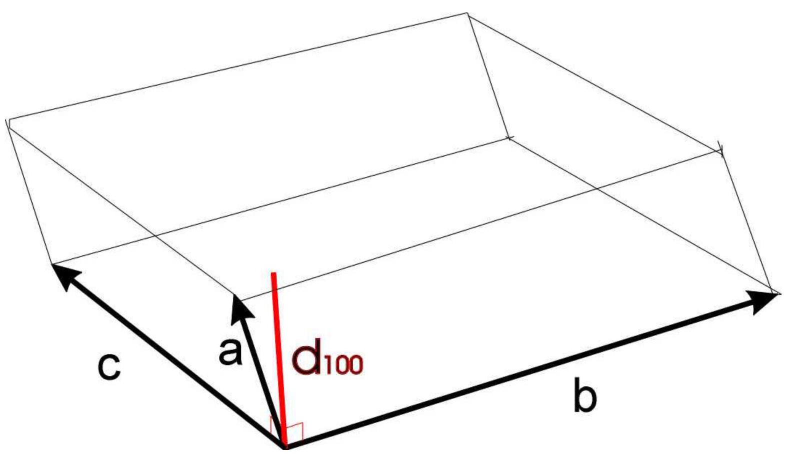
RETICLE RECÍPROC

A partir del reticle definit anteriorment, que com que cada nus correspon a un motiu l'anomenarem **reticle directe**, és possible definir un altre reticle (que en direm **recíproc**) en el qual els tres vectors fonamentals són:

$$a^* = \frac{b \times c}{a \times b \cdot c}\;; \quad b^* = \frac{c \times a}{a \times b \cdot c}\;; \quad c^* = \frac{a \times b}{a \times b \cdot c}$$

per tant, qualsevol vector d'aquest reticle s'expressa com

$$r^*_{hkl} = \left(ha^* + kb^* + lc^*\right)$$



Si s'analitzen els seus mòduls (per exemple en el cas del a^*)

$$a^* = \frac{b \times c}{a \times b \cdot c}$$

el numerador representa un vector perpendicular a b i c, el mòdul del qual és l'àrea del paral·lelogram definit per b i c, atès que

$$|b \times c| = a \bullet b \bullet \sin\alpha$$

mentre que el denominador és el volum de la cel·la fonamental del reticle directe definida per *a, b* i *c* (Vc). Per tant, el mòdul de a* val

$$|a^*| = \frac{area}{V_c}$$

i com que el volum és igual a l'àrea del paral·lelogram definit per *c* i *b*, per l'alçada - que és l'espaciat reticular dels plans definits per *b* i *c*, és a dir els (100) - , es pot escriure

$$|a^*| = \frac{area}{area \bullet d_{100}} = \frac{1}{d_{100}}$$

igualment, es pot deduir que $|b^*| = \dfrac{1}{d_{010}}$ i $|c^*| = \dfrac{1}{d_{001}}$

De les anteriors expressions que defineixen els vectors fonamentals a*, b* i c* es pot deduir

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

atès que si es multiplica per *a* els dos termes de la definició de *a**, queda

$$a \cdot a^* = \frac{a \cdot (b \times c)}{a \times b \cdot c} = \frac{V_c}{V_c} = 1 ,$$ i igualment per *b** i *c**.

També, a partir de les definicions dels vectors a*, b* i c* es dedueix que

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

ja que el vector *a** és perpendicular a *b* i *c*, *b** ho és a *a* i *c*, i *c** a *a* i *b*.

El reticle recíproc té dues propietats fonamentals:

a) un vector r*(hkl) del reticle recíproc és perpendicular al pla (hkl) del reticle directe.

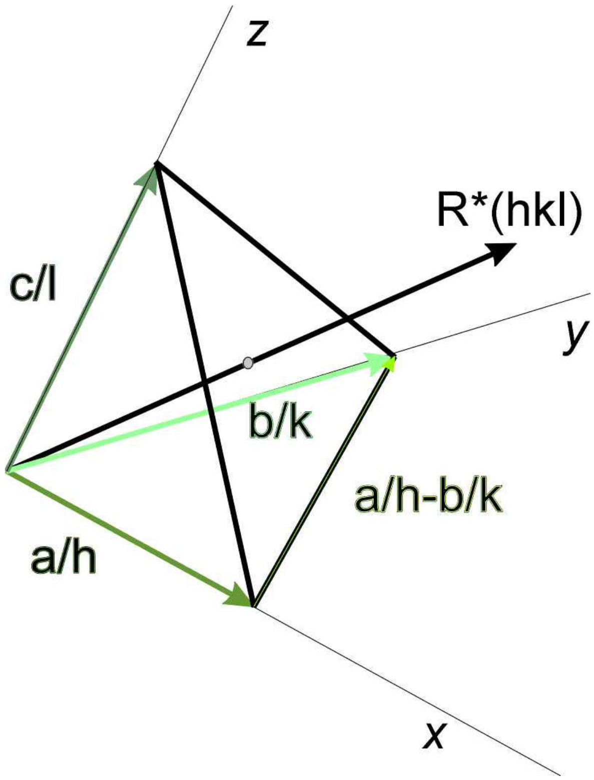
b) els mòdul del vector r*(hkl) és igual a l'invers de l'espaciat reticular dels plans (hkl) del reticle directe.

