ROZDZIAŁ 9. SUPLEMENT 1

KONSTRUKCJA SIECI ODWROTNEJ W 3-D

Zobaczmy teraz, jak praktycznie tworzy się sieć odwrotną w trzech wymiarach. Weźmy jako przykład sieć regularną przestrzennie centrowaną (ang. *body centered cubic*, bcc, rys.1a).

Wybrane wektory bazy to:

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \tag{1}$$

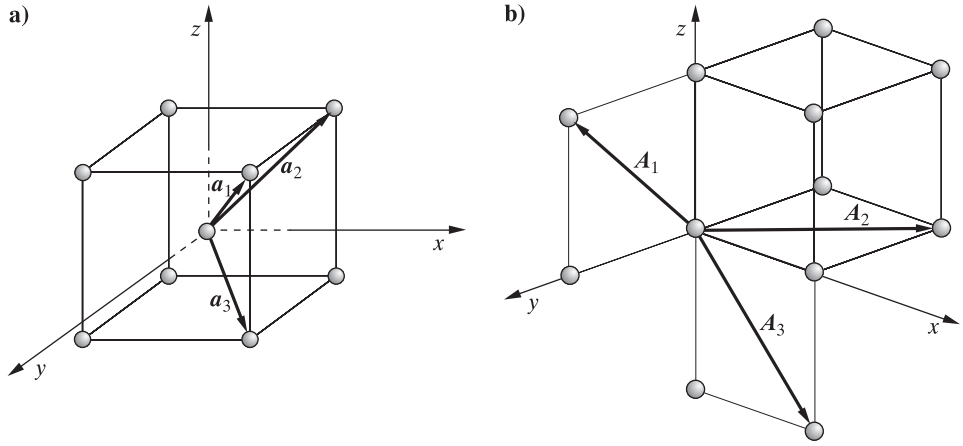
$$\boldsymbol{a}_2 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \tag{2}$$

$$\boldsymbol{a}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} - \boldsymbol{k}), \tag{3}$$

gdzie $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{k}$ to wersory wzdłuż osi x, y, z. Jest to baza, bo wszystkie inne węzły sieci powstają przez jakąś liniową kombinację $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ i $\boldsymbol{a}_3$ ze współczynnikami całkowitymi[1]. Na przykład atom w dolnym, prawym, tylnym rogu wskazywany jest wektorem

$$\frac{a}{2}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{j} - \boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_3. \tag{4}$$

Nim przejdziemy do sieci odwrotnej odpowiadającej sieci prostej bcc, rozważmy inną sieć prostą: regularną (inaczej kubiczną) ściennie centrowaną (ang. *face centered cubic*, fcc). Komórka elementarna tej sieci jest pokazana na rys.1b.



Rys.1. a) Sieć regularna przestrzennie centrowana (bcc). b) Sieć regularna ściennie centrowana (fcc). W obu przypadkach trzy wektory bazy mają jednakową długość, ale nie są wzajemnie prostopadłe

Wektory bazy w tej sieci to:

$$\boldsymbol{A}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \tag{5}$$

[1] Zwróćmy uwagę na jednakową długość wektorów bazy, a także na to, że nie są one do siebie prostopadłe (co sprawdzamy przez obliczenie iloczynów skalarnych).

$$\boldsymbol{A}_2 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{j}), \tag{6}$$

$$\boldsymbol{A}_3 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{k}). \tag{7}$$

Inne atomy można przedstawić jako wskazywane wektorami, które są liniowymi kombinacjami (o całkowitych współczynnikach) $\boldsymbol{A}_1$, $\boldsymbol{A}_2$, $\boldsymbol{A}_3$. Na przykład atom, który na naszym płaskim rysunku jest najwyżej, wskazywany jest wektorem

$$\frac{a}{2}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{j}) = \boldsymbol{A}_2 - \boldsymbol{A}_3. \tag{8}$$

Sieci odwrotne

Sieć regularna przestrzennie centrowana (bcc). Teraz przechodzimy do sprawy sieci odwrotnej dla pierwszej z sieci, czyli bcc. Z definicji wektorów bazy sieci odwrotnej mamy

$$\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3 \frac{2\pi}{V}, \tag{9}$$

ale

$$\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 (\boldsymbol{k} + \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k} + \boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} - \boldsymbol{i}) = \left(\frac{a}{2}\right)^2 2(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{j}). \tag{10}$$

Z kolei

$$V = \boldsymbol{a}_1 (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3) = \left(\frac{a}{2}\right)^3 4. \tag{11}$$

Stąd

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \tag{12}$$

a to oznacza proporcjonalność do $\boldsymbol{A}_1$.

Podobnie otrzymamy wektory

$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{2a}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{j} - \boldsymbol{k} + \boldsymbol{i} - \boldsymbol{j} + \boldsymbol{i}) = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{j}), \tag{13}$$

$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{2\pi}{2a}(-\boldsymbol{k} - \boldsymbol{j} - \boldsymbol{k} + \boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} + \boldsymbol{i}) = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{k}), \tag{14}$$

proporcjonalne odpowiednio do wektorów $\boldsymbol{A}_2$ i $\boldsymbol{A}_3$ (współczynnik proporcjonalności jest ten sam) sieci fcc. Stąd wniosek:

siecią odwrotną do sieci bcc jest sieć fcc.

Sieć regularna ściennie centrowana (fcc). Podobne rozważania dla sieci fcc dają:

$$\boldsymbol{A}_2 \times \boldsymbol{A}_3 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 (\boldsymbol{j} + \boldsymbol{k} + \boldsymbol{i}), \tag{15}$$

$$V = \boldsymbol{A}_1 (\boldsymbol{A}_2 \times \boldsymbol{A}_3) = \left(\frac{a}{2}\right)^3 (1 + 1) = \frac{a^3}{4} \tag{16}$$

oraz

$$\boldsymbol{B}_1 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k}), \tag{17}$$

$$\boldsymbol{B}_2 = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{j}+\boldsymbol{i}), \tag{18}$$

$$\boldsymbol{B}_3 = \frac{2\pi}{a}(-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{j}+\boldsymbol{i}), \tag{19}$$

proporcjonalne odpowiednio do wektorów $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ i $\boldsymbol{a}_3$ sieci bcc.

Stąd wniosek, że

siecią odwrotną do fcc jest sieć bcc.