Materials Engineer / Materiálový inžinier 2007 – 2009
ISSN 1337 – 8953
www.materialing.com
V. Girman, 22. 07. 2009

RECIPROČNÁ MRIEŽKA

V. Girman
Katedra fyziky kondenzovaných látok, UPJŠ, Košice
vladimir.girman@upjs.sk

Abstrakt
S každou kryštálovou štruktúrou sú spojené dve mriežky – reálna mriežka a recipročná mriežka. Tieto dve mriežky sú vzájomne spojené presne stanovenými reláciami. Ak otáčame kryštálom, otáčame zároveň aj reálnu a recipročnú mriežku. Môžeme povedať, že recipročná mriežka je vymedzená časť recipročného priestoru (tiež nazývaného združený Fourierov priestor, alebo k – priestor) [1], ktorá zodpovedá zobrazeniu z oblasti reálnej mriežky. Koncept recipročnej mriežky bol navrhnutý predovšetkým za účelom stanovenia dvoch významných vlastností kryštalografických rovín: ich orientácie a medzirovinnej vzdialenosti. No je možné z nej odčítať aj niektoré fyzikálne vlastnosti kryštálu [2]

1. Úvod

Študenti často považujú recipročnú mriežku za akúsi geometrickú abstrakciu, pochopiteľnú len cez pojmy vektorovej algebry a zložitej teórie difrakcie. V skutočnosti ide o veľmi jednoduchý a súčasne veľmi dôležitý koncept [3]. Je pravdou, že P. P. Ewald, ktorý ju v roku 1921 zaviedol [4], ju predostrel ako nejakú matematickú konštrukciu odvodenú z parametrov reálnej mriežky, no veľmi rýchlo sa recipročná mriežka stala dôležitým nástrojom pre ilustráciu a pochopenie „difrakčnej geometrie“ a s ňou spojených matematických vzťahov. O tom, že recipročná mriežka nie je len abstrakcia sa môžeme na vlastné oči presvedčiť vtedy, ak ožiarime reálnu mriežku napr. RTG alebo iným vhodným žiarením. Na fluorescenčnom tienitku budeme (za predpokladu splnenia podmienok difrakcie) pozorovať napr. bodový difraktogram. Takýto bodový difraktogram považujeme za akúsi mapu recipročného priestoru, kde každá reflexia zodpovedá určitému systému rovín (hkl). Na rozdiel od reálnej mriežky, môže takto vyobrazená recipročná mriežka pôsobiť trošku chaoticky a spôsobovať isté rozpaky. K jej správnej interpretácii je preto nutné poznať niekoľko dôležitých faktov.

2. Konštrukcia recipročnej mriežky

Z hľadiska kryštalografie je reálna mriežka definovaná troma elementárnymi translačnými vektormi **a**, **b**, **c** a troma uhlami α, β, γ. Recipročná mriežka sa definovanuje rovnakými parametrami, avšak na rozlíšenie od parametrov reálnej mriežky ich označujeme hviezdičkou v hornom indexe: **a***, **b***, **c*** a α^*, β^*, γ^*. Recipročná mriežka je teda konštruovaná v súradnicových osiach, zodpovedajúcich elementárnym translačným vektorom **a***, **b***, **c***, ktoré sú odvodené zo súradnicových osí zodpovedajúcich elementárnym translačným vektorom reálnej mriežky **a**, **b**, **c** tak, že:

$$a^* \cdot b = a^* \cdot c = b^* \cdot a = b^* \cdot c = c^* \cdot a = c^* \cdot b = 0$$

a súčasne:

$$a^* \cdot a = b^* \cdot b = c^* \cdot c = 1$$

To naznačuje, že **a*** je kolmé na rovinu (**b**, **c**), a podobne, **b*** je kolmé na rovinu (**a**, **c**), a **c*** je kolmé na rovinu (**a**, **b**). Recipročná súradná os je tak vektorovým výsledkom osí reálnej mriežky:

