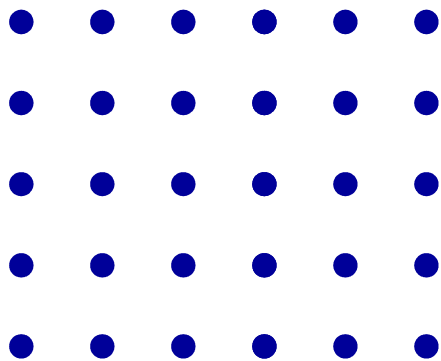


Redes cristalinas

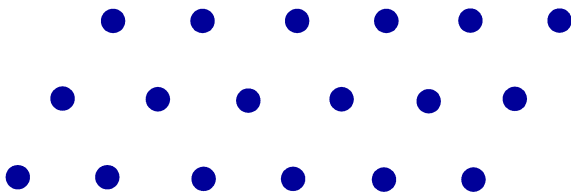
- Rede: conjunto de pontos “idênticos” no espaço.
- Exemplos (1D e 2D):

Rede linear: ● ● ● ● ● ● ● ● ●

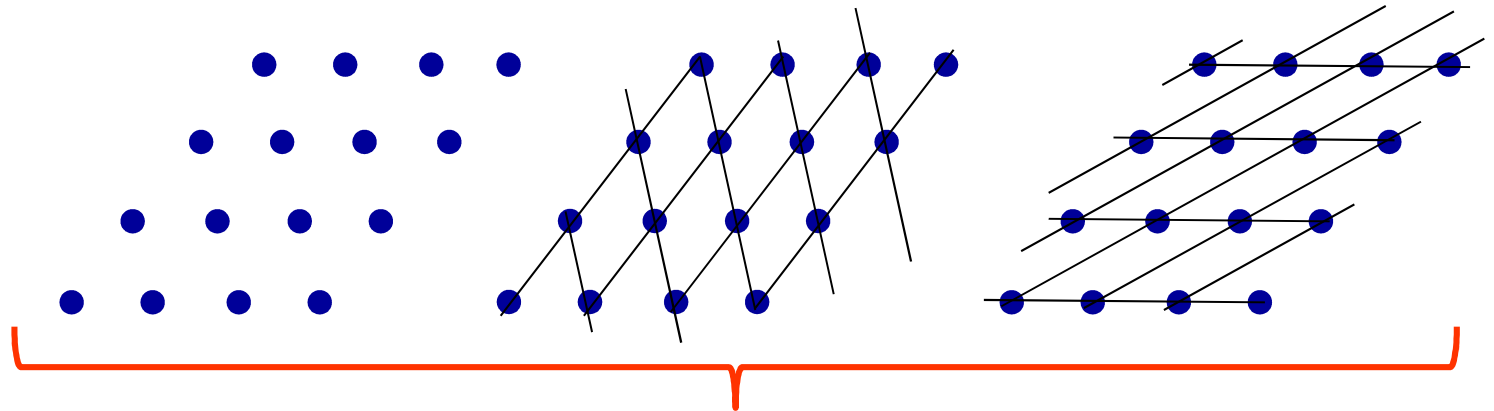
Rede quadrada.



Rede triangular.



Outras redes. Qual a diferença entre elas?

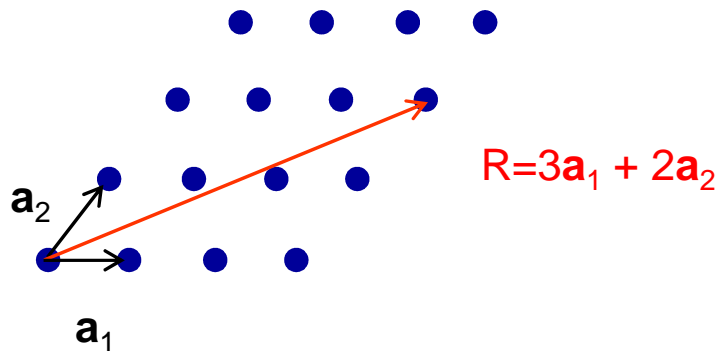


São redes equivalentes!

