

Обратная решетка.

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

При произвольном \vec{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:

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

Поделим на $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ и тогда обратную решетку опишем как множество таких волновых векторов \vec{K} для которых $e^{i\vec{k}\vec{R}} = 1$ 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 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$, определенных уравнениями

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

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

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{D} \vec{a}_2 * \vec{a}_3$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{D} \vec{a}_3 * \vec{a}_1$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{D} \vec{a}_1 * \vec{a}_2,$$

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

Тогда решетка, составленная из точек $l_1 \vec{b}_1 + l_2 \vec{b}_2 + l_3 \vec{b}_3$ (где l_i - целые) называется обратной решеткой. Размерность см^{-1} .

Отнесем векторы \vec{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:

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

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

ПРИМЕРЫ

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

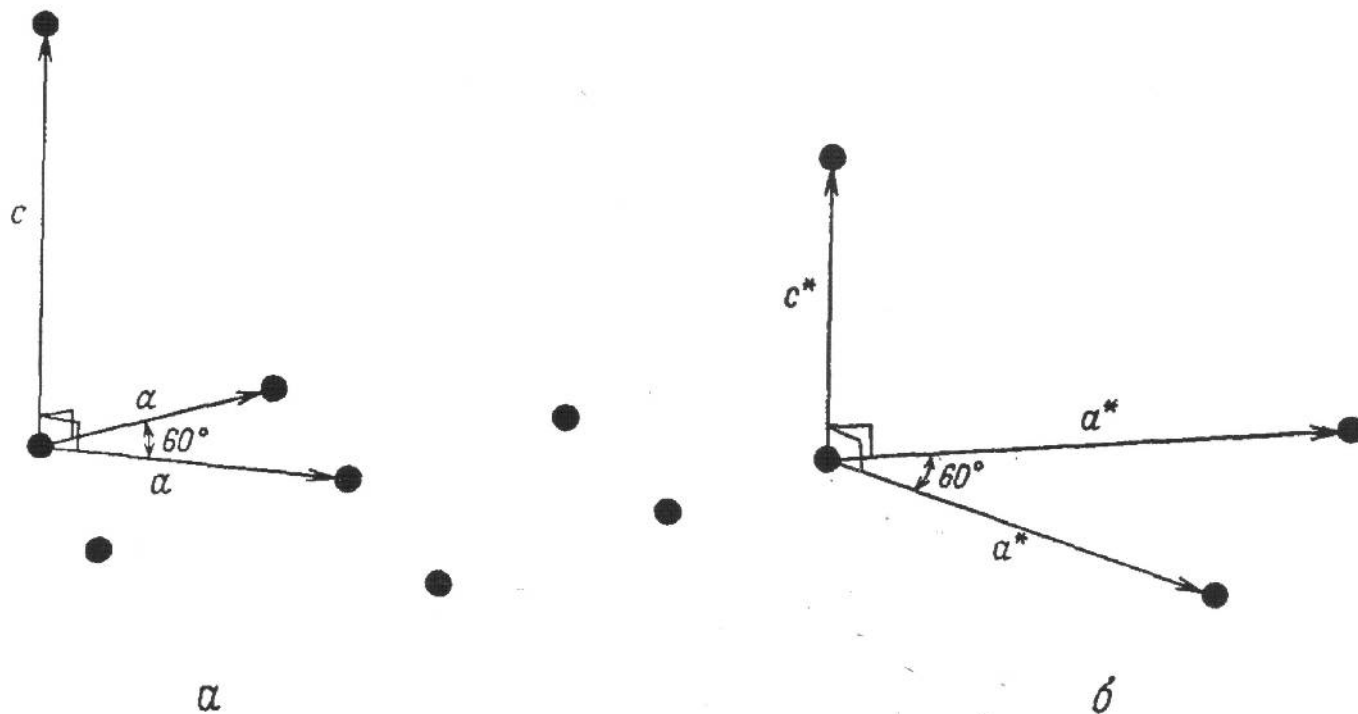
Обратной решеткой по отношению к простой кубической решетке Бравэ, сторона кубической элементарной ячейки которой равна a , является простая кубическая решетка с кубической элементарной ячейкой со стороной $2\pi/a$.

