de força do oscilador,  $M$  é a massa do átomo e  $\omega$  é a frequência de oscilação, com  $\omega = \sqrt{C/M}$ . Com isso, a intensidade do feixe espalhado fica:

$$I = I_0 e^{-\left[\frac{k_B T}{M\omega^2}\right]G^2}$$

intensidade da linha decresce com o aumento da temperatura

# Fator de Debye-Waller:

## Dependência das linhas de reflexão com a temperatura

A relação  $I/I_0$  é chamada fator de amortecimento, ou seja, se ele for igual à unidade significa que toda onda incidente é refletida. Se  $I/I_0 = 0,9$  significa que 90% da intensidade é a da difração coerente ou do espalhamento elástico nas direções bem definidas pela relação de Bragg. Os 10% de intensidade perdida é devido a espalhamentos inelásticos, ou fotoionização (um fóton de raio-X é absorvido e um elétron é emitido) ou efeito Compton (um fóton de raio-X é espalhado inelasticamente por um elétron; o fóton perde energia e um elétron é emitido).

**Exemplo:** Seja uma rede cúbica, com  $a \sim 3,15 \text{ \AA}$  e  $C \sim 10 \text{ eV/\AA}^2$ . Para  $\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(100)$  temos:

$$G^2 = \frac{(2\pi)^2}{a^2} = \left[ \frac{6,38}{3,15} \right]^2 \approx 4 \quad e \quad k_B T \approx \frac{1}{40} \text{ eV}$$

Então

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\frac{k_B T}{C} G^2} = e^{-\frac{1}{400} (4)} = e^{-\frac{1}{100}} \approx 1 - \frac{1}{100} \sim 0,99$$

99% do feixe é espalhado elasticamente e 1% inelasticamente

$$\text{Se } \vec{G} = \frac{2\pi}{a}(222) \Rightarrow \frac{I}{I_0} = e^{-\frac{k_B T}{C} G^2} = e^{-\frac{1}{400} (40)} \approx 1 - \frac{1}{10} \sim 0,90$$

Quanto maior  $|\vec{G}|$ , maior o amortecimento na onda espalhada.

# Fator de Debye-Waller:

O fator de Debye-Waller (amortecimento =  $I/I_0$ ) correspondente a reflexões em planos determinados por um certo vetor  $\vec{G}$  é 0,7 para  $T \neq 0$  e 0,9 para  $T = 0$ . Determinar o valor do amortecimento quando: a) a temperature for triplicada; b) o módulo de  $\vec{G}$  for duplicado para  $T = 0$ .

Se tratarmos o oscilador harmônico quanticamente, mesmo a  $T = 0$  existe deslocamento dos átomos (energia de ponto zero  $\Rightarrow$  OH tridimensional, estado fundamental:  $E = \frac{3}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} M \omega^2 \langle u^2 \rangle \Rightarrow \langle u^2 \rangle = \frac{3\hbar}{M\omega}$ ) e o fator de Debye-Waller fica:

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\frac{1}{3} \langle u^2 \rangle G^2} = e^{-\left[ \frac{\hbar}{M\omega} \right] G^2}$$

$$\text{a) } \frac{I}{I_0} = e^{-\left[ \frac{k_B T}{M\omega^2} \right] G^2} \Rightarrow e^{-\beta T} = 0,7 \text{ então}$$

$$\Rightarrow \left( \frac{I}{I_0} \right)' = e^{-\beta T'} = e^{-3\beta T} = (e^{-\beta T})^3 = (0,7)^3 = 0,343$$

$$\text{b) } \frac{I}{I_0} = e^{-\left[ \frac{\hbar}{2M\omega} \right] G^2} \Rightarrow e^{-\alpha G^2} = 0,9 \text{ então}$$

$$\Rightarrow \left( \frac{I}{I_0} \right)' = e^{-\alpha (G')^2} = e^{-\alpha (2G)^2} = (e^{-\alpha G^2})^4 = (0,9)^4 = 0,656$$

