

O USO DE DUAS DIMENSÕES NO ENSINO DA CRISTALOGRAFIA ELEMENTAR

M. DUARTE NAIA e J. M. FERREIRA

Departamento de Física, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro,
Quinta de Prados, 5000 VILA REAL

A rede Bravais bidimensional é usada para introduzir os conceitos básicos de cristalografia sem recorrer à bem mais complexa representação tridimensional. Apresentam-se as noções de rede Bravais, vectores primitivos e célula primitiva para uma rede Bravais geral bidimensional e sugere-se um método simples de determinar os índices de Miller para qualquer família de linhas dessa rede. Relaciona-se o espaçamento entre as linhas adjacentes desta família com os vectores primitivos da rede directa ou recíproca utilizando apenas geometria elementar e, a título de exemplo, aplicam-se estes conceitos a uma rede Bravais triangular.

A simplicidade analítica das representações bidimensionais, bem como a facilidade em visualizá-las, sugerem a sua utilização no ensino da cristalografia elementar a nível pré-universitário, deixando as representações tridimensionais para um nível mais avançado.

Introdução

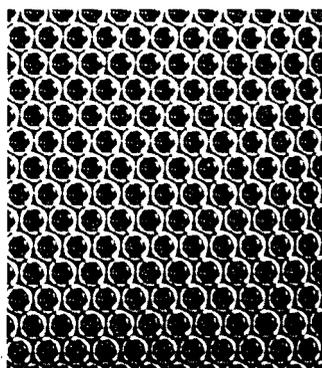
Numa Licenciatura em Física, a disciplina de Física do Estado Sólido deve incluir noções básicas de cristalografia tais como as de rede Bravais, vectores primitivos, célula primitiva, índices de Miller, espaçamento entre planos da rede e rede recíproca. Uma vez que os cristais são entidades tridimensionais é necessário a este nível recorrer igualmente a uma análise tridimensional, mas a maior parte destas noções pode ser introduzida aos alunos a um nível pré-universitário utilizando um modelo simplificado a duas dimensões. Esta estratégia evita a representação de modelos cristalinos tridimensionais no quadro bidimensional, uma dificuldade apontada por Riley (1970). Numa aplicação interessante da análise bidimensional à equação de Bragg, Fish (1971) utilizou uma rede ortorrômbica, tendo descrito algumas das suas propriedades. Este artigo propõe-se apresentar as propriedades básicas de uma qualquer rede Bravais bidimensional utilizando apenas conceitos elementares de matemática.

Rede de Bravais bidimensional; célula e vectores primitivos

Existem vários modos equivalentes de definir uma rede Bravais bidimensional e introduzir o conceito de célula e vectores primitivos. Uma maneira conveniente de fazer as duas coisas é adaptar a definição dada por Ashcroft e Mermin (1976) de uma rede Bravais tridimensional para o caso de duas dimensões. Uma rede Bravais bidimensional é então definida como consistindo de todos os pontos com vectores de posição

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (1)$$

onde \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , conhecidos por vectores primitivos, são quaisquer dois vectores não colineares, e n_1 e n_2 compreendem todos os números inteiros (positivos, negativos ou zero). Um exemplo de tal rede é dado na figura 1, a qual pode ser usada para mostrar que para que um par de vectores possa ser designado de primitivo, tem de satisfazer o critério que todos os pontos da



Redes de Bravais
Célula e vectores primitivos
Índices de Miller
Espaço recíproco

rede possam ser gerados por uma combinação linear destes vectores com coeficientes inteiros. Para a rede da figura 1, a_1 e a_2 são uma escolha possível de vectores primitivos pois satisfazem este critério. O mesmo não se verifica para a'_1 e a'_2 (figura 1) pois, por exemplo, o ponto A da rede pode apenas ser atingido a partir da origem por uma combinação linear de a'_1 e a'_2 com coeficientes não inteiros, ou seja, $OA = (3/2)a'_1 + (3/2)a'_2$. É útil referir nesta altura que, embora haja uma infinidade de escolhas possíveis de conjuntos de vectores primitivos a'_1 e a'_2 , para uma dada rede, a área S da célula primitiva, dada por

$$S = |a_1 \wedge a_2|, \quad (2)$$

tem um valor que é independente da escolha de a_1 e a_2 para a rede em questão.

