Обратная решетка.

Определение 1. Возьмем множество точек $\vec{R}$, составляющие решетку Бравэ, и плоскую волну $e^{i\overrightarrow{kr}}$.

При произвольном k такая волна имеет периодичность решетки Бравэ при определенном выборе волнового вектора.

Множество волновых векторов $\vec{K}$ называют **обратной решеткой**, если плоская волна с $\vec{k} = \vec{K}$ имеет периодичность данной решетки Бравэ. Аналитически это означает, что $\vec{K}$ принадлежит обратной решетке данной решетки Бравэ с точками $\vec{R}$, если для любого $\vec{r}$ и $\vec{R}$ справедливо равенство:

$$e^{i\overrightarrow{k(r+R)}} = e^{i\overrightarrow{kr}}$$

Поделим на $e^{i\overrightarrow{kr}}$ и тогда обратную решетку опишем как множество таких волновых векторов $\vec{K}$ для которых $e^{i\overrightarrow{kr}}$ =1 при всех $\vec{R}$, принадлежащих решетке Бравэ. Обратная решетка определена по отношению к конкретной решетке Бравэ.

Решетку Бравэ, соответствующую данной обратной решетке называют прямой решеткой.

Определение 2. Другое определение основано на введении трех векторов $\overline{b_1}$, $\overrightarrow{b_2}$, $\overrightarrow{b_3}$, определенных уравнениями

$\vec{a}_i * \vec{b}_i = 2\pi$ (i,j=1,2,3);

где $\vec{a}_i$ (i=1,2,3) примитивные векторы решетки Бравэ. Тогда:

$$\overrightarrow{b_1,} = \frac{2\pi}{D} \vec{a}_2 * \vec{a}_3$$

$$\overrightarrow{b_2,} = \frac{2\pi}{D} \vec{a}_1 * \vec{a}_3$$

$$\overrightarrow{b_3,} = \frac{2\pi}{D} \vec{a}_1 * \vec{a}_2,$$

где $D = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$.

Тогда решетка, составленная из точек $l_1\overrightarrow{b_1} + l_2\overrightarrow{b_2} + l_3\overrightarrow{b_3}$ (где l_i - целые) называется обратной решеткой. Размерность см^{-1}.

Отнесем векторы $\overrightarrow{b_j}$ к прямоугольной системе координат. Тогда удобно ввести матрицу $\vec{B}$, аналогично решетке Бравэ с матрицей $\vec{A}$:

Так что:

$$\vec{l}\vec{B}=(l_{1,} l_{2,} l_{3,})\begin{pmatrix} b_{1x} & b_{1y} & b_{1z} \\ b_{2x} & b_{2y} & b_{2z} \\ b_{3x} & b_{3y} & b_{3z} \end{pmatrix}$$

Тогда определение решетки обратной решетки сводится к виду:

$\vec{B}\vec{A}=2\pi\bar{1}$, где $\bar{1}$=E – единичная матрица. Например, для ОЦК:

$$\frac{b}{2} = \frac{2\pi}{a} \qquad \vec{B}=2\pi\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{a} & \frac{1}{a} \\ \frac{1}{a} & 0 & \frac{1}{a} \\ \frac{1}{a} & \frac{1}{a} & 0 \end{pmatrix}$$

ПРИМЕРЫ

Обратная решетка сама является решеткой Бравэ, поэтому можно построить ее обратную решетку. Оказывается, что она представляет собой просто исходную прямую решетку.