$$a^* = (b \times c) / V$$

$$b^* = (c \times a) / V$$

c* = (a x b) / V

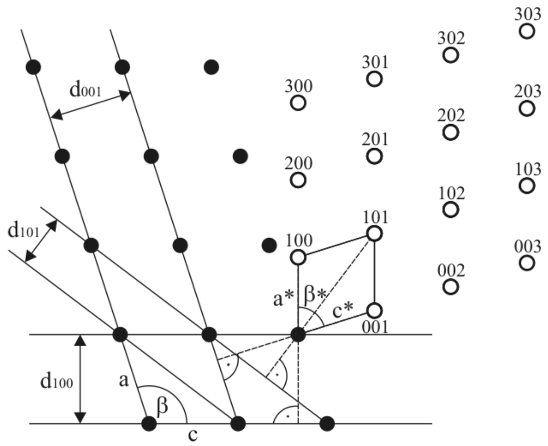
kde „**V**“ je objem reálnej mriežky. Zároveň platí, že:

α* je uhol medzi hranami **b*** a **c***

β* je uhol medzi hranami **a*** a **c***

γ* je uhol medzi hranami **a*** a **b***

Každý bod recipročnej mriežky je reprezentovaný vektorom, ktorý je kolmý na jednu sústavu rovnobežných rovín (hkl) reálnej mriežky, a ktorého dĺžka je rovná prevrátenej hodnote d_{hkl} reálnej mriežky. Pod pojmom dĺžka vektora sa skrýva označenie vzdialenosti od počiatku (000) do zvoleného bodu recipročnej mriežky. To znamená, že ak zostrojíme kolmicu k rovine, získame jej normálu, ktorá spoľahlivo určuje orientáciu roviny v priestore. Ak urobíme konštrukciu normály z každej roviny jedného typu (hkl) a obmedzíme dĺžku normály tak, že bude rovná recipročnej hodnote medzirovinnej vzdialenosti uvažovaného súboru rovín (hkl), charakterizujeme každú rovinu v súbore koncovým bodom jej normály. Je evidentné, že koncové body takého súboru rovín (hkl), vynesené od určitého počiatku, splynú v jediný bod označený ako hkl. Ak takto postupujeme u všetkých súborov rovnobežných rovín, nahradíme neprehľadnú sústavu súborov rovín prehľadnejšou sústavou bodov. Táto množina bodov vytvára opäť nejakú priestorovú mriežku, avšak už v recipročnom priestore. Takúto mriežku potom nazývame recipročná, a jej mriežkové body nazývame body recipročnej mriežky [5]. Na obr. 1 je znázornená konštrukcia recipročnej mriežky z mriežky reálnej.



Obr. 1: Body v reálnej mriežke sú reprezentované plnými krúžkami a body recipročnej mriežky prázdnymi krúžkami [podľa 5].

3. Vzťah medzi reálnou a recipročnou mriežkou

Ak je základná bunka v reálnej mriežke primitívna, je primitívna aj jej recipročná bunka. Podobne, ak je bunka reálnej mriežky centrovaná, je centrovaná aj jej recipročná bunka, aj keď nie vždy rovnako. Napríklad, objemovo centrovaná bunka reálnej mriežky je v recipročnom priestore plošne centrovaná, a naopak. Priame vzťahy medzi parametrami reálnej a recipročnej mriežky závisia na konkrétnej kryštalografickej sústave [5]:

- kocková (kubická) sústava:

$$a^* = b^* = c^* = \frac{1}{a}$$

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$$

- štvorcová (tetragonálna) sústava:

$$a^* = b^* = \frac{1}{a}$$

$$c^* = \frac{1}{c}$$

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$$

• šesťuholníková (hexagonálna) sústava:

$$a^* = b^* = \frac{2}{a\sqrt{3}}$$

$$c^* = \frac{1}{c}$$

$$\alpha^* = \beta^* = 90°$$

$$\gamma^* = 60°$$

• kosoštvorcová (rombická) sústava:

$$a^* = \frac{1}{a}$$

$$b^* = \frac{1}{b}$$

$$c^* = \frac{1}{c}$$

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°$$

• jednoklonná (monoklinická) sústava:

