GRAU: Enginyeria Matemàtica i Física
Assignatura: FISICA DEL ESTAT SÒLID i SUPERFICIES (CRISTAL·LOGRAFIA; SIMETRIA)

Prof. Dra. M. AGUILÓ
Universitat Rovira i Virgili.

Tarragona, setembre 2024

GRAU: EMIF
Assignatura: FISICA DEL ESTAT SÒLID i SUPERFICIES (CRISTAL·LOGRAFIA; SIMETRIA)
Prof. Dra. M. AGUILÓ
Universitat Rovira i Virgili.

CRISTAL·LOGRAFIA; SIMETRIA

Introducció conceptes bàsics de **CRISTAL·LOGRAFIA. Nomenclatura IUCr. Periodicitat i simetria**. Material cristal·lí bidimensional. Material cristal·lí tridimensional. **Sistemes cristal·lins. Elements de simetria. Xarxes de Bravais.**

Simetria puntual: Elements de simetria. Simetria puntual de sòlids cristal·lins. Objectes finits. Visió macroscòpica. Sistema de referencia exterior al cristall. **32 grups puntuals cristal·logràfics.** Representació d'elements de simetria. Projecció estereogràfica. Nomenclatura de Herman-Mauguin. Nomenclatura de Schoenflies

Simetria espacials: **230 Grups espacials cristal·lografics**. Objectes infinits. Cristalls. Visió amb sistema de referencia definit per els vectors de periodicitat a sobre de distribució ordenada (ions, àtoms, o molècules). Nomenclatura de Herman-Mauguin.

Sistema real i sistema recíproc. Punt, direcció i pla cristal·logràfic. Càlculs geomètrics: distàncies entre punts, angles i distàncies entre plans.

GRAU: EMIF
Assignatura: FISICA DEL ESTAT SÒLID i SUPERFICIES (CRISTAL·LOGRAFIA; SIMETRIA)
Prof. Dra. M. AGUILÓ
Universitat Rovira i Virgili.

Estructura Cristal·lina: cel·la, posicions atòmiques, grup espacial, Z número de fórmules estequiomètriques. Descripció d'un material cristal·lí.

Difracció de R-X. Llei vectorial de la difracció. Llei de Bragg. Caracterització per difracció de RX. Tècniques de difracció de RX.

Exemples d'algunes estructures.
Defectes cristal·lins: defectes puntuals, defectes linials, defectes en altres dimensions.
Anisotropia de les propietats fisiques: Tensors.
Nomenclatura tensors de 2on, 3rt i 4rt ordre.
Principi de Newmann.
Principi de Curie.

Bibliografia:

1.- M. Aguiló, documents Moodle per l'assignatura de "Física Estado Solido i Superficies", Tarragona 2023.

2.- M. Aguiló, document problemes, practiques i Taules de "Física Estado Solido i Superficies", Tarragona 2023

3.- A. Putnis, Introduction to the mineral Sciences, Cambridge University Press, 1992,
ISBN 0 521 42947 1, Chap 1

4.- International Tables for Crystallography (IUCr Series. International Tables for Crystallography).
C. P. Brock is the editor of International Tables for Crystallography, published by Wiley, 2016. Volum A.

5.- J.F.Nye, Physics Properties of Crystals. Their Represention by Tensors and Matrices. Pu. In the USA
by Oxford University Press, 1957, 1987.

6.- X. Solans, Introducció a la cristal·lografia. Textos docentes 158. Ed. Universidad de Barcelona, 1999.

7.- S. Galí, *Cristal·lografia. Teoria Reticular, grups puntuals i grups espacials.* PPU, Barcelona, 1988.

8.- Hammond, C. , The basics of crystallography and diffraction IUCr Texts on Crystallography,
IUCR- Oxford Science Pu., 1997

Estructura Cristal·lina d'un material cristal·lí:
XARXA REAL O DIRECTA a on es representa la cel·la, els àtoms, etc.

PARÀMETRES DE LA CEL·LA
a, b, c, α, β, γ

$$a = |\vec{a}|$$

$$b = |\vec{b}|$$

$$c = |\vec{c}|$$

α : angle que formen els vectors $\vec{b} : \vec{c}$

β : angle que formen els vectors $\vec{a} : \vec{c}$

γ : angle que formen els vectors $\vec{a} : \vec{b}$

VOLUM DE LA CEL·LA

$$V_c = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c}) = \vec{b} \cdot (\vec{c} \wedge \vec{a}) = \vec{c} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b})$$

VOLUM DE LA QUALSEVOL ALTRE PARAL·LELEPÍPEDE

$$V = \vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \wedge \vec{t}_3) = \vec{t}_2 (\vec{t}_3 \wedge \vec{t}_1) = \vec{t}_3 (\vec{t}_1 \wedge \vec{t}_2)$$

7 Sistemes Cristal·líns	Paràmetres de la cel·la
Triclínic	$a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$
Monoclínic (2n tipus)	$a \neq b \neq c$; $\alpha = \gamma = 90$; $\beta > 90$
Monoclínic (1er tipus)	$a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = 90$; $\gamma > 90$
Ortoròmbic o ròmbic	$a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90$;
Tetragonal	$a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90$;
Cúbic	$a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90$;
Hexagonal	$a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90$; $\gamma = 120$
Trigonal	1)$a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90$; $\gamma = 120$ 2) $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma < 120 \neq 90$;

XARXA RECÍPROCA (Ewald,1921)

Estructura cristal·lina: La xarxa directa es per descriure la cel·la, sistema cristal·lí, àtoms, posicions dels mateixos etc. Grup espacial

La principal forma de determinar l'estructura cristal·lina d'un material cristal·lí es fent servir experiments de difracció de Raigs-X. Amb el DRX s'obté la cel·la reciproca no la cel·la directa. Amb els càlculs apropiats de la informació obtinguda es podrà deduir l'estructura cristal·lina

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V_c}$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V_c}$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V_c}$$

$$V_c = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})$$

$$V_c = \vec{b} \cdot (\vec{c} \wedge \vec{a})$$

$$\mathbf{V_c = \vec{c} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b})}$$

1)

$$\begin{array}{lll} \vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1 & \vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0 & \vec{a}^* \cdot \vec{c} = 0 \\ \vec{b}^* \cdot \vec{b} = 1 & \vec{b}^* \cdot \vec{a} = 0 & \vec{b}^* \cdot \vec{c} = 0 \\ \vec{c}^* \cdot \vec{c} = 1 & \vec{c}^* \cdot \vec{a} = 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0 \end{array}$$

$$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = \frac{(\vec{b} \wedge \vec{c})}{V_c} \cdot \vec{a} = 1$$

$$\vec{a}^* \cdot \vec{b} = \frac{(\vec{b} \wedge \vec{c})}{V_c} \cdot \vec{b} = 0$$

2)Definició de XARXA RECÍPROCA: Conjunt de vectors $\vec{t}^{\,*}$
que acompleixen

$$\boxed{\vec{t}^{\,*} \cdot \vec{t}} = (h\vec{a}^{\,*} + k\vec{b}^{\,*} + l\vec{c}^{\,*}) \cdot (m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}) =$$

$= hm + kn + lp = \ q \ \in \ z$ **,** a on q es un numero sencer qualsevol

3) $$\boxed{V_c^* = V_c^{-1}} \qquad V_c = \vec{a}\cdot(\vec{b}\wedge\vec{c})$$

Demostració:

$$\vec{A}\wedge\vec{B}\wedge\vec{C} = \vec{B}(\vec{A}\cdot\vec{C}) - \vec{C}(\vec{A}\cdot\vec{B})$$

$$V^* = \vec{a}^*\cdot(\vec{b}^*\wedge\vec{c}^*) = \vec{a}^*\cdot\left(\vec{b}^*\wedge\frac{\vec{a}\wedge\vec{b}}{V_c}\right.$$

$$V^* = \vec{a}^*\left[\vec{a}\cdot\frac{(\vec{b}^*\cdot\vec{b}}{V_c} - \vec{b}\frac{(\vec{b}^*\cdot\vec{a}}{V_c}\right] = \frac{\vec{a}^*\cdot\vec{a}}{V_c} = \frac{1}{V_c}$$

