Red recíproca

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

Definición

Pese al rol central de las redes de Bravais en la descripción de la estructura cristalina, los estudios analíticos de sus propiedades se llevan a cabo mayoritariamente en lo que se conoce como “red recíproca” (RR).
Cada red de Bravais determina un RR única.
Cuando se trabaja en la red recíproca, a la red de Bravais que la genera se la suele llama su “red directa” (RD).

Red recíproca

Definición

Dada una red de Bravais (*directa*) de puntos $\mathbf{R}$, su red recíproca es el conjunto de vectores $\mathbf{K}$ que cumplen:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1, \qquad \forall \mathbf{R} \in \mathrm{RD}.$$

RR como red de Bravais

Definición

Dada una red de Bravais (*directa*) de puntos $\mathbf{R}$, su red recíproca es el conjunto de vectores $\mathbf{K}$ que cumplen:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1, \qquad \forall \mathbf{R} \in \mathrm{RD}. \tag{1}$$

<u>Propiedad</u>: la Red Recíproca es una red de Bravais.

Si $\mathbf{a_1}$, $\mathbf{a_3}$, $\mathbf{a_3}$ son los vectores primitivos de la RD, entonces la RR puede ser generada por los vectores:

$$\mathbf{b_1} = 2\pi\frac{\mathbf{a_2}\times\mathbf{a_3}}{\mathbf{a_1}\cdot(\mathbf{a_2}\times\mathbf{a_3})} \qquad \mathbf{b_2} = 2\pi\frac{\mathbf{a_3}\times\mathbf{a_1}}{\mathbf{a_1}\cdot(\mathbf{a_2}\times\mathbf{a_3})}$$

$$\mathbf{b_3} = 2\pi\frac{\mathbf{a_1}\times\mathbf{a_2}}{\mathbf{a_1}\cdot(\mathbf{a_2}\times\mathbf{a_3})}$$

$$(\mathbf{b_i}\cdot\mathbf{a_j} = 2\pi\delta_{ij})$$

RR como red de Bravais

Definición

Dada una red de Bravais (*directa*) de puntos $\mathbf{R}$, su red recíproca es el conjunto de vectores $\mathbf{K}$ que cumplen:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1, \qquad \forall \mathbf{R} \in \mathrm{RD}. \qquad (1)$$

<u>Propiedad</u>: la Red Recíproca es una red de Bravais.
Si $\mathbf{K} = k_1\mathbf{b_1} + k_2\mathbf{b_2} + k_3\mathbf{b_3}$ y $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a_1} + a_2\mathbf{a_2} + n_3\mathbf{a_3}$:

$$\mathbf{K}\cdot\mathbf{R} = 2\pi(k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3)$$

Como los $n_i \in \mathbb{Z}$, los únicos vectores que cumplen (1) son:

$$\mathbf{K} = k_1\mathbf{b_1} + k_2\mathbf{b_2} + k_3\mathbf{b_3},\ \ k_i \in \mathbb{Z} \qquad (2)$$

RR como red de Bravais

Definición

Dada una red de Bravais (*directa*) de puntos $\mathbf{R}$, su red recíproca es el conjunto de vectores $\mathbf{K}$ que cumplen:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1, \qquad \forall\mathbf{R} \in \mathrm{RD}. \tag{1}$$

<u>Propiedad</u>: la Red Recíproca es una red de Bravais.

$$\mathbf{K} = k_1\mathbf{b_1} + k_2\mathbf{b_2} + k_3\mathbf{b_3},\ k_i \in \mathbb{Z} \tag{2}$$

Además si $\mathbf{K_1}$ y $\mathbf{K_2} \in \mathrm{RR}$, entonces

$$e^{i(\mathbf{K_1}+\mathbf{K_2})\cdot\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{K_1}\cdot\mathbf{R}}e^{i\mathbf{K_2}\cdot\mathbf{R}} = 1$$

$$\Rightarrow \mathbf{K_1} + \mathbf{K_2} \in \mathrm{RR} \tag{3}$$

RR como red de Bravais

Definición

Dada una red de Bravais (*directa*) de puntos $\mathbf{R}$, su red recíproca es el conjunto de vectores $\mathbf{K}$ que cumplen:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1, \qquad \forall\mathbf{R} \in \mathrm{RD}. \tag{1}$$