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

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

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 $4\pi/\sqrt{3}a$ повернутая на 30° вокруг c -оси по отношению к прямой решетке.

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



Фиг. 5.1. a — основные векторы для простой гексагональной решетки Бравэ; b — основные векторы для решетки, обратной той, которая порождена основными векторами решетки a .

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 $\mathbf{a}_i \mathbf{a}_j$ ячейки, а межплоскостные расстояния между координатными плоскостями есть частные от деления объема ячейки на площадь этой грани. Объем ячейки определяется смешанным произведением:

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

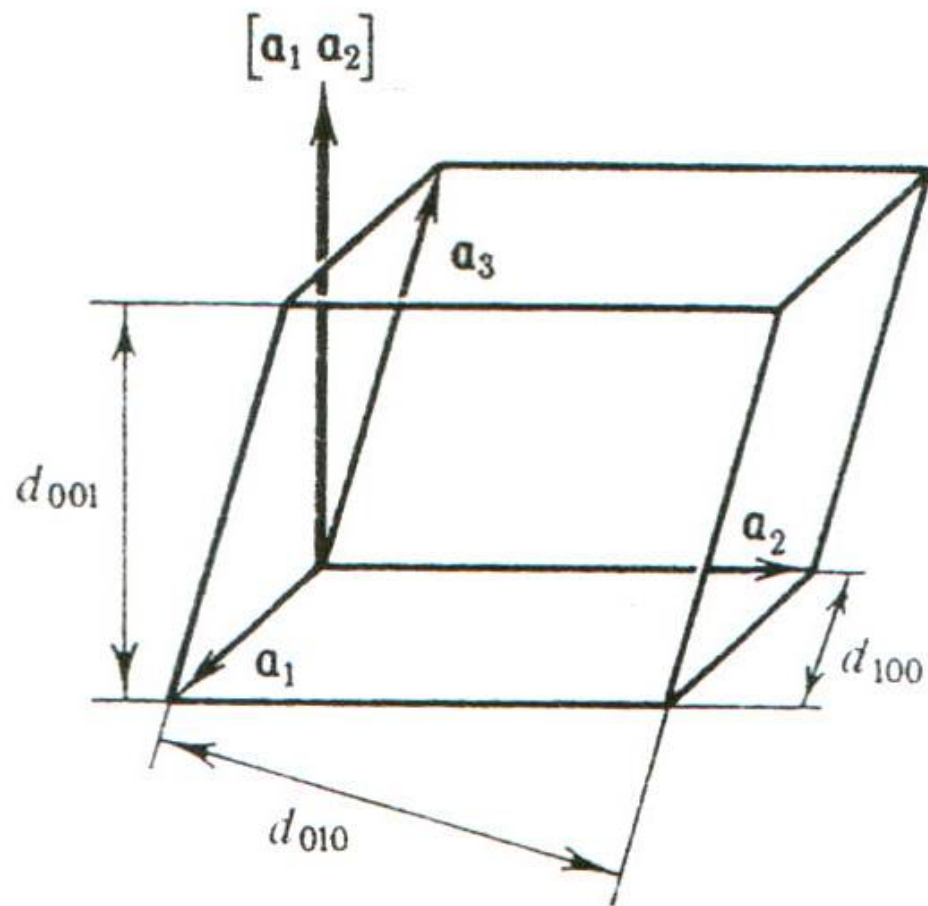
Таким образом, $d_{100} = \frac{\Omega}{|[\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3]|}$, $d_{010} = \frac{\Omega}{|[\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1]|}$, $d_{001} = \frac{\Omega}{|[\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2]|}$.