4) La XARXA RECÍPROCA d'una xarxa recíproca és la XARXA ORIGINAL O DIRECTA.

$$\vec{a}^{**} = \frac{\vec{b}^{*} \wedge \vec{c}^{*}}{V^{*}} = \frac{1}{V^{*}}\left(\vec{b}^{*} \wedge \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V_c}\right) =$$

$$= \vec{a}(\vec{b}^{*} \cdot \vec{b}) - \vec{b}(\vec{b}^{*} \cdot \vec{a}) = \vec{a}$$

$$\vec{b}^{**} = \vec{b}^{/} \qquad \vec{c}^{**} = \vec{c}$$

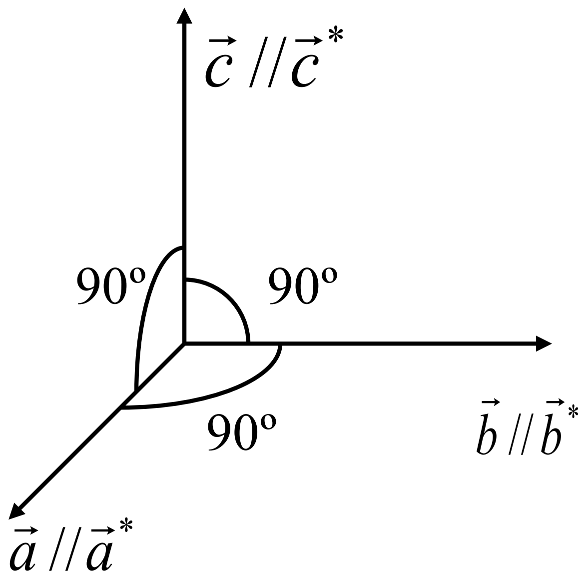
Xarxa real i xarxa reciproca reciproca en sistemes ortogonals

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V_c}$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V_c}$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V_c}$$

$$\boxed{a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^{o}}$$



$$\vec{a}^* // \vec{a}; \quad \vec{b}^* // \vec{b}; \quad \vec{c}^* // \vec{c}$$

$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1$; $|\vec{a}^*| \cdot |\vec{a}| \cos 0 = 1$

$$|\vec{a}^*| = \frac{1}{a}; \quad |\vec{b}^*| = \frac{1}{b}; \quad |\vec{c}^*| = \frac{1}{c}$$

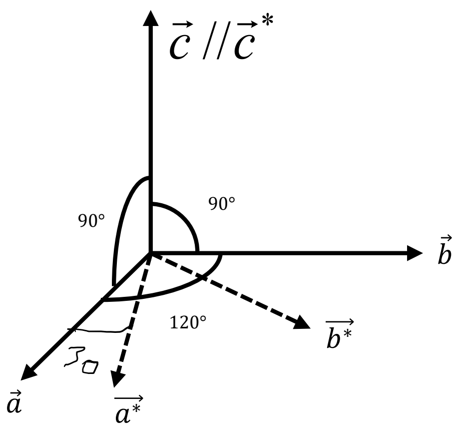
Xarxa real i Xarxa reciproca en el sistema hexagonal

$a = b \neq c;\ \alpha = \beta = 90^\circ;\ \gamma = 120^\circ$

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V_c}$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V_c}$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V_c}$$



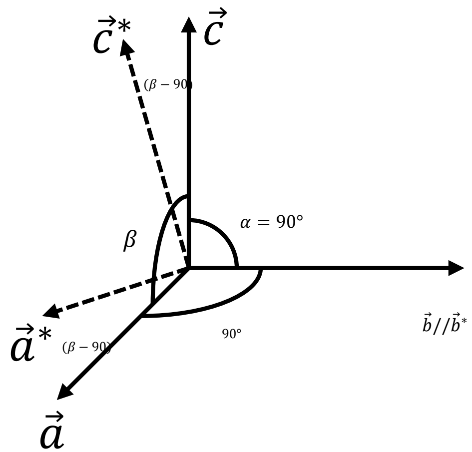
$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 30°;\quad \vec{b}^* \cdot \vec{b} = 30°;\quad \vec{c}^*//\vec{c}$

$|\vec{a}^*| = \dfrac{1}{a\cos 30};\quad \left|\vec{b}^*\right| = \dfrac{1}{b\cos 30};\quad |\vec{c}^*| = \dfrac{1}{c}$

$\alpha^* = \beta^* = 90;\ \gamma^* = 60$

Xarxa real i Xarxa reciproca en el sistema monoclínic

$$a \neq b \neq c;\ \alpha = \gamma = 90°;\ \beta > 90°$$



$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V_c}$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V_c}$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V_c}$$

$$angle\ \vec{a}^* i\ \vec{a} = \beta - 90°; \quad \vec{b} \parallel \vec{b}^*;$$

$$angle \vec{c}^* i\ \vec{c} = \beta - 90°$$

$$|\vec{a}^*| = \frac{1}{a\cos(\beta - 90)}; \quad \left|\vec{b}^*\right| = \frac{1}{b}; \quad |\vec{c}^*| = \frac{1}{c\cos(\beta - 90)}$$

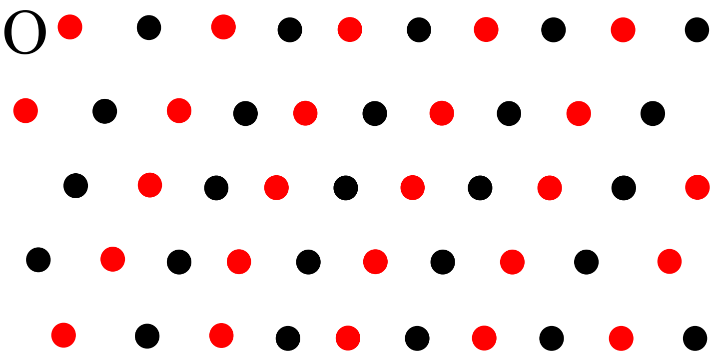
<u>Nomenclatura Cristal·logràfica per la materia cristal·lina</u>

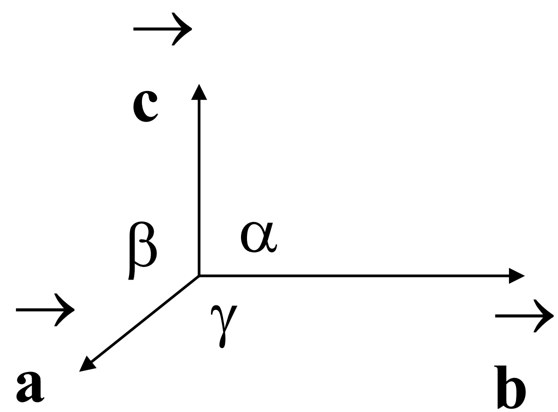
(x,y,z): punt (de la xarxa cristal·lina) $\vec{r} = x\,\vec{a} + y\,\vec{b} + z\,\vec{c}$

[uvw] : direcció cristal·logràfica $\vec{t} = u\,\vec{a} + v\,\vec{b} + w\,\vec{c}$

(hkl): pla cristal·logràfic. Índexs de Miller. $\vec{w}^{*}_{hkl} = h\,\vec{a}^{*} + k\,\vec{b}^{*} + l\,\vec{c}^{*}$

