7. ОБРАТНА ПРОСТРАНСТВЕНА РЕШЕТКА. РАЗЛАГАНЕ НА ФУНКЦИЯ С ПЕРИОДИЧНОСТТА НА ПРОСТРАНСТВЕНА РЕШЕТКА В РЕД НА ФУРИЕ.

1. Въведение

Удобно е въвеждането на понятието обратна пространствена решетка при изучаването на геометричните свойства на пространствените решетки в рентгеноструктурния анализ и в квантовата теория на твърдото тяло. Това понятие възниква от често срещаната във физиката на кристалите задача за разлагане на функция, притежаваща периодичността на кристалната решетка в ред на Фурие. Тримерни периодични функции са плътността на електронния облак в дадена точка на пространството, заета от решетката; електростатичния потенциал, наречен още вътрешно кристално поле и др.

2. Разлагане на функция с периодичността на пространствена решетка в ред на Фурие

Физически еквивалентни (с еднакви физични свойства) са точки от кристала с радиус-вектори $\vec{r}$ и $\hat{t}\vec{r}$.

За периодичната функция е изпълнено условието:

$$A(\vec{r}) = A(\hat{t}\vec{r}) = A(\vec{r} + \vec{a}_u), \tag{1}$$

$\hat{t}$ - оператор на транслация.

Разглеждаме координатна система с координати ξ_i ($\xi_i \equiv q_i$), чиито единични вектори съвпадат по посока с основните вектори на КР $\vec{a}_i$. Разлагаме в троен ред на Фурие периодичната функция $A(\vec{r})$ по променливите ξ_i с периоди $\vec{a}_i$.

$$A(\vec{r}) = \sum_{k_1=-\infty}^{+\infty} \sum_{k_2=-\infty}^{+\infty} \sum_{k_3=-\infty}^{+\infty} A_{k_1 k_2 k_3}\, e^{2\pi i \left(\frac{k_1 \xi_1}{a_1} + \frac{k_2 \xi_2}{a_2} + \frac{k_3 \xi_3}{a_3} \right)}, \tag{2}$$

k_1, k_2, k_3 - три произволни цели числа: 0, <0, >0; $A_{k_1 k_2 k_3}$ - коефициент на разлагането.

Преход от неортогоналните координати ξ_i към ортогоналните координати *x*:

$$\xi_i = a_{ij}\, x_j \tag{3}$$

a_{ij} - коефициенти, зависещи от ъглите между осите на двете координатни системи (КС).

В ортогонална КС:

$$A(\vec{r}) = \sum_{b_1} \sum_{b_2} \sum_{b_3} A_{b_1 b_2 b_3}\, e^{2\pi i (b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3)} \tag{4}$$

b_1, b_2, b_3 - коефициенти зависещи от k_i, a_i и a_{ij}. Могат да се определят от (3).

Всяка тройка b_1, b_2, b_3 може да се разгледа като компоненти на един вектор $\vec{b}_v$ в избраната правоъгълна КС.

$$\vec{b}_v = v_1 \vec{b}_1 + v_2 \vec{b}_2 + v_3 \vec{b}_3 \tag{5}$$

Редът на Фурие за $A(\vec{r})$ във векторен вид в правоъгълната КС е:

$$A(\vec{r}) = \sum_{\vec{b}_v} A_{\vec{b}_v} e^{2\pi i(\vec{b}_v \,.\, \vec{r})} \tag{6}$$

Възможните стойности за $\vec{b}_v$ се получават от условието за периодичност (1).

$$A(\vec{r} + \vec{a}_u) = \sum_{\vec{b}_v} A_{\vec{b}_v} e^{2\pi i(\vec{b}_v \,.\, \vec{r})} e^{2\pi i(\vec{b}_v \,.\, \vec{a}_u)} = A(\vec{r}) = \sum_{\vec{b}_v} A_{\vec{b}_v} e^{2\pi i(\vec{b}_v \,.\, \vec{r})} \tag{7}$$