<u>Propiedad</u>: la **Red Recíproca es una red de Bravais**.

$$\mathbf{K} = k_1\mathbf{b_1} + k_2\mathbf{b_2} + k_3\mathbf{b_3},\ \ k_i \in \mathbb{Z} \tag{2}$$

$$\mathbf{K_1} + \mathbf{K_2} \in \mathrm{RR} \tag{3}$$

¿Cuál es la RR de la RR? Respuesta en la guía de ejercicios.

Vectores de la RR

Definición

Dada una red de Bravais (*directa*) de puntos $\mathbf{R}$, su red recíproca es el conjunto de vectores $\mathbf{K}$ que cumplen:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1, \qquad \forall\mathbf{R} \in \mathrm{RD}. \qquad (1)$$

Caso 2D: ¿cómo generar los vectores primitivos de la RR?
La condición válida en todos los casos es:

$$\mathbf{b_i} \cdot \mathbf{a_j} = 2\pi\delta_{ij}$$

Alternativamente, se puede obtener a partir del resultado en 3D, tomando $\mathbf{a_3} = \lim_{c\to\infty} c\hat{z}$

$$\mathbf{b_1} = 2\pi\frac{\mathbf{a_2}\times\hat{z}}{\mathbf{a_1}\cdot(\mathbf{a_2}\times\hat{z})} \qquad \mathbf{b_2} = 2\pi\frac{\hat{z}\times\mathbf{a_1}}{\mathbf{a_1}\cdot(\mathbf{a_2}\times\hat{z})}$$

Red recíproca

Ejemplos

SC, de lado a → SC, de lado $(2\pi)/a$

$$\mathbf{a_i} = a\hat{x}_i \qquad \mathbf{b_i} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}_i$$

FCC, de lado a → BCC, de lado $(4\pi)/a$

$$\mathbf{a_1} = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \qquad \mathbf{b_1} = \left(\frac{4\pi}{a}\right)\frac{1}{2}(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x})$$

$$\mathbf{a_2} = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}) \qquad \mathbf{b_2} = \left(\frac{4\pi}{a}\right)\frac{1}{2}(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y})$$

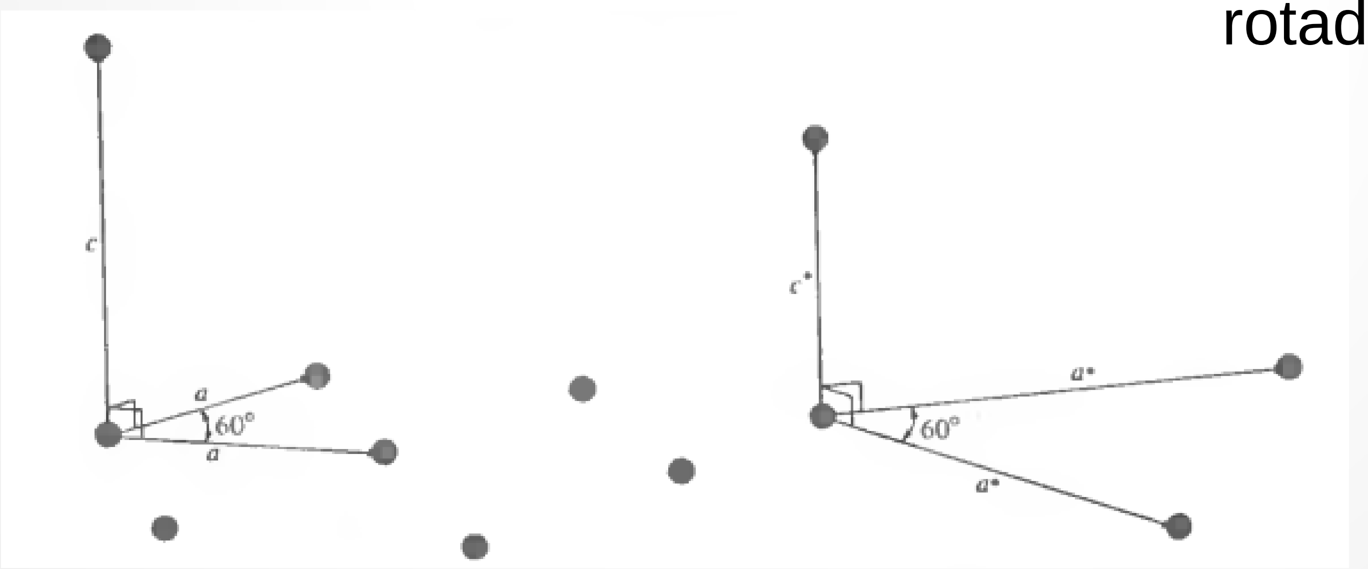
$$\mathbf{a_3} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \qquad \mathbf{b_3} = \left(\frac{4\pi}{a}\right)\frac{1}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

