

# Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах

Лекция 3

22.02.2019

# Дифракция в кристаллах

- Длина волны должна быть порядка межатомного расстояния  
 $\lambda \simeq d$
- Три основных вида излучения: фотоны рентгеновского излучения, быстрые электроны и поток нейтронов.

# Волны де Бройля

- Луи Виктор Пьер Раймон, 7-й герцог Брольи, более известный как Луи де Бройль (фр. Louis-Victor-Pierre-Raymond, 7ème duc de Broglie, Louis de Broglie; 15 августа 1892 — 19 марта 1987)



## Еще раз о фотонах

- Энергия фотона:

$$E_{\Phi} = \hbar \omega$$

- Из СТО известно, что энергия частицы  $E$  связана с ее импульсом  $\mathbf{p}$  и скоростью  $\mathbf{v}$  соотношением

$$\mathbf{p} = E \frac{\mathbf{v}}{c^2} \quad (1)$$

# Импульс фотона

- Из формул (1) и (2) следует, что импульс фотона определяется соотношением

$$\mathbf{p} = \hbar \omega \frac{c}{c^2} \mathbf{n} = \hbar \frac{\omega}{c} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k} \quad \left( \mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \mathbf{n} \right)$$

- Здесь  $\mathbf{n}$  – единичный вектор,  $\mathbf{k}$  – волновой вектор, или

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

# Гипотеза де Бройля

- В 1924 г. Луи де Бройль предположил, что дуализм волна — частица является универсальным свойством материи. Каждой частице можно сопоставить волну, длина которой определяется соотношением де Бройля

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

- Соответственно, импульс и энергия частицы равны:

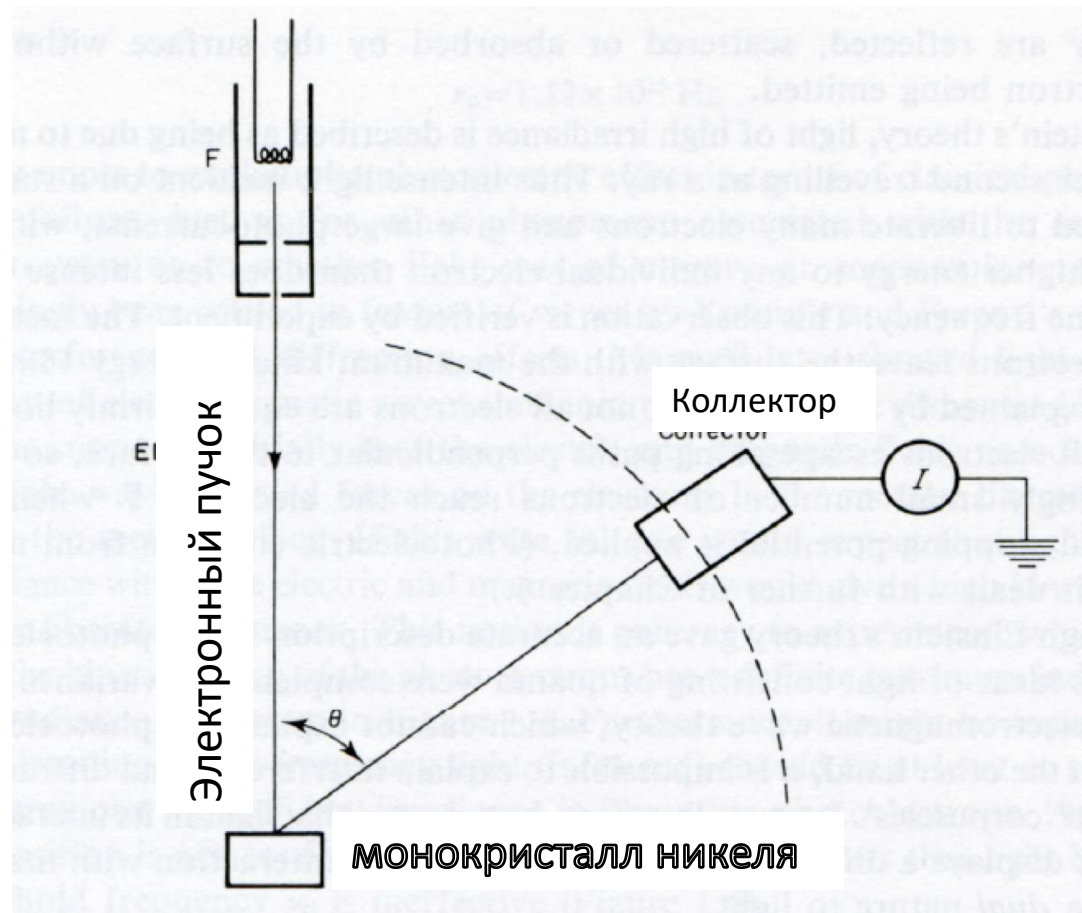
$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}, E = \hbar\omega.$$

## Оценка длины волны де Бройля

- Для фотонов рентгеновского излучения:  $\lambda = c/\nu = hc/E$
- Длине волны 0.1 нм соответствует энергия  $E \sim 12\,000$  эВ.
- Для потока электронов имеем:  $\lambda = h/(m\nu) = h/\sqrt{2mE}$
- Длине волны 0.1 нм соответствует энергия  $E \sim 150$  эВ.
- Скорость электронов составляет  $\nu \sim 7 \cdot 10^6$  м/с.
- Для потока нейтронов:  $\lambda = h/(M_n\nu) = h/\sqrt{2M_nE}$
- Длине волны 0.1 нм соответствует энергия  $E \sim 0.08$  эВ.
- Скорость нейтронов  $\nu \sim 4000$  м/с.

# Дифракция электронов (1927 г.)

- Опыт Дэвиссона и Джермера (Davisson and Germer)



# Дифракционная картина

- Первое подтверждение гипотезы де Бройля было получено в 1927 году в опытах американских физиков К. Дэвиссона и Л. Джермера. Пучок электронов ускорился в электрическом поле с разностью потенциалов 100—150 В (энергия таких электронов 100—150 эВ, что соответствует  $\lambda \approx 0.1$  нм) и падал на кристалл никеля, играющий роль пространственной дифракционной решётки.  $\alpha = 50^\circ$

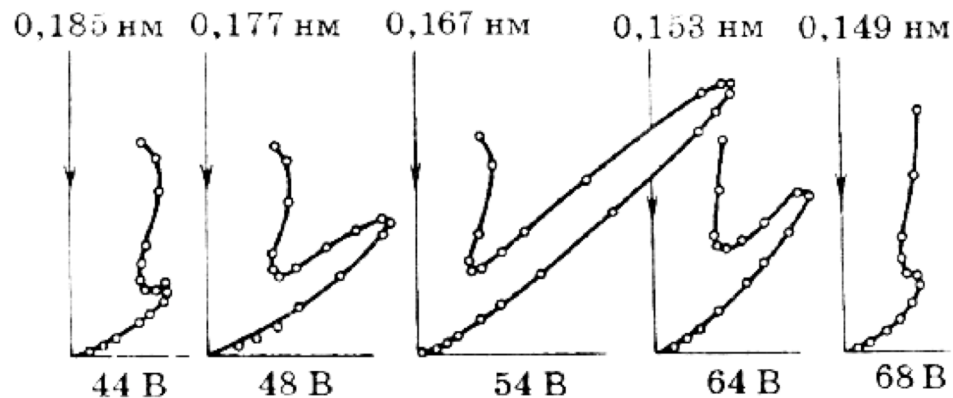
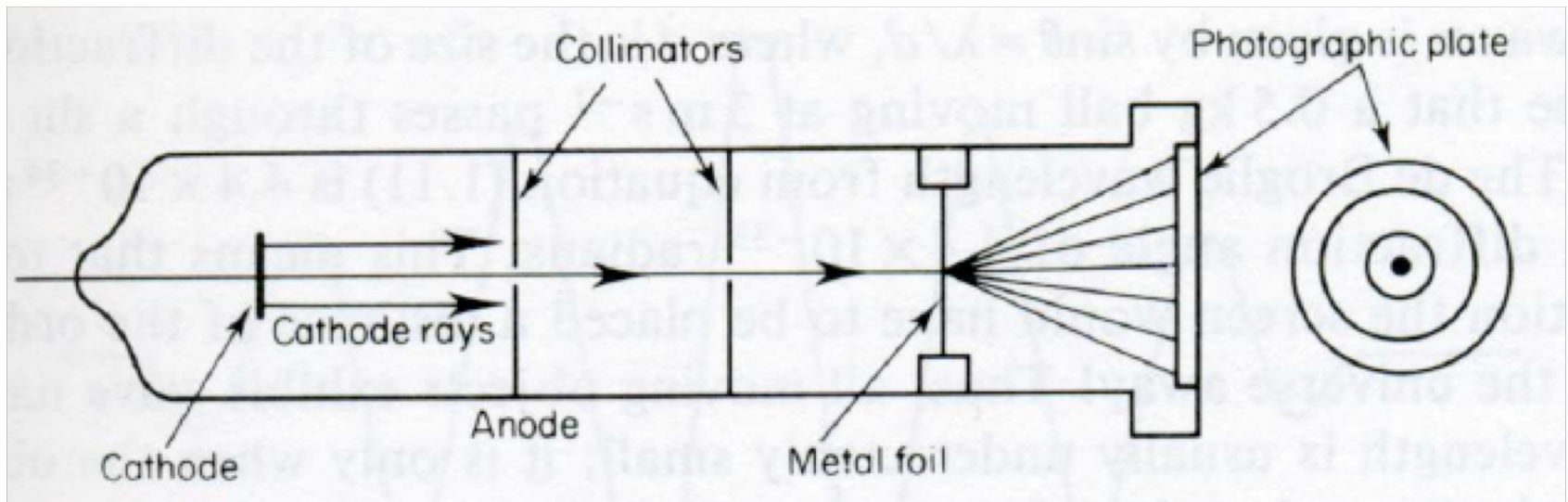


Рис. 4.2

## Еще один опыт. Опыт Томсона и Рейда 1927 г. (Thomson and Reid)



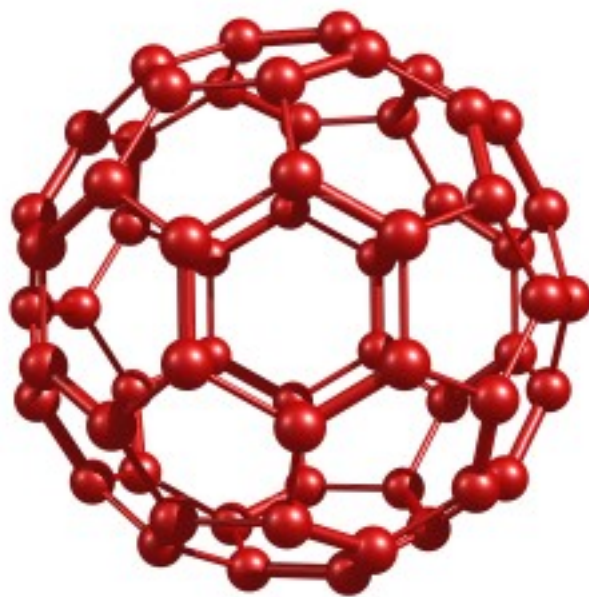
Ускоряющее напряжение  $U = 17.5 - 56.5$  кВ. Золотая фольга толщиной  $0.1$  мкм.