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

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

нормальных к координатным плоскостям. Отсюда, следовательно,

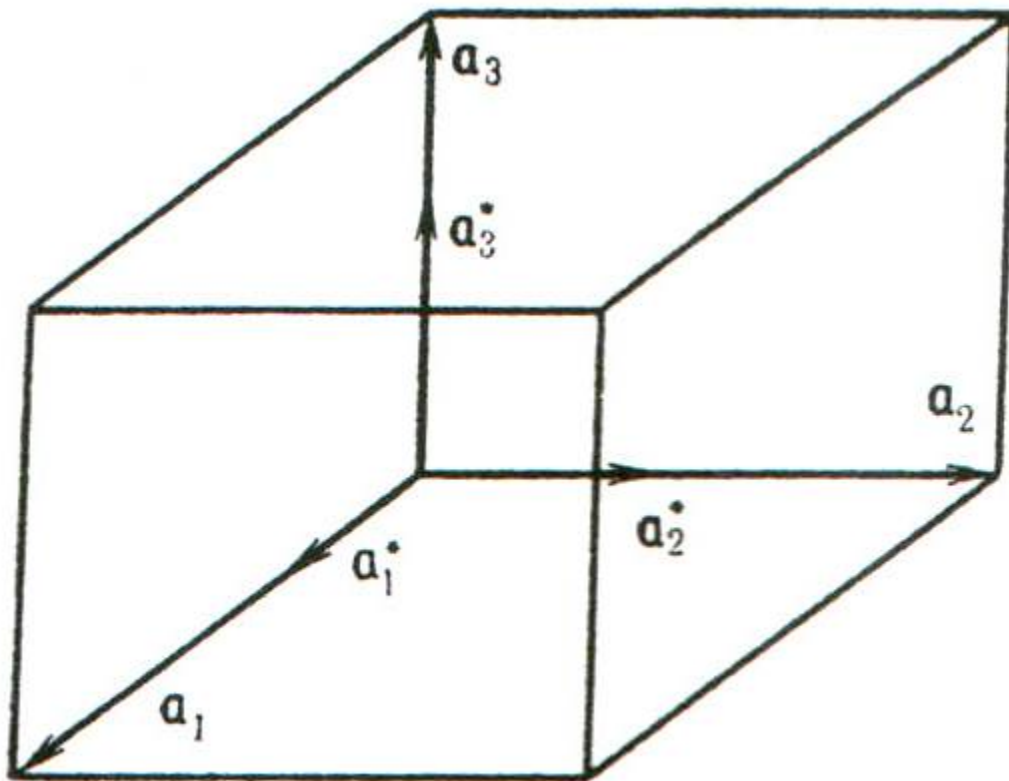
$$d_{100} = a_1^{*-1}, \quad d_{010} = a_2^{*-1}, \quad d_{001} = a_3^{*-1}$$



Межплоскостные расстояния d_{100} , d_{010} , d_{001} и нормаль $[a_1 a_2]$ к плоскости (001) в общем случае косоугольной ячейки

В частном случае ортогональных решеток: $a_1^* = a_1^{-1} = d_{100}^{-1}$, $a_2^* = a_2^{-1} = d_{010}^{-1}$, $a_3^* = a_3^{-1} = d_{001}^{-1}$

$$a_i a_j^* = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$



Совпадение по направлениям базисных векторов прямой a_1, a_2, a_3 и обратной a_1^*, a_2^*, a_3^* решеток в ортогональной ячейке

Найдем теперь \mathbf{H} для произвольной плоскости с миллеровскими индексами $(h_1 h_2 h_3)$. 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:

