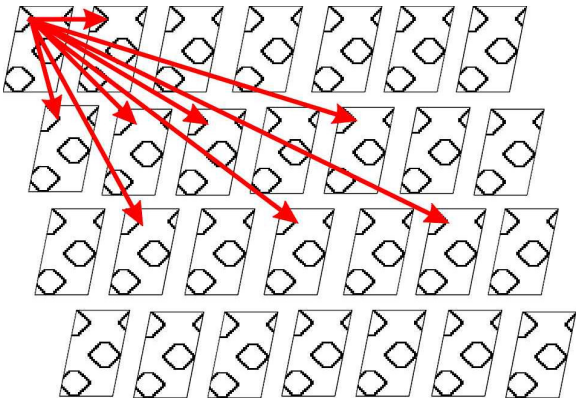
EL CRISTALL. PERIODICITAT

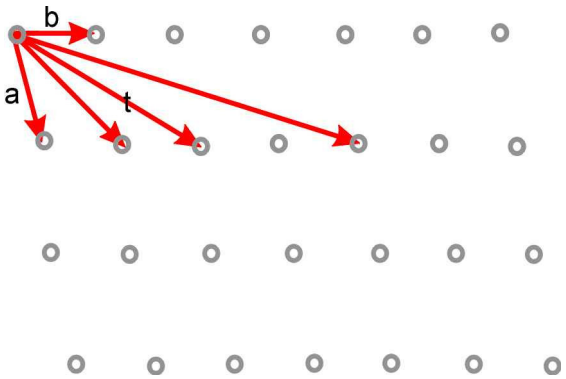
El cristall des d'un punt de vista microscòpic

Un medi cristal·lí està format per un conjunt d'àtoms disposats en un ordre ben definit generat per la repetició periòdica tridimensional d'un grup d'àtoms, que constitueixen el **motiu**.

En cada motiu es pot definir un punt qualsevol, que es relaciona amb els punts homòlegs dels altres motius amb vectors translació, els extrems dels quals, que s'anomenen **nusos**, defineixen el **reticle cristal·lí**.

Aquesta associació motiu-reticle és una característica fonamental del medi cristal·lí.





El cristall des d'un punt de vista macroscòpic

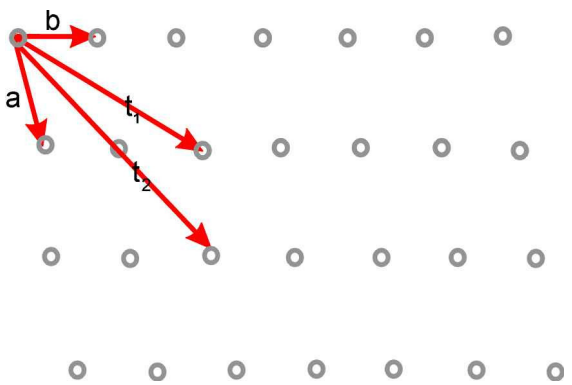
El model anterior implica "veure" els àtoms que formen el cristall, no obstant, la interpretació de l'estudi del medi cristal·lí amb tècniques que no permeten assolir aquest nivell de definició (el llum visible, per exemple) es pot fer en base a un altre model que es podria anomenar *macroscòpic*.

Des d'aquest punt de vista, el cristall es pot considerar *una massa homogènia que té propietats vectorials discontínues*. Aquest darrer aspecte el diferencia dels vidres, que no presenten propietats vectorials discontínues.

PERIODICITAT

El reticle, imaginat com una abstracció del medi cristal·lí, està format per nusos, entre cada parella dels quals es pot dibuixar un vector translació.

En un reticle bidimensional és possible localitzar dos vectors no colinials (tres no coplanaris si el reticle és tridimensional), de tal manera que tots els altres es poden expressar com combinació lineal d'aquests, que s'anomenen **vectors fonamentals**.