$$a^* = \frac{1}{a\sin\beta}$$

$$b^* = \frac{1}{b}$$

$$c^* = \frac{1}{c\sin\beta}$$

$$\alpha^* = 90°$$

$$\beta^* = 180° - \beta$$

$$\gamma^* = 90°$$

• trojklonná (triklinická) sústava:

$$a^* = \frac{bc\sin\alpha}{V}$$

$$b^* = \frac{ca\sin\beta}{V}$$

$$c^* = \frac{ab\sin\gamma}{V}$$

$$\cos\alpha^* = \frac{\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha}{\sin\beta\sin\gamma}$$

$$\cos\beta^* = \frac{\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta}{\sin\gamma\sin\alpha}$$

$$\cos\gamma^* = \frac{\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha\sin\beta}$$

• trojuholníková (trigonálna) sústava:

$$a^* = \frac{1}{a\sin\alpha\ \sin\alpha^*}$$

$$\cos\frac{\alpha^*}{2} = \frac{1}{2\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)}$$

4. Vlastnosti recipročnej mriežky

- *recipročná mriežka nie je závislá na súradnicových osiach, ktoré boli zvolené pre popis reálnej mriežky*. Samozrejme, vektorová báza **a***, **b***, **c*** sa zmení, avšak samotný priestor recipročnej mriežky nie. Vyplýva to z definície recipročnej mriežky, ako skupiny vektorov charakterizovaných rovinami reálnej mriežky. V recipročnej mriežke sa takisto popisuje rozloženie atómov, ibaže v tomto prípade sa to realizuje prostredníctvom rovín namiesto popisovania mriežkových bodov. To okrem iného znamená, že recipročná mriežka má tú istú kryštalografickú kategorizáciu a symetriu, ako reálna mriežka.

- *vytvorením recipročnej mriežky z recipročnej dostaneme mriežku reálnu* [6]. Reálna mriežka je vlastne recipročná mriežka recipročnej mriežky. Alebo matematicky vyjadrené:

$$a = \frac{1}{\frac{1}{a}}$$

- *jednotkový objem recipročnej mriežky* ***V**** *je rovný prevrátenej hodnote objemu* ***V*** *reálnej mriežky*. Keď pre objem reálnej mriežky platí, že:

$$V = c.(a \times b)$$

potom pre objem recipročnej mriežky platí:

$$V^* = c^*.(a^* \times b^*)$$

Zároveň teda musí platiť, že:

$$V.V^* = 1$$

Má to však jeden háčik. Tieto vzťahy sa dajú aplikovať iba na primitívne bunky jednotlivých kryštalografických sústav. Pre neprimitívne bunky platí, že **U*** = 8**V***. **U*** je objem neprimitívnej bunky danej sústavy.

- *translačný vektor recipročnej mriežky je* $\boldsymbol{G} = n_1 \,.\, \boldsymbol{a^*} + n_2 \,.\, \boldsymbol{b^*} + n_3 \,.\, \boldsymbol{c^*}$, kde n sú celé čísla. Vektor **G** nám tak definuje ďalší bod recipročnej mriežky.

Použitá literatúra

[1] KITTEL CH.: *Úvod do fyziky pevných látek.* 6. vydanie, Academia, Praha, 1985.
[2] TILLEY R. J. D.: *Crystals and crystal structures*. John Wiley and Sons, 2006, ISBN 0470018216.
[3] HAMMOND CH.: *The Basics of Crystallography and diffraction.* 2nd. edition, Oxford University Press, Oxford, 2008, ISBN 9780198505525.
[4] PECHARSKY V. K., ZAVALIJ P. Y.: *Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials*. Springer Science, New York, 2003, ISBN 0387241477.
[5] KRATOCHVÍL B., JENŠOVSKÝ L.: *Úvod do krystalochemie*. SNTL, Praha, 1987. ISBN 0460887.
[6] WILKES P.: *Solid state theory in metallurgy.* Cambridge University Press, 1973, ISBN 0521096995.