Redes recíprocas

Dada uma rede definida pelos pontos

$$\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$$

em que $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ e $\boldsymbol{a}_3$, são os vectores da rede primitiva directa, e n_1, n_2 e n_3 são inteiros.

A rede recíproca define-se pelos pontos $\boldsymbol{G}$ tais que

$$e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{R}} = 1$$

Os vectores $\boldsymbol{G}$ formam uma rede no espaço recíproco, com vectores primitivos $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$ e $\boldsymbol{b}_3$, e têm a seguinte propriedade:

$$\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

Podemos determinar estes vectores da rede recíproca usando:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{b}_1 &= 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \\
\boldsymbol{b}_2 &= 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \\
\boldsymbol{b}_3 &= 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)}
\end{aligned}$$

Podemos escrever um ponto arbitrário da rede recíproca na forma

$$\boldsymbol{G} = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3 \tag{1}$$

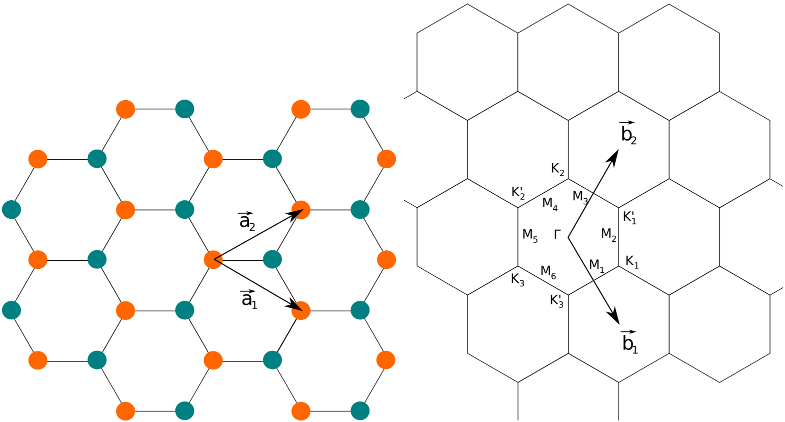


Figure: Representation of the vectors on the real space and on the reciprocal space

Real	Reciprocal
$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\vec{e}_x - \frac{a}{2}\vec{e}_y$	$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}\vec{k}_x - \frac{2\pi}{a}\vec{k}_y$
$\vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\vec{e}_x + \frac{a}{2}\vec{e}_y$	$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}\vec{k}_x + \frac{2\pi}{a}\vec{k}_y$

The positions of the atoms, in units of the lattice vectors, are

$$(0\ 0\ 0); (\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ 0)$$

and in normal units:

$$(0\ 0\ 0); (\frac{\sqrt{3}}{3}a\ 0\ 0)$$

Special points:	$\vec{b}_1,\ \vec{b}_2$	$\vec{k}_x,\ \vec{k}_y$ (units of $\frac{2\pi}{a}$)
M_1	$\frac{1}{2}\vec{b}_1$	$\frac{1}{2\sqrt{3}}\vec{k}_x - \frac{1}{2}\vec{k}_y$
M_2	$\frac{1}{2}(\vec{b}_1 + \vec{b}_2)$	$\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{k}_x$
M_3	$\frac{1}{2}\vec{b}_2$	$\frac{1}{2\sqrt{3}}\vec{k}_x + \frac{1}{2}\vec{k}_y$
M_4	$-\frac{1}{2}\vec{b}_1$	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}\vec{k}_x + \frac{1}{2}\vec{k}_y$
M_5	$-\frac{1}{2}(\vec{b}_1 + \vec{b}_2)$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{k}_x$
M_6	$-\frac{1}{2}\vec{b}_2$	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}\vec{k}_x - \frac{1}{2}\vec{k}_y$
K_1	$\frac{2}{3}\vec{b}_1 + \frac{1}{3}\vec{b}_2$	$\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{k}_x - \frac{1}{3}\vec{k}_y$
K_2	$-\frac{1}{3}\left(\vec{b}_1 - \vec{b}_2\right)$	$\frac{2}{3}\vec{k}_y$
K_3	$-\frac{1}{3}\vec{b}_1 - \frac{2}{3}\vec{b}_2$	$\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{k}_x + \frac{1}{3}\vec{k}_y$
K'_1	$\frac{1}{3}\vec{b}_1 + \frac{2}{3}\vec{b}_2$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{k}_x - \frac{1}{3}\vec{k}_y$
K'_2	$-\frac{2}{3}\vec{b}_1 - \frac{1}{3}\vec{b}_2$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}\vec{k}_x + \frac{1}{3}\vec{k}_y$
K'_3	$\frac{1}{3}\left(\vec{b}_1 - \vec{b}_2\right)$	$-\frac{2}{3}\vec{k}_y$

