Rede Recíproca[1]

Definição de Rede Recíproca

Considere um conjunto de pontos $\vec{\boldsymbol{R}}$ constituintes de uma rede de Bravais, e uma onda plana, $e^{i\vec{k}.\vec{r}}$, para um $\vec{\boldsymbol{k}}$ geral, de maneira que a onda plana não terá normalmente a periodicidade da rede de Bravais, exceto para determinados valores especiais do vetor de onda ($\vec{\boldsymbol{k}}$). *O conjunto de todos os vetores de onda $\vec{\boldsymbol{K}}$ que geram ondas planas cuja periodicidade coincide com pontos de uma dada rede de Bravais é conhecida como sua rede reciproca.*

Analiticamente, $\vec{\boldsymbol{K}}$ pertence à rede recíproca de uma rede de Bravais $\vec{\boldsymbol{R}}$, desde que satisfaça a relação

$$e^{i\vec{K}.(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{K}.\vec{r}}.e^{i\vec{K}.\vec{R}} = e^{i\vec{K}.\vec{r}} \qquad \text{(Eq.5.1)}$$

para qualquer $\vec{\boldsymbol{r}}$ em algum $\vec{\boldsymbol{R}}$ da rede de Bravais. Portanto a rede recíproca é caracterizada por todos os vetores de onda $\vec{\boldsymbol{K}}$ que satisfazem:

$$e^{i\vec{K}.\vec{R}} = 1 \qquad \text{(Eq.5.2)}$$

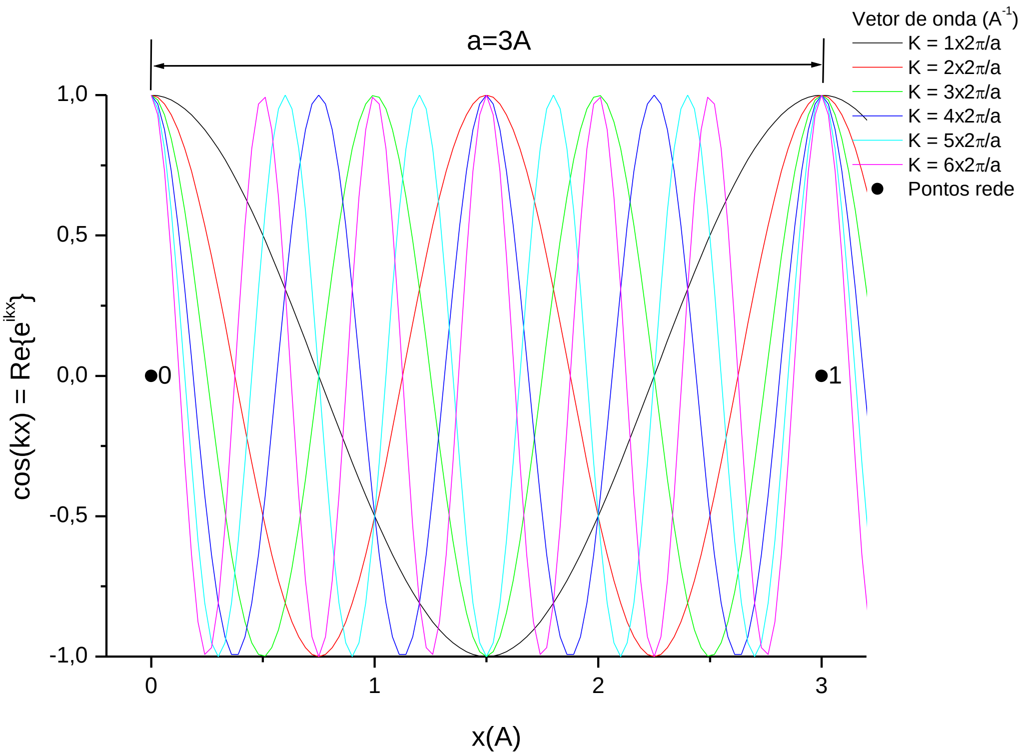
para todos os $\vec{\boldsymbol{R}}$ da rede direta.