En la figura es pot veure que

$$\vec{t}_1 = \vec{a} + 2\vec{b}\,; \quad \vec{t}_2 = 3\vec{a} + 2\vec{b}$$

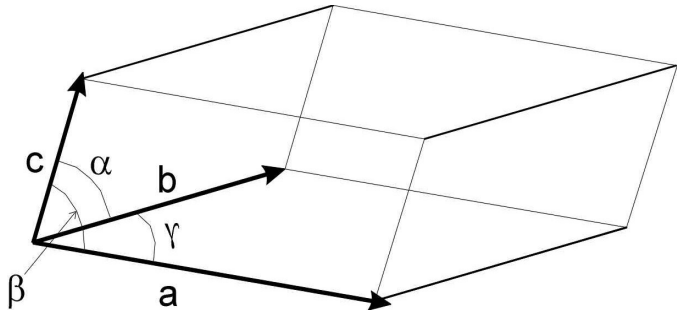
El postulat reticular estableix que

"tota propietat en un medi cristal·lí és invariant per una translació definida per

$$\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

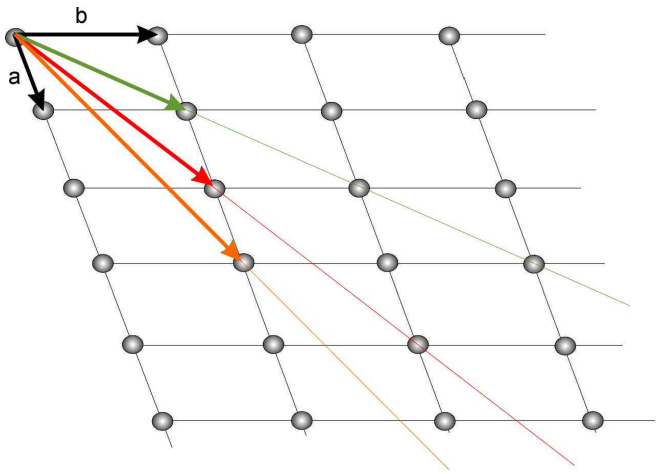
on u, v i w són enters, i a, b i c els vectors fonamentals del reticle"

és a dir, tots els nusos són idèntics i no hi ha cap diferència entre ells deguda a la seva posició relativa en el reticle.



El tres vectors fonamentals defineixen un paral·lelepípede que es coneix com a **cel·la fonamental**, i la seva repetició en l'espai genera tot el reticle. Per tant, la mida, forma i contingut de la cel·la fonamental permeten definir unívocament l'espai cristal·lí.

Les característiques de la cel·la fonamental s'expressen a partir dels vectors fonamentals que la defineixen i dels angles que formen entre ells, amb la convenció que indica la figura (α és l'angle entre *b* i *c* - l'oposat al vector *a*-; β és l'angle entre *a* i *c* - oposat a *b* -; i γ és l'angle que formen *a* i *b* -oposat a *c*).



També és possible definir **fileres reticulars**, com a successions de nusos alineats, els quals tots compleixen la condició

$$\vec{t} = n(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})$$

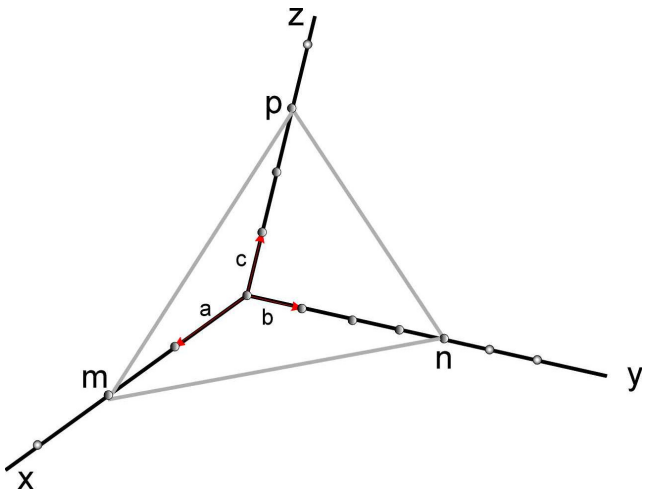
per *n*=1, T és el vector translació que defineix la filera reticular, i els seus coeficients s'utilitzen com a notació de la filera. Per convenció s'expressen entre claudàtors i sense comes entre mig:

$$[uvw]$$

Les fileres definides pels vectors fonamentals *a, b* i *c*, se'n diuen *fileres fonamentals*, i constitueixen el sistema d'eixos de referència que s'utilitza per descriure i efectuar càlculs en el reticle cristal·lí. Cal fer notar que es tracta d'un sistema d'eixos no necessàriament ortogonal, en els que els vectors "unitat de mesura" en cada direcció són *a*, *b* i *c* (que no tenen el valor 1).