Red recíproca

Ejemplos

BCC, de lado a → FCC, de lado $(4\pi)/a$

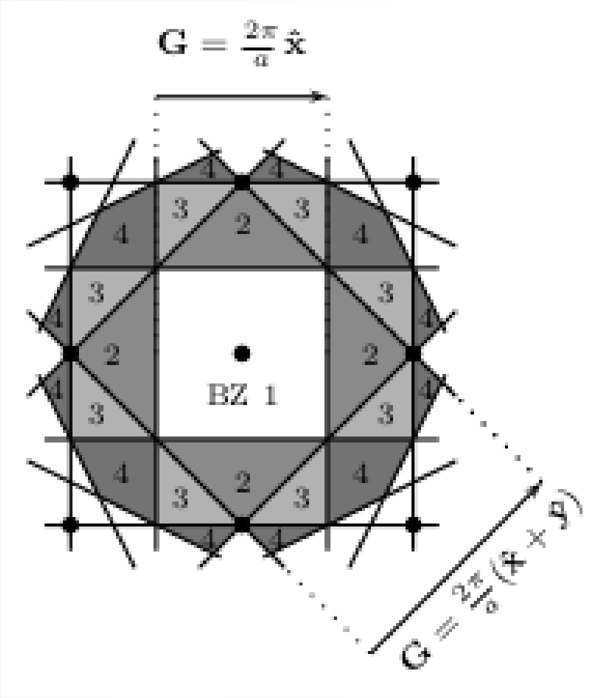
SH, de lado a y altura c → SH, de lado $(4\pi)/(\sqrt{3}a)$ y altura $(4\pi)/c$ rotada 30°

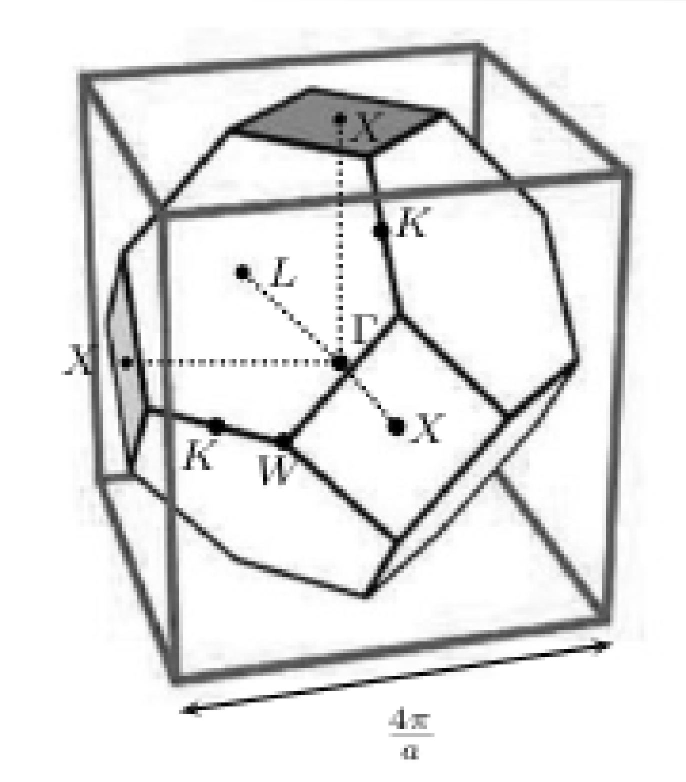


Celda primitiva en RR

Zonas de Brillouin

La celda de Wigner-Seitz de la RR se conoce como la *“primera zona de Brillouin”*.
Como su nombre sugiere existen la segunda, tercera, etc.