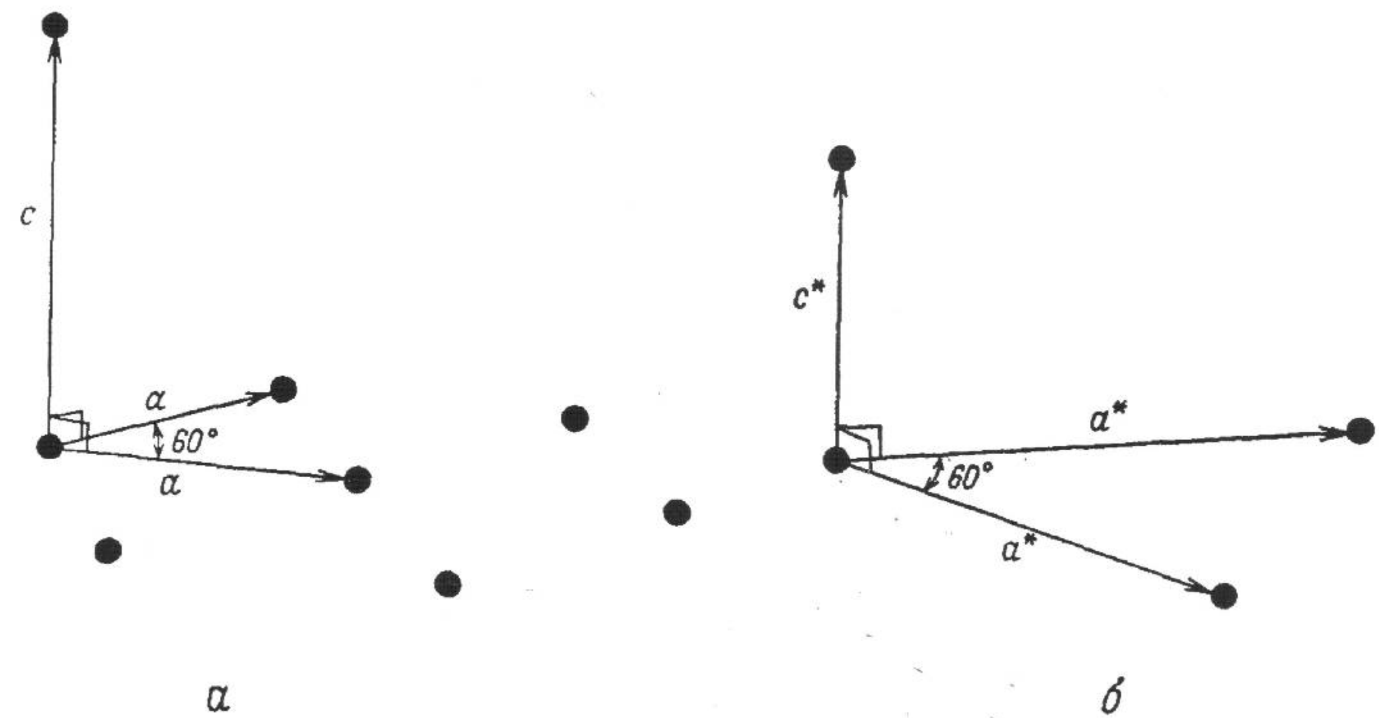
Обратной решеткой по отношению к простой кубической решетке Бравэ, сторона кубической элементарной ячейки которой равна $\boldsymbol{a}$, является простая кубическая решетка с кубической элементарной ячейкой со стороной $2\pi/\boldsymbol{a}$.

Для гранецентрированной кубической решетки Бравэ со стороной условной кубической ячейки $\boldsymbol{a}$ обратной решеткой является объемноцентрированная кубическая решетка со стороной условной кубической ячейки $4\pi/\boldsymbol{a}$.

Для объемноцентрированной кубической решетки со стороной условной кубической ячейки а обратной является г.ц.к. решетка со стороной условной кубической ячейки $4\pi/\boldsymbol{a}$.

Решетка, обратная к простой гексагональной решетке Бравэ с постоянными решетки ***c*** и ***a*** есть также простая гексагональная решетка с постоянными решетки $2\pi/c$ и $4\pi/\sqrt{3a}$ повернутая на 30° вокруг ***c***-оси по отношению к прямой решетке.

Если υ – объем элементарной ячейки прямой решетки, то элементарная ячейка обратной решетки имеет объем $(2\pi)^3/\upsilon$.



Фиг. 5.1. *а* — основные векторы для простой гексагональной решетки Бравэ; *б* — основные векторы для решетки, обратной той, которая порождена основными векторами решетки *а*.

