Lista número 2 de Introdução à física do estado sólido

Ivan Ramos Pagnossin

03 de Outubro de 2000

1. *Uma rede plana é caracterizada pelos vetores primitivos* $\vec{a}_1 = 2\hat{i}$ *e* $\vec{a}_2 = \hat{i} - \hat{j}$.

(a) *Trace a rede e represente a família de planos cujos índices de Miller são* (1 2)*;*

(b) *Trace a rede recíproca e represente o vetor de translação* $\vec{K}$ *da rede recíproca perpendicular a esse conjunto de planos.*

(c) *Use os gráficos para mostrar que* $\vec{K}$ *é realmente perpendicular ao conjunto de planos e que a relação entre* $|\vec{K}|$ *e a distância entre planos consecutivos é satisfeita;*

(d) *Desenhe as quatro primeiras zonas de Brillouin.*

Uma vez que a rede direta é a recíproca da recíproca, os índices de Miller de uma são as coordenadas (x_1, x_2)[1] da outra, e vice versa. Deste modo, se os índices de Miller são (1 2), então podemos achar os pontos de interseção x_1 e x_2 simplesmente transformando-os exatamente da mesma forma como faríamos se tivéssemos o problema inverso: Dados os pontos de interseção, achar os índices de Miller:

$$1\ 2 \ \rightarrow\ \frac{1}{1}\ \frac{1}{2} \ \rightarrow\ \frac{2}{2}\ \frac{1}{2} \ \rightarrow\ 2\ 1$$

Isto é, temos que o plano procurado corta os vetores primitivos $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ em $x_1 = 2$ e $x_2 = 1$ [2], respectivamente. Daí temos a *fig.1*.

O segundo item pede um vetor de translação da rede recíproca, dado por $N(l\vec{b}_1 + m\vec{b}_2)$, com N inteiro, $(l\ m)$ os índices de Miller e $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2\}$ os vetores primitivos da rede recíproca. Tomando $N = 1$ temos um vetor de translação especial – o mais simples e menor de todos – chamado $\vec{k}_0$, que permitir-nos-á encontrar a distância interplanar solicitada no item seguinte. Mas para explicitarmos $\vec{k}_0$ [3] devemos conhecer $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2\}$.

Com A sendo a área da célula primitiva da rede direta,

$$A = |\hat{k} \times \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2| = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{vmatrix} = 2$$

Podemos agora encontrar os vetores primitivos da rede recíproca:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{A}(\vec{a_2} \times \hat{k}) = \pi \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = -\pi(\hat{i} + \hat{j})$$

e

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{A}(\hat{k} \times \vec{a}_1) = \pi \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \end{vmatrix} = 2\pi\hat{j}$$

[1] Os pontos nos quais o plano cruza os vetores primitivos.

[2] Isto é, $\vec{x}_1 = 2\vec{a}_1$ e $\vec{x}_2 = \vec{a}_2$.

[3] E conseqüentemente qualquer $\vec{K} = N(l\vec{b}_1 + m\vec{b}_2)$.

Assim fica fácil determinar o vetor da rede recíproca:

$$\begin{aligned}\vec{k}_0 &= l\vec{b}_1 + m\vec{b}_2 \\ &= l[-\pi(\hat{i}+\hat{j})] + m[2\pi\hat{j}] \\ &= \pi(3\hat{j}+\hat{i})\end{aligned}$$

É claro, pela *fig.1*, que o vetor $\vec{k}_0$ é perpendicular à família de planos $\{1\ 2\}$, mas podemos demonstrar isto com precisão analítica: Observe que a inclinação da família de planos com relação à base canônica ilustrada ainda na primeira figura é $\tan\theta = 1/3$, e a do vetor $\vec{k}_0$ é

$$\tan\phi = -\frac{|\vec{k}_{0_y}|}{|\vec{k}_{0_x}|} = -\frac{3\pi}{\pi} = -3$$

E assim, pela geometria analítica, como $\tan\phi\cdot\tan\theta = -1$ temos que o vetor $\vec{k}_0$ é realmente perpendicular à família de planos considerada.