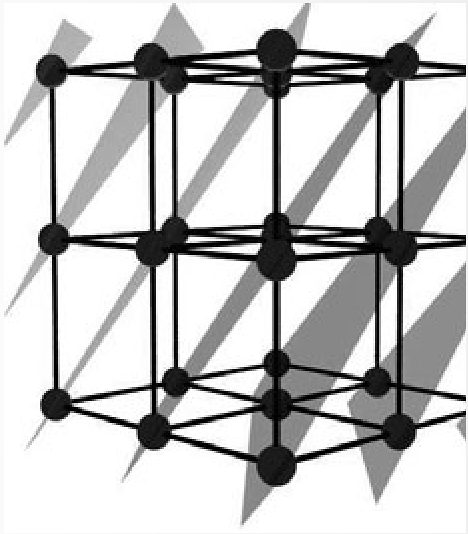




Planos en la RD

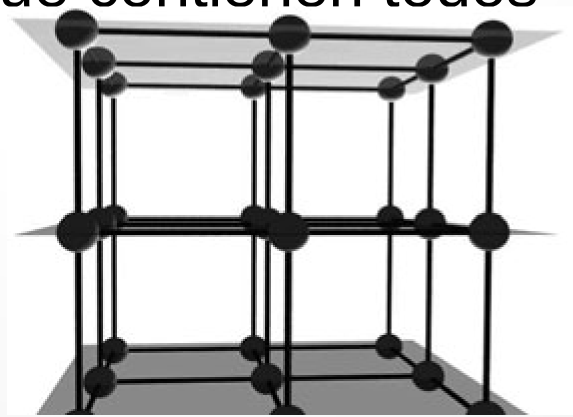
Definiciones

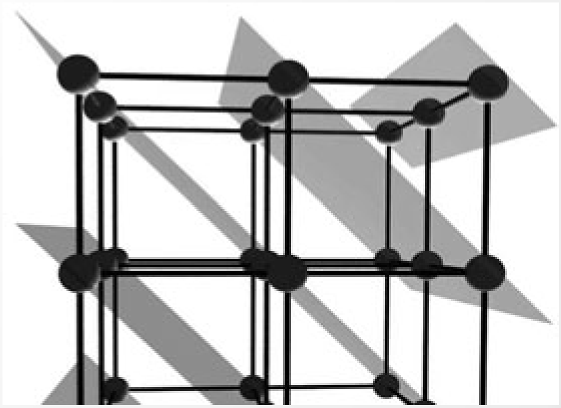
Existe una relación directa entre los vectores de la RR y planos en la RD. Esto es de importancia práctica en los estudios de difracción de Rx en sólidos.



Plano de la red: es cualquier plano en la RD que contiene al menos 3 puntos de la red no colineales.

Familia de planos: es un conjunto de planos paralelos, equiespaciados, que contienen todos los puntos de la RD.





Planos en la RD

Planos de la RD y vectores de la RR

Para cualquier familia de planos de red separados por una distancia *d*, existen vectores de RR perpendiculares a los planos, siendo el más corto de una longitud $2\pi/d$.
De la misma manera, para cualquier vector de la RR $\mathbf{K}$, existe una familia de planos normal al mismo y separados por una distancia *d*, donde $2\pi/d$ es la longitud del vector más corto de la RR paralelo a $\mathbf{K}$.

Planos en la RD

Planos de la RD y vectores de la RR

Para cualquier familia de planos de red separados por una distancia *d*, existen vectores de RR perpendiculares a los planos, siendo el más corto de una longitud $2\pi/d$.