(A rede é definida pelos pontos e não pela conectividade)

Vetor de translação e vetores primitivos

- Vetores primitivos:



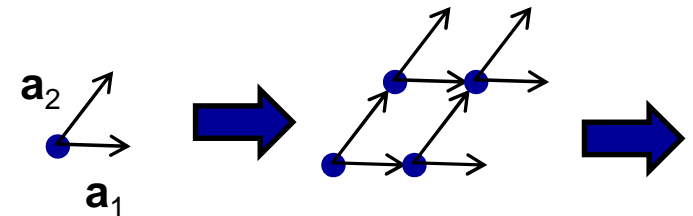
Vetor de translação na rede:

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

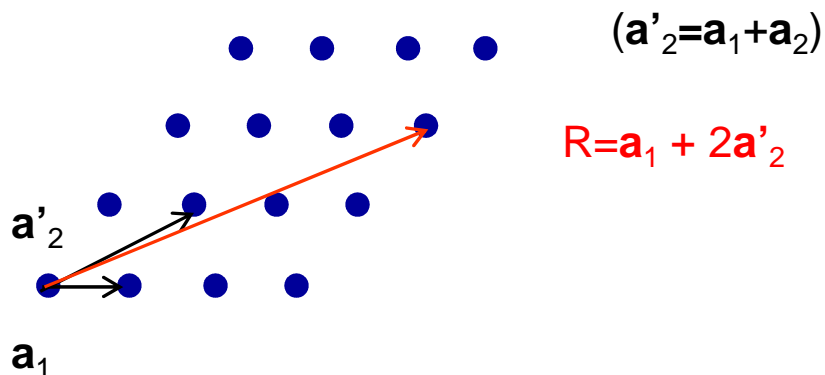
n_1 , n_2 e n_3 são **inteiros**.

(se não forem inteiros, os vetores \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 não são primitivos)

- Dados os vetores primitivos, geramos a rede.



- Note que é possível usar outras bases primitivas (às vezes é útil).