Обратная решетка. Определение 2 (одно из многих)

Расстояние между парой соседних плоскостей из семейства (hkl) называется межплоскостным расстоянием и обозначается d_{hkl}. Оно измеряется по нормали к плоскости (hkl) и зависит от метрических параметров a_1, a_2, a_3 элементарной ячейки.

Построим к каждой плоскости (hkl) нормальный вектор $\mathbf{H}_{hkl}$ и определим его длину как величину, обратную межплоскостному расстоянию d_{hkl}: $|\mathbf{H}_{hkl}| = d_{hkl}^{-1}$
В общем случае косоугольной ячейки (рис.4) нормаль к координатной плоскости задается векторным произведением вида $[\mathbf{a}_i\mathbf{a}_j]$ - вектором, модуль которого равен площади грани $a_i a_j$ ячейки, а межплоскостные расстояния между координатными плоскостями есть частные от деления объема ячейки па площадь этой грани.
Объем ячейки определяется смешанным произведением:

$$\Omega = \mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3] = \mathbf{a}_2[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1] = \mathbf{a}_3[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2] .$$

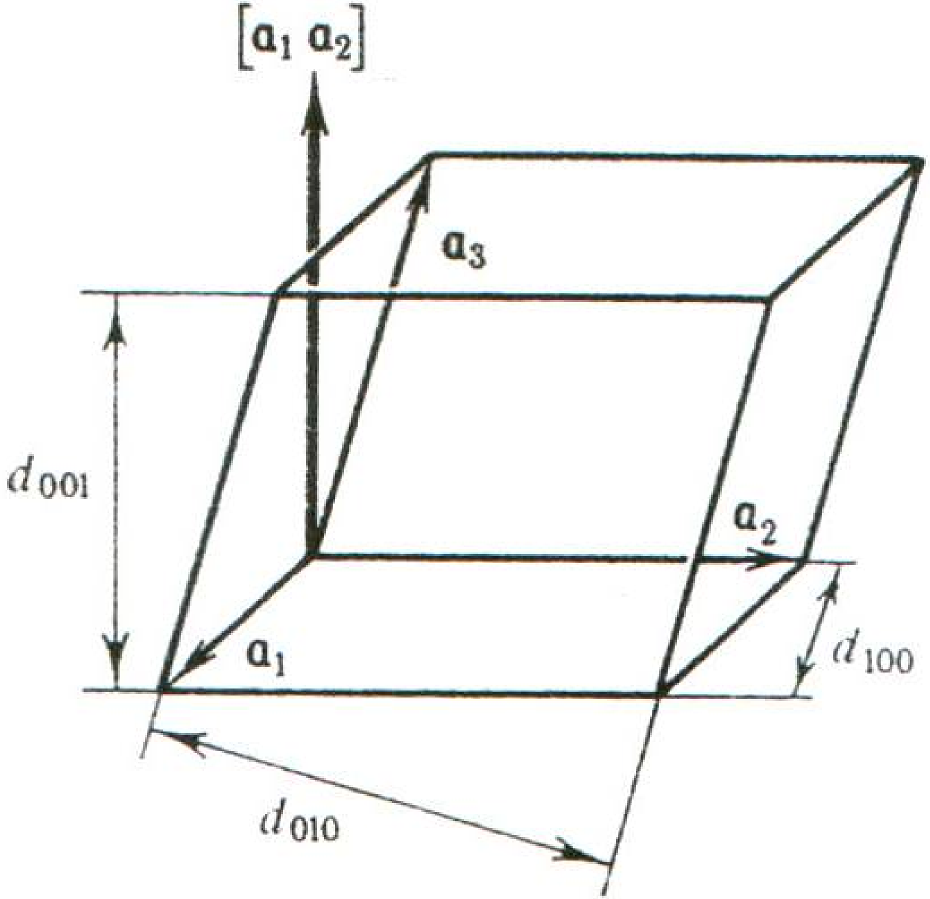
Таким образом, $d_{100} = \dfrac{\Omega}{|[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]|}$, $d_{010} = \dfrac{\Omega}{|[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1]|}$, $d_{001} = \dfrac{\Omega}{|[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]|}$.