Длина волны де Бройля  $0.092 - 0.052$  Å

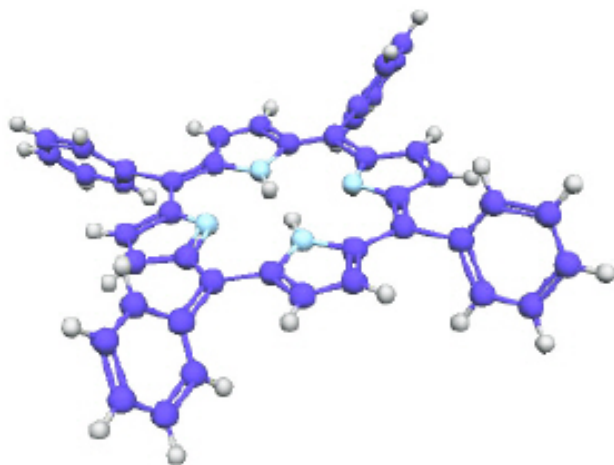
# Дифракция фуллеренов (‘buckyballs’)

- В 1999, Антон Цейлингер с сотрудниками (Anton Zeilinger’s group) Венского Университета наблюдали волновые свойства молекул  $C_{60}$  (buckminsterfullerenes or ‘buckyballs’) и молекул  $C_{70}$ . В то время это были самые большие объекты, которые проявляли волновые свойства. Их диаметры составляли около 1 нм.

# Фуллерен $C_{60}$



# Дифракция больших молекул

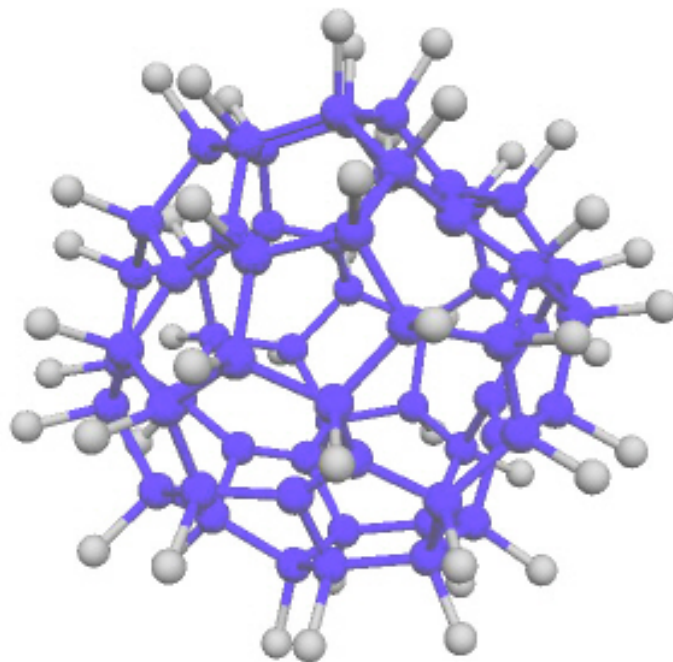


тетрафенилпорфирин

Диаметр около 2 нм

# Гемоглобин

(L Hackermüller *et al.* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 090408).



Диаметр около 2 нм

# Условия наблюдения дифракции

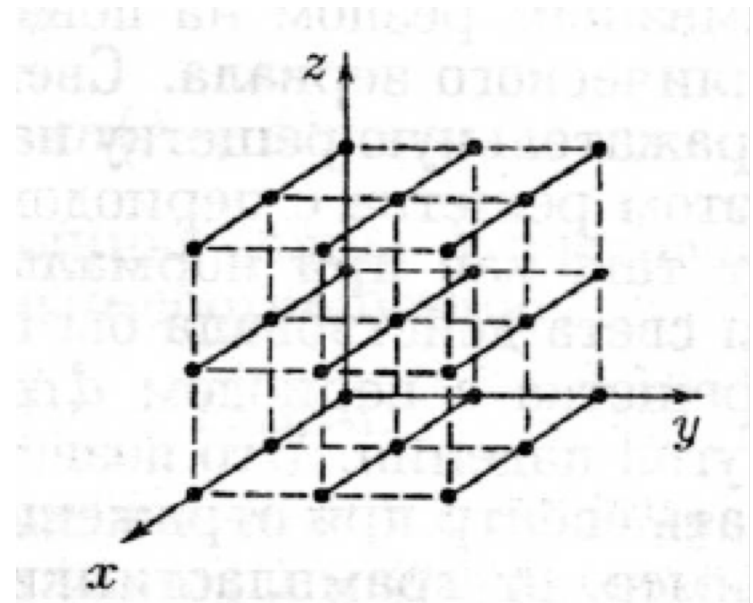
Длина волны де Бройля должна быть по порядку величины близка к межатомному расстоянию

$$\lambda \simeq 10^{-8} \text{ см}$$

Электроны с такой длиной волны имеют энергию около 100 эВ, нейтроны – около 0.1 эВ.

# Дифракция рентгеновских лучей

- Рентгеновское излучение имеет длину волны  $\lambda$  от  $10^{-14}$  до  $10^{-8}$  м.
- Для наблюдения дифракции необходимо, чтобы  $d$  было больше  $\lambda$ , поскольку  **$d \sin \alpha = k\lambda$** . Это условие выполняется для кристаллических решеток.



Рассмотрим действие одной цепочки атомов, параллельной оси  $x$ . Каждый атом является источником вторичных волн.

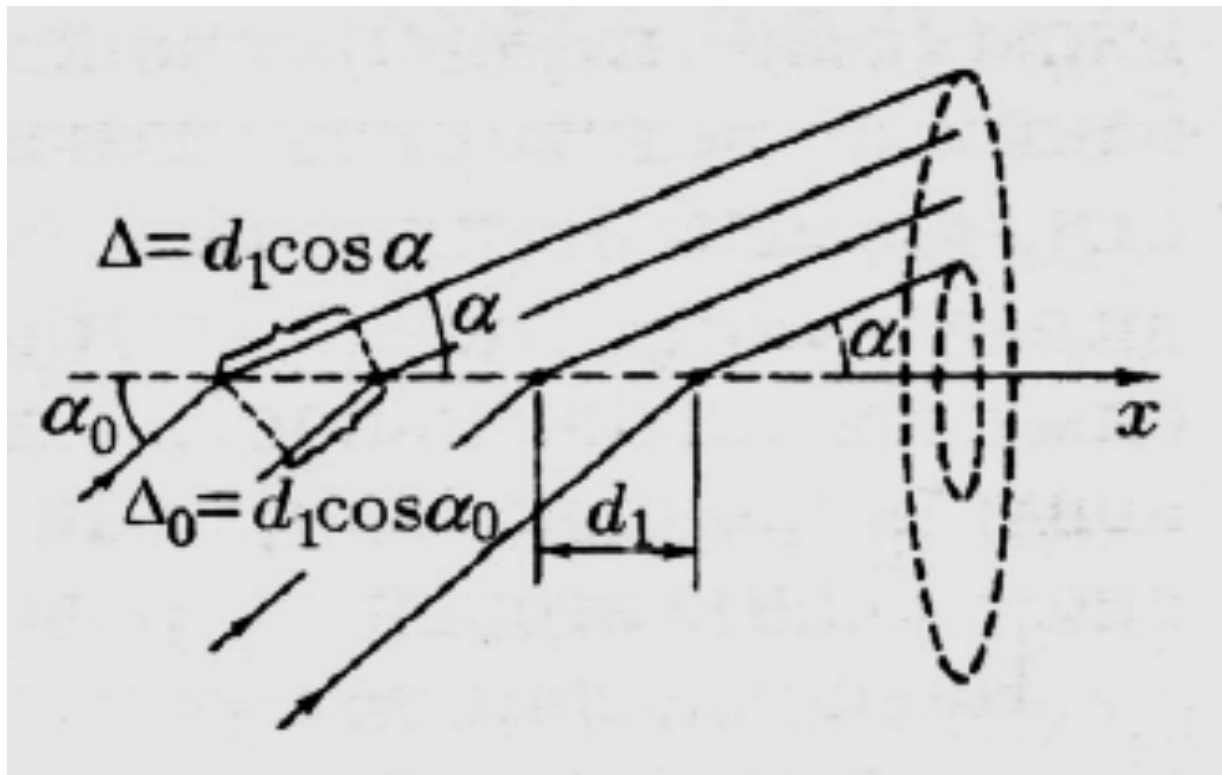
- К соседним источникам падающая волна приходит с разностью фаз

$$\delta_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta_0, \quad \Delta_0 = d_1 \cos \alpha_0.$$

- $d_1$  – период структуры вдоль оси  $x$ .