<u>Sistema de referencia: red directa de paràmetres a, b, c, α, β, γ</u>

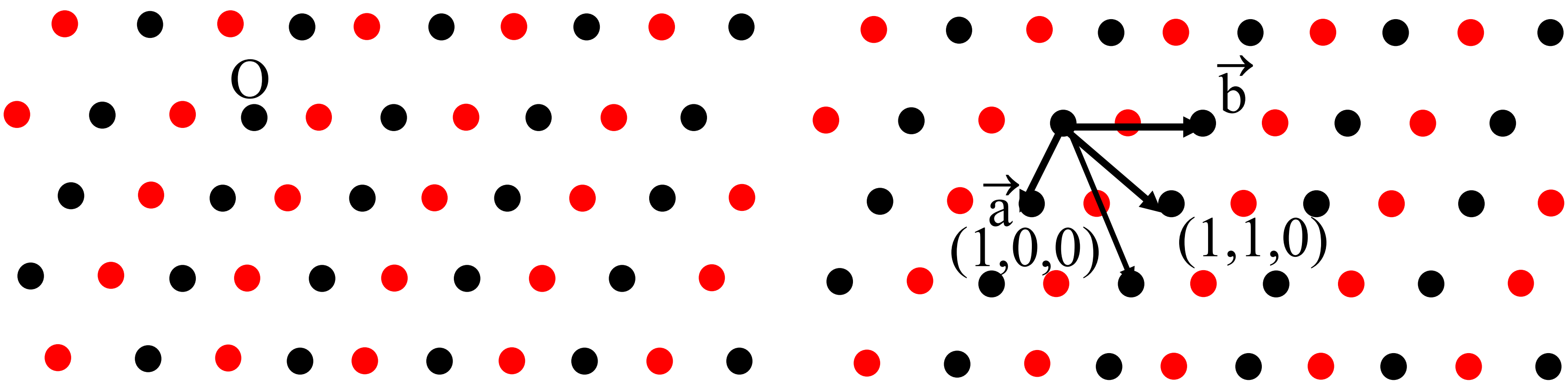




XARXA CRISTAL·LINA: Infinits punts equivalents entre ells per els vectors de periodicitat (vectors de translació) formen una xarxa de punts.

Punt de la xarxa: (x,y,z,). Cada punt de la xarxa es equivalent al altres per els vectors de periodicitat $\vec{r} = x\,\vec{a} + y\,\vec{b} + z\,\vec{c}$

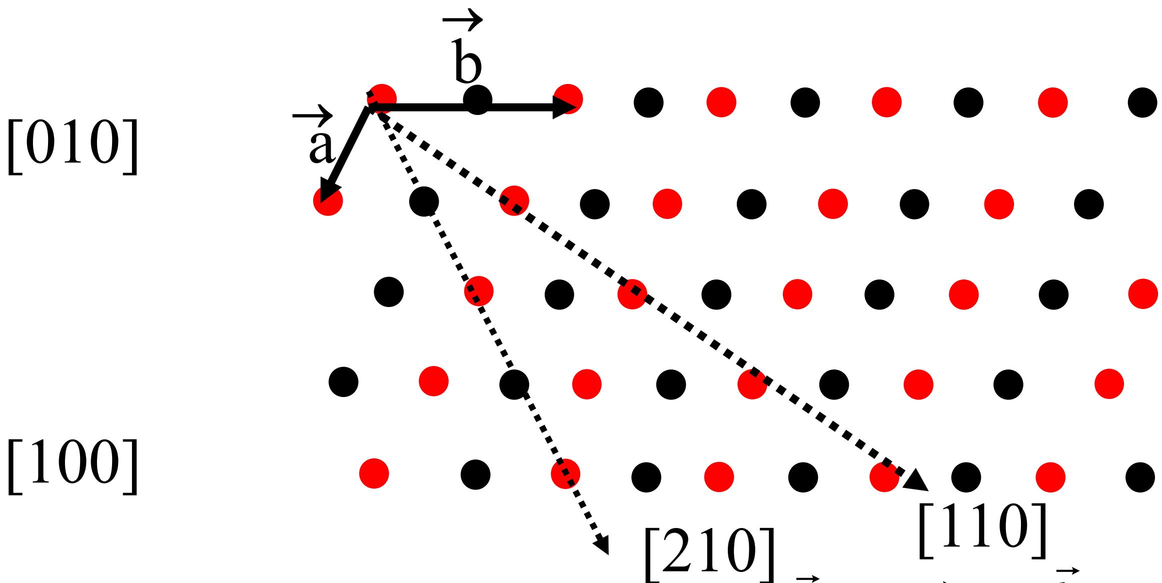
e.g.: $(0,0,0)\,(1,0,0)\;(1,1,0)\;(0,1,0)$



M. AGUILÓ. Catedràtica de Cristal·lografia

DIRECCIÓ CRISTAL·LOGRAFICA O FILERA: $\vec{t} = u\,\vec{a} + v\,\vec{b} + w\,\vec{c}$

Un conjunt de punts equivalents per un vector de periodicitat: $\vec{t} = u\,\vec{a} + v\,\vec{b} + w\,\vec{c}$



$\vec{t} = u\,\vec{a} + v\,\vec{b} + w\,\vec{c}$ [uvw]

[uvw] representa una filera, però el mateix temps una família de fileres paral·leles.

$$\vec{t}_1 = \vec{a} + \vec{b} \qquad [110]$$

$$\vec{t}_2 = \vec{a} - \vec{b} \qquad [1\bar{1}0]$$

$$\vec{t}_3 = 2\vec{a} - \vec{b} + \vec{c} \qquad [2\bar{1}1]$$

$$\vec{t}_4 = \vec{a} \qquad [100]$$

$$\vec{t}_5 = \vec{b} \qquad [010]$$

$$\vec{t}_6 = \vec{a} + \vec{b} + \vec{c} \qquad [111]$$

PLA CRISTAL·LOGRAPHIC: (hkl)

- Infinits punts equivalents per dos vectors de periodicitat $\vec{t}_1 \ \vec{t}_2$

ó vectors de translació.

- Cada pla cristal·logràfic (hkl) està definit per 2 vectors de periodicitat del pla, $\vec{t}_1 \ \vec{t}_2$ o per el seu vector director $\vec{w}^*_{hkl}$

- Cada vector director $\vec{w}^*_{hkl}$ és perpendicular al seu pla (**hkl).**

$\vec{t}_1 \wedge \vec{t}_2 =$ Aquest producte vectorial dona un vector perpendicular als vectors $\vec{t}_1 \ \vec{t}_2$ i al pla (hkl).

$\vec{w}^*_{hkl} = h\,\vec{a}^* + k\,\vec{b}^* + l\,\vec{c}^* \quad , h,k,l \in Z$ Aquest vector esta expresat en la base reciproca **a*, b*, c*** (vectors.)