Это определяет три вектора $\mathbf{H}_{100} = \mathbf{a}_1^*$, $\mathbf{H}_{010} = \mathbf{a}_2^*$, $\mathbf{H}_{001} = \mathbf{a}_3^*$:

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]}{\Omega},\ \mathbf{a}_2^* = \frac{[\mathbf{a}_3\mathbf{a}_1]}{\Omega},\ \mathbf{a}_3^* = \frac{[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]}{\Omega},$$

нормальных к координатным плоскостям. Отсюда, следовательно,

$$d_{100} = a_1^{*-1},\ d_{010} = a_2^{*-1},\ d_{001} = a_3^{*-1}$$

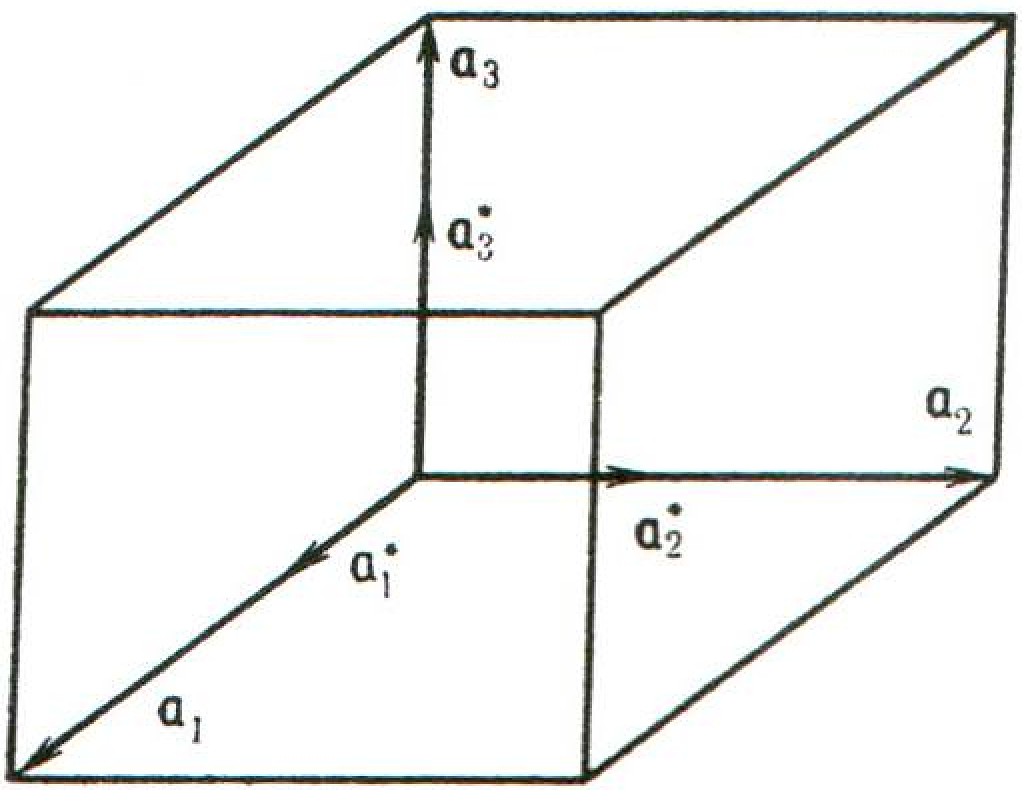


Межплоскостные расстояния d_{100}, d_{010}, d_{001} и нормаль $[\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2]$ к плоскости (001) в общем случае косоугольной

ячейки

В частном случае ортогональных решеток: $a_2^* = a_2^{-1} = d_{010}^{-1}$, $a_3^* = a_3^{-1} = d_{001}^{-1}$

$$\mathbf{a}_i\mathbf{a}_j^* = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$



Совпадение по направлениям базисных векторов прямой $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ и обратной $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ решеток в ортогональной ячейке

