3.Sieć odwrotna

Każda struktura krystalograficzna posiada dwie stowarzyszone ze sobą sieci: sieć krystaliczną (rzeczywistą), którą zajmowaliśmy się do tej pory, oraz sieć odwrotną, będącą abstrakcyjnym siecią w przestrzeni Fouriera (czyli w przestrzeni wektorów falowych). Sieć odwrotna jest szczególnie przydatna z punktu widzenia dyfrakcji rentgenowskiej, podczas której zachodzi rozpraszanie promieniowania charakteryzowanego właśnie poprzez wektory falowe. W wyniku tego zjawiska, to co obserwujemy na obrazie dyfrakcyjnym jest tak naprawdę obrazem sieci odwrotnej.

3.1. Podstawowe wektory sieci odwrotnej

Podobnie jak w przypadku sieci rzeczywistej, również **sieć odwrotna posiada swoje wersory**. Są one powiązane z wersorami sieci rzeczywistej poprzez wzory:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot\left(\vec{a}_2\times\vec{a}_3\right)}\\ \vec{b}_2 &= 2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot\left(\vec{a}_2\times\vec{a}_3\right)}\\ \vec{b}_3 &= 2\pi\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\vec{a}_1\cdot\left(\vec{a}_2\times\vec{a}_3\right)}\end{aligned} \tag{3.1}$$

Gdzie: $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ - podstawowe wektory sieci krystalicznej

$\vec{b}_1,\vec{b}_2,\vec{b}_3$ - podstawowe wektory sieci odwrotnej

Dodatkowe wektory te spełniają zależność:

$$\vec{b}_i\cdot\vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \tag{3.2}$$

Gdzie: δ_{ij} - delta Kroneckera (dla $i=j,\delta_{ij}=1$, dla $i\neq j,\delta_{ij}=0$)

Węzły sieci odwrotnej generowane są analogicznie do tych w sieci rzeczywistej:

$$\vec{G} = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3 \tag{3.3}$$

Gdzie: n_1,n_2,n_3 - liczby całkowite

3.2. Własności sieci odwrotnej

Sieć odwrotna posiada pewne własności, które są bardzo przydatne przy analizie struktur krystalicznych. Pierwsza z nich, **umożliwia wyznaczenie wektora $\vec{N}_\perp$, prostopadłego do płaszczyzny opisanej wskaźnikami Miller'a *hkl*:**

$$\vec{N}_\perp = \vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \tag{3.4}$$

Druga własność, pozwala na **wyznaczenie odległości międzypłaszczyznowej** dla płaszczyzny zadanej wartościami *hkl*:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\left\| \vec{G}_{hkl} \right\|} \tag{3.5}$$

Pozostałymi własnościami sieci odwrotnej zajmiemy się przy okazji dyfraktografii rentgenowskiej.

Przykład 3.1.

Oblicz odległość międzypłaszczyznową dla płaszczyzny (210) w komórce typu sc układu regularnego. Długość boku komórki wynosi 5Å

Rozwiązanie

Wektory sieci rzeczywistej:

$$\vec{a}_1 = (a, 0, 0)$$
$$\vec{a}_2 = (0, a, 0)$$
$$\vec{a}_3 = (0, 0, a)$$

iloczyn mieszany wynosi:

$$\vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \right) = a^3$$

wektory sieci odwrotnej:

$$\vec{b}_1 = (\tfrac{2\pi}{a}, 0, 0)$$
$$\vec{b}_2 = (0, \tfrac{2\pi}{a}, 0)$$
$$\vec{b}_3 = (0, 0, \tfrac{2\pi}{a})$$

Wektor prostopadły:

$$G_{hkl} = 2\vec{b}_1 + 1\vec{b}_2 + 0\vec{b}_3$$

jego moduł wynosi:

$$\left\| G_{hkl} \right\| = \sqrt{\frac{16\pi^2}{a^2} + \frac{4\pi^2}{a^2}} = \pi \frac{2\sqrt{5}}{5}$$

Na podstawie wzoru (3.5) otrzymujemy:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\left\| \vec{G}_{hkl} \right\|} = \sqrt{5}$$

Jest to wartość równa tej, którą otrzymamy z równania (2.15).

3.3. Strefa Brillouina

Strefa Brillouina (a właściwie to <u>pierwsza</u> strefa Brillouina) jest komórką Wignera-Seitza w sieci odwrotnej, tzn. powstaje poprzez poprowadzenie z danego węzła odcinków łączących go z najbliższymi sąsiadami, a następnie przecięciu ich w połowie długości prostopadłymi płaszczyznami. Chwilowo nie będziemy z niej korzystać, jednak pojęcie to pojawi się podczas analizy energetycznej struktury kryształów.

Przykład 3.2.

Wyznacz granice strefy Brillouina dla komórki z poprzedniego przykładu.

Rozwiązanie

Wektory podstawowe sieci odwrotnej odpowiadają periodom jej identyczności, które z kolei są równe odległości do najbliższego sąsiada w danym kierunku:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= (\tfrac{2\pi}{a},0,0)\\ \vec{b}_2 &= (0,\tfrac{2\pi}{a},0)\\ \vec{b}_3 &= (0,0,\tfrac{2\pi}{a})\end{aligned}$$

Każdy węzeł w sieci sc ma 6 sąsiadów, zatem znajdują się oni w pozycjach:

$$\begin{aligned}\pm\vec{b}_1 &= (\pm\tfrac{2\pi}{a},0,0)\\ \pm\vec{b}_2 &= (0,\pm\tfrac{2\pi}{a},0)\\ \pm\vec{b}_3 &= (0,0,\pm\tfrac{2\pi}{a})\end{aligned}$$

zatem granice pierwszej strefy Brillouina znajdują się w pozycjach:

$$\begin{aligned}\pm\frac{1}{2}\vec{b}_1 &= (\pm\tfrac{\pi}{a},0,0)\\ \pm\frac{1}{2}\vec{b}_2 &= (0,\pm\tfrac{\pi}{a},0)\\ \pm\frac{1}{2}\vec{b}_3 &= (0,0,\pm\tfrac{\pi}{a})\end{aligned}$$