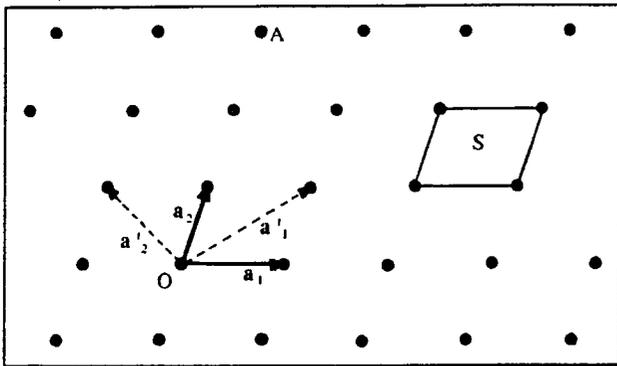


Fig. 1 — Porção da mais geral das redes de Bravais bidimensionais, a rede oblíqua, mostrando um par de vectores primitivos (a_1 e a_2), e um par de vectores não primitivos (a'_1 e a'_2). Mostra-se igualmente uma célula primitiva (S).

Índices de Miller; distância entre linhas da rede

Para se determinar o espaçamento entre linhas adjacentes de uma família de linhas da rede é conveniente dar a orientação destas linhas, e isto pode fazer-se especificando os índices de Miller (hk) de qualquer linha da família relativamente ao conjunto escolhido de vectores primitivos a_1 e a_2 . A determinação destes índices em duas dimensões é imediata utilizando o seguinte método (figura 2):

(i) Seleccione-se a linha da família que está mais próxima da origem e que intersecte os eixos de a_1 e a_2 , em dois pontos da rede, P_1 e P_2 .

(ii) As posições destes dois pontos, ka_1 e ha_2 , dão os índices de Miller (hk) da família de linhas da rede.

Tendo determinado os índices de Miller, o espaçamento d_{hk} entre linhas adjacentes da família pode determi-

nar-se facilmente por geometria elementar, da seguinte maneira: dada a linha da rede contendo os pontos P_1 e P_2 , desenha-se uma linha adjacente contendo os pontos P_3 e P_4 (figura 2). O paralelogramo $P_1P_2P_3P_4$ tem base $P_1P_2 = |ha_2 - ka_1|$ e altura d_{hk} , portanto a sua área é $|ha_2 - ka_1| d_{hk}$. Uma vez que este paralelogramo constitui uma célula primitiva, a sua área é também igual a $|a_1 \wedge a_2|$. Logo, o espaçamento entre linhas adjacentes, d_{hk} , é dado por

$$d_{hk} = |a_1 \wedge a_2| / |ha_2 - ka_1|. \quad (3)$$

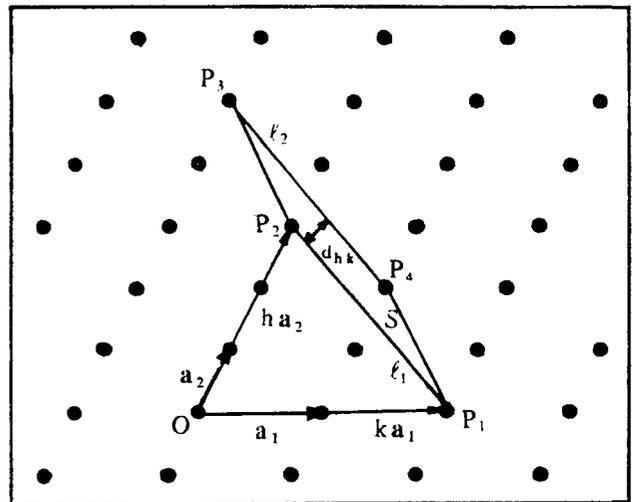


Fig. 2 — Rede oblíqua com duas linhas adjacentes (ℓ_1 e ℓ_2) pertencentes a uma família de linhas da rede. Os índices de Miller (hk) da família são determinados a partir das posições dos pontos P_1 e P_2 relativamente à origem O (ka_1 e ha_2 respectivamente). O espaçamento entre as linhas (d_{hk}), e a célula primitiva (S) formada pelo paralelogramo $P_1P_2P_3P_4$, também estão indicados.

Espaço recíproco

Um método simples de introduzir a noção de espaço recíproco é resolver o problema de determinar uma base b_1 e b_2 na qual o vector $hb_1 + kb_2$ seja sempre perpendicular à família (hk) de linhas da rede para qualquer escolha de h e k , ou seja

$$(hb_1 + kb_2) \cdot (ha_1 - ka_2) = 0. \quad (4)$$

Da equação (4),

$$h^2 a_2 \cdot b_1 - k^2 a_1 \cdot b_2 + hk(a_2 \cdot b_2 - a_1 \cdot b_1) = 0. \quad (5)$$

A equação (5) só é válida para qualquer família (hk) de linhas da rede se os vectores \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 satisfizerem as condições seguintes:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_1 &= \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_2 = 0 \\ \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_1 &= \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_2 = C, \end{aligned} \quad (6)$$

onde C é uma constante.