Já a distância interplanar pode ser determinada geometricamente através da triangulação em vermelho na *fig.1*

$$3d = 6\sin(\arctan\frac{1}{3}) \Rightarrow d \cong 0,63\mathring{A}$$

ou pela teoria de estruturas desenvolvida:

$$d_{(1\ 2)} = \frac{2\pi}{|\vec{k}_0|} = \frac{2\pi}{\sqrt{10}\pi} \cong 0,63\mathring{A}$$

E verifica-se que realmente a expressão acima utilizada é correta.

O último item pede as quatro primeiras zonas de Brillouin. O primeiro passo é desenhar a rede recíproca – na qual essas zonas são definidas – com o auxílio dos resultados $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$ encontrados anteriormente. Em seguida, escolhemos um ponto da rede como referência e, a partir dele, encontramos os primeiros vizinhos e traçamos a mediatriz do segmento que une o ponto de referência aos seus vizinhos. Repete-se o processo para todos os segundos vizinhos, terceiros, quartos, e assim por diante[4]. O resultado é mostrado passo a passo na figura 2.

2. *Para um cristal monoatômico, um dado vetor da rede recíproca tem módulo* $|\vec{G}| = 2\cdot 10^8\ cm^{-1}$. *Um feixe de raios-X com vetor de onda* $\vec{k}$ *incide sobre o cristal formando um ângulo de* 30^o *com a direção de* $\vec{G}$.

(a) *Qual deve ser o comprimento de onda do feixe incidente para que haja interferência construtiva?*

(b) *Qual o ângulo entre a direção do feixe incidente e do difratado?*

A condição de Von Laue para que haja interferência construtiva numa experiência de difração de ondas é que a diferença entre os vetores de onda incidente e refratada seja um vetor de translação da rede recíproca, isto é

$$\vec{k}_i - \vec{k}_r = \vec{G} \tag{1}$$

[4]Não existe um momento específico para se parar, mas é sempre bom repetir o processo para uns dois ou três vizinhos seguintes àqueles aos quais se quer chegar para evitar a possibilidade de deixarmos uma linha importante de lado.

com $|\vec{k}_i| = |\vec{k}_r| = k = \frac{2\pi}{\lambda}$, condição esta que impõe a conservação da energia eletromagnética na difração.

Escolhendo uma base ortonormal como descrita na *fig.3* podemos escrever os vetores $\vec{k}_i$ e $\vec{G}$ de modo a determinarmos $\vec{k}_r$:

$$\vec{k}_i = -k\sin\theta\hat{\imath} - k\cos\theta\hat{\jmath}$$

e

$$\vec{G} = -G\hat{\jmath}$$

Isolando $\vec{k}_r$ em (1) e aplicando os conhecimentos acima adquiridos concluimos que

$$\begin{aligned}
\vec{k}_r &= \vec{k}_i - \vec{G} \\
&= -k\sin\theta\hat{\imath} - k\cos\theta\hat{\jmath} + G\hat{\jmath} \\
&= -k\sin\theta\hat{\imath} + (G - k\cos\theta)j \\
|\vec{k}_r|^2 &= k^2\sin^2\theta + k^2\cos^2\theta + G^2 - 2kG\cos\theta
\end{aligned}$$

que dá

$$G = 2k\cos\theta \;\Rightarrow\; k = \frac{G}{2\cos\theta} \;\Rightarrow\; \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{G}{2\cos\theta} \;\Rightarrow\; \lambda \cong 5,44\ \mathring{A}$$

Já o ângulo entre os feixes incidente e refratado pode ser encontrado percebendo-se que o ângulo entre $\vec{k}_r$ e $\vec{G}$ é

$$\phi = \arcsin\frac{|\vec{k}_{r_x}|}{|\vec{k}_r|} = \arcsin\frac{k\sin\theta}{k} = \theta = 30^o$$

Isto é, o ângulo de desvio do feixe de raios-X é $\theta + \phi = 60^o$.