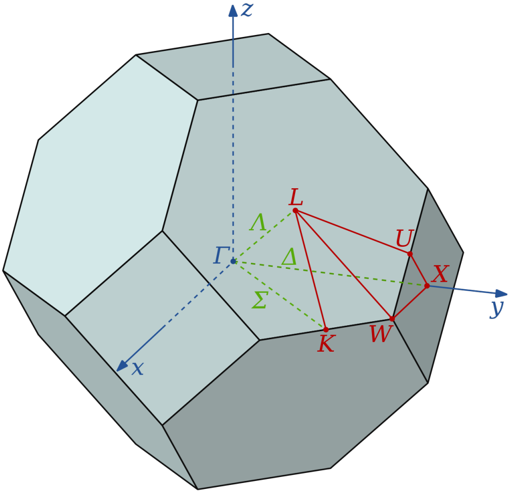
Zona de Brillouin

É a célula de Wigner-Sitz do espaço recíproco.

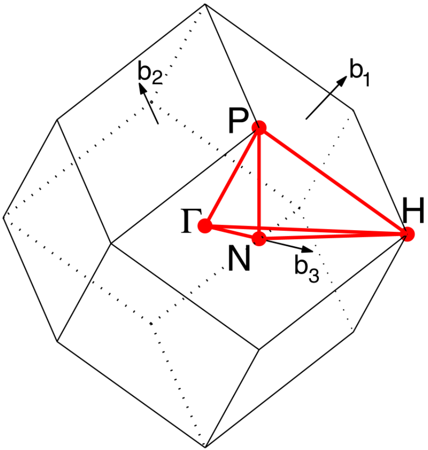
Convenções para os pontos especiais

- Dentro da zona de Brillouin, usam-se letras gregas maiúsculas
- Na fronteira da zona de Brillouin, usam-se letras latinas maiúsculas
- No centro $(0, 0, 0)$ usa-se o Gama Γ

Exemplo Zona de Brillouin FCC



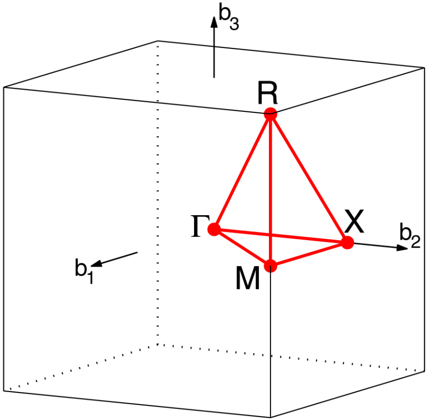
Exemplo: BCC



BCC path: Γ-H-N-Γ-P-H|P-N

[Setyawan & Curtarolo, DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.05.010]

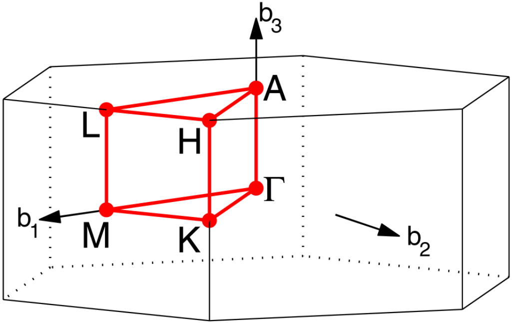
Exeplo: Cúbico



CUB path: Γ-X-M-Γ-R-X|M-R

[Setyawan & Curtarolo, DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.05.010]

Exmplo: Hexagonal



HEX path: Γ-M-K-Γ-A-L-H-A|L-M|K-H

[Setyawan & Curtarolo, DOI: 10.1016/j.commatsci.2010.05.010]