Essent:

$\vec{t}_1, \vec{t}_2$ vectors continguts al PLA RETICULAR,

$$\vec{t}_1 \wedge \vec{t}_2 = (u_1\vec{a} + v_1\vec{b} + w_1\vec{c}) \wedge (u_2\vec{a} + v_2\vec{b} + w_2\vec{c})$$

$$= u_1 v_2(\vec{a} \wedge \vec{b}) - v_1 u_2(\vec{a} \wedge \vec{b}) +$$

$$+ w_1 u_2(\vec{c} \wedge \vec{a}) - u_1 w_2(\vec{c} \wedge \vec{a}) +$$

$$+ v_1 w_2(\vec{b} \wedge \vec{c}) - w_1 v_2(\vec{b} \wedge \vec{c}) =$$

$$= (u_1 v_2 - v_1 u_2)(\vec{a} \wedge \vec{b}) +$$

$$+ (w_1 u_2 - u_1 w_2)(\vec{c} \wedge \vec{a}) +$$

$$+ (v_1 w_2 - w_1 v_2)(\vec{b} \wedge \vec{c}) =$$

$$= \begin{vmatrix} \vec{b} \wedge \vec{c} & \vec{c} \wedge \vec{a} & \bar{a} \wedge \vec{b} \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix} = V_c \begin{vmatrix} \dfrac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V_c} & \dfrac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V_c} & \dfrac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V_c} \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix}$$

$$= V_c \begin{vmatrix} \vec{a}\,* & \vec{b}\,* & \vec{c}\,* \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix} = V_c(v_1 w_2 - w_1 v_2)\,\vec{a}^{\,*} + V_c(w_1 u_2 - u_1 w_2)\vec{b}^{\,*} + V_c(u_1 v_2 - v_1 u_2)\,\vec{c}^{\,*}$$

$$\vec{t}_1 \wedge \vec{t}_2 = V_c(v_1 w_2 - w_1 v_2)\,\vec{a}^{\,*} + V_c(w_1 u_2 - u_1 w_2)\,\vec{b}^{\,*} + V_c(u_1 v_2 - v_1 u_2)\,\vec{c}^{\,*}$$

ÍNDEXS DE MILLER (hkl)

$$\vec{w}^{*}_{hkl} = h\ \vec{a}^{*}\ +\ k\ \vec{b}^{*}\ +\ l\ \vec{c}^{*} \quad ,\ h,k,l\ \in\ z$$

h,k,l són primers entre ells

(hkl) representa un pla, però al mateix temps una **família de plans paral·lels.**

h,k,l són els components del vector perpendicular al pla, expressats en base reciproca.

(hkl) indexs de Miller: Nomenclatura de plans.

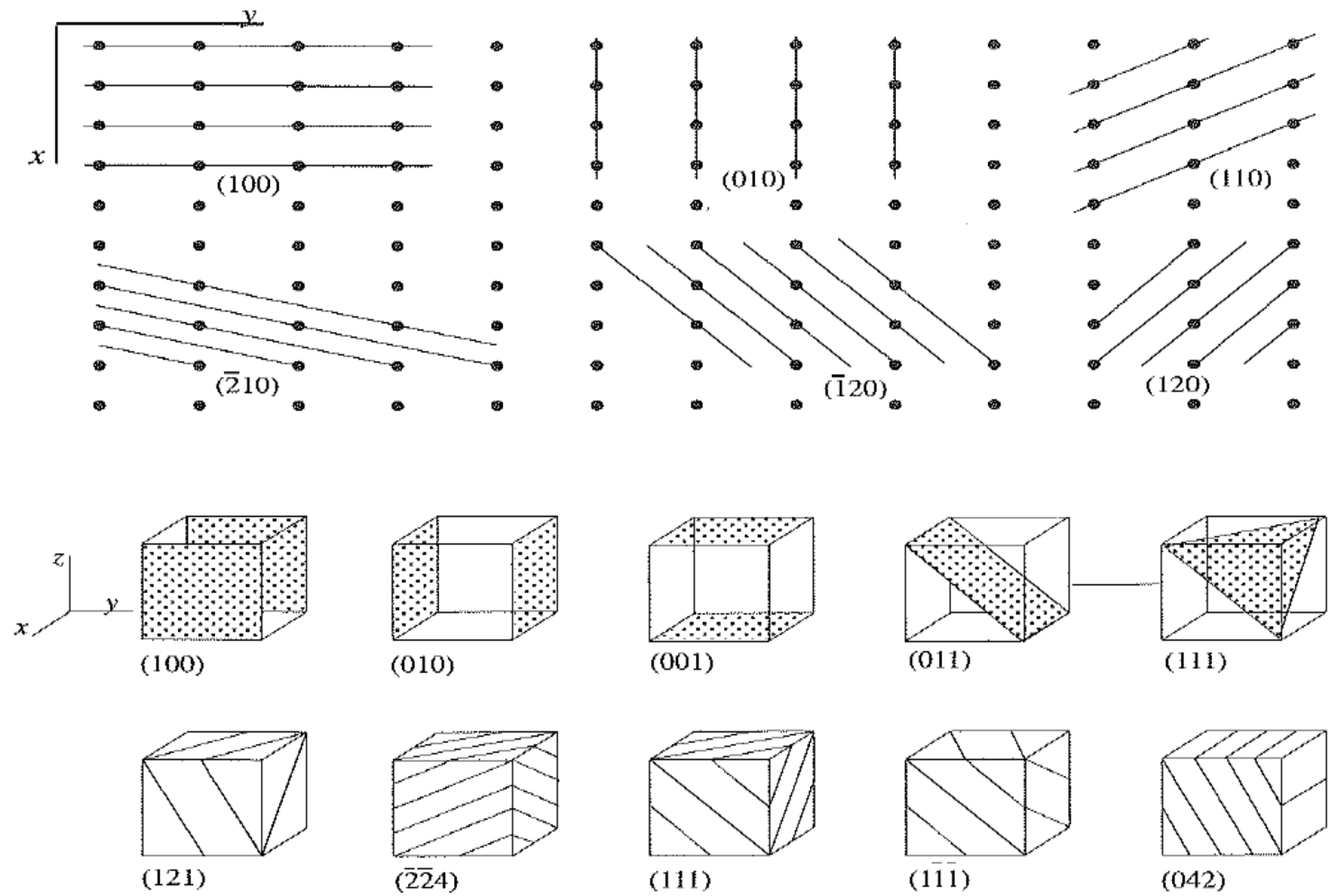


Figure 1.14. Examples of lattice planes and their Miller indices.

Volum del paral·lelepípede definit per t_1 t_2 i t_3

$$V = \vec{t}_3 \bullet (\vec{t}_1 \wedge \vec{t}_2) =$$

$$= (u_3\vec{a} + v_3\vec{b} + w_3\vec{c})V_c\left((v_1 w_2 - w_1 v_2)\frac{(\vec{b} \wedge \vec{c})}{V_c} + (w_1 u_2 - u_1 w_2)\frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V_c} + (u_1 v_2 - v_1 u_2)\frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V_c} \right) =$$

$$= V_c(u_3(v_1 w_2 - w_1 v_2) + v_3(w_1 u_2 - u_1 w_2) + w_3(u_1 v_2 - v_1 u_2) =$$

$$= V_c \begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix}$$

CALCUL D’ANGLES

-Angles entre direccions cristal·logràfiques: [uvw] i [u’v’w’].

-Angles entre direcció [uvw] i vector perpendicular a un pla (hkl).