Возникает дополнительная разность хода

$$\Delta = d_1 \cos \alpha.$$



Колебания от отдельных структурных элементов будут усиливаться для тех направлений, для которых

выполняются соотношения Лауэ:

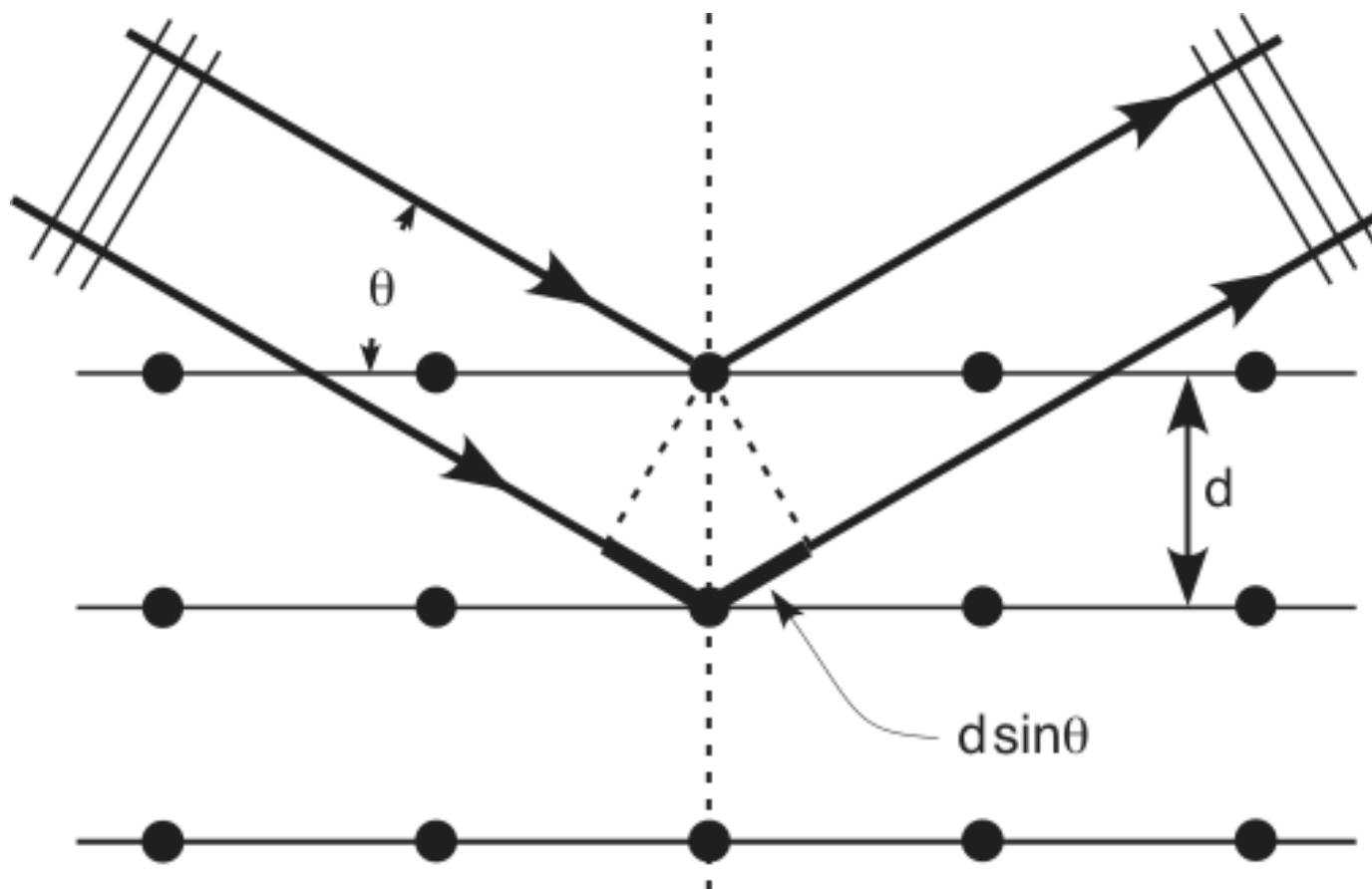
$$\begin{aligned}d_1 (\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= \pm m_1 \lambda \\d_2 (\cos \beta - \cos \beta_0) &= \pm m_2 \lambda \quad (m_i = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (10) \\d_3 (\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= \pm m_3 \lambda\end{aligned}$$

Углы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  не являются независимыми. Например, в прямоугольной системе координат они связаны соотношением

- $\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$  (11)

- Система, состоящая из четырех уравнений (10) и (11) может быть разрешена только для определенных значений длины волны  $\lambda$  при фиксированных значениях  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  и  $\gamma_0$ . Наоборот, при фиксированном значении  $\lambda$  (монохроматическое излучение) систему можно сделать совместной варьируя значения  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  и  $\gamma_0$ , т.е. поворачивая пространственную структуру относительно направления падающего пучка.

# Формула Вульфа - Брэгга



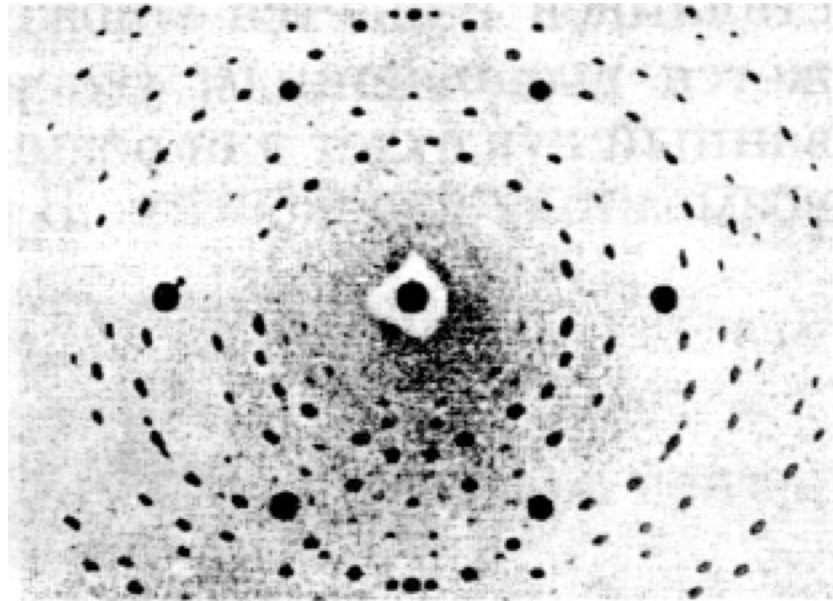
Разность хода двух волн, отразившихся от соседних слоев,  
равна  $2d\sin\theta$ ,

- где  $d$  — период идентичности кристалла в направлении, перпендикулярном к рассматриваемым слоям,  $\theta$  — угол, дополнительный к углу падения и называемый углом скольжения падающих лучей. Направления, в которых получаются дифракционные максимумы, определяются условием (формула Брэгга — Вульфов)

$$2d \sin \theta = \pm m\lambda \quad (m = 1, 2, \dots) \quad (12)$$

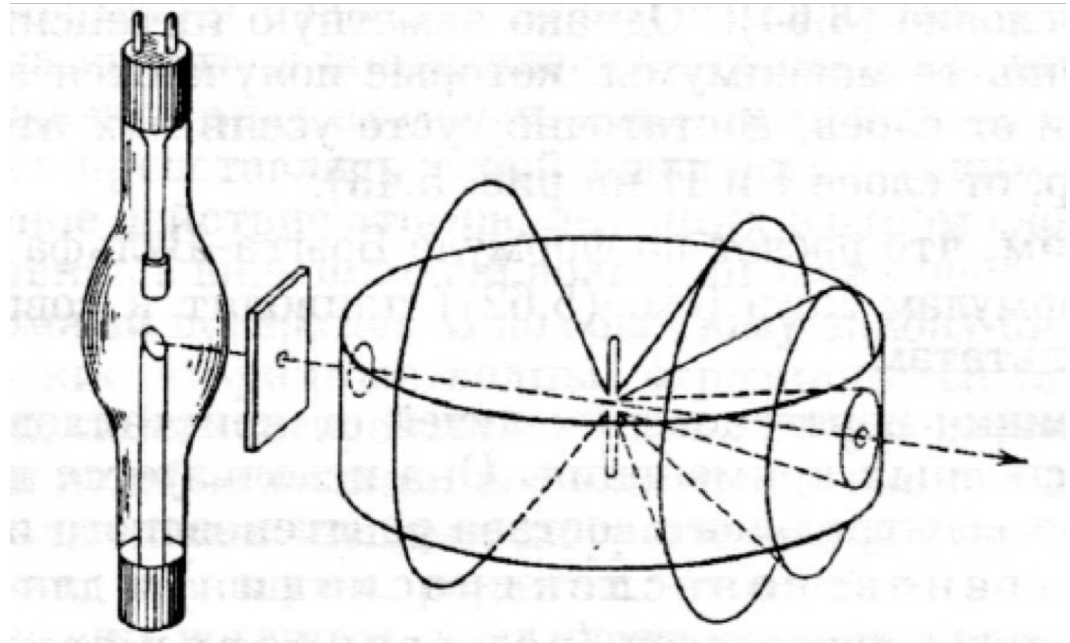
## Дифракция рентгеновских лучей от кристаллов находит два основных применения

- Рентгеновская спектроскопия и рентгеноструктурный анализ.
- **Метод Лауэ:** «белый» рентгеновский пучок направляется на монокристалл.



# Метод Дебая - Шерера

- Используется **монохроматическое** рентгеновское излучение и **поликристаллические** образцы. Исследуемое вещество измельчается в порошок, из которого прессуется образец в виде проволоочки.