3. *Mostre qual das duas zonas de Brillouin é maior: A da prata (estrutura FCC de aresta $a = 4,08\ \mathring{A}$) ou a do lítio (BCC com $a = 3,50\ \mathring{A}$).*

Como estamos falando de uma estrutura tridimensional, a grandeza que utilizamos para comparar as células é o volume. Isto significa que precisamos calcular o volume da zona de Brillouin[5]. Mas a célula de Brillouin é a de Wigner-Seitz na rede recíproca, e sabemos também que a célula de Wigner-Seitz é uma primitiva. Isto posto, o que precisamos fazer é apenas determinar os vetores primitivos da rede recíproca e encontrar o volume pelo produto misto destes vetores. Comecemos pela FCC.

Os vetores primitivos canônicos são

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{\imath} + \hat{\jmath})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{\jmath} + \hat{k})$$

[5]Não é necessário fazer distinção entre qual zona estamos falando, uma vez que todas tem o mesmo volume.

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{k})$$

E o volume V_d da célula primitiva da rede direta é

$$V_d = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3| = (\frac{a}{2})^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4}$$

A partir destes vetores é trivial encontrar os da rede recíproca:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_p}\ \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{8\pi}{a^3} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_p}\ \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{8\pi}{a^3} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_p}\ \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{8\pi}{a^3} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1)$$

Assim[6], o volume V_r da zona de Brillouin da rede FCC é

$$V_r = |\vec{b}_1 \times \vec{b}_2 \cdot \vec{b}_3| = (\frac{2\pi}{a})^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{32\pi^3}{a^3} \cong\ 14,61\ \mathring{A}^{-3}$$

Vejamos o que ocorre para a rede BCC: Os vetores primitivos são

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})$$

E o volume da rede direta é

$$V_d = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3| = \frac{a^3}{8} \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}$$

Os vetores da rede recíproca são

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_d}\ \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{\pi}{a} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = -\frac{2\pi}{a}(1, 1, 0)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_d}\ \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{\pi}{a} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = -\frac{2\pi}{a}(1, 0, 1)$$

[6]Note que, a despeito da ordenação dos vetores $\vec{b}_j$, estes formam uma rede BCC, o que não é de se espantar pois sabemos que a rede recíproca também é de Bravais.

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_d}\, \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{\pi}{a} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = -\frac{2\pi}{a}(1,1,0)$$

E o volume da célula de Brillouin é

$$V_r = |\vec{b}_1 \times \vec{b}_2 \cdot \vec{b}_3| = (\frac{2\pi}{a})^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{16\pi^3}{a^3} \cong\ 11,57\ \mathring{A}^{-3}$$

Concluimos então que a zona de Brillouin da rede da prata (FCC) é maior[7].

4. *Considere a rede unitária do diamante que contém oito átomos por célula. Determine o fator de estrutura. Ache os zeros do fator de estrutura e mostre que as reflexões permitidas na estrutura do diamante satisfazem a relação $h+k+l = 4n$, onde os índices são pares e n é um inteiro qualquer, ou então todos os índices são ímpares.*

O fator de estrutura geométrico é dado por

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

onde f é o fator de estrutura atômico e a somatória é feita sobre os átomos da base[8].

A rede do diamante é formada exclusivamente por átomos de carbono – salvo situações de dopagem. Portanto, o fator de estrutura atômico é igual para todos os átomos e, assim, podemos passá-lo para fora do sinal de soma:

$$S_{\vec{G}} = f_0 \sum_{j}^{N} e^{i\vec{r}_j \cdot \vec{G}}$$

A célula unitária indicada no enunciado do exercício é assim escolhida pois é comum em cristalografia descrever-se todas as estruturas em termos de redes cúbicas simples. Neste contexto, devemos escolher oito átomos da célula unitária para fazermos de base[9]. Aqui, escolhemos os quatro átomos internos à célula é os quatro outros que identificam os vetores primitivos convencionais:

$$\begin{aligned} \vec{r}_0 &= (0,0,0) \\ \vec{r}_1 &= \frac{1}{2}a(1,0,1) \\ \vec{r}_2 &= \frac{1}{2}a(1,1,0) \end{aligned}$$

