

# CRISTALOGRAFIE:

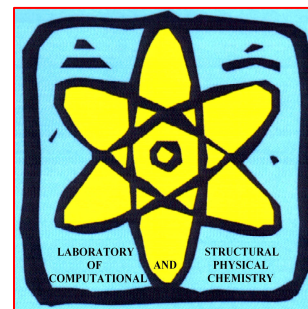
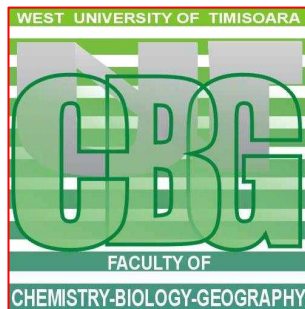
## C5: REȚELE BRAVAIS, ZONE BRILLOUIN

### Conf. Dr. Mihai V. PUTZ

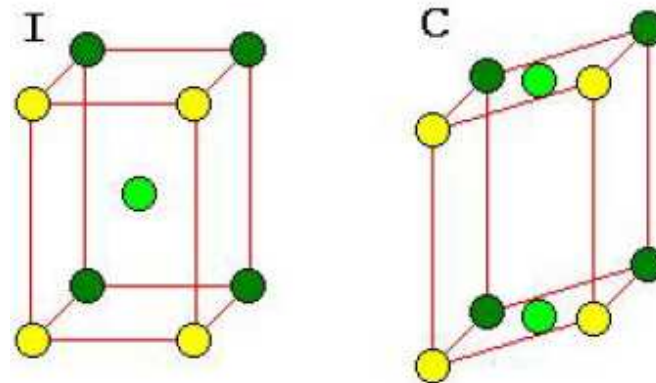
*Chemistry Department, West University of Timisoara,  
Pestalozzi Street No.16, Timisoara, RO-300115, Romania;  
E-mails: [mvputz@cbg.uvt.ro](mailto:mvputz@cbg.uvt.ro) or [mv\\_putz@yahoo.com](mailto:mv_putz@yahoo.com) ;  
Web: <http://www.mvputz.iqstorm.ro>*

*Member of American Chemical Society  
Member of European Society of Mathematical Chemistry*

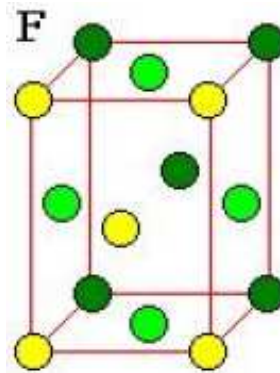
*Editor in-Chief of Int. J. Chem. Model. (at NOVA Publishers)  
Editor in-Chief of Int. J. Environ. Sci. (at SERIALS Publishers)  
Guest Editor & Editor of Int. J. Mol. Sci. (at MDPI Organization)*



celule elementare non-primitive



*Stânga: celulă dublu primitivă de tip I; dreapta: celulă dublu primitivă monoclinică de tip C.*



*Celulă cubică cuadruplu primitivă, de tip F.*

Un sistem cristalin admite o celulă nonprimitivă dacă aceasta îndeplinește trei condiții:

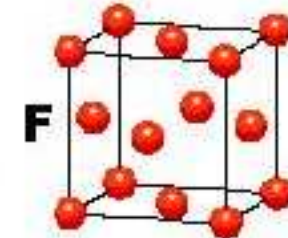
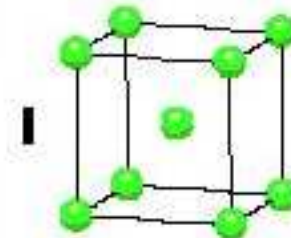
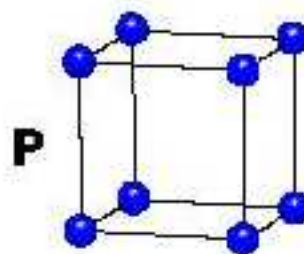
- nu anulează simetria la rotația specifică sistemului;
- nu se poate transforma într-o altă celulă nonprimitivă, aparținând aceleiași singonii, prin schimbarea axelor;
- Se poate transforma într-o celulă primitivă aparținând unei alte singonii, de categorie mai mică.