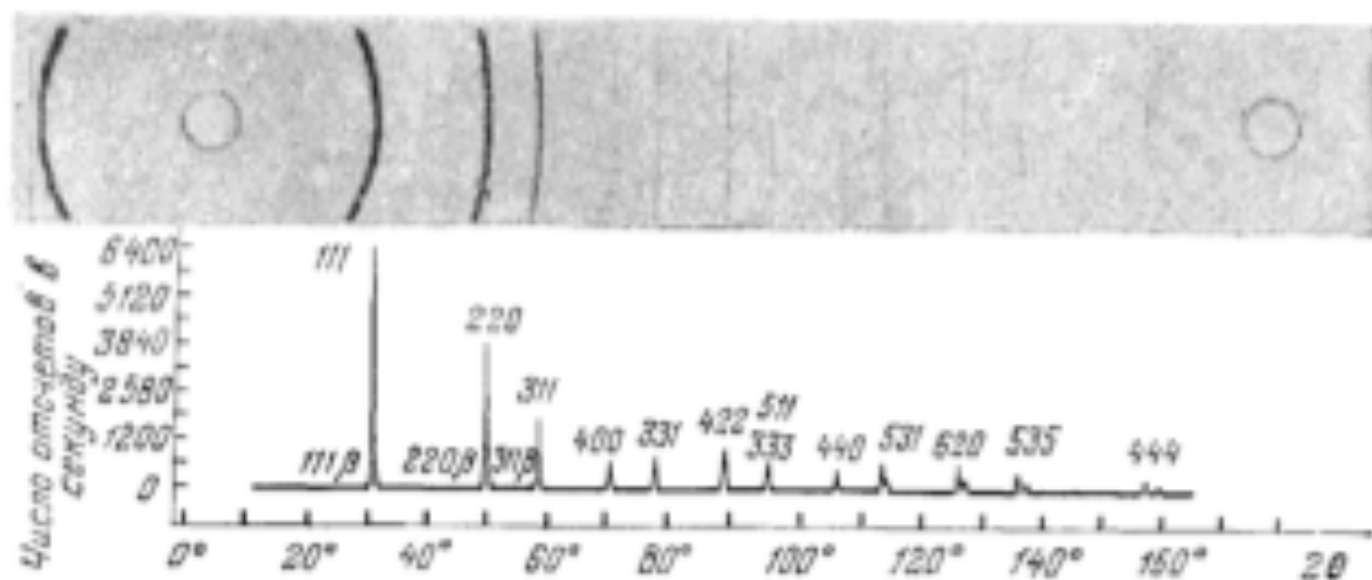
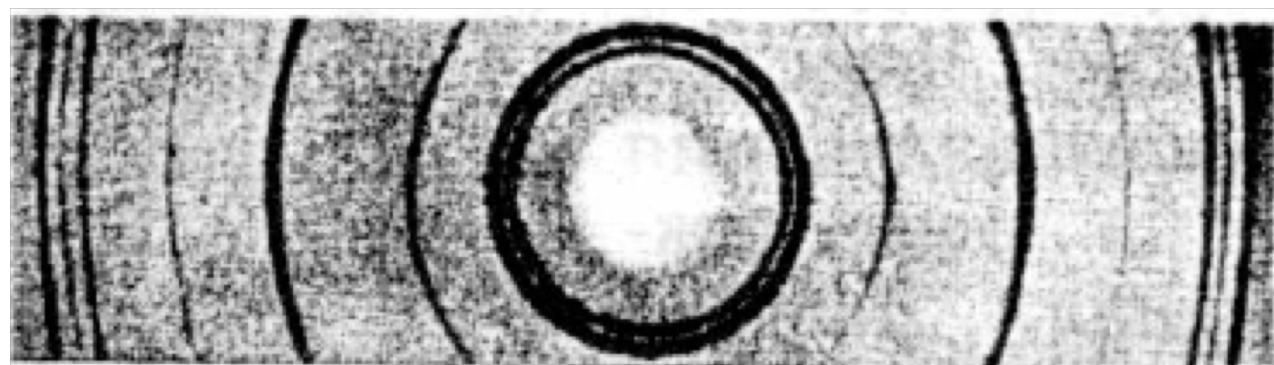
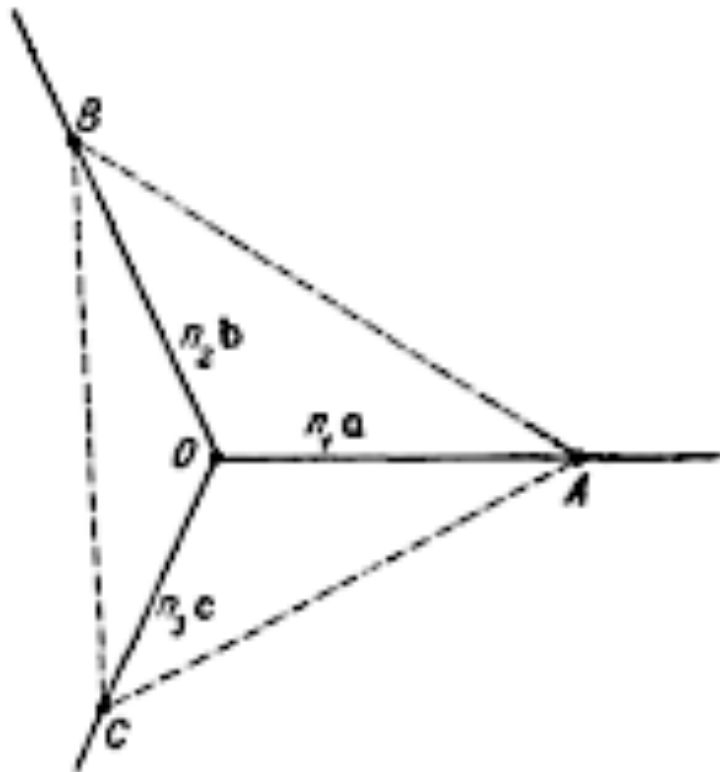
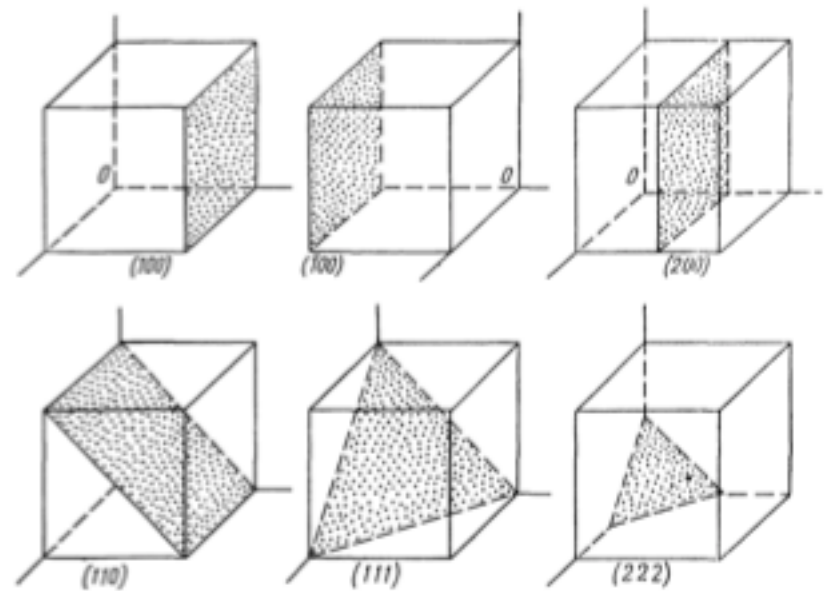


Рис. 2.13. Рентгенограммы кремния, полученные методом порошка (верхняя) и с помощью рентгеновского дифрактометра (нижняя). Верхняя рентгенограмма получена путем регистрации отраженных лучей на пленку, нижняя — с помощью счетчика отраженных лучей. (W. Parrish.)

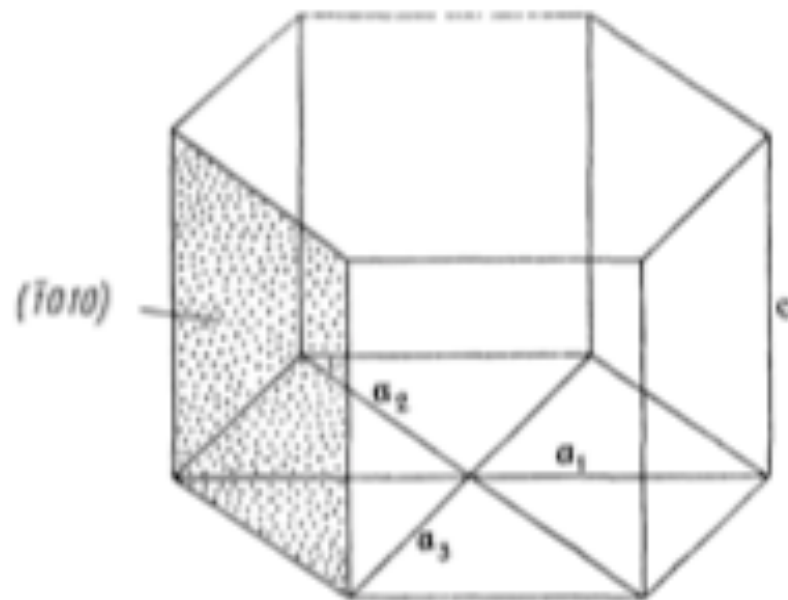
# Индексы Миллера

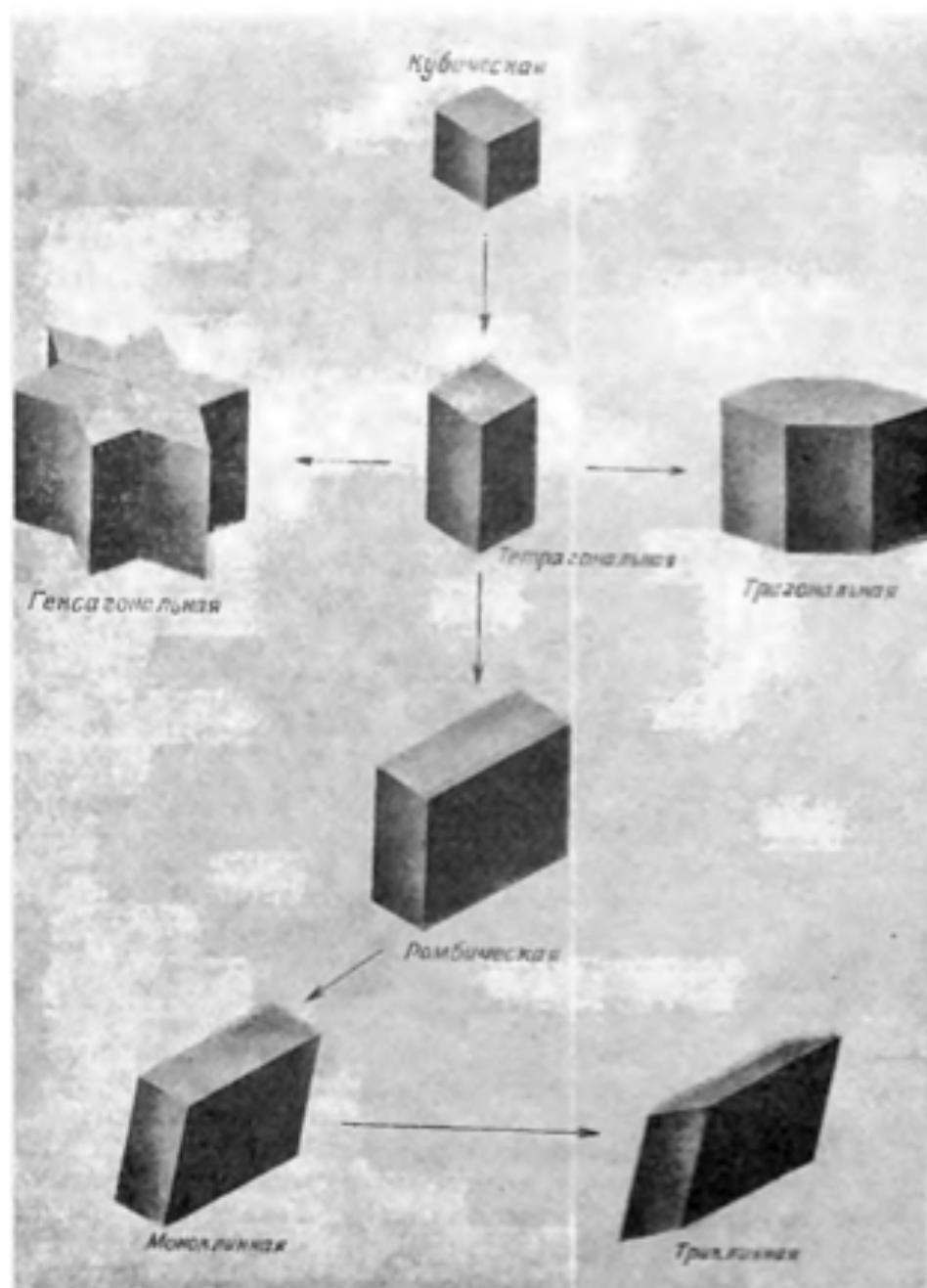


$$h:k:l = n_1^{-1} : n_2^{-1} : n_3^{-1}$$



# Гексагональные и тригональные кристаллы

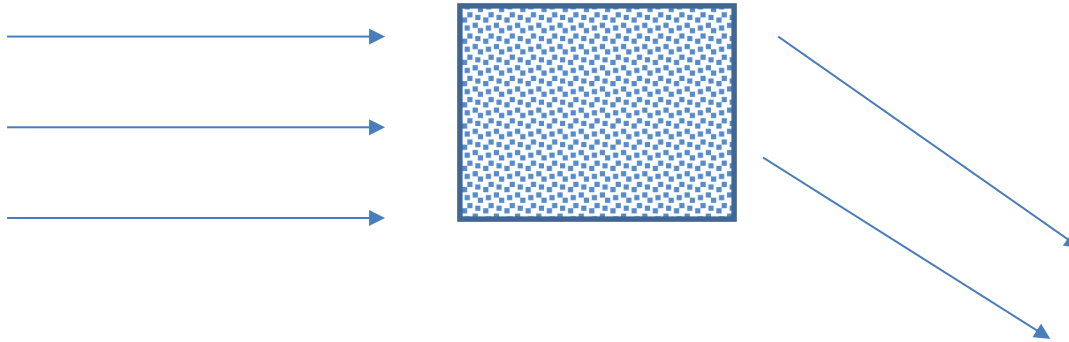




Экспериментальные методы определения структуры кристаллов:  
рассеяние рентгеновского излучения и частиц на кристаллах