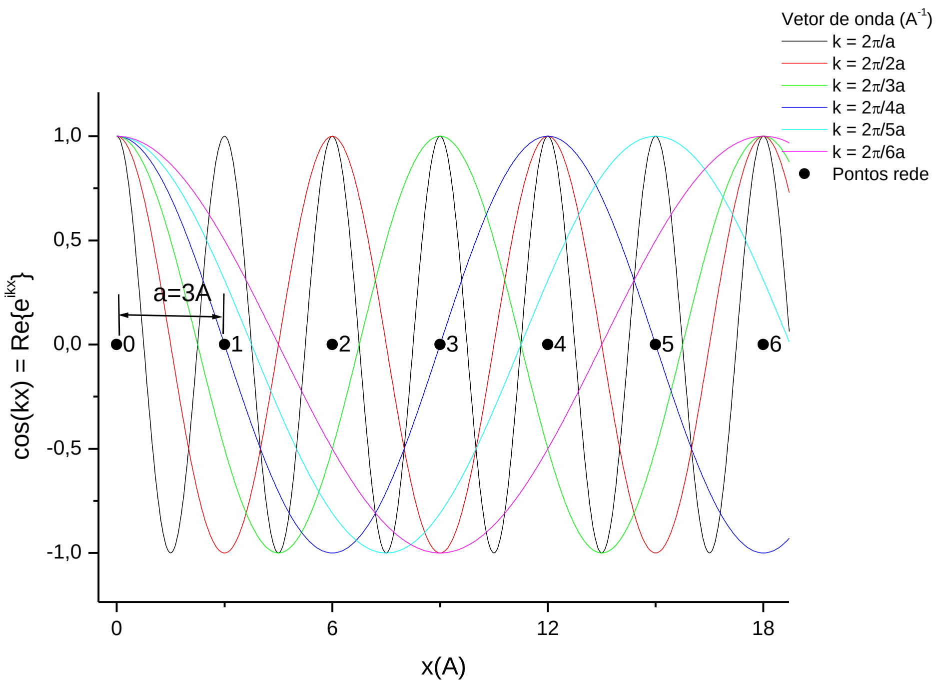
A rede de Bravais que determina uma dada rede recíproca é frequentemente chamada de rede direta, quando vista em relação à sua rede recíproca. Note também que embora possamos definir um conjunto de vetores $\vec{\boldsymbol{K}}$ que satisfaçam a Eq.5.2 para um conjunto arbitrário de vetores $\vec{\boldsymbol{R}}$, tal conjunto $\vec{\boldsymbol{K}}$ só é chamado de rede recíproca quando o conjunto de vetores $\vec{\boldsymbol{R}}$ for uma rede de Bravais.

Exemplo. Em 1 dimensão temos:

Fig.1: (a) Cos(Kx), para diferentes valores de K, pertencentes à rede recíproca. Observe que todas as funções apresentam valores máximos f(x)=1 ***em todos*** *os pontos da rede direta. Portanto os vetores $\frac{2\pi}{a}$, $2\times\frac{2\pi}{a}$, $3\times\frac{2\pi}{3a}$, etc... são vetores da rede recíproca da rede R. (b) Em R=0, a, 2a,3a, etc... , observamos que máximos de $\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$,$\cos\left(\frac{2\pi}{2a}x\right)$, $\cos\left(\frac{2\pi}{3a}x\right)$, etc... são iguais a 1, entretanto, nesse caso apenas primeiro, $\frac{2\pi}{a}$, é vetor da rede recíproca. Os outros são vetores do espaço k apenas.*

[1] Traduzido e adaptado de Ashcroft e Mermin para a disciplina Propriedades Ópticas de Materiais. Prof. Humberto, 2016.





Vetores Primitivos da Rede Recíproca

Seja $\overrightarrow{\boldsymbol{a}_1}, \overrightarrow{\boldsymbol{a}_2}$ e $\overrightarrow{\boldsymbol{a}_3}$ um conjunto de vetores primitivos da rede direta. Então a rede recíproca pode ser gerada pelos três vetores primitivos $\overrightarrow{\boldsymbol{b}_1}, \overrightarrow{\boldsymbol{b}_2}$ e $\overrightarrow{\boldsymbol{b}_3}$, dados por:

$$\overrightarrow{\boldsymbol{b}_1} = 2\pi \frac{\overrightarrow{\boldsymbol{a}_2} \times \overrightarrow{\boldsymbol{a}_3}}{\overrightarrow{\boldsymbol{a}_1}.(\overrightarrow{\boldsymbol{a}_2} \times \overrightarrow{\boldsymbol{a}_3})}$$

$$\overrightarrow{\boldsymbol{b}_2} = 2\pi \frac{\overrightarrow{\boldsymbol{a}_3} \times \overrightarrow{\boldsymbol{a}_1}}{\overrightarrow{\boldsymbol{a}_1}.(\overrightarrow{\boldsymbol{a}_2} \times \overrightarrow{\boldsymbol{a}_3})}$$

$$\overrightarrow{\boldsymbol{b}_3} = 2\pi \frac{\overrightarrow{\boldsymbol{a}_1} \times \overrightarrow{\boldsymbol{a}_2}}{\overrightarrow{\boldsymbol{a}_1}.(\overrightarrow{\boldsymbol{a}_2} \times \overrightarrow{\boldsymbol{a}_3})}$$