[7] O volume aqui é dado com a dimensão $1/L^3$ pois estamos trabalhando na rede recíproca, definida por $\vec{R} \cdot \vec{G} = 2\pi N$, $N \in \mathcal{N}$. Nesta situação, como o segundo membro é adimensional e, no primeiro, $[\vec{R}] = L$, então $[\vec{G}]$ deve ser $1/L$, esclarecendo a aparente impossibilidade.

[8] Perceba que não é sobre os átomos da célula considerada.

[9] Os átomos não podem ser escolhidos sem discriminação, pois devemos construir uma base que preencha todos os pontos da estrutura sem que haja superposição de qualquer um dos átomos.

$$
\begin{aligned}
\vec{r}_3 &= \frac{1}{2}a(0,1,1) \\
\vec{r}_4 &= \frac{1}{4}a(1,1,1) \\
\vec{r}_5 &= \frac{1}{2}a(3,3,1) \\
\vec{r}_6 &= \frac{1}{2}a(3,1,3) \\
\vec{r}_7 &= \frac{1}{2}a(1,3,3)
\end{aligned}
$$

Quanto ao vetor de translação $\vec{G}$ da rede recíproca, é conveniente expressá-lo em termos dos índices de Miller:

$$
\vec{G} = N\vec{k}_0 = N(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3) \tag{2}
$$

Devemos, portanto, determinar $\vec{b}_i$ para podermos avaliar o produto interno na exponencial do fator de estrutura.

Os vetores primitivos da rede direta são[10]

$$
\vec{a}_1 = a\hat{i}
$$

$$
\vec{a}_2 = a\hat{j}
$$

$$
\vec{a}_3 = a\hat{k}
$$

E o volume é a^3. Assim, os vetores primitivos da rede recíproca associada são

$$
\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_d}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{2\pi}{a}\begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}\hat{i}
$$

$$
\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_d}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{2\pi}{a}\begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}\hat{j}
$$

$$
\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_d}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{2\pi}{a}\begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}\hat{k}
$$

Retornando estes resultados em (2)[11],

$$
\vec{G} = \vec{k}_0 = \frac{2\pi}{a}(h,k,l)
$$

Isto nos dá a seqüência de produtos escalares que nos interessa:

$$
\begin{aligned}
\vec{r}_0 \cdot \vec{G} &= 0 \\
\vec{r}_1 \cdot \vec{G} &= \pi(h+l) \\
\vec{r}_2 \cdot \vec{G} &= \pi(h+k) \\
\vec{r}_3 \cdot \vec{G} &= \pi(k+l)
\end{aligned}
$$

[10] Lembre-se que adotamos uma descrição baseada em células cúbicas simples.

[11] Por simplicidade fazemos $N = 1$.

$$
\begin{aligned}
\vec{r}_4 \cdot \vec{G} &= \frac{\pi}{2}(h+k+l) \\
\vec{r}_5 \cdot \vec{G} &= \frac{\pi}{2}(h+3k+l) \\
\vec{r}_6 \cdot \vec{G} &= \frac{\pi}{2}(3h+k+l) \\
\vec{r}_7 \cdot \vec{G} &= \frac{\pi}{2}(h+k+3l)
\end{aligned}
$$

Dando-nos o fator de estrutura

$$
\begin{aligned}
\frac{S_{\vec{G}}}{f_0} &= [1+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(k+l)}]+[1+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(h+l)} \\
&\quad +e^{i\pi(h+l)}]e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} \\
&= [1+e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}][1+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(k+l)}]
\end{aligned}
$$

