

3. Sieć odwrotna

Każda struktura krystalograficzna posiada dwie stowarzyszone ze sobą sieci: sieć krystaliczną (rzeczywistą/prostą), którą zajmowaliśmy się do tej pory, oraz sieć odwrotną, będącą abstrakcyjnym bytem matematycznym 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 rezultacie, 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:

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

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

Dodatkowo, wektory te spełniają zależność:

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

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

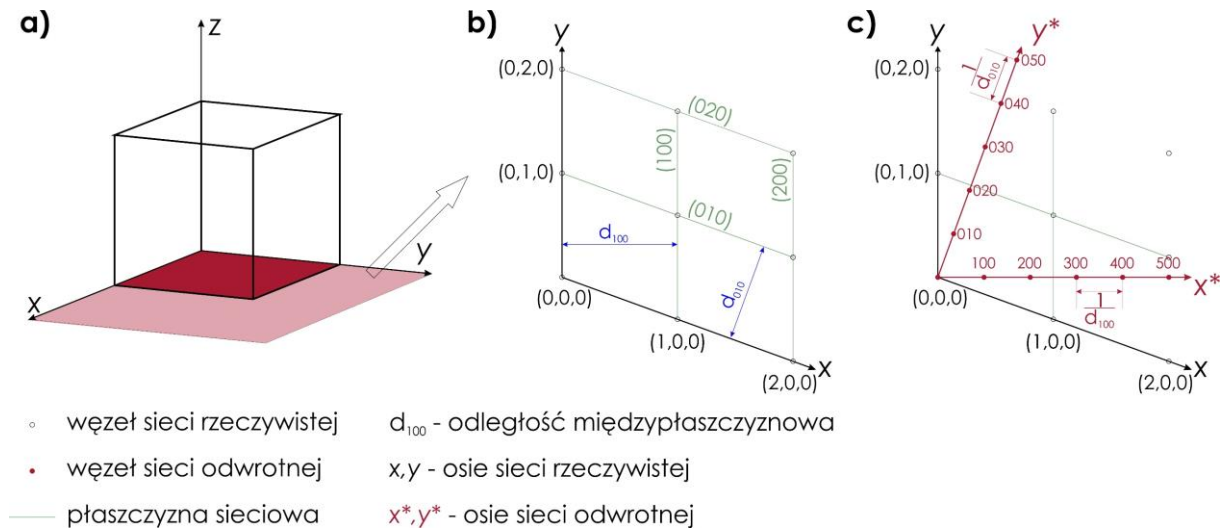
Węzły sieci odwrotnej generowane są analogicznie do tych w sieci rzeczywistej:

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

gdzie: n_1, n_2, n_3 - liczby całkowite

Powyższą konstrukcję matematyczną, możemy sprowadzić do relatywnie prostego opisu konstrukcji geometrycznej. Wyznaczenie węzłów sieci odwrotnej zaczynamy od poprowadzenia z dowolnego węzła sieci rzeczywistej prostych prostopadłych do każdej rodziny płaszczyzn sieciowych (przez rodzinę płaszczyzn rozumiemy płaszczyzny wielokrotne, np. (100), (200), (300)...). Na tych prostych, odkładamy teraz odcinki odpowiadające odwrotnościom odległości międzypłaszczyznowych $1/d_{hkl}$ (odpowiednio dla każdej rodziny płaszczyzn) i im wielokrotnościom. Uzyskane w ten sposób punkty odpowiadają węzłom sieci odwrotnej. Współrzędne punktów sieci odwrotnej zwyczajowo zapisujemy bez nawiasów.

Pokażmy teraz na przykładzie graficznym, w jaki sposób wyznaczyć węzły sieci odwrotnej i jaka jest ich relacja względem węzłów sieci rzeczywistej. Rozważmy fragment sieci ukośnokątnej (Rys. 3.1a), a dokładniej jej rzut na płaszczyznę XY:



Rys. 3.1. a) schematyczne przedstawienie komórki ukośnokątnej; b) rzut na płaszczyznę XY, oś Z prostopadła do rysunku. Zaznaczone zostały płaszczyzny sieciowe (100) i (010) oraz ich odległości międzypłaszczyznowe; c) konstrukcja węzłów i osi sieci odwrotnej.

Rozpatrując rzut na płaszczyznę XY, możemy na niej zaznaczyć płaszczyzny sieciowe (100) i (010) (oraz płaszczyzny (200) i (020) należące do ich rodzin), jak również odpowiednie odległości międzypłaszczyznowe (Rys. 3.1b). Zwróćmy uwagę, iż **odcinki odpowiadające odległościom międzypłaszczyznowym w tego typu układzie, nie muszą być równoległe do kierunków osi x i y** (Rys. 3.1b). Natomiast **będą one równoległe do osi x^* i y^* w sieci odwrotnej** (Rys. 3.1c). Aby zaznaczyć teraz węzły na obu tych osiach, wykorzystujemy odcinki o długości równej **odwrotności odpowiednich odległości międzypłaszczyznowych z sieci rzeczywistej** (Rys. 3.1c). Jak możemy zauważyć, pozycje tych węzłów mogą znacząco odbiegać od pozycji węzłów sieci rzeczywistej.