Consideremos el vector perpendicular a los planos, $\mathbf{K} = \frac{2\pi}{d}\hat{n}$.
¿Es un vector de la RR?
Para cualquiera de los planos $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = \mathrm{cte}$, en particular para el plano que contiene el origen $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1$.
Para puntos en otro plano:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} = e^{i\frac{2\pi}{d}\hat{n}\cdot(\mathbf{R}'-\mathbf{R})} = e^{i2\pi m} = 1 = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}'}$$

Por lo tanto es un vector de la RR.

Planos en la RD

Planos de la RD y vectores de la RR

Para cualquier familia de planos de red separados por una distancia *d*, existen vectores de RR perpendiculares a los planos, siendo el más corto de una longitud $2\pi/d$.

Es un vector de la RR.
Si fuera más corto, los planos definidos estarían a mayor distancia entre si. Por lo tanto,

$$\mathbf{K}_{\min} = \frac{2\pi}{d}\hat{n}.$$

La distancia *d*, la “longitud de onda” es la separación entre planos, “planos de fase constante” (onda plana).

Planos en la RD

Planos de la RD y vectores de la RR

De la misma manera, para cualquier vector de la RR $\mathbf{K}$, existe una familia de planos normal al mismo y separados por una distancia *d*, donde $2\pi/d$ es la longitud del vector más corto de la RR paralelo a $\mathbf{K}$.

Planos en la RD

Planos de la RD y vectores de la RR

De la misma manera, para cualquier vector de la RR $\mathbf{K}$, existe una familia de planos normal al mismo y separados por una distancia *d*, donde $2\pi/d$ es la longitud del vector más corto de la RR paralelo a $\mathbf{K}$.

Consideremos la familia de planos definidos por:

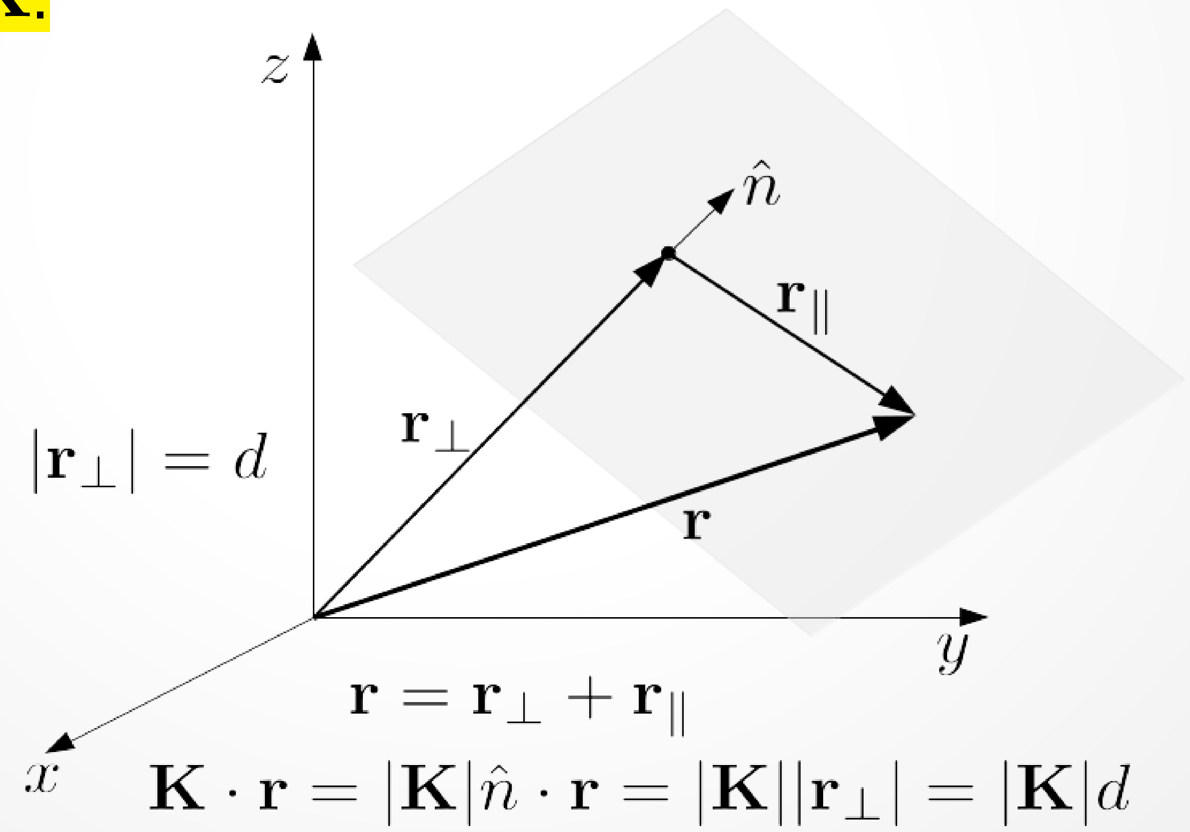
$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} = 2\pi m, \qquad m \in \mathbb{Z}$$