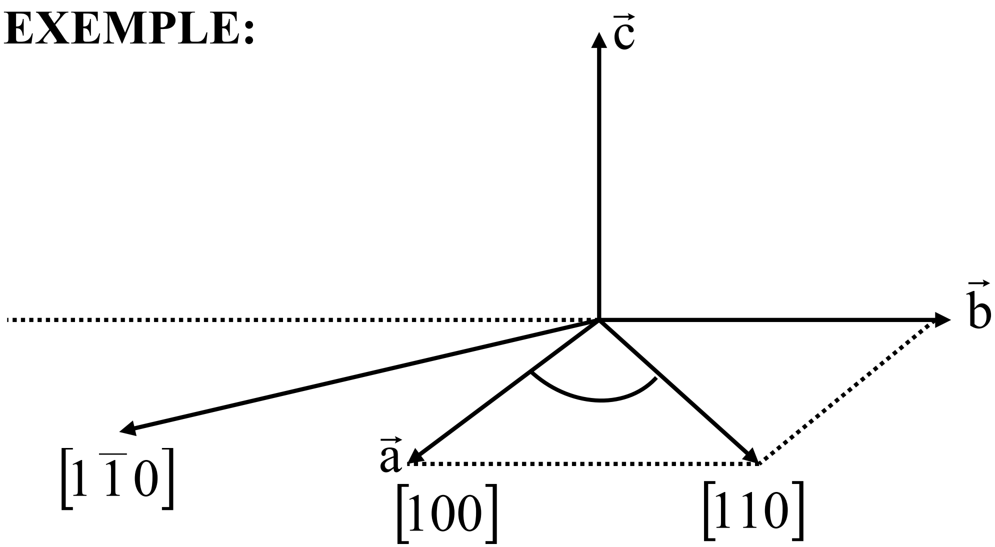
-Angles entre vectors directors de dos plans (hkl) i (h’k’l’).

ANGLE ENTRE DIRECCIONS (FILERES RETICULARS)

$$\vec{t} = [uvw]; \quad \vec{t}' = [u'v'w']$$

$$(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}) \cdot (u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c}) = |\vec{t}| \cdot |\vec{t}'| \cdot \cos\delta$$

EXEMPLE:



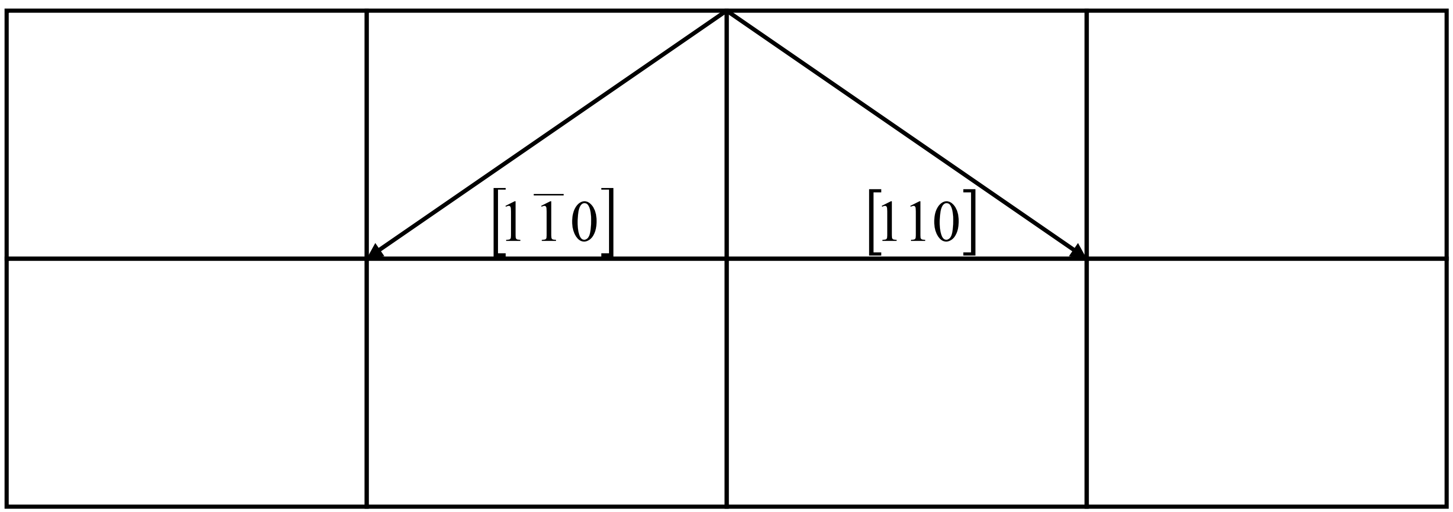
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$$

a= 5Å
b= 8Å
c= 7Å

$a)\ ANGLE\ ENTRE\ [100]\quad [110]\quad \delta = 57{,}99^{o}$

$b)\ ANGLE\ ENTRE\ [010]\quad [110]\quad \delta = 32{,}01^{o}$

$c)\ ANGLE\ ENTRE\ [110]\quad [1\bar{1}0]\quad \delta = 115{,}99^{o}$



ANGLE ENTRE [uvw] i (hkl)

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

$$\vec{w}^{*} = h\vec{a}^{*} + k\vec{b}^{*} + l\vec{c}^{*}$$

$$\vec{t} \cdot \vec{w}^{*} = (u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}) \cdot (h\vec{a}^{*} + k\vec{b}^{*} + l\vec{c}^{*})$$

$$\vec{t} \cdot \vec{w}^{*} = \left|\vec{t}\right| \cdot \left|\vec{w}^{*}\right| \cdot \cos\delta$$

a) CÚBIC $\quad a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$

ANGLE ENTRE $[100]$ i (110) 45º

ANGLE ENTRE $[100]$ i (101) 45º

b) TETRAGONAL $\quad a = b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$

ANGLE ENTRE $[100]$ *i* (110) 45º

ANGLE ENTRE $[100]$ *i* (101) ~~45º~~

c) RÒMBIC $\quad a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$

ANGLE ENTRE $[100]$ i (110) ~~45º~~

ANGLE ENTRE $[100]$ i (101) ~~45º~~

$$\boxed{\begin{array}{l} \left|\vec{a}^{*}\right| = \frac{1}{a} = \frac{1}{5\text{Å}} = 0{,}2\text{Å}^{-1} \\ \left|\vec{b}^{*}\right| = \frac{1}{b} = \frac{1}{8}\text{Å} = 0{,}125\text{Å}^{-1} \end{array}}$$

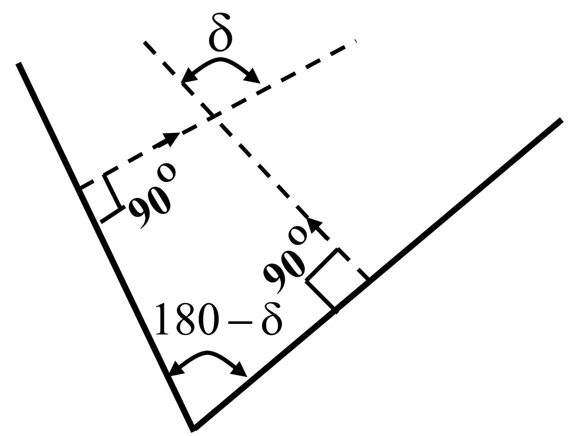
ANGLE ENTRE (hkl) i (h′k′l′)

$$\vec{w}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

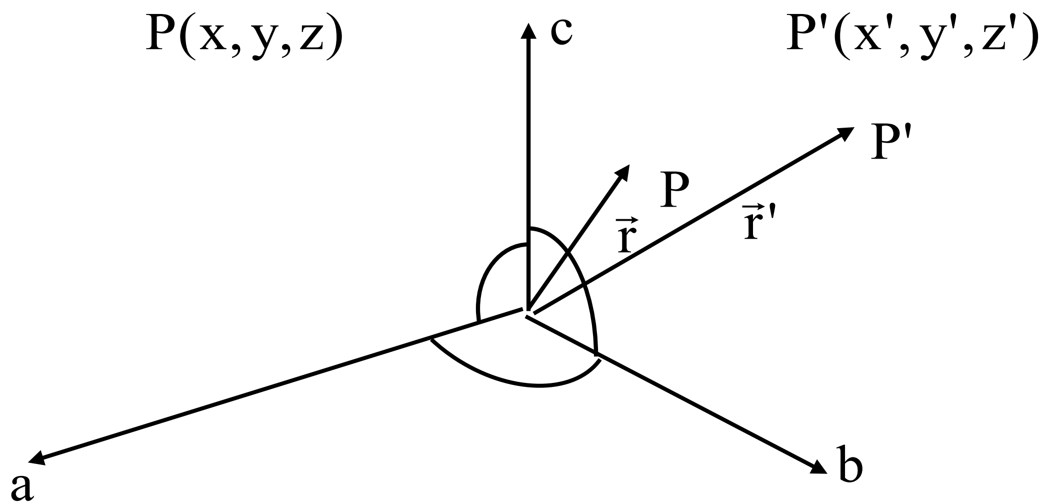
$$\vec{w}^{*\prime} = h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + l'\vec{c}^*$$

