Матричное представление решетки Бравэ

Чтобы точно определить векторы $\vec{a}_i, n, \vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3 a_3$ (i =1,2,3), удобно отнести их к прямоугольной системе координат. Тогда компоненты вектора $\vec{a}_i$ будут; эти 9 величин / индекс i принимает значения 1,2,3/ полностью определяют решетку.

Удобные обозначения получаются, если записать 9 компонент $a_{ix},$ в виде матрицы, а три целых числа n_1 n_2 n_3 как компоненты вектора-столбца. Тогда точка решетки задается символом $\vec{A}\vec{n}$,где:

$$\vec{A}\vec{n} = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}$$

Сумма 2-х трансляций на вектор решетки $A\bar{n}$ и $A\bar{m}$ равна $A(\bar{n}+\bar{m})$.
Таким образом, трансляционная решетка полностью определяется матрицей

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}$$

для ОЦК решетки: $$\vec{A} = \begin{pmatrix} -a/2 & a/2 & a/2 \\ a/2 & -a/2 & a/2 \\ a/2 & a/2 & -a/2 \end{pmatrix}$$

для ГЦК решетки: $$\vec{A} = \begin{pmatrix} 0 & a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 & a/2 \\ a/2 & a/2 & 0 \end{pmatrix}$$

Длины примитивных векторов можно найти, складывая квадраты элементов любого столба. Для ОЦК $|a_1|^2 = 3a^2/4$. Для ГЦК $|a_1|^2 = a^2/2$.

Угол между примитивными векторами можно получить составив скалярное произведение; т.е. перемножив 2 любых столбца матрицы $\vec{A}$. Таким образом, для ОЦК $-a^2/4 = 3\ a^2/4 * \cos\theta$: или $\cos\theta = -1/3$, что дает $\theta = 109^0 30$; Для ГЦК $a^2/4 = a^2/2 * \cos\theta$; $\cos\theta = 1/2$; $\theta = 60^0$;

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:

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