Sistemul cubic nu permite o celulă de tip C (A, B). deoarece centrarea a doar două fețe opuse anulează cele 4 axe  $A^3$  caracteristice singoniei, contravenind condiției a). de mai sus.

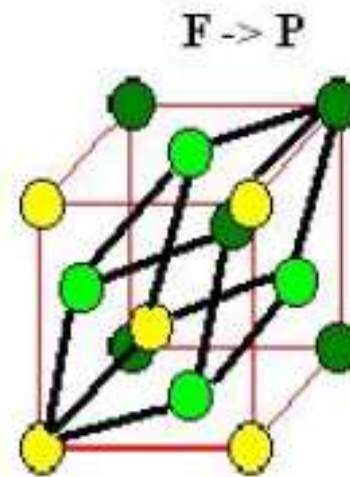
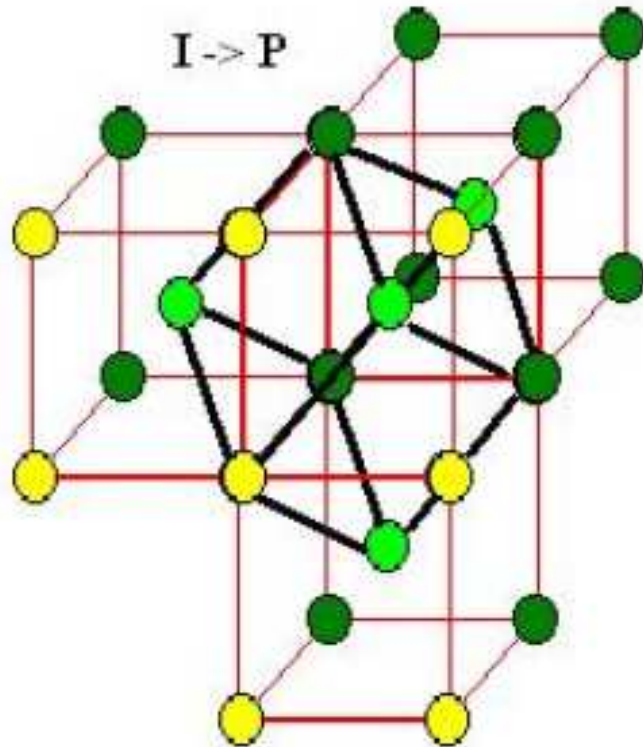
**CUBIC**

$$a = b = c$$

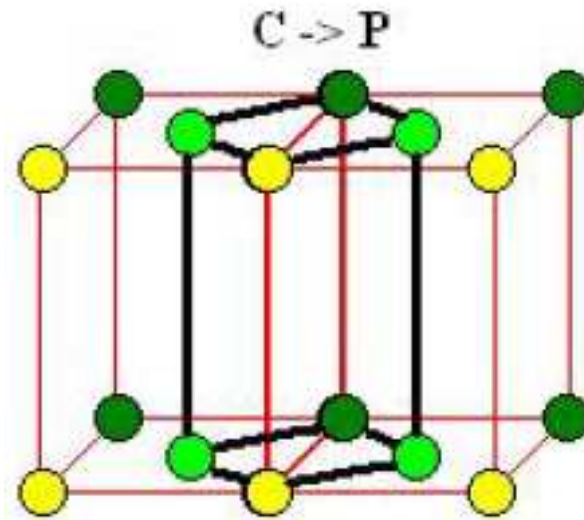
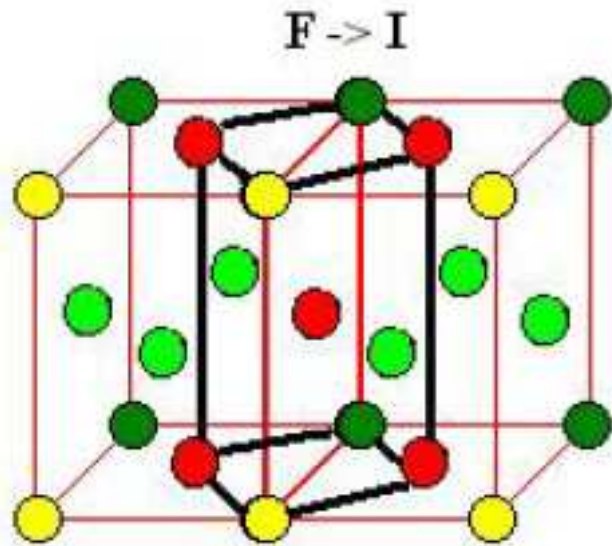
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