$$\vec{w}^* \cdot \vec{w}^{*\prime} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + l'\vec{c}^*) =$$

$$= \left|\vec{w}^*\right| \left|\vec{w}^{*\prime}\right| \cdot \cos\delta$$



DISTÀNCIA ENTRE DOS PUNTS



$$\overrightarrow{PP}\,' = \vec{r}\,' - \vec{r} = (x'\vec{a} + y'\vec{b} + z'\vec{c}) - (x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c}) =$$
$$= (x' - x)\vec{a} + (y' - y)\vec{b} + (z' - z)\vec{c}$$

DISTÀNCIA ENTRE DOS PUNTS: per a qualsevol sistema cristal·lí

$$d = \left|\overrightarrow{PP'}\right| = \sqrt{\overrightarrow{PP'} \cdot \overrightarrow{PP'}} = \{(x'-x)^2 a^2 + (y'-y)^2 b^2 + (z'-z)^2 c^2 +$$

$$+ 2(x'-x)\,(y'-y)\; a \cdot b \cos\gamma +$$

$$+ 2(x'-x)\,(z'-z)\; a \cdot c \cos\beta +$$

$$+ 2(y'-y)\,(z'-z)\; b \cdot c \cos\alpha\}^{1/2}$$

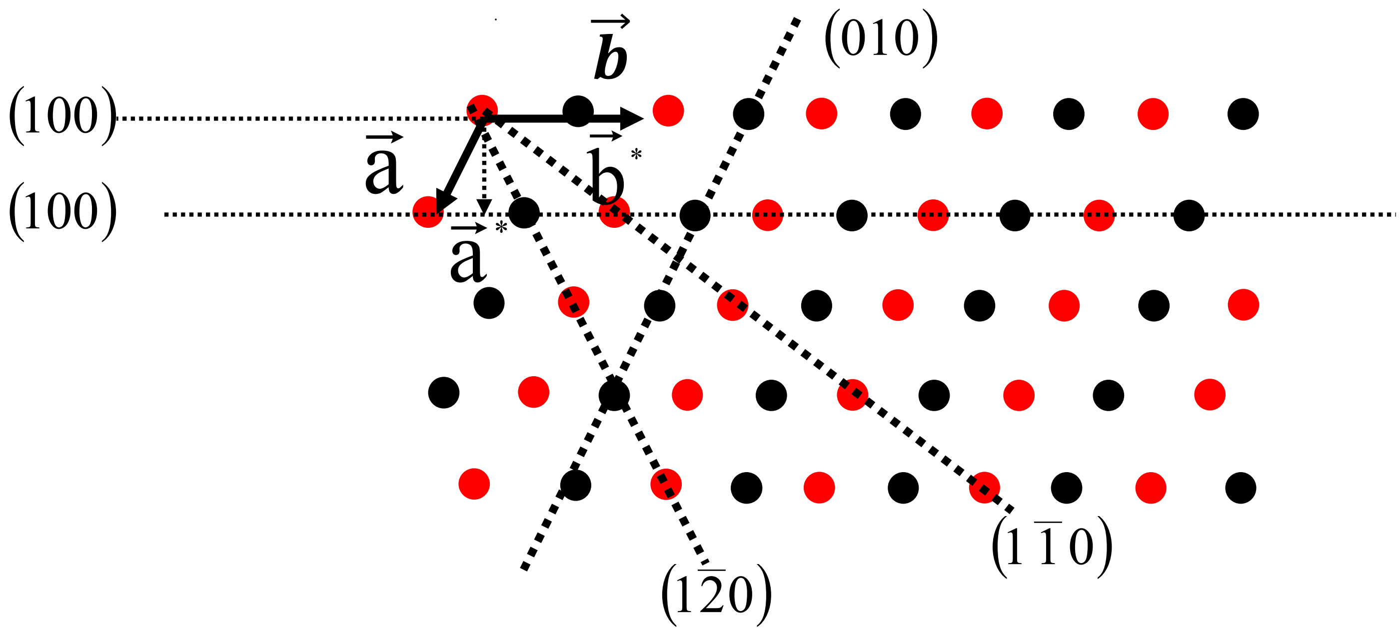
DISTÀNCIA ENTRE DOS PUNTS: per un sistema cristal·lí ortogonal

$$\mathbf{d = \sqrt{(x'-x)^2 a^2 + (y'-y)^2 b^2 + (z'-z)^2 c^2}}$$

DISTÀNCIA ENTRE PLANS PARAL·LES (hkl) d_{hkl}

(hkl): família de plans reticulars

d_{hkl}: espaiat entre plans reticulars de la família (hkl)



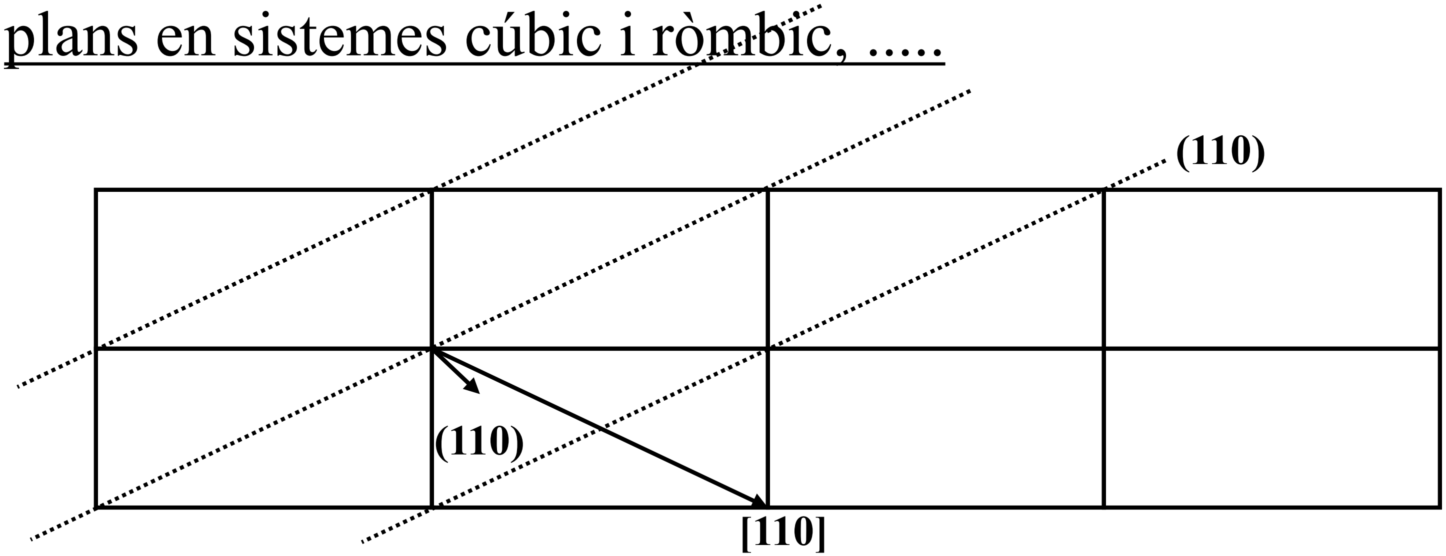
$$\vec{b} \wedge \vec{c} = \begin{vmatrix} \vec{a}^* & \vec{b}^* & \vec{c}^* \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \vec{a}^* \; ; \; (100)$$