Como $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = 1$, todos los puntos de la RD están incluidos en la familia de planos, pero puede haber planos que no sean planos de red.

Planos en la RD

Planos de la RD y vectores de la RR

De la misma manera, para cualquier vector de la RR $\mathbf{K}$, existe una familia de planos normal al mismo y separados por una distancia *d*, donde $2\pi/d$ es la longitud del vector más corto de la RR paralelo a $\mathbf{K}$.



Planos en la RD

Planos de la RD y vectores de la RR

De la misma manera, para cualquier vector de la RR $\mathbf{K}$, existe una familia de planos normal al mismo y separados por una distancia *d*, donde $2\pi/d$ es la longitud del vector más corto de la RR paralelo a $\mathbf{K}$.

Para que ***solo*** estén incluidos puntos de las familias de planos de la RD, además se debe cumplir que la distancia entre los planos sea *d*, así si tomamos dos puntos en planos adyacentes, queremos que

$$2\pi = \mathbf{K} \cdot (\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}) = |\mathbf{K}|\hat{n} \cdot (\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}) = |\mathbf{K}|d$$

$$\implies d = \frac{2\pi}{|\mathbf{K}|} \qquad \implies \mathbf{K}_{\min} = \frac{2\pi}{d}\hat{n}$$

Planos en la RD

Índices de Miller

La correspondencia entre vectores de la RR y las familias de planos de red permiten especificar las orientaciones de los planos utilizando el vector de RR más corto: *índices de Miller*.
Los índices de Miller de un plano de red son las coordenadas del vector de la RR más corto perpendicular al plano, así un plano de índices $h,\ k,\ l$ es normal al vector $h\mathbf{b_1} + k\mathbf{b_2} + l\mathbf{b_3}$.

Los índices dependen de los vectores primitivos elegidos.
El la SC los índices de Miller son las coordenadas cartesianas. A las BCC y FCC se las representa como SC más base por ese motivo.
En general, los índices de Miller son las coordenadas de la normal en el sistema de coordenadas de la RR.

Planos en la RD

Índices de Miller, interpretación geométrica

Un plano de índices $h,\ k,\ l$ cumple la ecuación del plano $\mathbf{K}\cdot\mathbf{r} = \mathrm{cte}$. Ese plano interseca los ejes determinados por los vectores primitivos $\mathbf{a_i}$ en los puntos:

$$x_1 = \frac{\mathrm{cte}}{2\pi h},\ x_2 = \frac{\mathrm{cte}}{2\pi k},\ x_3 = \frac{\mathrm{cte}}{2\pi l}$$

Los puntos de intersección son inversamente proporcionales a los índices de Miller.