*Tipurile I și F de non-primitive cubice și transformările acestora.*

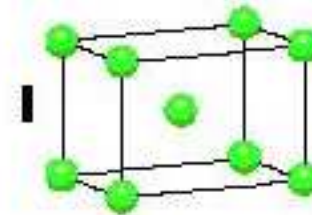
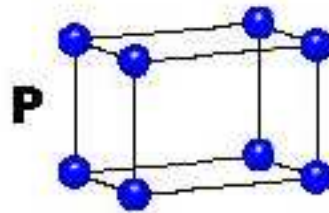


*Tipurile F și C de non-primitive tetragonale și transformările acestora.*



**TETRAGONAL**

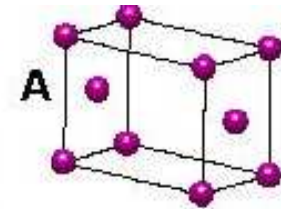
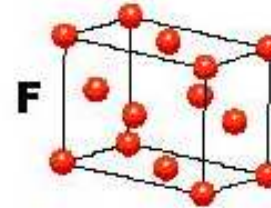
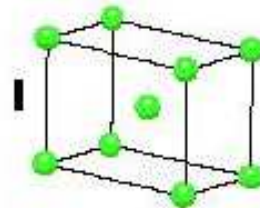
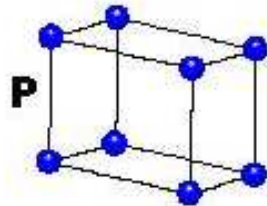
$a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



Analize similare pot fi efectuate și pentru celelalte sisteme cristalografice, la nivelul celulelor unitate.

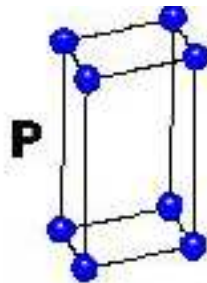
**ORTOROMBIC**

$a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



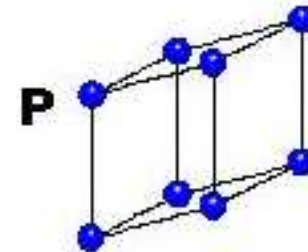
**HEXAGONAL**

$a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = 90^\circ$   
 $\gamma = 120^\circ$



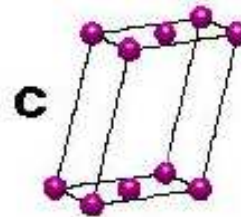
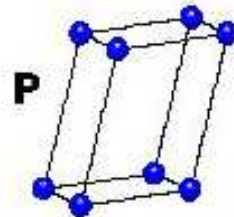
**TRIGONAL**

$a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



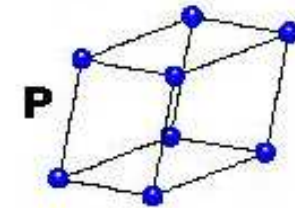
**MONOCLINIC**

$a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \gamma = 90^\circ$   
 $\beta \neq 120^\circ$