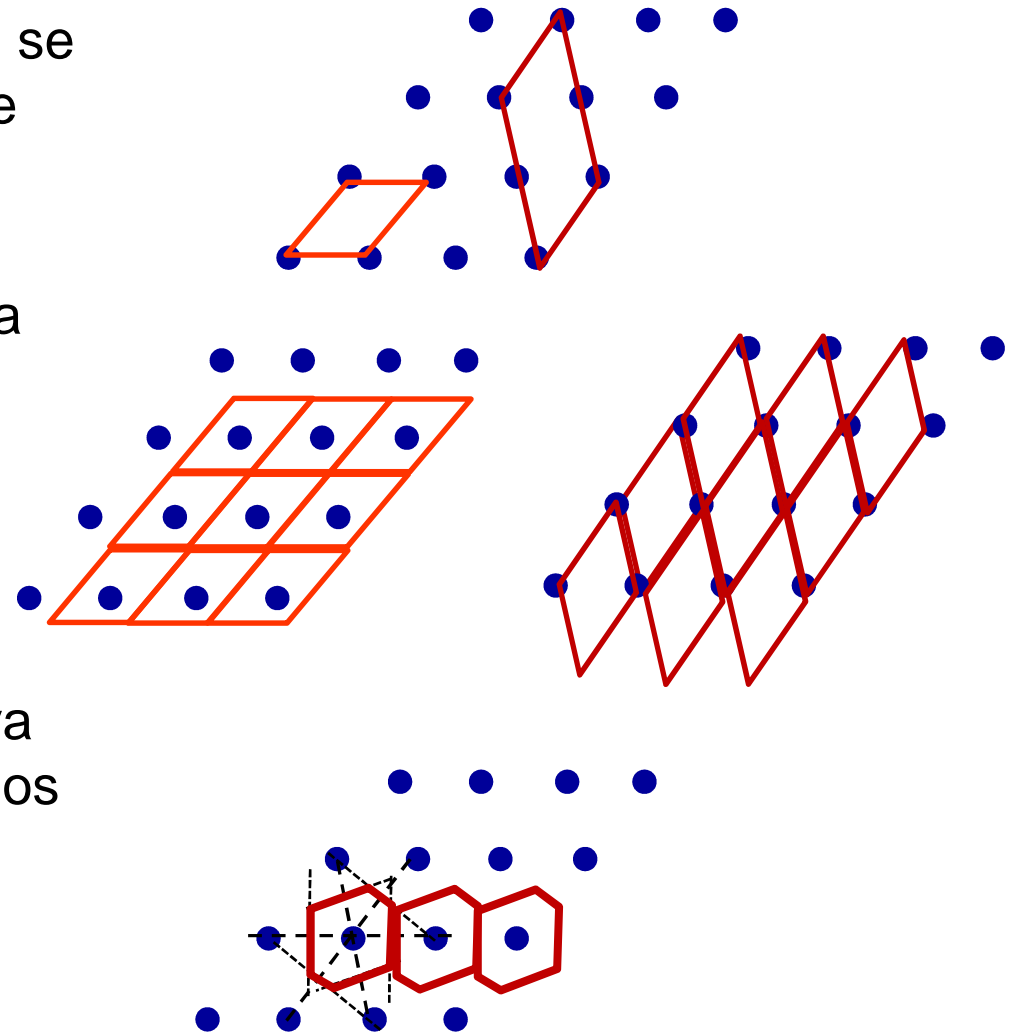


$$\mathbf{R} = n'_1 \mathbf{a}'_1 + n'_2 \mathbf{a}'_2 + n'_3 \mathbf{a}'_3$$

Células unitárias e células primitivas

- **Célula unitária:** região do espaço que, se transladada pelo vetores da rede, cobre todo o espaço (infinitas possibilidades)
- **Célula unitária primitiva:** célula unitária que contém apenas um ponto da rede. (também infinitas possibilidades)
- **Célula de Wigner-Seitz:** célula primitiva tal que “seus pontos estão mais próximos de um dado ponto da rede do que de qualquer outro ponto da rede.”
- Em 2D, são hexágonos ou retângulos (Vide Lista)

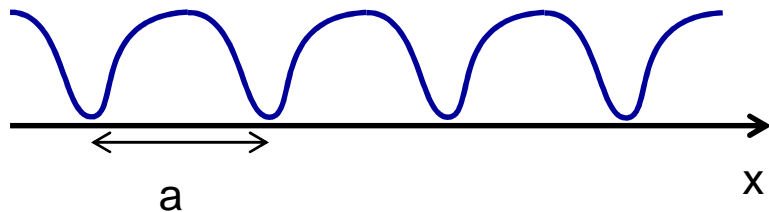
Exemplos:



Partículas em potenciais periódicos

- Potencial periódico: $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$

$$V(x) = V(x + n \cdot a) \quad \text{para qualquer } \mathbf{R} \text{ da rede.}$$



- Transformada de Fourier “no espaço”:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{G}}$$

A periodicidade de $V(\mathbf{r})$ implica em:

$$e^{i\mathbf{R} \cdot \mathbf{G}} = 1 \Rightarrow \mathbf{R} \cdot \mathbf{G} = 2n\pi \quad \text{com } n \text{ inteiro.}$$

- Rede recíproca:

$$\text{Vetor de translação na rede direta: } \mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Logo, os vetores \mathbf{G} no espaço recíproco obedecem:

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{A}_1 + m_2 \mathbf{A}_2 + m_3 \mathbf{A}_3$$

onde os \mathbf{A}_k são tais que:

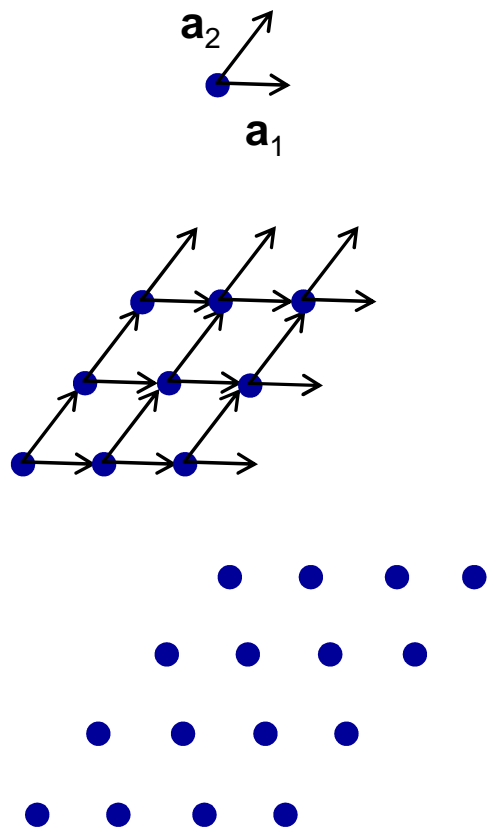
$$\mathbf{a}_\ell \cdot \mathbf{A}_j = 2\pi \delta_{\ell j}$$

\mathbf{a}_1 : vetores primitivos da rede direta.

\mathbf{A}_k : vetores primitivos da rede recíproca.

Rede recíproca e Zona de Brillouin.

■ Rede direta



$$\mathbf{a}_\ell \cdot \mathbf{A}_k = 2\pi\delta_{\ell k}$$

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{A}_1 = \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{A}_2 = 2\pi$$



$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{A}_2 = \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{A}_1 = 0$$

A célula de Wigner-Seitz na rede recíproca é chamada de primeira **Zona de Brillouin**.

Todo vetor \mathbf{k} na rede recíproca pode ser escrito em termos de um vetor \mathbf{q} na 1a ZB e um vetor de translação \mathbf{G} :

$$\mathbf{k} = \mathbf{q} + \mathbf{G}$$

■ Rede recíproca