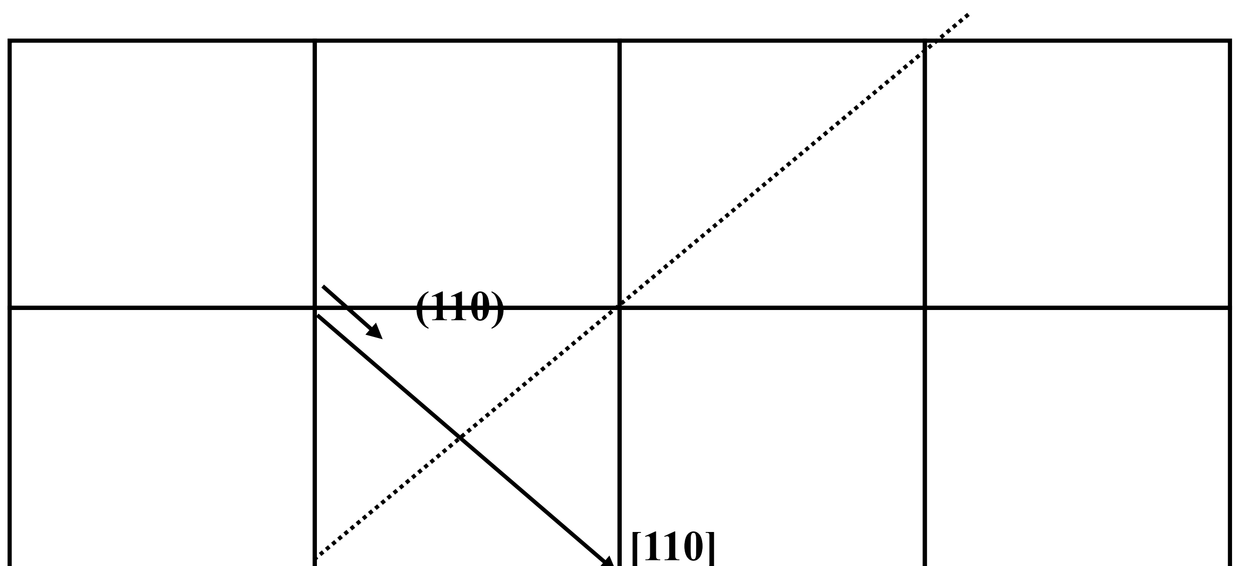
$$\left(\vec{a} + \vec{b}\right) \wedge \vec{c} = \begin{vmatrix} \vec{a}^* & \vec{b}^* & \vec{c}^* \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \vec{a}^* - \vec{b}^* ; \; (1\bar{1}0)$$

$$\left(2\vec{a} + \vec{b}\right) \wedge \vec{c} = \begin{vmatrix} \vec{a}^* & \vec{b}^* & \vec{c}^* \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \vec{a}^* - 2\vec{b}^* ; \; (1\bar{2}0)$$

$$\vec{a} \wedge \vec{c} = \begin{vmatrix} \vec{a}^* & \vec{b}^* & \vec{c}^* \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = -\vec{b}^* ; \; (0\bar{1}0) // (010)$$

Observació: Angles entre direccions i perpendiculars a plans en sistemes cúbic i ròmbic, ...

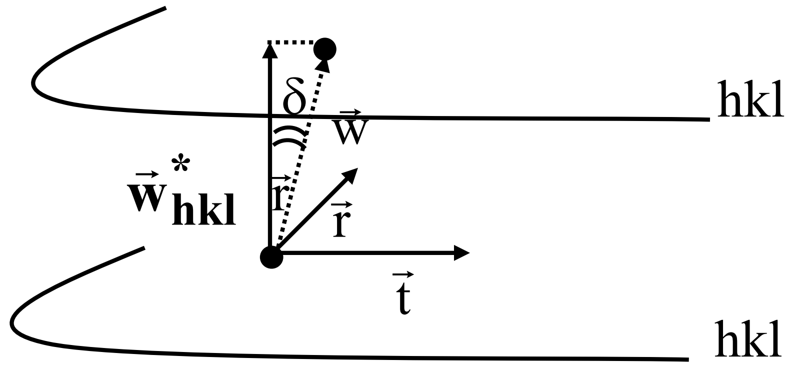




DISTÀNCIA ENTRE PLANS PARAL·LES (hkl)

$$\mathbf{d_{hkl}} = \frac{1}{\left|\vec{w}^*_{hkl}\right|}$$

Per a qualsevol sistema cristal·lí



$$\frac{\vec{t} \wedge \vec{r}}{V_c} = \vec{w}^*_{hkl}$$

$$\vec{w}^*_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$d_{hkl} = \vec{w} \cdot \frac{\vec{w}^*}{\left|\vec{w}^*_{hkl}\right|} = \frac{\vec{w} \cdot \dfrac{\vec{t} \wedge \vec{r}}{V_c}}{\left|\vec{w}^*_{hkl}\right|} = \frac{1}{\left|\vec{w}^*_{hkl}\right|}$$

DISTÀNCIA ENTRE PLANS PARAL·LES (hkl)

Sistema Triclínic 1) $a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$

$$\left|\vec{w}^{*}_{hkl}\right| = \sqrt{(h\vec{a}^{*} + k\vec{b}^{*} + l\vec{c}^{*}) \cdot (h\vec{a}^{*} + k\vec{b}^{*} + l\vec{c}^{*})} =$$

$$= (h^{2}a^{*2} + k^{2}b^{*2} + l^{2}c^{*2} + 2hka^{*}b^{*}\cos\gamma^{*} +$$

$$+ 2hla^{*}c^{*} \cdot \cos\beta^{*} + 2klb^{*}c^{*}\cos\alpha^{*})^{1/2}$$

$$\boxed{d_{hkl} = \frac{1}{\left|w^{*}_{hkl}\right|} = (\qquad\qquad)^{-1/2}}$$

DISTÀNCIA ENTRE PLANS PARAL·LES (hkl)

Sistemes ortogonals

Sistema Cúbic $2) a=b=c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^{o}$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{h^2 \frac{1}{a^2} + k^2 \frac{1}{b^2} + l^2 \frac{1}{c^2}}} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Sistema Tetragonal $3) a=b\neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^{o}$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

Sistema Ròmbic $4) a\neq b\neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=90^{o}$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

DISTÀNCIA ENTRE PLANS PARAL·LES (hkl)

Monoclínic, 2on tipus $5) \quad a \neq b \neq c \quad \alpha = \gamma = 90^{o} \quad \beta > 90^{o}$

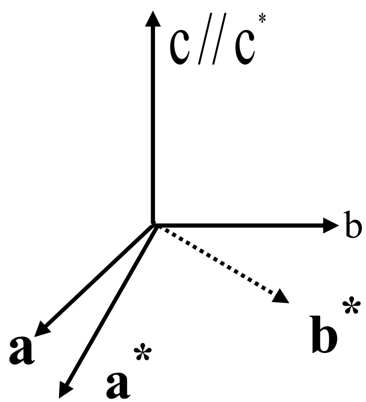
$$\mathrm{d}_{\mathrm{hkl}} = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{h}^2\mathrm{a}^{*2} + \mathrm{k}^2\mathrm{b}^{*2} + \mathrm{l}^2\mathrm{c}^{*2} + 2\mathrm{hla}^*\mathrm{c}^* \cos\beta^*}}$$