(7) се изпълнява при условие

$$e^{2\pi i(\vec{b}_v \,.\, \vec{a}_u)} = 1 \tag{8}$$

$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$ - формула на Ойлер

Това е възможно при:

$$\vec{b}_v \,.\, \vec{a}_u = u_1 \vec{b}_v \,.\, \vec{a}_1 + u_2 \vec{b}_v \,.\, \vec{a}_2 + u_3 \vec{b}_v \,.\, \vec{a}_3 = \text{цяло число} \tag{9}$$

т.е. ако всички скаларни произведения в дясната страна са произволни цели числа (0, <0, >0)

$$\vec{b}_v \,.\, \vec{a}_1 = v_1, \quad \vec{b}_v \,.\, \vec{a}_2 = v_2, \quad \vec{b}_v \,.\, \vec{a}_3 = v_3 \tag{10}$$

Всеки вектор се определя еднозначно от своите три компоненти $\Rightarrow$ трите независими уравнения (10) са достатъчни за определяне на вектор $\vec{b}_v$.

Да представим $\vec{b}_v$ чрез $\vec{a}_i$ във вида:

$$\vec{b}_v = \alpha(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) + \beta(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) + \gamma(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \tag{11}$$

Заместваме (11) в (10).

$$\begin{aligned} &\beta\, \vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = v_1 & & \beta = \frac{v_1}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{v_1}{\Omega_0} \\ &\gamma\, \vec{a}_2(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = v_2 & \Rightarrow \quad & \gamma = \frac{v_2}{\vec{a}_2(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)} = \frac{v_2}{\Omega_0} \\ &\alpha\, \vec{a}_3(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = v_3 & & \alpha = \frac{v_3}{\vec{a}_3(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)} = \frac{v_3}{\Omega_0} \end{aligned} \tag{12}$$

Ако $\Omega_0 = [\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3]$ е елементарният обем на правата КР и заместим (12) в (11).

$$\vec{b}_v = \frac{v_3(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{\Omega_0} + \frac{v_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{\Omega_0} + \frac{v_2(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}{\Omega_0} \tag{13}$$

Сравняваме (5) и (13) и получаваме:

$$\vec{b}_1 = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega_0}; \quad \vec{b}_2 = \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega_0}; \quad \vec{b}_3 = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega_0} \tag{14}$$

Векторите $\vec{b}_i$ от (14) се наричат **основни вектори на обратната решетка**, паралелепипедът, образуван от тях – **елементарна клетка на обратната решетка**, а векторът (5) – **транслационен вектор на обратната решетка**.

От (14) следват две свойства на основните вектори $\vec{b}_i$:

1) $\vec{a}_i \,.\, \vec{b}_k = \delta_{ik} = \begin{cases} 0, & i \neq k \\ 1, & i = k \end{cases}$

2) $\vec{b}_1 \perp \vec{a}_2$ и $\vec{a}_3$, $\vec{b}_2 \perp \vec{a}_1$ и $\vec{a}_3$, $\vec{b}_3 \perp \vec{a}_1$ и $\vec{a}_2$.

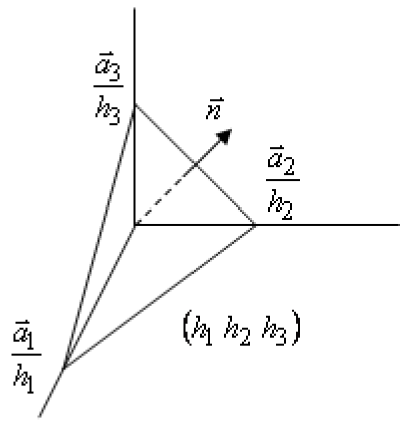
$$\Omega_0 \,.\, \Omega_0^* = 1, \tag{16}$$

Ω_0^* - обем на обратната КР (следва от определението(14)).

3. Свойства на обратната пространствена решетка

Съдържат се в две теореми:

Т1: Транслационният вектор на обратната решетка $\vec{b}_v = v_1 \vec{b}_1 + v_2 \vec{b}_2 + v_3 \vec{b}_3$ е перпендикулярен на фамилията възлови равнини на правата решетка, чиито Милерови индекси h_1, h_2, h_3 се отнасят както целите числа v_1, v_2, v_3, т.е. $h_1 : h_2 : h_3 = v_1 : v_2 : v_3$.