Esta é a expressão do fator de estrutura geométrico procurado. Vejamos suas propriedades identificando os máximos e os mínimos. Para isso é preciso lembrarmos da álgebra quais as relações entre números pares e ímpares numa soma. Abaixo segue uma seqüência de igualdades que utilizaremos, na qual denota-se $\mathcal{P}$ para número par e $\mathcal{I}$ para ímpar:

$$\mathcal{P}+\mathcal{P} = \mathcal{P} \tag{3}$$
$$\mathcal{P}+\mathcal{I} = \mathcal{I} \tag{4}$$
$$\mathcal{I}+\mathcal{I} = \mathcal{P} \tag{5}$$
$$\mathcal{P}+\mathcal{P}+\mathcal{P} = \mathcal{P} \tag{6}$$
$$\mathcal{P}+\mathcal{P}+\mathcal{I} = \mathcal{I} \tag{7}$$
$$\mathcal{P}+\mathcal{I}+\mathcal{I} = \mathcal{P} \tag{8}$$
$$\mathcal{I}+\mathcal{I}+\mathcal{I} = \mathcal{I} \tag{9}$$

Se $h+k+l$ for par, então é claro que $e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} = \pm 1$ (Situação 1); Por outro lado, se $h+k+l$ for ímpar, teremos $e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} = \pm i$ (Situação 2).

Considere a situação 1 em primeiro lugar. Para que $h+k+l$ seja par, devemos ter – equações (6) e (8) – h, k e l todos simultaneamente pares (Situação i) ou apenas um deles par (Situação ii). E mais, a exponencial $e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}$ será $+1$ (Situação 1.1) se

$$\frac{\pi}{2}(h+k+l) = 2n\pi \Rightarrow h+k+l = 2(2n)$$

ou seja, se $h+k+l$ for o DOBRO DE UM NÚMERO PAR. Ou ainda, se $\frac{\pi}{2}(h+k+l)$ for MÚLTIPLO PAR de π. Neste caso, e considerando ainda a situação i, podemos escrever

$$\frac{S_{\vec{G}}}{f_0} = [1+1][1+1+1+1] = 8$$

que é um MÁXIMO. Ou seja, uma reflexão permitida. Perceba que utilizamos (3) para avaliar as exponenciais mais à direita: Sendo $h+k$, $h+l$ e $k+l$ somas de parcelas pares, o resultado é sempre par, e um múltiplo par como argumento daquelas exponenciais dá $+1$ como resposta.

Se considerarmos a situação ii, perceberemos que

$$\frac{S_{\vec{G}}}{f_0} = [1+1][1-1-1+1] = 0$$

que é um MÍNIMO. Neste caso, como temos dois números ímpares e um par, então pelas equações (3) a (5) teremos dois argumentos ímpares nas exponenciais (resultando -1) e um par (dando $+1$). A primeira exponencial continua dando $+1$.

Vendo a possibilidade de a exponencial $e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}$ resultar -1, notamos que isto ocorrerá se

$$\frac{\pi}{2}(h+k+l) = (2n+1)\pi \Rightarrow h+k+l = 2(2n+1)$$

isto é, se $h+k+l$ for o DOBRO DE UM NÚMERO ÍMPAR. Ou ainda, se $\frac{\pi}{2}(h+k+l)$ for MÚLTIPLO ÍMPAR DE π. Neste caso não interessa a configuração individual de h, k e l pois teremos o primeiro colchete no fator de estrutura se anulando e estaremos numa situação de MÍNIMO.

Na hipótese de $e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} = \pm i$ (Situação 2), veremos que não podemos distingüir entre $+i$ e $-i$, mas isto não nos afetará pois também veremos que o resultado é idêntico em ambas as situações.