Monoclínic, 1er tipus $5) a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^{o}, \gamma > 90^{o}$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{h^2a^{*2} + k^2b^{*2} + l^2c^{*2} + 2hka^*b^* \cos\gamma^*}}$$

DISTÀNCIA ENTRE PLANS PARAL·LES (hkl)

Hexagonal 6) $a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^{o} \quad \gamma = 120^{o}$

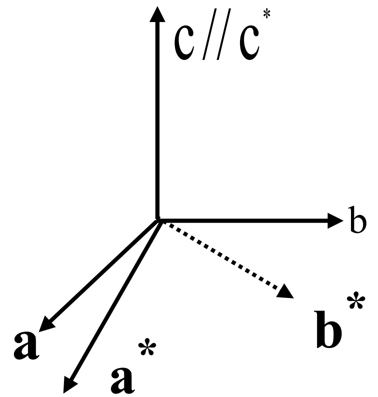


$$a^{*} = \frac{1}{a \cos 30}; \quad b^{*} = \frac{1}{b \cos 30}; \quad c^{*} = \frac{1}{c}$$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^{2}}{a^{2} \cos^{2} 30} + \frac{k^{2}}{b^{2} \cos^{2} 30} + \frac{l^{2}}{c^{2}} + \frac{2hk}{ab \cos^{2} 30} \cdot \cos 60}}$$

DISTÀNCIA ENTRE PLANS PARAL·LES (hkl)

Trigonal 7) $a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^{o} \quad \gamma = 120^{o}$



$$a^{*} = \frac{1}{a \cos 30}; \quad b^{*} = \frac{1}{b \cos 30}; \quad c^{*} = \frac{1}{c}$$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^{2}}{a^{2} \cos^{2} 30} + \frac{k^{2}}{b^{2} \cos^{2} 30} + \frac{l^{2}}{c^{2}} + \frac{2hk}{ab \cos^{2} 30} \cdot \cos 60}}$$

Més Exercicis

1.2.- Calculate the angle between [1 0 0] i [1 1 1], in the cubic system, a=b=c, $\alpha = \beta = \gamma = 90$**.** S:54°44'

$$[100];\ \vec{a}$$
$$[111];\ \vec{a} + \vec{b} + \vec{c}$$

$$\vec{a} \cdot \left(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}\right) = a\sqrt{a^2 + b^2 + c^2} \cdot \cos\delta$$

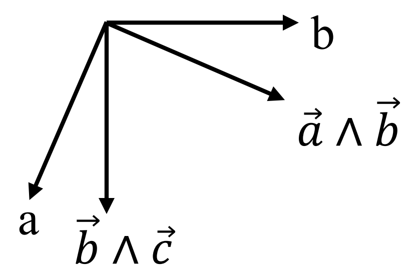
$$\cos\delta = \frac{a^2}{a\sqrt{a^2 + b^2 + c^2}} = \frac{a^2}{a\sqrt{3a^2}} = \frac{a^2}{a \cdot a\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}};$$

$$\delta = arc \cdot \cos\frac{1}{\sqrt{3}} = 54°44'$$

Problem 1.6. In the hexagonal system a=6 Å, b= 6 Å, c= 4 Å, α =β= 90 i γ= 120°,

a)Calculate the angle between [1 0 0] and [1 1 0].

b) Calculate the volume of the cell. S: 60° ; 124.71 Å³



Cell Volume : $V_c = \vec{a}\cdot(\vec{b}\wedge\vec{c}) = \vec{b}\cdot(\vec{c}\wedge\vec{a}) = \vec{c}\cdot(\vec{a}\wedge\vec{b})$

a) $[100];\ \vec{a}$

$[110];\ \vec{a}+\vec{b}$

$$\vec{a}\cdot\left(\vec{a}+\vec{b}\right) = |\vec{a}|\cdot\sqrt{a^2+b^2+2ab\cdot\cos 120}\ \cdot\ \cos\delta$$

$$a^2 + ab\cos 120 = a\sqrt{a^2+b^2+2ab\left(-1/_2\right)}\ \cdot\ \cos\delta$$

$$\cos\delta = \frac{a^2-\frac{1}{2}a^2}{a\sqrt{2a^2-a^2}} = \frac{\frac{1}{2}a^2}{a^2} = \frac{1}{2};\ \delta = 60°$$

b) $V_c = a\cdot(b\cdot c\cdot\sin 90)\cdot\cos 30 = a\cdot b\cdot c\frac{\sqrt{3}}{2}\text{Å}^3 = 124{,}71\text{Å}^3$

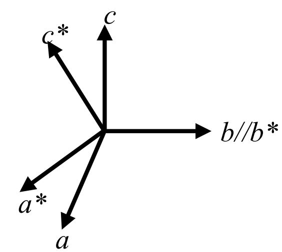
$$V_c = b\cdot(c\cdot a\cdot\sin 90)\cdot\cos 30 = b\cdot c\cdot a\frac{\sqrt{3}}{2}\text{Å}^3 = 124{,}71\text{Å}^3$$

$$V_c = c\cdot(a\cdot b\cdot\sin 120)\cdot\cos 0 = c\cdot a\cdot b\frac{\sqrt{3}}{2}\text{Å}^3 = 124{,}71\text{Å}^3$$

Problem 1.7. .- Determine the volume of the parallelepiped define by the vectors: [110], [-1 10] and [001], in the monoclinic system a= 3 Å, b= 6 Å, c= 9 Å, i β= 100°. S: 319.08 Å³

General parallelepiped volume: $V = \vec{t}_1 \cdot (\vec{t}_2 \wedge \vec{t}_3) = \vec{t}_2(\vec{t}_3 \wedge \vec{t}_1) = \vec{t}_3(\vec{t}_1 \wedge \vec{t}_2)$

$$[110];\ \vec{t_1} = \vec{a} + \vec{b}$$
$$[\bar{1}10];\ \vec{t_2} = -\vec{a} + \vec{b}$$
$$[001];\ \vec{t_3} = \vec{c}$$



$$V = \overrightarrow{t_3} \cdot (\overrightarrow{t_1} \wedge \overrightarrow{t_2});$$
$$(\overrightarrow{t_1} \wedge \overrightarrow{t_2}) = \left(\vec{a} + \vec{b}\right) \wedge \left(-\vec{a} + \vec{b}\right)$$
$$= -(\vec{a} \wedge \vec{a}) - \left(\vec{b} \wedge \vec{a}\right) + \left(\vec{a} \wedge \vec{b}\right) + \left(\vec{b} \wedge \vec{b}\right)$$
$$= \left(\vec{a} + \vec{b}\right) + \left(\vec{a} + \vec{b}\right) = 2\left(\vec{a} \wedge \vec{b}\right) = 2V_c\overrightarrow{c^*}$$
$$V = \vec{c} \cdot 2V_c \cdot \overrightarrow{c^*} = 2V_c \cdot \vec{c} \cdot \overrightarrow{c^*} = 2V_c$$

$$\boxed{V_c = \vec{a} \cdot \left(\vec{b} \wedge \vec{c}\right) = \vec{b} \cdot (\vec{c} \wedge \vec{a}) = \vec{c} \cdot \left(\vec{a} \wedge \vec{b}\right)}$$

$$\boxed{V_c = \vec{b} \cdot (\vec{c} \wedge \vec{a}) = b \cdot c \cdot a \cdot \sin\beta \cdot \cos 0 = a \cdot b \cdot c \cdot \sin\beta = 3 \cdot 6 \cdot 9 \cdot \sin 100 = 159{,}54 \text{ Å}^3}$$

$$V = 2V_c = 2 \cdot 159{,}54 = 319{,}08 \text{ Å}^3$$