***

Para verificar que os vetores $\overrightarrow{\boldsymbol{b}_\iota}$ fornecem um conjunto de vetores primitivos da rede recíproca notamos primeiramente que:

$$\overrightarrow{\boldsymbol{b}_\iota}.\overrightarrow{\boldsymbol{a}_j} = 2\pi\delta_{ij}$$

onde δ_{ij} é o símbolo do delta de Kronecker:

$$\delta_{ij} = 0, \quad i \neq j$$

$$\delta_{ij} = 1, \quad i = j$$

Verifica-se também que qualquer vetor $\vec{\boldsymbol{k}}$ pertencente ao espaço recíproco, pode ser escrito como uma combinação linear de $\overrightarrow{\boldsymbol{b}_\iota}$:

$$\vec{\boldsymbol{k}} = k_1\overrightarrow{\boldsymbol{b}_1} + k_2\overrightarrow{\boldsymbol{b}_2} + \ k_3\overrightarrow{\boldsymbol{b}_3}$$

Quando $k_1, k_2\ e\ k_3$ são números reais quaisquer, $\vec{\boldsymbol{k}}$ é um vetor qualquer do espaço recíproco, porém quando $k_1, k_2\ e\ k_3$ são números ***inteiros,*** digamos $m_1, m_2\ e\ m_3$, $\vec{\boldsymbol{k}} = \vec{\boldsymbol{K}}$ é um vetor da rede recíproca. Portanto:

Para um vetor da rede direta:

$$\vec{\boldsymbol{R}} = n_1\overrightarrow{\boldsymbol{a}_1} + n_2\overrightarrow{\boldsymbol{a}_2} + \ n_3\overrightarrow{\boldsymbol{a}_3}, \qquad n_1, n_2, n_3\ inteiros$$

Para um vetor da rede recíproca:

$$\vec{\boldsymbol{K}} = m_1\overrightarrow{\boldsymbol{b}_1} + m_2\overrightarrow{\boldsymbol{b}_2} + \ m_3\overrightarrow{\boldsymbol{b}_3}, \qquad m_1, m_2, m_3\ inteiros$$

Nessas condições, podemos escrever:

$$\vec{\boldsymbol{K}}.\vec{\boldsymbol{R}} = 2\pi(m_1.n_1 + m_2.n_2 + m_3.n_3) = \ 2\pi \times inteiro => \ e^{i\vec{\boldsymbol{K}}.\vec{\boldsymbol{R}}} = 1$$

Enquanto para $\vec{\boldsymbol{k}}$ e $\vec{\boldsymbol{r}}$ quaisquer:

$$\vec{\boldsymbol{k}}.\vec{\boldsymbol{r}} = 2\pi(k_1.r_1 + k_2.r_2 + k_3.r_3) = \ 2\pi \times real$$

Quando o número real é não inteiro $e^{i\vec{\boldsymbol{k}}.\vec{\boldsymbol{r}}} \neq 1$.

Primeira Zona de Brillouin

A célula primitiva de Wigner-Seitz da rede recíproca é conhecida como a primeira zona de Brillouin. Como o nome sugere pode-se definir zonas de Brillouin superiores, que têm aplicações no estudo da teoria dos níveis eletrônicos de um potencial periódico. A mais importante é a primeira zona, que é geralmente utilizada nas representações da estrutura de bandas de um sólido.

Quando nos referimos à primeira zona de Brillouin de uma de uma rede de Bravais no espaço r (associada a uma estrutura cristalina particular) o que se quer dizer é a célula de Wigner-Seitz da rede recíproca associada.

Exemplo:

A recíproca de uma rede cúbica de corpo centrado (do inglês: *Body Centered Cubic* - BCC) é uma rede cúbica de face centrada (do inglês: *Face Centered Cubic* – FCC), a primeira zona de Brillouin de uma rede BCC é a célula de Wigner-Seitz de uma rede FCC. Em oposição, a primeira zona de Brillouin de uma rede FCC é uma célula de Wigner-Seitz de uma rede BCC (veja exercício da lista).

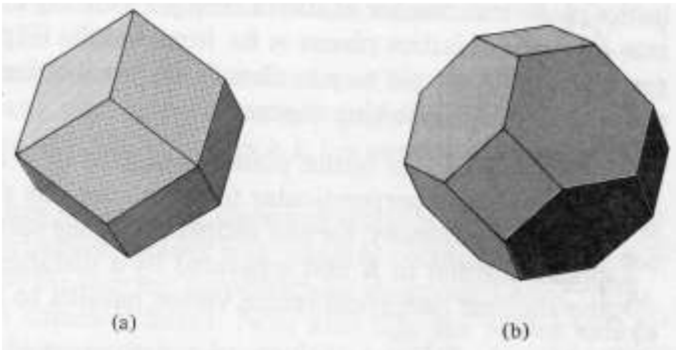


Fig.2 Primeira zona de Brillouin: (a) de uma rede direta FCC, (b) De uma rede direta BCC.