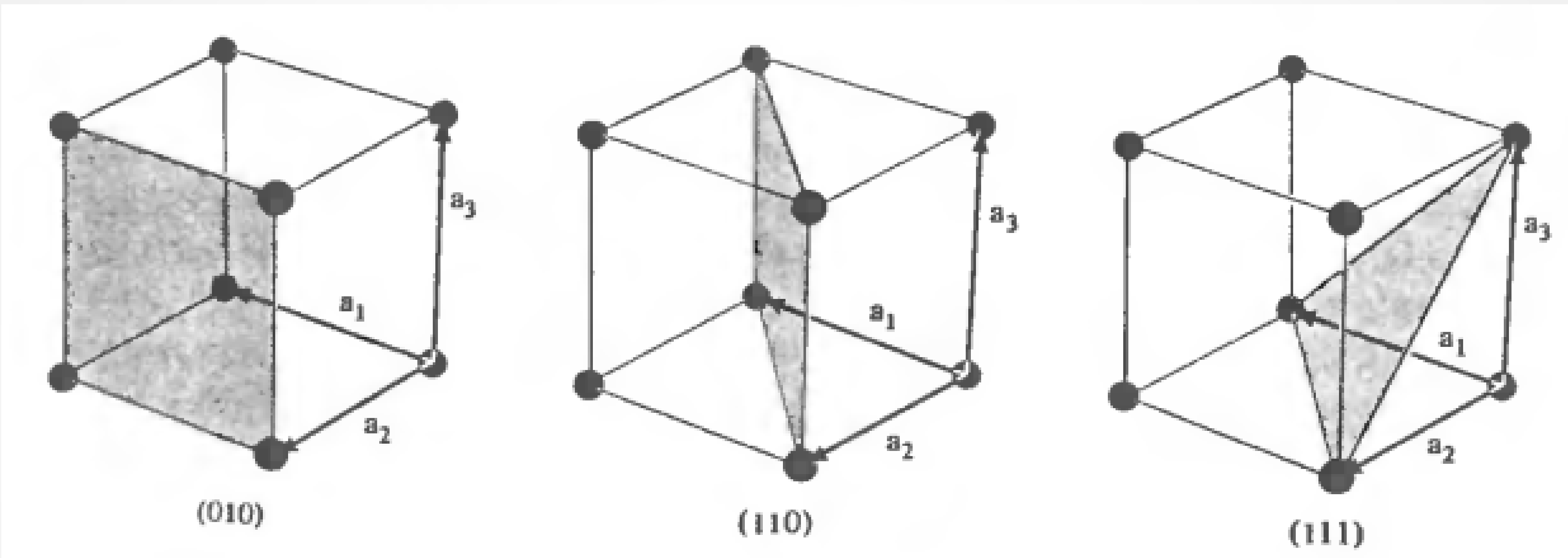
Planos en la RD

Índices de Miller, convenciones

- Los índices de Miller se indican entre paréntesis $(h\,k\,l)$.
- Los índices negativos se indican con una barra superior $(-h,\ k,\ l) = (\bar{h}\,k\,l)$
- Los planos se indican usando paréntesis: $(h\,k\,l)$.
- Los planos equivalentes al $(h\,k\,l)$ por las simetrías del cristal se indican usando corchetes $\{h\,k\,l\}$.
- Se usa una notación análoga para indicar direcciones en la RD: $[h\,k\,l]$.
- Todos las direcciones relacionados por las simetrías del cristal se denotan $\langle h\,k\,l\rangle$.