$E_{\text{in}}$  – исходная энергия

$\mathbf{k}_{\text{in}}, I_0$  – начальные волновой вектор и интенсивность



$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}_{\text{in}} - \mathbf{k}_{\text{f}}$$

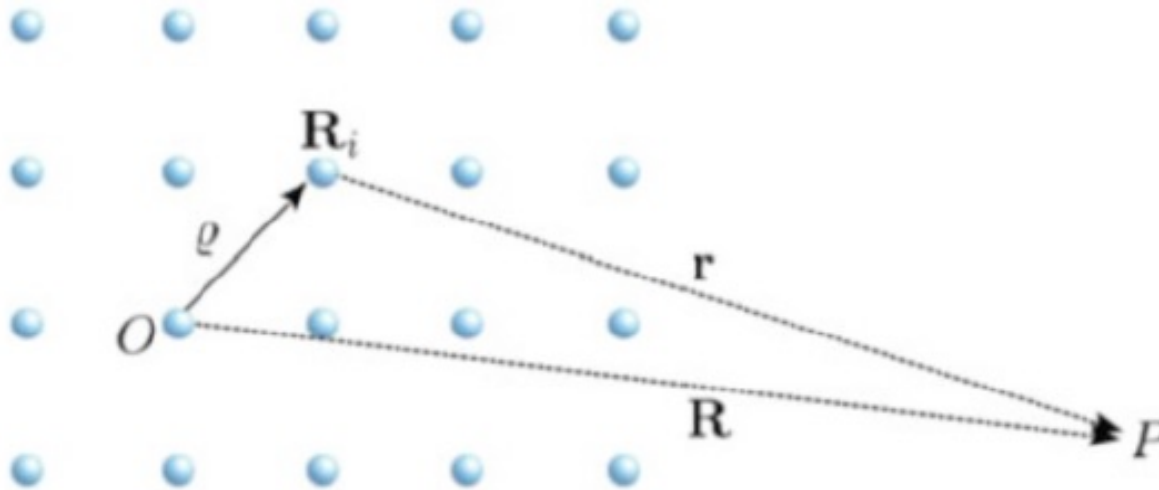
$$\Delta E = E_{\text{f}} - E_{\text{in}}$$

$$I_{\text{f}}$$

# Интенсивность рассеяния

- Рассеяние бывает упругое  $\Delta E=0$  и неупругое  $\Delta E \neq 0$ . Заряженные частицы ускоряются электрическим полем, после чего сами становятся источником излучения.

# Упругое рассеяние излучения атомом кристаллической решётки



$O$  – начало координат,  $P$  – точка, где расположен детектор,  $R_i$  – положение излучающего атома,  $\rho$  – положение атома относительно начала координат.

## Атомный фактор рассеяния (формфактор атома)

- Если бы все электроны атома рассеивали волну в одной фазе, то отношение амплитуды волны, рассеянной атомом, к амплитуде волны, рассеянной электроном при тех же условиях, т.е. для той же длины волны и под тем же углом, равнялось бы числу электронов в атоме.
- Это отношение называется атомным фактором рассеяния и характеризует рассеяние атомом по сравнению с рассеянием одним электроном.

Пусть на атоме сосредоточен заряд  $Q_\rho$ , который становится источником вторичной сферической волны

$$E_\rho \propto Q_\rho \frac{e^{ikr}}{r} e^{i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - \omega t)} ,$$

$$r^2 = R^2 + \rho^2 - 2R\rho \cos \theta ,$$

Здесь  $\theta$  – угол между векторами  $\mathbf{R}$  и  $\boldsymbol{\rho}$ ,  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\text{in}}$ . Обычно в условиях эксперимента  $\rho/R \ll 1$ , поэтому, извлекая корень и пренебрегая членами порядка  $(\rho/R)^2$ , получим

$$r = R \left( 1 - \frac{\rho}{R} \cos \theta \right) = R - \rho \cos \theta .$$

# Полное поле, попадающее в детектор

$$E \propto \left( \sum_{\mathbf{\rho}} \frac{Q_{\rho}}{R} e^{-ik\rho \cos(\theta)} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{\rho}} \right) e^{i(kR - \omega t)} .$$

Фаза  $k\rho \cos(\theta)$  может быть записана в векторном виде как

$$\mathbf{k}' \cdot \mathbf{\rho}$$

где вектор  $\mathbf{k}'$  направлен вдоль  $\mathbf{R}$  и имеет модуль  $k$ .

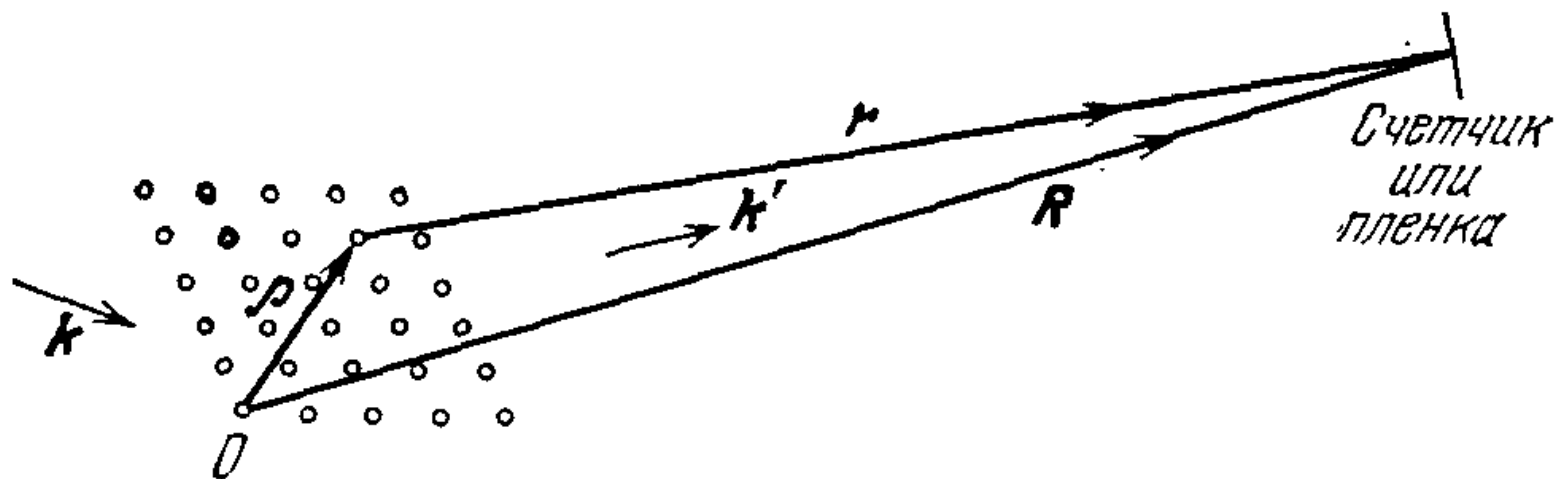
Обозначим  $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ , тогда

$$E \propto \sum_{\rho} Q_{\rho} e^{-i\Delta \vec{k} \vec{\rho}}$$

Множитель  $1/R$  опущен, т.к.

не зависит от заряда и для данного геометрического расположения является величиной постоянной.

## Схема установки



# Расчёт интенсивности рассеянного кристаллом излучения

Рассчитаем сумму на предыдущем слайде. Учтем тот факт, что длина волны излучения сравнима с межатомным расстоянием и размерами самих атомов. Следовательно, каждый элемент заряда  $\rho_\mu(\mathbf{r})d\mathbf{r}$  является источником вторичных сферических волн. Здесь  $\mu$  – идентификатор атома в кристаллической решётке.

Координаты элемента заряда описываются выражением

$$\vec{\rho} = \vec{R} + \vec{d}_\mu + \vec{\xi}$$

В уравнении  $\mathbf{R}$  – вектор прямой решетки, указывающий положение примитивной ячейки,  $\mathbf{d}_\mu$  - показывает положение атома внутри ячейки,  $\xi$  – показывает положение элемента заряда по отношению к ядру атома.

$$E \propto \sum_{n_1, n_2, n_3} \sum_{\mu} \int_{V_{a, \mu}} d\vec{\xi} \rho_{\mu}(\vec{\xi}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot (\vec{R} + \vec{d}_{\mu} + \vec{\xi})} = S_R F_G$$

$$S_R = \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{R}}$$

$$F_G = \sum_{\mu} f_{\mu}(\Delta\vec{k}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{d}_{\mu}}$$

Где атомный структурный фактор определяется соотношением

$$f_{\mu}(\Delta\vec{k}) = \int_{V_{a, \mu}} d\vec{\xi} \rho_{\mu}(\vec{\xi}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{\xi}}$$

и  $V_{a, \mu}$  — атомный или ионный объём атома (иона) с идентификатором  $\mu$ .

# Вывод

Интенсивность рассеяния рентгеновских лучей определяется как произведение двух множителей  $S_R$  и  $F_G$ . Здесь  $S_R$  – структурный фактор, который определяется решеткой Браве;  $F_G$  – (геометрический) структурный фактор, который определяется распределением атомов (ионов) в базисе. Последний множитель, в свою очередь, зависит от формфактора атома

$$f_{\mu}(\Delta \mathbf{k})$$

# Расчёт структурного фактора решетки Браве

Количество узлов равно  $N_1$ ,  $N_2$  и  $N_3$  соответственно.