**TRICLINIC**

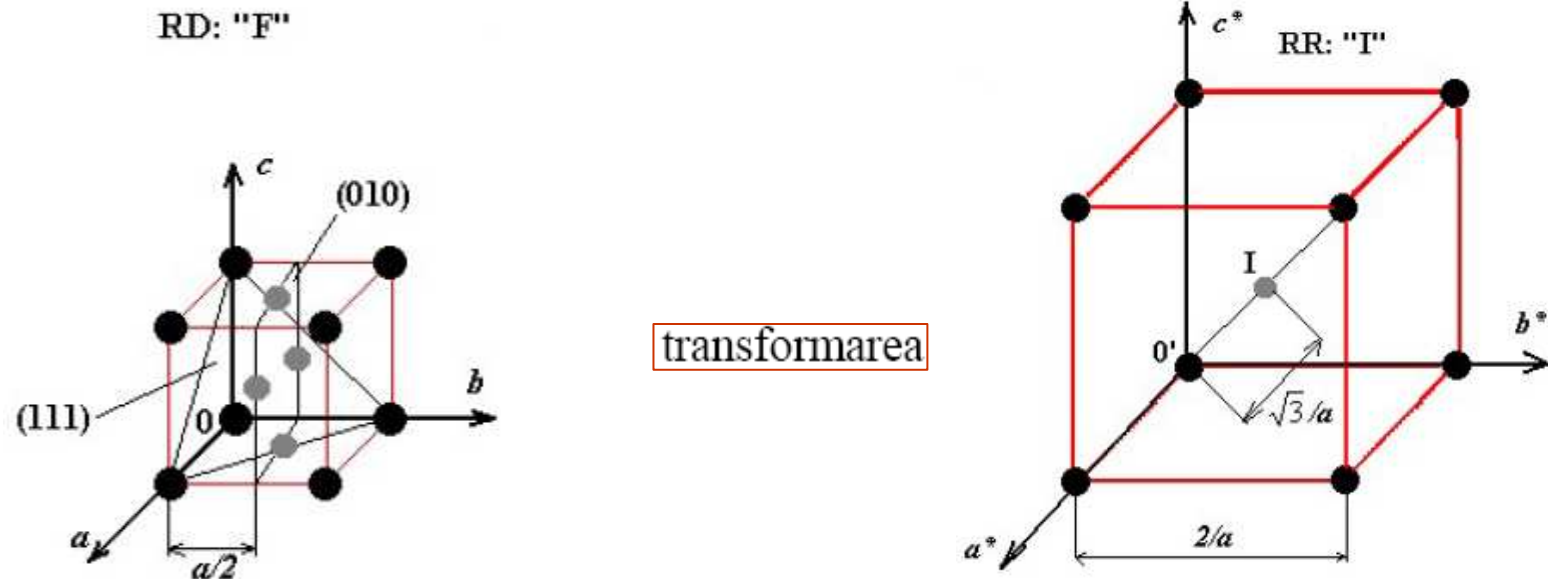
$a \neq b \neq c$   
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



În continuare, pe baza răspunsurilor anterioare, se pune problema: cum se proiectează în rețeaua reciprocă rețelele și celulele unitate Bravais din cele șapte singonii cristaline, și la ce tip de celulă unitate le corespunde proiecția?

*Proiecția celulei unitate cubice  $F$  din rețeaua directă (RD) în celula unitate  $I$  din rețeaua reciprocă (RR).*

Rezultă așadar că vectorul  $\vec{d}_{hkl}^*$  din rețeaua reciprocă este perpendicular pe planul cristalografic ( $hkl$ ) și are mărimea  $1/d_{hkl}$  corespunzătoare inversului distanței interplanare pentru familia de plane ( $hkl$ ).