No sistema de coordenadas xy , sejam

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= (a_{1x}, a_{1y}) \\ \mathbf{a}_2 &= (a_{2x}, a_{2y}) \\ \mathbf{b}_1 &= (b_{1x}, b_{1y}) \\ \mathbf{b}_2 &= (b_{2x}, b_{2y}). \end{aligned} \quad (7)$$

Das equações (6) e (7), obtém-se o seguinte sistema

$$\begin{aligned} a_{1x}b_{1x} + a_{1y}b_{1y} &= C \\ a_{2x}b_{1x} + a_{2y}b_{1y} &= 0 \\ a_{1x}b_{2x} + a_{1y}b_{2y} &= 0 \\ a_{2x}b_{2x} + a_{2y}b_{2y} &= C. \end{aligned} \quad (8)$$

Resolvendo o sistema (8), vem imediatamente que

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= C(a_{2y}, -a_{2x})/|\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2| \\ \mathbf{b}_2 &= C(-a_{1y}, a_{1x})/|\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2|. \end{aligned} \quad (9)$$

Uma vez que \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 são vectores não-colineares (equação (9); figura 3), o conjunto de todas as combinações lineares possíveis de \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 com coeficientes inteiros, gera outra rede de Bravais a qual é denominada *rede recíproca*.

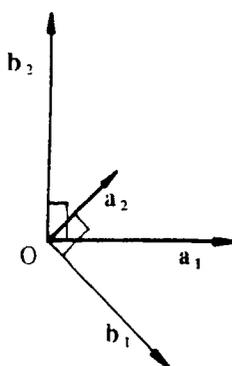


Fig. 3 — Orientação dos vectores primitivos \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 da rede recíproca relativamente aos vectores primitivos \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 da rede directa.

Utilizando as equações (3) e (9) é fácil deduzir a relação entre o espaçamento d_{hk} da família de linhas (hk) da rede directa e o módulo do vector da rede recíproca

$h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2$ normal a esta família. Da equação (9), o módulo deste vector é

$$\begin{aligned} |h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2| &= C|(ha_{2y} - ka_{1y}, ka_{1x} - ha_{2x})|/|\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2| \\ &= C(h^2a_{2y}^2 + k^2a_{1y}^2 - 2hka_{1y}a_{2y})^{1/2}/|\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2|. \end{aligned} \quad (10)$$

Da equação (3)

$$d_{hk} = |\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2|/(h^2a_{2y}^2 + k^2a_{1y}^2 - 2hka_{1y}a_{2y})^{1/2}. \quad (11)$$

Comparando as equações (10) e (11) obtém-se

$$d_{hk} = C/|h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2| \quad (12)$$

um resultado bem conhecido cuja demonstração a três dimensões é bem mais complexa. A constante de proporcionalidade C toma-se geralmente como sendo igual a 1 ou 2π .

Rede triangular

Os conceitos expostos aqui podem ser utilizados no estudo de qualquer rede Bravais bidimensional, por exemplo a rede triangular da figura 4. Os vectores primitivos desta rede, \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , podem escrever-se

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= (a/2, a\sqrt{3}/2) \\ \mathbf{a}_2 &= (-a/2, a\sqrt{3}/2) \end{aligned} \quad (13)$$

e a área da célula primitiva para esta rede é

$$S = |\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2| = a^2\sqrt{3}/2. \quad (14)$$

Para se determinarem os índices de Miller da família de linhas da rede representadas na figura 4, note-se que ℓ é a linha mais próxima da origem e que intersecta os eixos de \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 nos dois pontos da rede P_1 e P_2 , de coordenadas $1\mathbf{a}_1$ e $2\mathbf{a}_2$ respectivamente. Logo, a família de linhas da rede tem índices de Miller (21). Das equações (3), (13) e (14), o espaçamento entre as linhas da família (21) é

$$\begin{aligned} d_{21} &= |\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2|/|2\mathbf{a}_2 - 1\mathbf{a}_1| \\ &= (a^2\sqrt{3}/2)/|(-3a/2, a\sqrt{3}/2)| = a/2. \end{aligned} \quad (15)$$

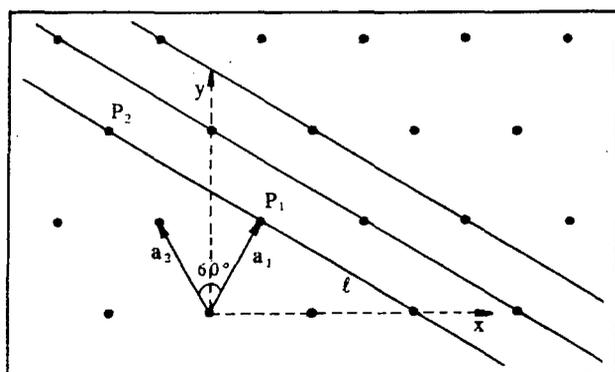


Fig. 4 — Rede triangular com constante da rede a e vectores primitivos a_1 e a_2 , onde $|a_1| = |a_2| = a$ e o ângulo entre a_1 e a_2 é 60° . Indica-se uma família de linhas paralelas da rede, e os pontos da rede P_1 e P_2 numa linha (l) pertencente a esta família.