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

$$\sum_{n_1, n_2, n_3} e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{R}} = \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \left( e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \right)^{n_1} \sum_{n_2=0}^{N_2-1} \left( e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right)^{n_2} \sum_{n_3=0}^{N_3-1} \left( e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_3} \right)^{n_3}$$

$$\sum_{n=0}^{N-1} x^n = (1 - x^N) / (1 - x)$$

$$\sum_{n_1=0}^{N_1-1} \left( e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \right)^{n_1} = \frac{1 - e^{-iN_1\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_1}}{1 - e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_1}}$$

$$I = \left| \frac{1 - e^{-iN_1 \Delta \vec{k} \cdot \vec{a}_1}}{1 - e^{-i \Delta \vec{k} \cdot \vec{a}_1}} \right|^2 = \frac{\sin^2(N_1 \Delta \vec{k} \cdot \vec{a}_1 / 2)}{\sin^2(\Delta \vec{k} \cdot \vec{a}_1 / 2)}.$$

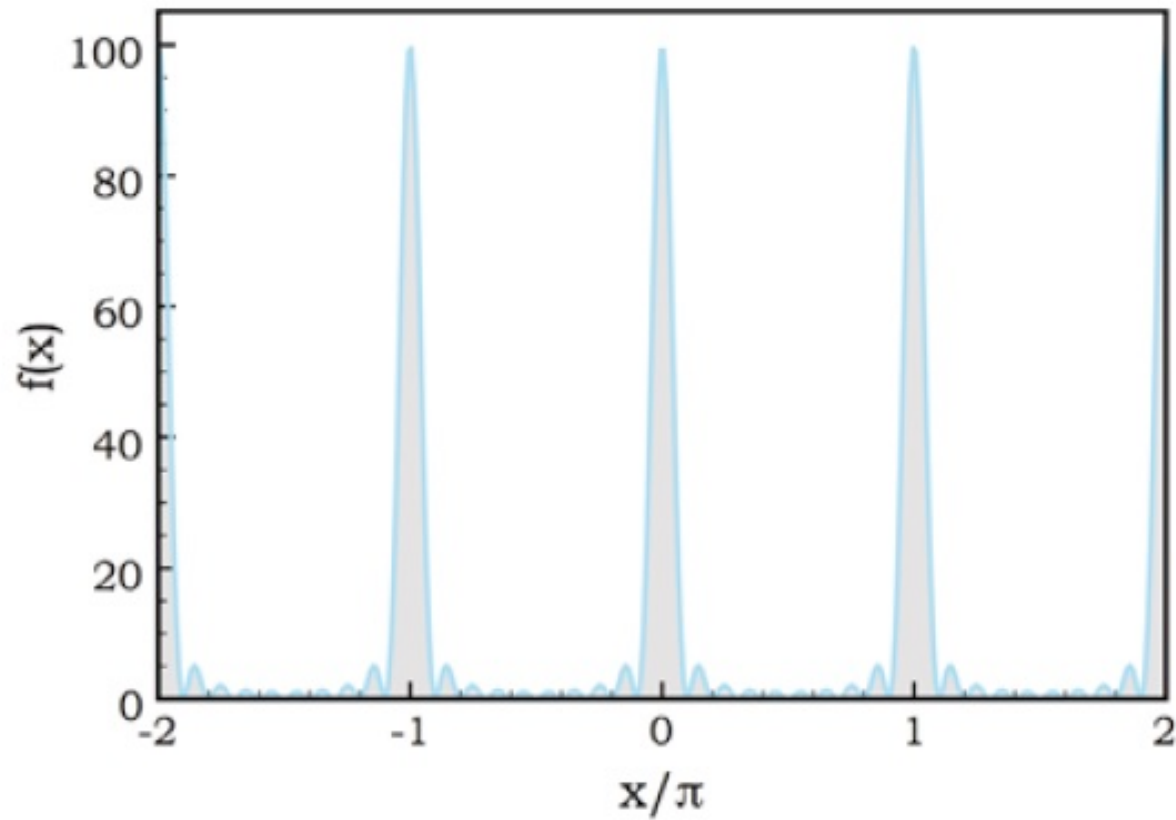
$$\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi n, \quad \Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 = 2\pi m, \quad \text{and} \quad \Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3 = 2\pi p.$$

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G},$$

Это и есть условия Лауэ.

Функция

$$f(x) = \frac{\sin^2(Nx)}{\sin^2(x)}$$



## Структурный фактор рассеяния (базиса)

- Структурный фактор рассеяния характеризует во сколько раз интенсивность лучей, рассеянных плоскостями со сложной решеткой, отличается от интенсивности лучей, рассеянных той же атомной плоскостью кристалла с простой решеткой.
- Пусть решетка содержит  $N$  базисных атомов, положение которых относительно начала координат ячейки определяется векторами

$$\mathbf{d}_{\mu} = u_{\mu} \mathbf{a}_1 + v_{\mu} \mathbf{a}_2 + w_{\mu} \mathbf{a}_3 \quad (\mu = 1, 2, \dots, N)$$

# Фазовые соотношения рассеяния на подрешетках

- Структурный фактор можно записать в виде:

$$F_G = \sum_{\mu=1}^s f_{\mu} e^{i\Phi_{\mu}}$$

- Разность фаз лучей  $\Phi_{\mu}$ , рассеянных на  $\mu$  – том атоме и на атоме, находящемся в начале координат ячейки.

$$\Phi_{\mu} = \Delta \vec{k} \cdot \vec{d}_{\mu} = (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{d}_{\mu}$$

Последнюю формулу можно также записать в виде

$$\Phi_{\mu} = (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (u_{\mu} \mathbf{a}_1 + v_{\mu} \mathbf{a}_2 + w_{\mu} \mathbf{a}_3)$$

$$\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi g_i$$

$$g_1 : g_2 : g_3 = h : k : l$$

$$\Phi_{\mu} = 2\pi (hu_{\mu} + kv_{\mu} + lw_{\mu})$$

$$F_G(hkl) = \sum_{\mu=1}^s f_{\mu} e^{2\pi i(hu_{\mu} + kv_{\mu} + lw_{\mu})}$$

# Законы погасания для различных типов структур

- Условия, при которых структурный фактор обращается в ноль, называют правилами погасания.
- 1. Рассмотрим сначала примитивную кубическую решетку. Базис этой решетки  $[(0,0,0)]$ .

$$F_G = f_1 e^{2\pi i(h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0)} = f_1$$

- Структурный фактор ни при каких условиях в ноль не обращается.

# Кубическая объёмно-центрированная решетка

- Базис такой решетки состоит из двух атомов с координатами

$$\left[ (0,0,0); \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$F_G = f_1 e^{2\pi i(h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0)} + f_2 e^{2\pi i(h \cdot 0.5 + k \cdot 0.5 + l \cdot 0.5)} = f_1 + f_2 \cos \pi(h + k + l)$$

- Пусть  $f_1 = f_2$ , тогда структурный фактор не равен нулю, если сумма  $(h+k+l)$  равна четному числу.

# Обратная решётка

Рассмотрим вектор

$$\Delta \vec{k} = r_1 \vec{b}_1 + r_2 \vec{b}_2 + r_3 \vec{b}_3 \quad (2)$$

Где  $r_1$ ,  $r_2$  и  $r_3$  — целые числа из условий Лауэ.

Векторы  $b_1$ ,  $b_2$  и  $b_3$  предстоит определить. Для этого подставим (2) в условия Лауэ. В результате имеем, что (2) является решением (1) только в том случае, если выполняются соотношения

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = 2\pi, \quad \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_1 = 0, \quad \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_1 = 0$$

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_2 = 0, \quad \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = 2\pi, \quad \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_2 = 0$$

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_3 = 0, \quad \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_3 = 0, \quad \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_3 = 2\pi$$

Из первого столбца следует, что вектор  $\mathbf{b}_1$  должен быть перпендикулярен к векторам  $\mathbf{a}_2$  и  $\mathbf{a}_3$ .

# Вектор обратной решётки

Так как векторное произведение по определению перпендикулярно к каждому сомножителю, то имеем:

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}\end{aligned}\tag{4}$$

Легко проверить соотношение:

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{i,j}$$

Вектор обратной решётки имеет вид:

$$\mathbf{G} = r_1 \mathbf{b}_1 + r_2 \mathbf{b}_2 + r_3 \mathbf{b}_3 \quad (5)$$

$r_1$ ,  $r_2$ , и  $r_3$  – целые числа

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(n_1 r_1 + n_2 r_2 + n_3 r_3)$$

Это и есть основные векторы обратной решетки. Каждому кристаллу соответствуют две решетки: прямая решетка Браве и обратная решётка. Эти решетки связаны между собой соотношениями (4). Обратная решетка – это решетка в  $k$ -пространстве (пространстве Фурье). Положение узлов обратной решетки и векторы обратной решетки  $\mathbf{G}$  в пространстве Фурье определяются соотношением (5).

# Свойства обратной решётки

**Первое свойство.** Объём  $V_r$  элементарной ячейки обратной решётки равен

$$V_r = \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3$$

Подставив сюда выражения для векторов обратной решётки получим, что

$$V_r = (2\pi)^3 / V_c$$

Таким образом, **произведение объёмов прямой и обратной решёток есть константа.**