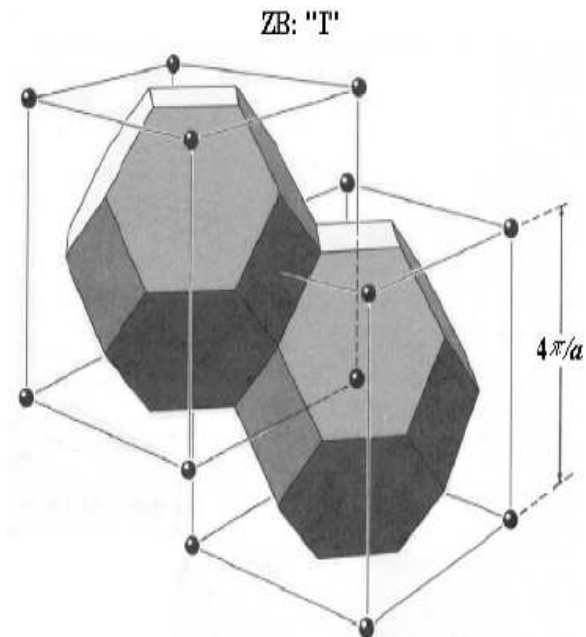
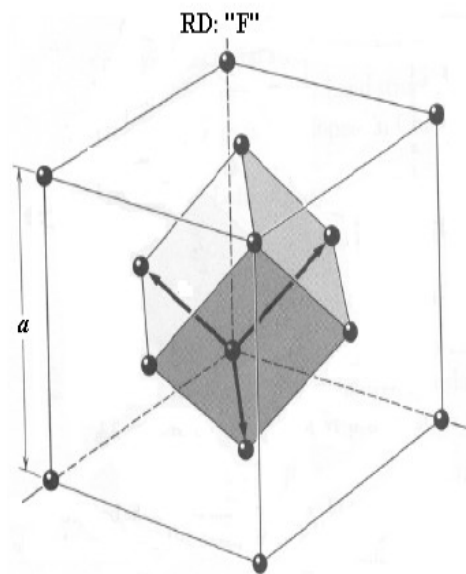


distanțelor interplanare minime, ce corespund tipurilor de plane (010) și (111) din celula  $F$  în rețeaua directă, în puncte din celula  $I$  în rețeaua reciprocă, puncte aflate la distanțe egale cu inversul distanțelor interplanare din rețeaua directă.

*Corespondențele celulelor unitate Bravais între rețeaua directă (RD) și rețeaua reciprocă (RR).*

| <b>Singonia</b>   | <b>Tipul de celulă în RD</b> | <b>Tipul de celulă în RR</b> |
|-------------------|------------------------------|------------------------------|
| <i>Triclinic</i>  | P(primitivă)                 | P                            |
| <i>Monoclinic</i> | P                            | P                            |
|                   | C                            | C                            |
| <i>Ortorombic</i> | P                            | P                            |
|                   | I                            | F                            |
|                   | F                            | I                            |
| <i>Tetragonal</i> | C                            | C                            |
|                   | P                            | P                            |
|                   | I                            | I                            |
| <i>Romboedral</i> | R                            | R                            |
| <i>Hexagonal</i>  | P                            | P                            |
| <i>Cubic</i>      | P                            | P                            |
|                   | I                            | F                            |
|                   | F                            | I                            |





*Celula primitivă cubică din celula cubică F (stânga) în rețeaua directă (RD) și celula primitivă (octaedron trunchiat) ca Zona Brillouin (ZB) din celula I, reciproca lui F în rețeaua reciprocă (dreapta).*

Se remarcă cum, într-adevar, zona Brillouin este celula primitivă în spațiul reciproc, fiind construită în jurul punctului central din celula I (ca proiecție reciprocă a lui F din rețeaua directă) însă necuprinzând nici un alt punct reciproc în spațiul închis de unirea planelor mediane la distanțele față de punctul central spre cele mai apropiate puncte vecine (din colțurile cubului).

$M=2\pi$  pentru proiecția distanței  $a/2$  în  $2M/a$

identificarea mărimii  $M/a=2\pi/a$  specifică rețelei reciproce cu o mărime fizică precisă: modulul vectorului de undă  $k=2\pi/\lambda$ , ce indexează numărul nodurilor unei unde cu lungimea de undă  $\lambda$ .

impulsul stării de „corpusul” asociate prin legătura de Broglie

$$p=k\hbar$$

Introducerea spațiului reciproc permite așadar atât caracterizarea prin proiecție *unitară* (planele se reprezintă prin puncte) și *completă* (sunt prezente ambele informații de orientare și de distanță interplanară) a planelor cristalografice din spațiul direct, cât și posibilitatea *reprezentării cuantice* a acestora prin caracterizarea Zonelor Brillouin a vectorilor de undă asociați eigen-stărilor cristaline.