Das equações (9), (13) e (14) resulta que a rede triangular da figura 4 tem uma rede recíproca de vectores primitivos

$$\begin{aligned} b_1 &= (2C/(a^2\sqrt{3}))(a\sqrt{3}/2, a/2) \\ b_2 &= (2C/(a^2\sqrt{3}))(-a\sqrt{3}/2, a/2) \end{aligned} \quad (16)$$

os quais têm, relativamente a a_1 e a_2 , a orientação indicada na figura 5. Para visualizar a rede recíproca gerada por b_1 e b_2 , note-se que esta rede pode também ser gerada por um conjunto alternativo de vectores primitivos

$$\begin{aligned} b_1 &= (2C/(a^2\sqrt{3}))(a\sqrt{3}/2, a/2) \\ b'_2 &= b_1 + b_2 = (2C/(a^2\sqrt{3}))(0, a) \end{aligned} \quad (17)$$

os quais formam entre si um ângulo de 60° e têm módulos iguais (equação 17; figura 5). É portanto fácil de visuali-

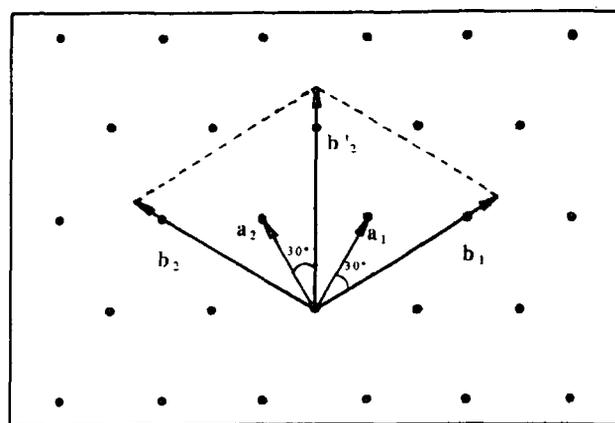


Fig. 5 — Vectores primitivos a_1 e a_2 de uma rede triangular, e os correspondentes vectores primitivos b_1 e b_2 da rede recíproca. Note-se que a rede recíproca pode também ser gerada por b_1 e b'_2 , onde b_1 forma um ângulo de 60° com $b'_2 = b_1 + b_2$, e $|b_1| = |b'_2|$, ou seja a rede recíproca também é triangular.

zar que a recíproca da rede triangular é também ela uma rede triangular, rodada de 30° relativamente à rede original.

Conclusão

A simplicidade analítica das representações bidimensionais, juntamente com a sua fácil visualização, sugerem a possibilidade da sua utilização como forma de introduzir o conceito de rede Bravais numa fase preparatória, deixando a generalização à rede tridimensional para o nível Universitário em Física do Estado Sólido.

BIBLIOGRAFIA

- ASHCROFT, N. W. e MERMIN, N. D. — *Solid State Physics*, Holt Rinehart and Winston, E.U.A. (1976).
 FISH, P. W. — *Electron diffraction and the Bragg equation*, Physics Education 6, 7-9 (1971).
 RILEY, R. — *Bragg's law for X-ray crystal diffraction*, Physics Education 5, 371-372 (1970).

J. M. Ferreira é Professor Auxiliar na Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, Departamento de Física, e M. Duarte Naia é Assistente Estagiário da mesma instituição.

FÍSICA 96

Vai realizar-se de 13 a 17 de Setembro de 1996 na Universidade do Algarve, Faro, a 10.ª Conferência Nacional de Física e o 6.º Encontro Ibérico para o Ensino da Física.

Os desenvolvimentos mais importantes na Física actual vão ser realçados, dedicando-se ainda especial atenção ao Ensino da Física nas Escolas portuguesas.

A 1.ª Circular que vai junta a este número da Gazeta apresenta informação mais detalhada.

Na 2.ª Circular vai ser apresentado o programa da Conferência nos seus diferentes aspectos.

Para mais esclarecimentos contactar:

Secretariado da Física 96
 SPF - Delegação Regional do Sul e Ilhas
 Av. da República, 37-4., 1000 Lisboa
 Telef. (01)7973251
 Fax (01)7952349
 E-mail: fisica96@co.fc.ul.pt