# Индексы Миллера

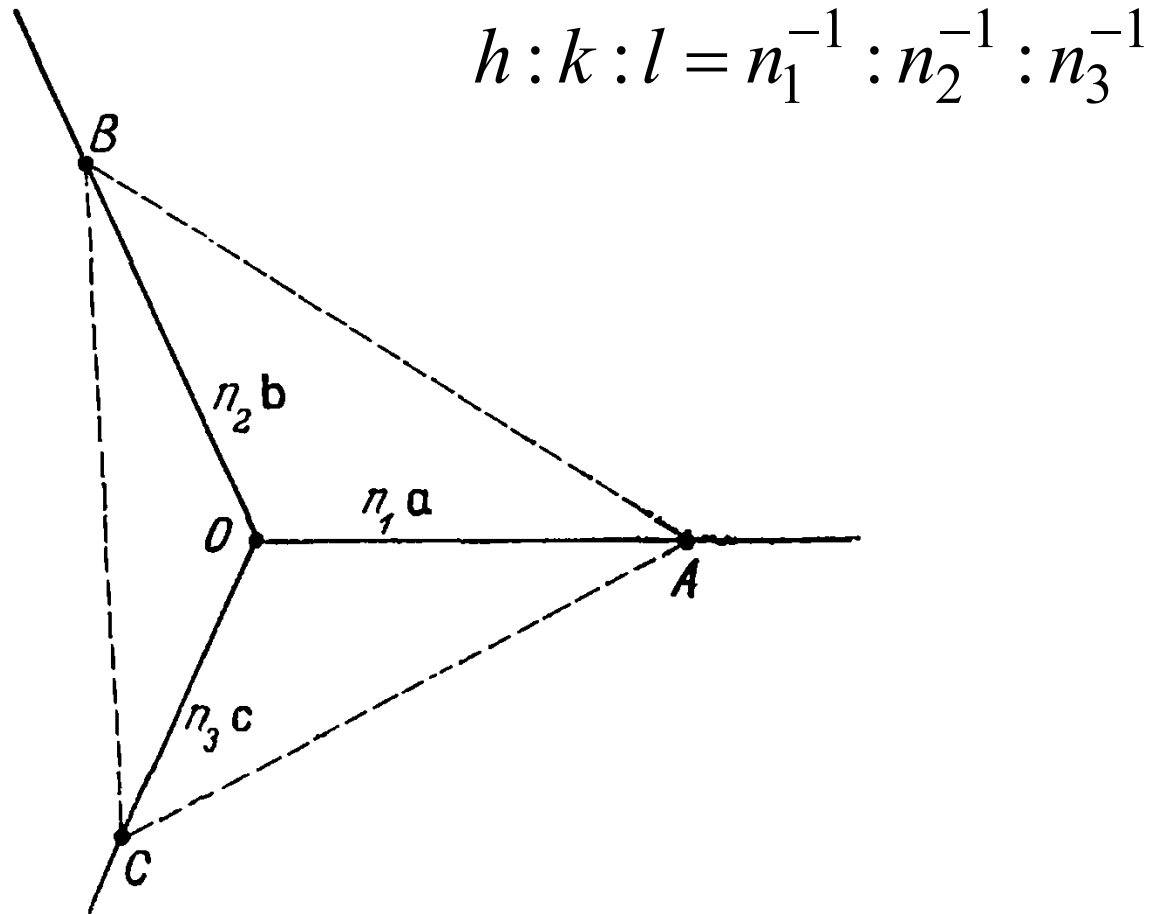
Существование взаимно-однозначного соответствия позволяет легко описать семейство плоскостей с помощью вектора обратной решётки с наименьшей длиной. Для него известны три целых числа, которые и идентифицируют семейство плоскостей.

## Определение

Три целых числа  $r_1$ ,  $r_2$  и  $r_3$ , не имеющие общего множителя и идентифицирующие вектор обратной решётки

$$\mathbf{G} = r_1 \mathbf{b}_1 + r_2 \mathbf{b}_2 + r_3 \mathbf{b}_3$$

и, соответственно, идентифицирующие семейство плоскостей, перпендикулярное к этому вектору, называются **индексами Миллера**.



Плоскость, которая удовлетворяет этому соотношению имеет индексы Миллера ( $hkl$ ). Обычно в качестве  $h$ ,  $k$  и  $l$  берут наименьшие целые числа.

**Второе свойство:** набор функций вида  $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$  с различными векторами  $\mathbf{G}$  является ортогональным внутри элементарной ячейки прямой решётки. Действительно,

$$\int_{V_c} e^{i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \int_{V_c} e^{i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} ,$$

Здесь  $\mathbf{G}$ ,  $\mathbf{G}'$  и  $\mathbf{G}''$  – векторы обратной решётки. Подставим радиус-вектор в виде

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3, \text{ причём } u, v \text{ и } w \in [0,1)$$

Используя формулу  $\mathbf{G} = r_1\mathbf{b}_1 + r_2\mathbf{b}_2 + r_3\mathbf{b}_3$  получим

$$\int_{V_c} e^{i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = V_c \int_0^1 du \int_0^1 dv \int_0^1 dw e^{i2\pi(r_1u+r_2v+r_3w)} .$$

Интеграл справа не равен нулю только, если  $r_1=r_2=r_3=0$ .

## Третье свойство обратной решётки

Набор функций  $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$  является полным, это свойство Фурье-разложения периодических на прямой решётке Браве функций.

Другими словами, если справедливо соотношение  $f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad \forall \mathbf{R}$ , тогда функция  $f(\mathbf{r})$  может быть разложена в ряд Фурье

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$

$$C_{\mathbf{G}} = \frac{1}{V_c} \int_{V_c} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} .$$

## Четвёртое свойство

4. Обратная обратной решетке является прямой решеткой. Это легко демонстрируется, применяя еще раз преобразование к векторам  $\mathbf{b}$  вместо  $\mathbf{a}$ . Как непосредственное следствие, любая функция  $f(\mathbf{k})$ , периодическая на обратной решетке, а именно  $f(\mathbf{k}) = f(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \forall \mathbf{G}$ , может быть разложена в ряд Фурье:

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \quad \text{with} \quad C_{\mathbf{R}} = \frac{1}{V_r} \int_{V_r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} f(\mathbf{k}) d\mathbf{k} .$$

# Зона Бриллюэна

**Ячейка Вигнера-Зейтца для обратной решётки называется зоной Бриллюэна**

**Простая кубическая решётка**

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{x}} \quad ; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{z}}.$$

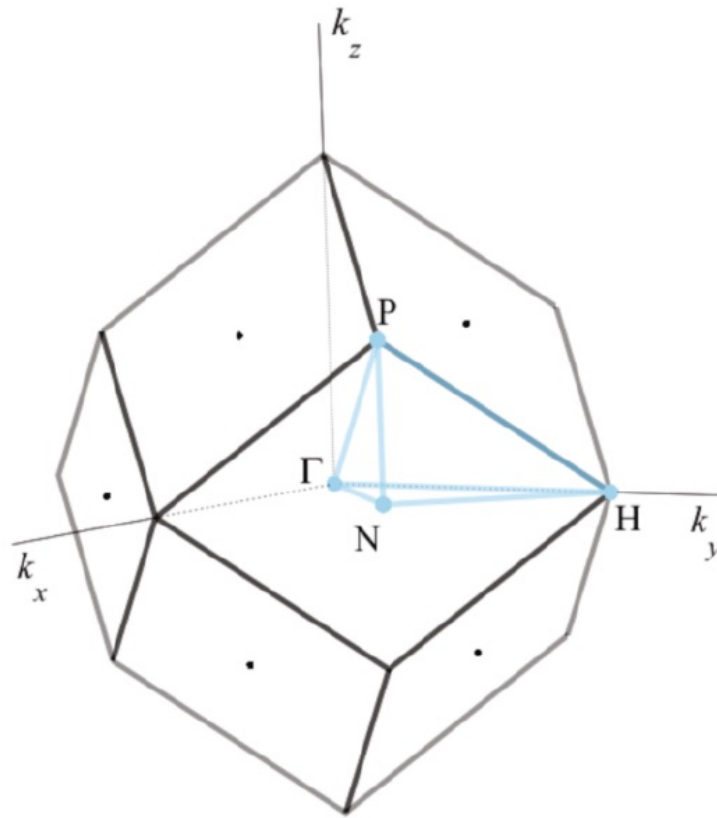
Таким образом, обратная решётка для простой кубической прямой решётки со стороной  $a$  является простой кубической решёткой со стороной  $2\pi/a$ .

**Объёмно-центрированная кубическая решётка**

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}) \quad ; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \quad ; \quad \mathbf{b}_3 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{z}}).$$

# Продолжение

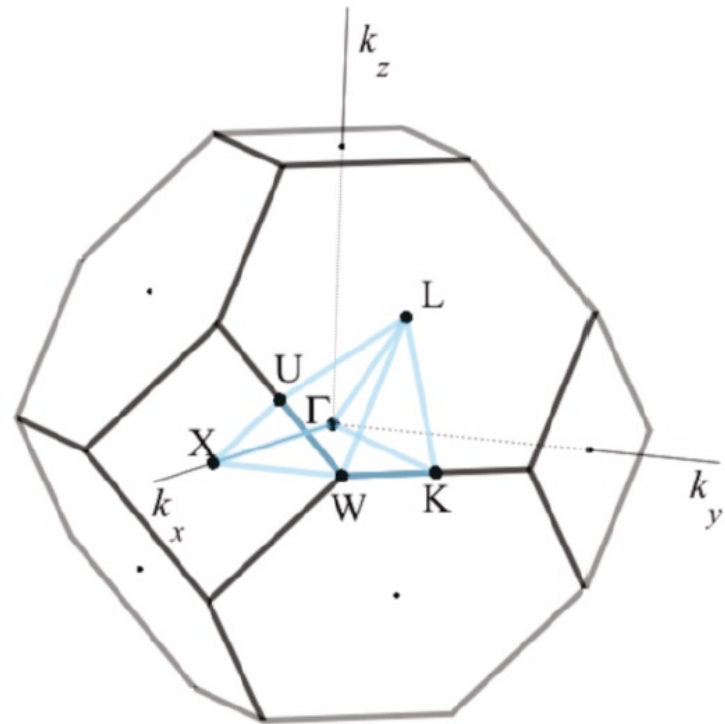
Таким образом, обратная решетка по отношению к объемно-центрированной кубической решетке со стороной  $a$  - это гранецентрированная кубическая решетка с боковыми сторонами  $4\pi/a$ . Соответствующая зона Бриллюэна отображена на рис.



# Гранецентрированная кубическая решётка

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{z}}) \quad ; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} (-\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \quad ; \quad \mathbf{b}_3 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}).$$

Таким образом, обратная по отношению к обычной ячейке прямой г.ц.к. решетки со стороной  $a$ , является о.ц.к. решетка с боковыми сторонами  $4\pi/a$ .



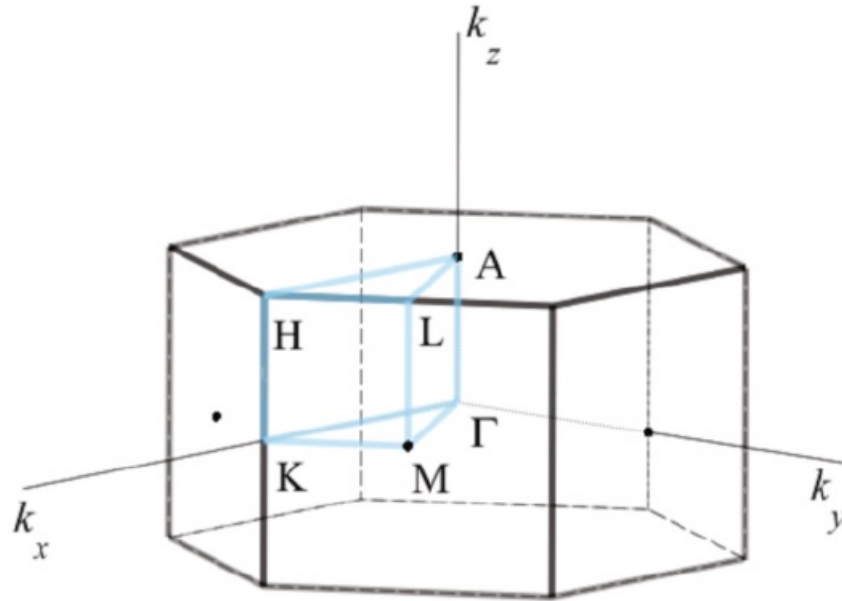
# Простая тетрагональная решётка

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{x}} \quad ; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\hat{\mathbf{z}}.$$

Таким образом, обратная решетка к простой тетрагональной решетке с параметрами  $a$  и  $c$  является простой тетрагональной решеткой с параметрами  $2\pi/a$  и третьей на  $2\pi/c$ .