Planos en la RD

Índices de Miller, ejemplos

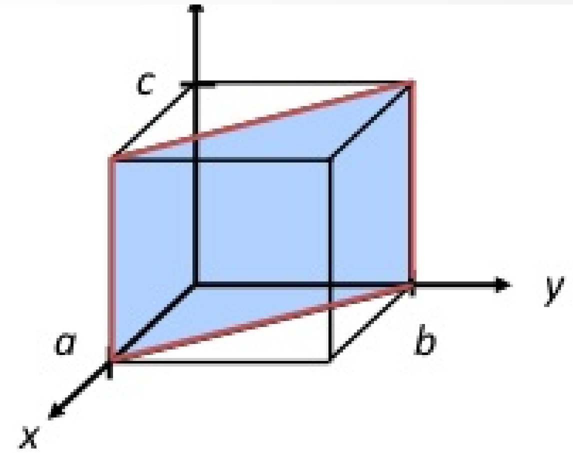


$$\{100\} = (100); (010); (001); (\bar{1}00); (0\bar{1}0); (00\bar{1})$$

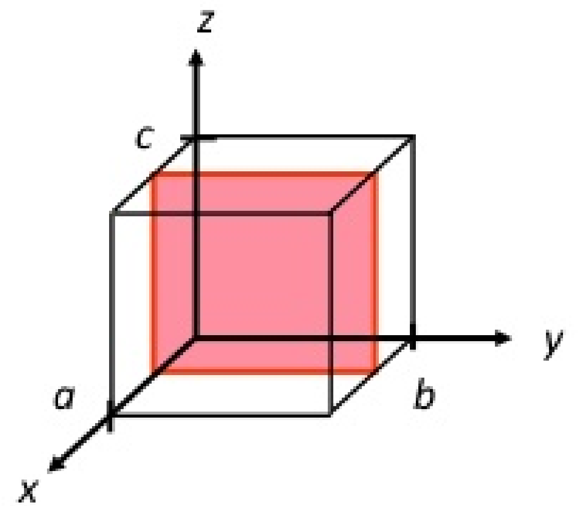
Planos en la RD

Índices de Miller, ejemplos

example		a	b	c
1.	Intercepts	1	1	∞
2.	Reciprocals	1/1	1/1	1/∞
		1	1	0
3.	Reduction	1	1	0
4.	Miller Indices	(110)		



example		a	b	c
1.	Intercepts	1/2	∞	∞
2.	Reciprocals	1/½	1/∞	1/∞
		2	0	0
3.	Reduction	2	0	0
4.	Miller Indices	(200)		

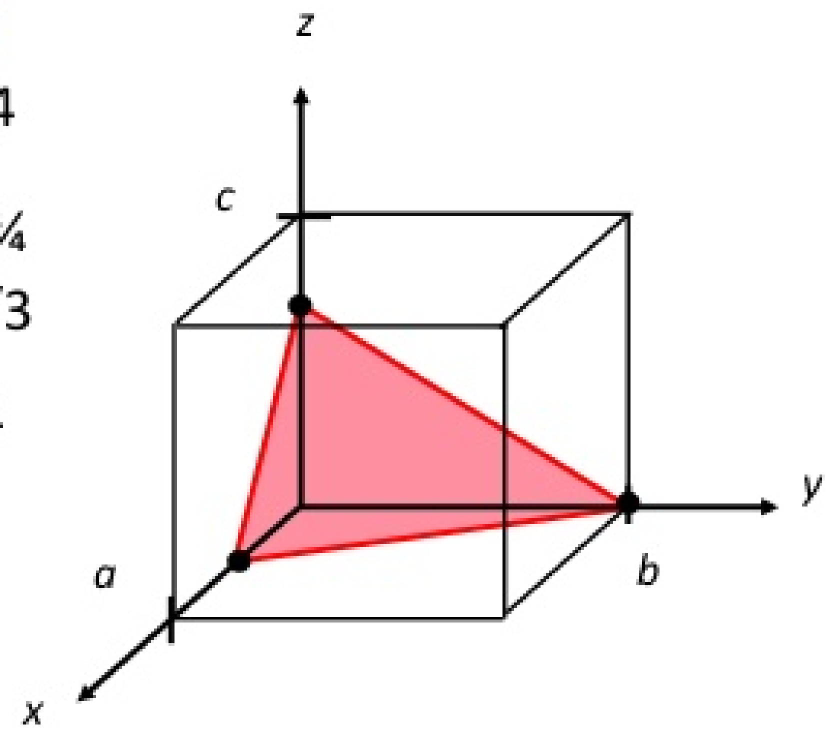


Planos en la RD

Índices de Miller, ejemplos

<u>example</u>

		a	*b*	*c*
1.	Intercepts	1/2	1	3/4
2.	Reciprocals	1/½	1/1	1/¾
		2	1	4/3
3.	Reduction	6	3	4
4.	Miller Indices	(634)		



Fin de la clase

¡Muchas gracias!