Temat 2. Sieć odwrotna.

Definicja 2.1

Sieć odwrotna – jeżeli dane są wektory podstawowe $\mathbf{a_1}$, $\mathbf{a_2}$, $\mathbf{a_3}$ sieci prostej, to sieć odwrotną definiujemy poprzez wektory podstawowe

$$\mathbf{b_1} = 2\pi \frac{\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})}, \tag{2.1}$$

$$\mathbf{b_2} = 2\pi \frac{\mathbf{a_3} \times \mathbf{a_1}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})}, \tag{2.2}$$

$$\mathbf{b_3} = 2\pi \frac{\mathbf{a_1} \times \mathbf{a_2}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})}, \tag{2.3}$$

przy czym

$$\Omega = |\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})| = |\mathbf{a_2} \cdot (\mathbf{a_3} \times \mathbf{a_1})| = |\mathbf{a_3} \cdot (\mathbf{a_1} \times \mathbf{a_2})|, \tag{2.4}$$

jest objętością komórki elementarnej sieci prostej. Wektory sieci odwrotnej będziemy dalej oznaczać przez **K**

$$\mathbf{K} = m_1\,\mathbf{b}_1 + m_2\,\mathbf{b}_2 + m_3\,\mathbf{b}_3\,, \tag{2.5}$$

gdzie m_1, m_2, m_3 są liczbami całkowitymi. Jednostką wektorów sieci prostej jest [m], jednostką wektorów sieci odwrotnej jest [1/m].

Definicja 2.2

Sieć odwrotna jest zbiorem tych wszystkich wektorów falowych **K**, dla których fale płaskie mają okresowość sieci Bravais'go (krystalicznej).

Wniosek: obraz dyfrakcyjny kryształu jest obrazem sieci odwrotnej.
Definicję 2.2 można wyprowadzić z definicji 2.1.

Dowód 2.1

Ze wzorów (2.1)-(2.3) wynika, że

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\,\delta_{ij}. \tag{2.6}$$

Falę płaską w punkcie o wektorze wodzącym **r** w chwili t można zapisać

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A \exp[\mathrm{i}(\mathbf{K}\cdot\mathbf{r} + \omega\, t)]. \tag{2.7}$$

Stąd wynika, że fala płaska w punkcie **R** + **r**, gdzie **R** jest wektorem sieci prostej

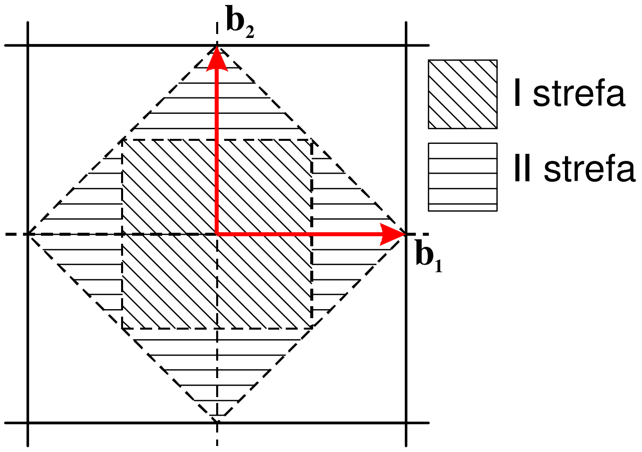
$$\Psi(\mathbf{R} + \mathbf{r}, t) = \mathrm{A} \exp[\mathrm{i}(\mathbf{K}\cdot\mathbf{R} + \mathbf{K}\cdot\mathbf{r} + \omega\, t)] = \Psi(\mathbf{r}, t) \exp[\mathrm{i}(\mathbf{K}\cdot\mathbf{R})] =$$
$$= \Psi(\mathbf{r}, t) \exp[\mathrm{i}\ 2\pi(n_1m_1 + n_2m_2 + n_3m_3)] = \Psi(\mathbf{r}, t). \tag{2.8}$$

Właściwości sieci odwrotnej:

1. Sieć odwrotna jest siecią Bravais'go.
2. Każdy wektor **K** sieci odwrotnej jest prostopadły do odpowiedniego zbioru płaszczyzn sieci prostej Bravais'go (sieci krystalicznej).
   $$\text{dla każdego } \mathbf{K} \quad \mathbf{K} = h\mathbf{b_1} + k\mathbf{b_2} + l\mathbf{b_3}\,, \tag{2.9}$$
   gdzie h, k, l są wskaźnikami Millera generującymi płaszczyzny sieci prostej Bravais'go.
3. Odległość między płaszczyznami sieci krystalicznej o wskaźnikach Millera h, k, l jest równa
   $$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{K}(h,k,l)|}. \tag{2.10}$$
4. Objętość komórki sieci odwrotnej
   $$V_{\mathbf{K}} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathbf{r}}}, \tag{2.11}$$
   gdzie $V_{\mathbf{r}}$ jest objętością komórki elementarnej sieci prostej.

5. Siec prosta (krystaliczna bądź Bravais'go) jest siecią odwrotną do swojej sieci odwrotnej.
6. Komórka elementarna sieci odwrotnej nie musi być prostopadłościanem (nawet gdy komórki sieci elementarnej są prostokątne).

Definicja 2.3
Pierwszą strefą Brillouina nazywany komórkę elementarną Wignera-Seitza skonstruowaną dla sieci odwrotnej. **Druga strefa Brillouina** jest obszarem zawartym między brzegiem pierwszej strefy a płaszczyznami połowiącymi odcinki łączące wybrany węzeł sieci odwrotnej z jego następnymi sąsiadami. Analogicznie konstruuje się dalsze strefy.



Rys. 2.1. Dwie pierwsze strefy Brillouina dla sieci kwadratowej.

Grupa punktowa symetrii pierwszej strefy Brillouina oraz grupa symetrii sieci odwrotnej jest taka sama jak grupa symetrii danej sieci krystalograficznej.

Znaczenie I strefy Brillouina
Komórki sieci odwrotnej zbudowane na wektorach bazowych sieci $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$, $\mathbf{b}_3$ są mało użyteczne. Rozpraszanie fal na kryształach jest blisko związane ze **strefami Brillouina**. Każda fala o wektorze falowym poprowadzonym ze środka pierwszej strefy Brillouina do jej granicy jest źródłem fali ugiętej. Dlatego sieć odwrotną kryształu można wyznaczyć doświadczalnie na podstawie analizy rozpraszania promieni X lub neutronów przez ten kryształ.