Igualment, es poden definir **plans reticulars**, com aquells formats per conjunts de nusos coplanaris. Òbviament, tres nusos qualsevols no alineats defineixen un pla reticular. En aplicació del postulat reticular, un cop definit un pla per cada nus passa un pla paral·lel al definit, de manera que es configuren *famílies de plans reticulars*. A la distància que separa dos plans propers d'una mateixa família se l'anomena **espaiat reticular**, i s'expressa com

$$d_{hkl}$$

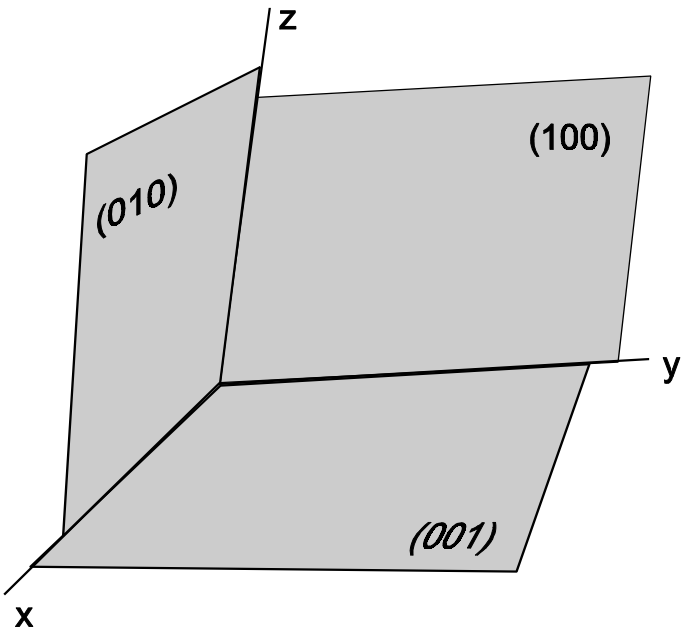


La notació dels plans reticulars està formada (com en les fileres) per una terna de números expressada entre parèntesi i sense comes entre mig

$$(hkl)$$

Aquesta notació es pot deduir de la següent manera: suposem un pla reticular com el de la figura, que talla als eixos cristal·lins a unes distàncies m=2*a*, n=4*b*, i p=3*c*

(s'utilitza la terna de números 2, 4 i 3 perquè determinen el pla de la figura, però no qualsevol altre de la mateixa família de plans)



L'equació canònica d'un pla qualsevol, en funció dels eixos cristal·logràfics definits per *a, b* i *c* (x, y, z) és

$$\frac{x_0}{ma}+\frac{y_0}{nb}+\frac{z_0}{pc}=1\ ,$$

la del pla de la figura és:

$$\frac{x_0}{2a}+\frac{y_0}{4b}+\frac{z_0}{3c}=1$$

entre el pla dibuixat i l'origen hi haurà un nombre N de plans igual al mínim múltiple comú de m, n i p, per tant, l'equació del pla d'aquesta família més proper a l'origen serà

$$\frac{Nx}{ma}+\frac{Ny}{nb}+\frac{Nz}{pc}=1$$

fent

$$\frac{N}{m}=h\ ;\quad \frac{N}{n}=k\ ;\ \frac{N}{p}=l\ ,$$

l'equació del pla es pot rescriure de la següent manera

$$h\cdot\frac{x}{a}+k\cdot\frac{y}{b}+l\cdot\frac{z}{c}=1$$

on h, k i l són tres números enters i primers entre ells, i inversament proporcionals a m, n i p (les distàncies d'intersecció del pla amb els eixos cristal·logràfics), respectivament. Aquesta terna de números és la que s'utilitza com a notació dels plans reticulars, i s'escriu

$$(hkl)$$ **Sense comes entre mig!**

Per tant, el pla de la família (hkl) més proper a l'origen talla als eixos x, y

i z a distàncies a/h ; b/k ; c/l , respectivament.

Conseqüentment, un índex zero significa que el pla és paral·lel (no intersecta) a l'eix corresponent.