# Fator de forma atômico

O fator de forma atômico  $f_j$  é uma medida do poder de espalhamento do átomo  $j$  na célula. O valor de  $f$  depende do número e da distribuição de elétrons do átomo da base, assim como do comprimento de onda e do ângulo de espalhamento da radiação. Um método clássico para a determinação do fator de espalhamento leva em conta os efeitos de interferência da radiação com a densidade eletrônica do sólido. Vimos que

$$f_j = \int n_j(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} dV$$

onde a integração é estendida sobre a concentração eletrônica de um único átomo (distribuição esférica simétrica). Supondo que o vetor posição faça um ângulo  $\beta$  com o vetor de translação do espaço recíproco, temos

$$f_j = 2\pi \int n_j(r)r^2 dr \int_{-1}^1 e^{-iGr \cos \beta} d(\cos \beta) = 4\pi \int n_j(r)r^2 \frac{\text{sen}(Gr)}{Gr} dr$$

Supondo que a densidade eletrônica total esteja concentrada em  $r = 0$ , somente  $Gr = 0$  contribui para o integrando. Neste limite temos que  $\text{sen}(Gr)/(Gr) = 1$  e  $f_j = Z$  (número atômico do átomo).

# Fator de forma atômico

Outro modo de mostrar que  $f_j = Z$ : Suponha que a distribuição eletrônica é esférica simétrica e que o átomo pode ser representado como uma esfera pontual em  $r = 0$ :  $n(\vec{r}) = Z\delta(0)$  e  $e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} = 1$ , levando à  $f = \int Z\delta(0)dV = Z$ .

Como o fator de forma atômico descreve a razão da amplitude da radiação espalhada pela real distribuição eletrônica de um átomo da célula, o resultado  $f_j = Z$  indica que ele pode ser descrito como a razão da amplitude da radiação espalhada por um elétron localizado naquele ponto. Assim, a distribuição eletrônica total em um sólido, como vista pela difração de raios-X, é muito próxima daquela dos respectivos átomos livres. Esta afirmação não significa que os elétrons de valência dos átomos não sofram uma redistribuição quando formam os cristais. Ela só significa que as intensidades das reflexões dos raios-X são muito bem representadas pelos valores dos fatores de forma dos átomos livres e não são muito sensíveis às redistribuições dos elétrons.

# RESUMO

1. Os vetores primitivos da rede recíproca são:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{|\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|} ; \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{|\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|} ; \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{|\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|} .$$

2. Um vetor de translação da rede recíproca possui a forma

$$\vec{G} = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3 , \text{ com } g_1, g_2, g_3 = \text{números inteiros.}$$

3. Várias formulações da condição de Bragg:

$$2d \sin \theta = m\lambda ; \quad \Delta \vec{k} = \vec{G} ; \quad 2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2 .$$

4. Condições de Laue:

$$\vec{a}_1 \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi g_1 ; \quad \vec{a}_2 \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi g_2 ; \quad \vec{a}_3 \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi g_3 .$$

# RESUMO

5. A amplitude espalhada na direção  $\Delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$  é proporcional ao fator de estrutura:

$$\mathcal{S}_{\vec{G}} = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} = \sum_{j=1}^s f_j e^{-i2\pi(x_j h + y_j k + z_j \ell)}$$

onde  $s$  é o número de átomos da base e  $f_j$  é o fator de forma atômico do  $j$ 'ésimo átomo.

6. Qualquer função invariante sob translação da rede pode ser desenvolvida numa série de Fourier do tipo

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

7. A primeira zona de Brillouin é a célula primitiva de Wigner-Seitz da rede recíproca. Somente ondas cujo vetor de onda  $\vec{k}$ , desenhado a partir da origem, que termine na superfície da zona de Brillouin poderão ser difratadas pelo cristal.