Найдем теперь $\mathbf{H}$ для произвольной плоскости с миллеровскими индексами $(h_1h_2h_3)$. Для этого поступим так же, как и для координатных плоскостей, но сделаем вспомогательное построение и вместо элементарной ячейки будем рассматривать маленькую ячейку с базисными векторами:

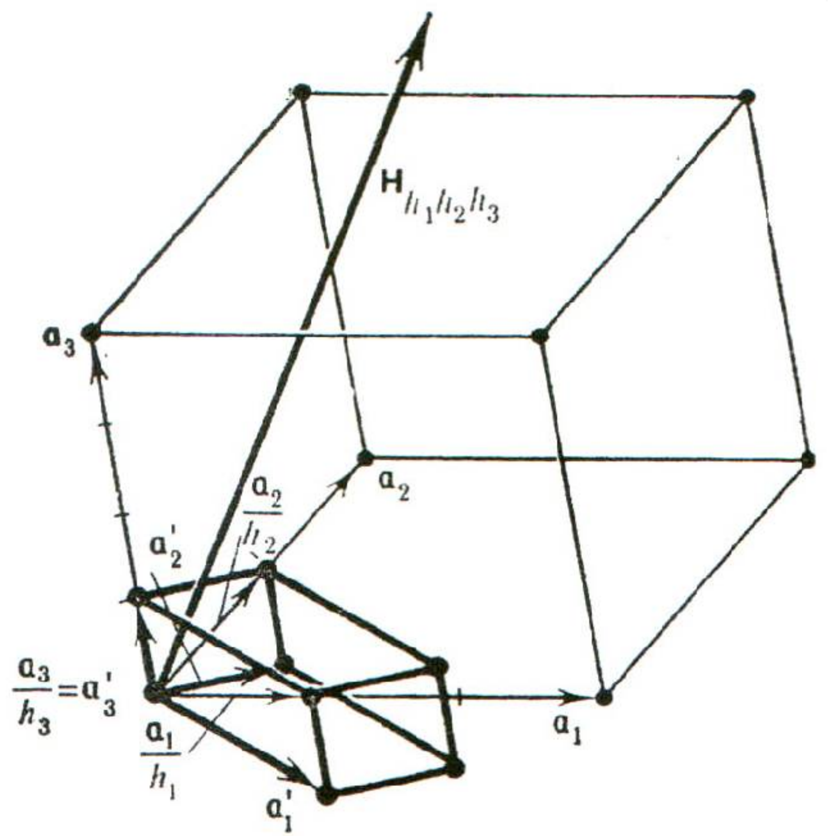
$$\mathbf{a}_1' = \frac{\mathbf{a}_1}{h_1} - \frac{\mathbf{a}_3}{h_3},\ \mathbf{a}_2' = \frac{\mathbf{a}_2}{h_2} - \frac{\mathbf{a}_3}{h_3},\ \mathbf{a}_3' = \frac{\mathbf{a}_3}{h_3}.$$

В сторонах плоскости $(h_1h_2h_3)$ лежат векторы $\mathbf{a}_1'$ и $\mathbf{a}_2'$ и векторное произведение $[\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_2']$ определяет направление $\mathbf{H}_{h_1h_2h_3}$ и площадь маленькой грани, а $\Omega' = \mathbf{a}_3'[\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_2']$, т.е.

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{\Omega'}{|[\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_2']|},\quad \mathbf{H}_{h_1h_2h_3} = \frac{[\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_2']}{\Omega'}$$

найдем, что $[\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_2'] = (h_1\mathbf{a}_1^* + h_2\mathbf{a}_2^* + h_3\mathbf{a}_3^*)\Omega'$, $\Omega' = \frac{\Omega}{hkl}$, т

$$\mathbf{H}_{hkl} = h_1\mathbf{a}_1^* + h_2\mathbf{a}_2^* + h_3\mathbf{a}_3^*,$$



Построение вектора $\mathbf{H}_{h_1h_2h_3}$ нормального к плоскости $(h_1h_2h_3)$ в общем случае ($h_1 = 3, h_2 = 2, h_3 = 4$)