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

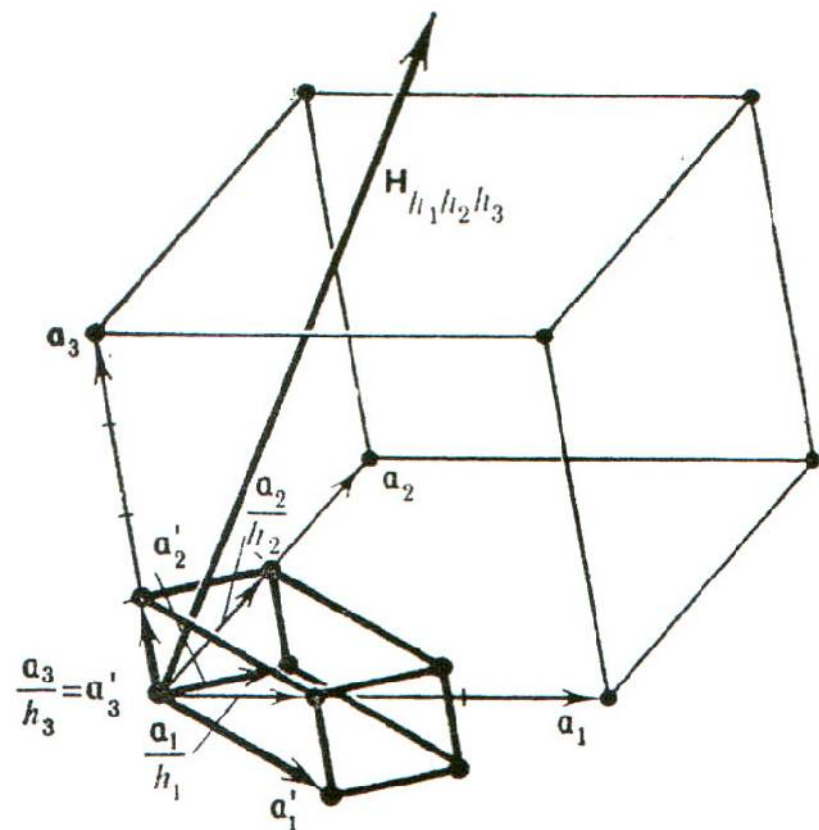
В сторонах плоскости $(h_1 h_2 h_3)$ лежат векторы \mathbf{a}'_1 и \mathbf{a}'_2 и векторное произведение $[\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}'_2]$ определяет направление $\mathbf{H}_{h_1 h_2 h_3}$ и площадь маленькой грани, а $\Omega' = \mathbf{a}'_3 [\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}'_2]$, т.е.

$$d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{\Omega'}{|[\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}'_2]|}, \quad \mathbf{H}_{h_1 h_2 h_3} = \frac{[\mathbf{a}'_1 \mathbf{a}'_2]}{\Omega'}$$

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 $\mathbf{H}_{h_1 h_2 h_3}$ нормального к плоскости $(h_1 h_2 h_3)$ 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 $\mathbf{t}_{p_1 p_2 p_3}$ образует решетку $T(\mathbf{x})$, построенную на векторах $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$:

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

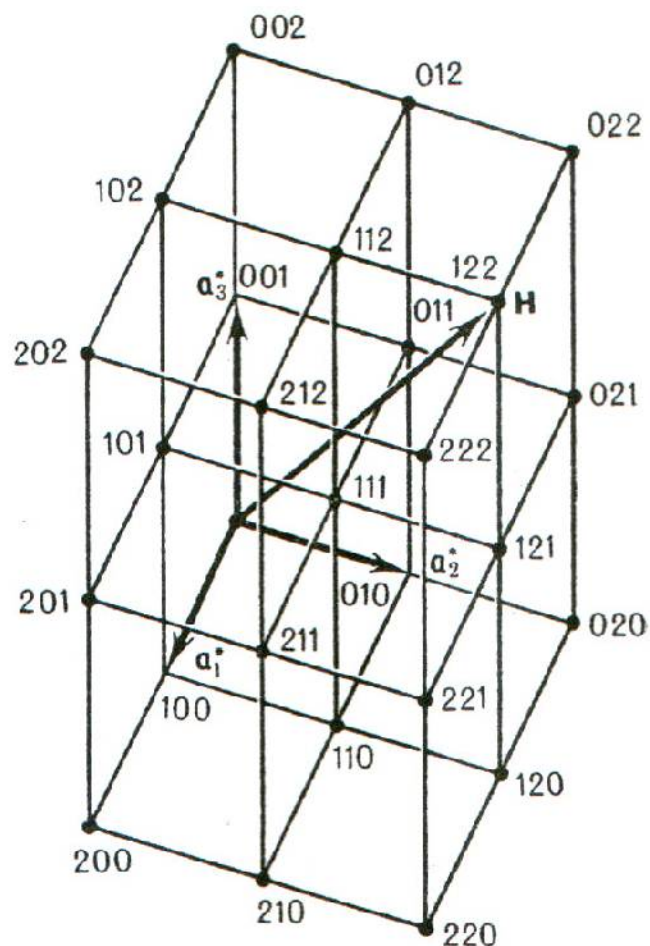
Где δ - дельта-функция

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

$$\mathbf{H}_{hkl} \frac{\mathbf{a}_1}{h_1} = 1, \mathbf{H}_{hkl} \frac{\mathbf{a}_2}{h_2} = 1, \mathbf{H}_{hkl} \frac{\mathbf{a}_3}{h_3} = 1$$

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