Краищата на векторите: $\dfrac{\vec{a}_i}{h_i}$ лежат в равнината (h_1 h_2 h_3) $\Rightarrow$ в тази равнина лежат и векторите:

$$\left(\frac{\vec{a}_1}{h_1} - \frac{\vec{a}_2}{h_2}\right), \quad \left(\frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_3}{h_3}\right), \quad \left(\frac{\vec{a}_3}{h_3} - \frac{\vec{a}_1}{h_1}\right)$$

Скаларното произведение на $\vec{b}_{h_1 h_2 h_3}$ с всеки от тези вектори е нула:

$$\begin{aligned}&\vec{b}_{h_1 h_2 h_3}.\left(\frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_3}{h_3}\right) = \left(h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3\right)\left(\frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_3}{h_3}\right) = \\ &= \vec{b}_2.\vec{a}_2 - \vec{b}_3.\vec{a}_3 = \frac{(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1).\vec{a}_2}{\Omega_0} - \frac{(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2).\vec{a}_3}{\Omega_0} = 0\end{aligned} \qquad , \qquad \vec{a}_i\,.\,\vec{b}_k = \delta_{ik}$$

$\Rightarrow$ векторът $\vec{b}_{h_1 h_2 h_3}$ $\perp$ на равнината (h_1 h_2 h_3), но $\vec{b}_{h_1 h_2 h_3} \parallel \vec{b}_v$, т.к. $h_1 : h_2 : h_3 = v_1 : v_2 : v_3$.

Т2: Разстоянието между две съседни равнини от дадена фамилия възлови равнини (h_1 h_2 h_3) в правата КР е

$$d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{1}{b_{h_1 h_2 h_3}}$$

d_h = проекцията на който и да е отрез от оста (в случая X_1) върху нормалата на равнината (h_1 h_2 h_3) - $\vec{n}$.

$$\vec{n} = \frac{\vec{b}_h}{b_h};$$

$$d_h = \left(\frac{\vec{a}_1}{h_1}.\vec{n}\right) = \frac{1}{h_1 b_h}\vec{a}_1.\left(h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3\right) = \frac{\vec{a}_1.\vec{b}_1}{b_h} = \frac{1}{b_h}$$

Теоремите дават връзката между възлите на обратната решетка и възловите равнини на правата решетка и обратно.

• На всяка фамилия възлови равнини (h_1 h_2 h_3) в правата решетка отговаря вектор $\vec{b}_h$ в обратната решетка, перпендикулярен на фамилията възлови равнини.

• Неговата големина b_h определя периода на идентичност (разстоянието между два съседни възела) по направление на вектора $\vec{b}_h$ в пространството на обратната КР.

• Означението на равнина в КР чрез съответния вектор на обратната решетка е еквивалентно на използването на индексите на Мюлер в класическата кристалография.

Най-характерни (добри за изследване) в КР са равнини, които най-плътно са заети с възли на КР (частици). Тъй като плътността на възлите в КР е постоянна в пространството, то тези характерни равнини са отдалечени на най-голямо разстояние една от друга, т.е. отговарят на най-малък вектор на обратната КР или на малки индекси на Мюлер.

4. Зони на Брилуен

Елементарната клетка на обратната КР може да се представи чрез паралелепипед с ръбове $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ или чрез съответната елементарна клетка на Вигнер-Зайц за обратната КР, която се нарича първа зона на Брилуен (елементарна клетка на Вигнер-Зайц на обратната КР).

5. Построяване на обратна кристална решетка

а) свежда се сложната права ЕК до примитивна ЕК: ($\vec{a}_i$) ;

б) използва се дефиницията за определяне на $\vec{b}_v$.

• Обратната КР на обемноцентрираната кубична КР е стенноцентрираната кубична КР и обратно (СЦ)КР $\rightarrow$ (ОЦ)КР.

• Обратната на кубичната (Р) КР е също (Р) КР.

• Обратната на тригоналната (Р) КР е също тригонална (Р) КР.