# Гексагональная решётка

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left( \hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{\mathbf{y}} \right) \quad ; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left( -\hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{\mathbf{y}} \right) \quad ; \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c} \hat{\mathbf{z}}.$$



Таким образом, обратная решетка для гексагональной прямой решетки является гексагональной решеткой.

# Свойство зоны Бриллюэна

Произвольный вектор в обратной решётке всегда может быть представлен в виде

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$$

Здесь  $\mathbf{k}$  лежит внутри первой зоны Бриллюэна,  $\mathbf{G}$  – вектор обратной решётки.

- Семейство плоскостей кристаллической решётки представляет собой набор равномерно распределённых параллельных плоскостей, содержащих точки решётки Браве. Причём это семейство плоскостей содержит все точки решётки Браве.

# Теорема

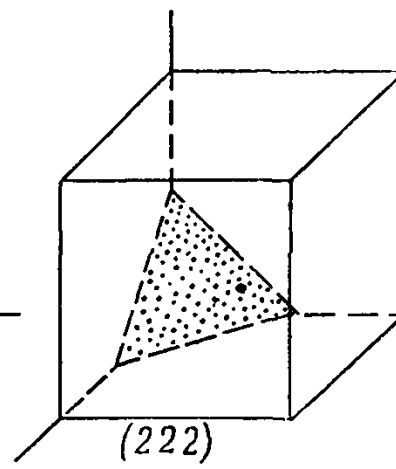
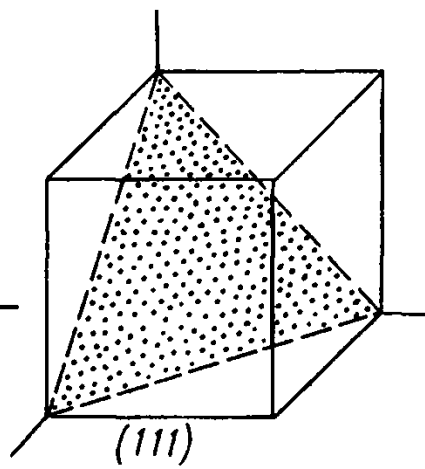
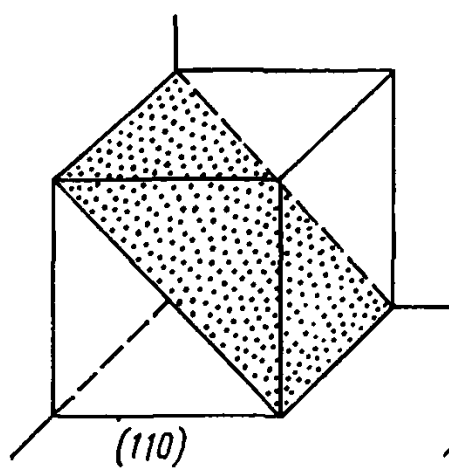
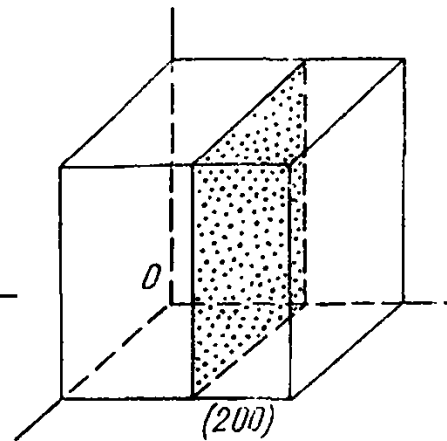
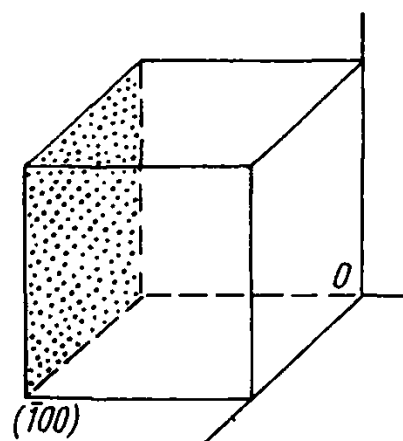
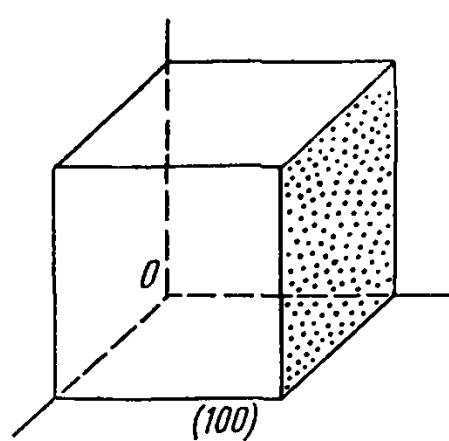
- Пусть дано семейство плоскостей решётки равномерно распределённых в пространстве так, что расстояние между соседними плоскостями  $d$ , и

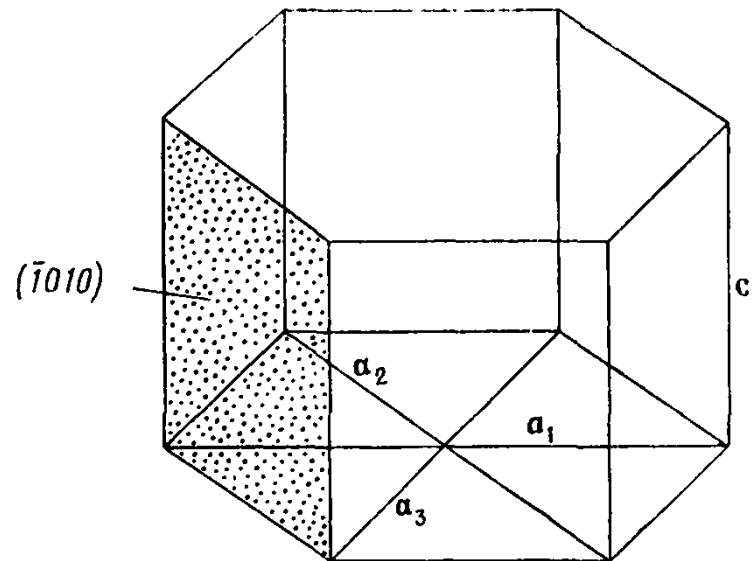
$$\mathbf{G} = 2\pi\mathbf{n}/d$$

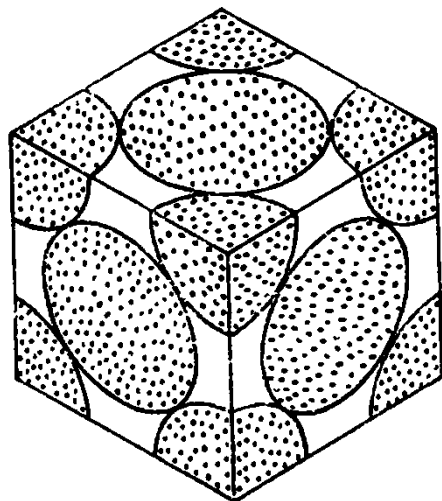
- вектор обратной решётки у которого единичный вектор  $\mathbf{n}$  направлен перпендикулярно к плоскостям решётки. Тогда среди всех векторов обратной решётки, перпендикулярных к этому семейству плоскостей, вектор  $\mathbf{G}$  имеет наименьшую длину.

И обратно, пусть даны вектор обратной решётки  $\mathbf{G}$  и вектор обратной решётки  $\mathbf{G}_0$  параллельный первому вектору и имеющий наименьшую длину среди всех параллельных векторов обратной решетки. Тогда существует семейство плоскостей решётки, которые перпендикулярны к  $\mathbf{G}_0$  и имеют межплоскостное расстояние  $d=2\pi/G_0$ .

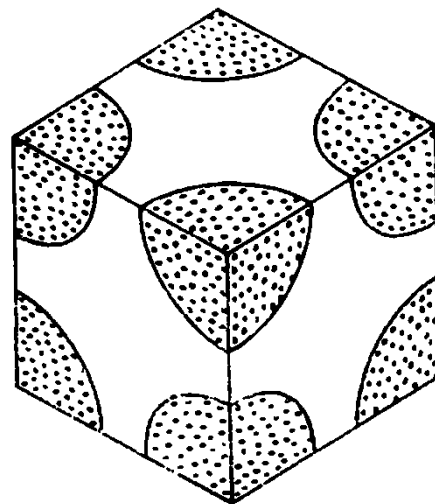
Для любого заданного направления в кристаллической решётке существует взаимно-однозначное соответствие между семействами плоскостей и векторами обратной решётки с наименьшей длиной.



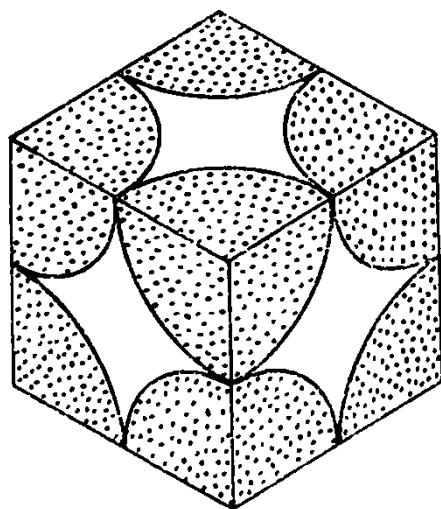




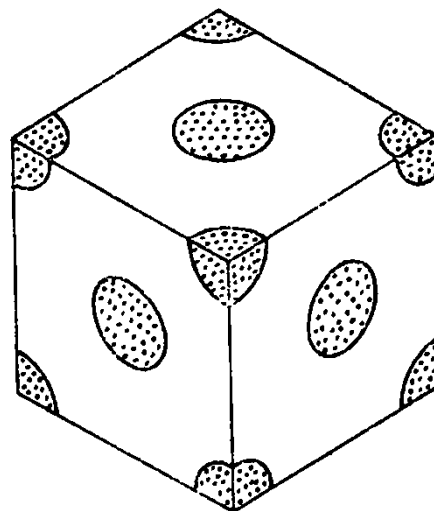
*г.ц.к. - структура,  
заполнение 74%*



*о.ц.к. - структура,  
заполнение 68%*



*Простая кубическая,  
заполнение 52%*



*Структура алмаза,  
заполнение 34%*