Precisamos que h, k e l sejam simultaneamente ímpares (situação iii) ou que apenas um deles seja ímpar (situação iv)[12]. No primeiro caso (iii), as exponenciais de duas parcelas apenas darão todas $+1$, visto que $\mathcal{I}+\mathcal{I}=\mathcal{P}$, resultando

$$\frac{S_{\vec{G}}}{f_0} = [1 \pm i][1+1+1+1] = 4(1 \pm i)$$

Até agora simplesmente avaliamos os valores de $S_{\vec{G}}$. Mas o que realmente nos interessa é a intensidade da radiação difratada, que é proporcional a $S^*_{\vec{G}}S_{\vec{G}}$. Isto posto concluiremos de imediato que

$$|S_{\vec{G}}|^2 = 16(1 \pm i)(1 \mp i)f_0^2 = 32 f_0^2$$

que não deixa de ser um MÁXIMO, embora de menor intensidade que aquele encontrado anteriormente. Se contudo estivermos na situação iv, apreciaremos que teremos duas exponenciais dando -1 (aquelas que dão combinações ímpares entre h, k e l) e uma dando $+1$ (combinação par). Com isso,

$$\frac{S_{\vec{G}}}{f_0} = [1 \pm i][1-1-1+1] = 0$$

outro MÍNIMO. Ufa! consumimos todas as possibilides. Agora vamos resumir:

Teremos um MÁXIMO se:

1. $h+k+l$ for PAR e todos os índices forem PARES $(h+k+l = 2(2n) = 4n$, com n qualquer);

2. $h+k+l$ for ÍMPAR e todos os índices forem ÍMPARES $(h+k+l = 2p+1 = n$, com n ímpar)[13].

E um MÍNIMO nas outras situações.

---

[12] Pelas equações (7) e (9).

[13] Os dois últimos parênteses tenta traduzir a resposta da forma como chegamos há pouco para aquela esperada no enunciado da questão, de modo a mostrar que são exatamente a mesma.

5. *Para uma rede cúbida de aresta a, localizar em uma base ortogonal um plano de índices de Miller* (15 6 10)*. Se* $a = \frac{2\pi}{3}\mathring{A}$*, ache o menor* $\vec{G}$ *da rede recíproca perpendicular a este plano. Qual é a distância interplanar?*

A partir dos índices de Miller podemos, como no primeiro exercício, encontrar os pontos de interseção do plano com os vetores primitivos da rede direta.

$$15\ 6\ 10 \ \rightarrow \ \frac{1}{15}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{10} \ \rightarrow \ \frac{2}{30}\ \frac{5}{30}\ \frac{3}{30} \ \rightarrow \ 2\ 5\ 3$$

Isto significa que o plano desejado cruza os eixos $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3\} = \{a\hat{\imath}, a\hat{\jmath}, a\hat{k}\}$ em $x_1 = 2$, $x_2 = 5$ e $x_3 = 3$. Ou seja, o plano em questão é determinado pelo terno $\{2a\hat{\imath}, 5a\hat{\jmath}, 3a\hat{k}\}$[14]. Além disso, fica claro que o menor vetor de translação da rede recíproca é $\vec{k}_0 = 15\vec{b}_1 + 6\vec{b}_2 + 10\vec{b}_3$. E para podermos determinar a distância entre os planos consecutivos da família precisamos determinar os vetores primitivos da rede recíproca de forma idêntica àquela dos exercícios 1, 3 e 4:

O volume da célula da rede direta é

$$V_d = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3| = \frac{a^3}{8}\begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4}$$

E os vetores primitivos da rede recíproca são

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_p}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{8\pi}{a^3}\begin{vmatrix} \hat{\imath} & \hat{\jmath} & \hat{k} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}\hat{\imath}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_p}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{8\pi}{a^3}\begin{vmatrix} \hat{\imath} & \hat{\jmath} & \hat{k} \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}\hat{\jmath}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_p}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{8\pi}{a^3}\begin{vmatrix} \hat{\imath} & \hat{\jmath} & \hat{k} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}\hat{k}$$

Logo temos $\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{a}(15\hat{\imath} + 6\hat{\jmath} + 10\hat{k})$, que dá $|\vec{k}_0| = \frac{38\pi}{a} = 57\mathring{A}^{-1}$ e, obviamente,

$$d_{15\ 6\ 10} = \frac{2\pi}{|\vec{k}_0|} \cong 0,11\mathring{A}$$

[14] Cuja equação é $\frac{x}{2} + \frac{y}{5} + \frac{z}{3} = 1$.