3.2. Własności sieci odwrotnej

Sieć odwrotna posiada pewne własności, które są bardzo przydatne przy analizie struktur krystalicznych:

1. Sieć odwrotna jest siecią Bravais'go
2. Każdy wektor \vec{G} sieci odwrotnej jest prostopadły do odpowiedniego zbioru płaszczyzn sieci rzeczywistej. Umożliwia nam to wyznaczenie wektora \vec{N}_\perp , prostopadłego do płaszczyzny opisanej wskaźnikami Millera hkl :

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

3. Odległość między płaszczyznami sieci rzeczywistej o wskaźnikach Millera h, k i l dana jest zależnością:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\|\vec{G}_{hkl}\|} \quad (3.5)$$

4. Sieć rzeczywista jest siecią odwrotną dla swojej sieci odwrotnej. Innymi słowy **każda sieć rzeczywista ma dokładnie jedną sieć odwrotną i vice versa**.
5. Komórka elementarna sieci odwrotnej nie musi być prostopadłościanem (nawet jeśli komórki sieci rzeczywistej są prostokątne).

Przykład 3.1. Oblicz odległość międzypłaszczyznową dla płaszczyzny (210) w komórce typu SC układu regularnego. Długość boku komórki wynosi 5\AA

Rozwiązanie:

Wektory bazowe sieci rzeczywistej:

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

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

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

Ich iloczyn mieszany wynosi:

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

wektory sieci odwrotnej (ze wzoru (3.1)):

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}, 0, 0\right)$$

$$\vec{b}_2 = \left(0, \frac{2\pi}{a}, 0\right)$$

$$\vec{b}_3 = \left(0, 0, \frac{2\pi}{a}\right)$$

wektor prostopadły (wzór (3.4)):

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

jego moduł wynosi:

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

Na podstawie wzoru (3.5) otrzymujemy:

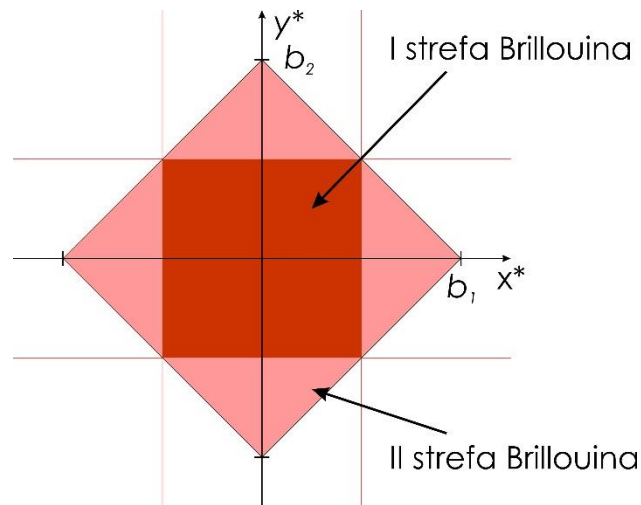
$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\|G_{hkl}\|} = \sqrt{5}$$

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

3.3. Strefa Brillouina

Strefa Brillouina (a właściwie to pierwsza 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 (Rys. 3.2). Możliwe jest również wyznaczenie dalszych stref, jednak ich znaczenie fizyczne jest

znacznie mniejsze niż strefy I. W dalszej części semestru strefa Brillouina pojawi się podczas analizy energetycznej struktury kryształów. Oprócz tego, ma również niebagatelne znaczenie z punktu widzenia dyfrakcji rentgenowskiej.



Rys. 3.2. Graficzna interpretacja I i II strefy Brillouina dla przypadku dwuwymiarowego.

Przykład 3.2. Wyznacz granice strefy Brillouina dla komórki z przykładu 3.1.

Rozwiązanie:

Jak można zauważyć w przykładzie 3.1, sieć odwrotna do sieci SC zachowuje ten sam charakter, czyli nadal jest siecią typu SC. Wektory podstawowe sieci odwrotnej odpowiadają zatem periodom jej identyczności, które z kolei są równe odległości do najbliższego węzła w danym kierunku:

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

Podobnie jak w sieci rzeczywistej, każdy węzeł w sieci odwrotnej typu SC posiada 6 najbliższych sąsiadów, oddalonych dokładnie o period identyczności w sieci odwrotnej:

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

zatem granice pierwszej strefy Brillouina znajdują się w połowie tych odległości (zgodnie z zasadami konstrukcji komórki Wignera-Seitza), czyli w pozycjach:

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