Получается замечательный результат – совокупность векторов $\mathbf{H}_{hkl}$ выражается через базисные векторы $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ с целочисленными координатами hkl, которые являются как раз миллеровскими индексами плоскостей (hkl). Другими словами, концы векторов $\mathbf{H}_{hkl}$ образуют решетку $T^*(S)$, построенную на векторах $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ точно так же как вектор пространственной решетки $\mathbf{t}_{p_1p_2p_3}$ образует решетку $T(\mathbf{x})$, построенную на векторах $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$:

$$T^*(S) = \sum_{hkl=-\infty}^{+\infty} \delta(S - \mathbf{H}_{hkl})$$

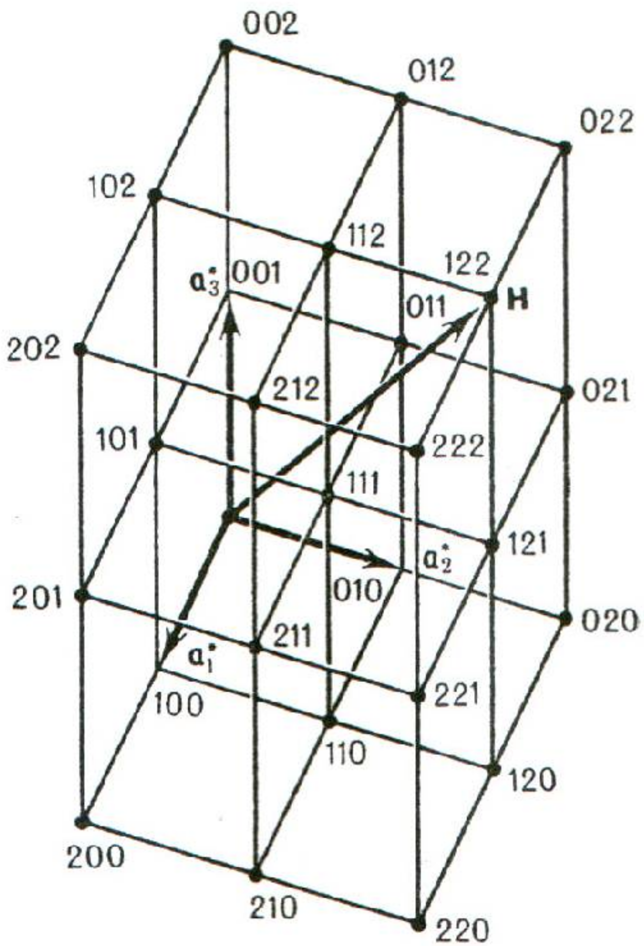
Где δ - дельта-функция

Решетка с вектором $\mathbf{H}_{hkl}$, построенная на базисных векторах $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$, называется *обратной решеткой*, векторы $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ (обозначаемые также и $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$) – координатными векторами обратной решетки. При этом из (11), (14) следует, что

$$\mathbf{H}_{hkl}\frac{a_1}{h_1} = 1,\ \mathbf{H}_{hkl}\frac{a_2}{h_2} = 1,\ \mathbf{H}_{hkl}\frac{a_3}{h_3} = 1$$

Обратная решетка определена в трехмерном обратном пространстве с размерностью «обратных длин». Чтобы отличать исходную решетку кристалла, определенную в реальном пространстве, от обратной решетки, первую в таких случаях называют «атомной» или «прямой» решеткой.

атомная решетка является обратной по отношению к обратной решетке, т. е. они взаимно-обратны, и можно величины со звездочками заменить на таковые без звездочек и наоборот, в том числе и Ω на Ω^* при замене $\mathbf{a}_i$ на $\mathbf{a}_i^*$.



Обратная решетка как совокупность узлов с базисом $\mathbf{a}_1^*$, $\mathbf{a}_2^*$, $\mathbf{a}_3^*$ и один из векторов $\mathbf{H}$ в ней ($\mathbf{H}_{122}$)

Взаимосвязь атомной и обратной решеток может быть сформулирована и так: узловые прямые в одной решетке перпендикулярны плоскостям в другой, расстояния между узлами в одной обратны межплоскостным расстояниям