a) El pla (hkl) més proper a l'origen talla els eixos *x, y* i *z* a a/h , b/k , c/l , respectivament, per tant el vector $\left(a/h - b/k\right)$ està contingut en el pla (hkl), i si és així, el producte vectorial d'ambdós haurà de ser nul:

$$r^*_{hkl} \cdot \left(\frac{a}{h} - \frac{b}{k}\right) = (ha^* + kb^* + lc^*) \cdot \left(\frac{a}{h} - \frac{b}{k}\right) = 0$$

desenvolupant l'expressió:

$$ha^* \cdot \frac{a}{h} + kb^* \cdot \frac{a}{h} + lc^* \cdot \frac{a}{h} - ha^* \cdot \frac{b}{k} - kb^* \cdot \frac{b}{k} - lc^* \cdot \frac{b}{k} = 0$$



considerant que alguns dels termes s'anulen perquè *a** és perpendicular a *b* i *c*, etc., queda

$$a^* \cdot a - b^* \cdot b = 1 - 1 = 0$$

per tant r*(hkl) és perpendicular a $\left(a/h - b/k \right)$

Igualment es pot demostrar que r*(hkl) és perpendicular a qualsevol dels altres vectors continguts en el pla (hkl): $\left(c/l - b/k \right)$ o $\left(a/h - c/l \right)$, i per tant és perpendicular a (hkl).

b) Si **n** és un vector unitari perpendicular al pla (hkl), la distància entre plans (l'espaciat reticular d(khl)) serà

$$d_{hkl} = \frac{a}{h} \cos \varphi$$

i com que $(a \cdot \cos \varphi) = |\vec{a}| \cdot |\vec{n}| \cdot \cos \varphi = \vec{a} \cdot \vec{n}$, l'anterior equació es pot escriure com

$$d_{hkl} = \frac{\vec{a} \cdot \vec{n}}{h}$$

el vector unitari n equival al vector r*(hkl) dividit pel seu mòdul,

$$\vec{n} = \frac{r^*_{hkl}}{\left| r^*_{hkl} \right|}$$

i per tant

$$d_{hkl} = \frac{\vec{a}}{h} \cdot \frac{r^*_{hkl}}{\left| r^*_{hkl} \right|}$$

el producte $\vec{a}/h \cdot r^*_{hkl}$ val la unitat, i per tant

$$\frac{\vec{a}}{h} \cdot (ha^* + kb^* + lc^*) = \frac{ha \cdot a^*}{h} + \frac{ka \cdot b^*}{k} + \frac{la \cdot c^*}{h} = 1$$

Perquè el segon i tercer termes s'anul·len i el primer val u.

$$d_{hkl} = \frac{1}{\left|r^*_{hkl}\right|}$$

És fàcil demostrar, a més a més, que *el reticle recíproc del reticle recíproc és el reticle directe*

És a dir: $$(a^*)^* = \frac{b^* \times c^*}{a^* \cdot b^* \times c^*} = a$$

Si es multiplica per a·a*=1 el segon terme de l'expressió dels vectors fonamentals (a*)*,

$$(a^*)^* = a \cdot a^* \frac{b^* \times c^*}{a^* \cdot b^* \times c^*} = a$$

i per tant, $(a^*)^* = a$; $(b^*)^* = b$; $(c^*)^* = c$

De tot el que s'ha deduït fins ara es pot concloure que **els vectors del reticle recíproc representen famílies de plans del reticle directe, de tal manera que cada vector r*(hkl) és perpendicular a (hkl) i el seu mòdul és inversament proporcional a l'espaciat reticular d'aquesta família de plans**.

Conseqüentment, és possible calcular l'espaciat reticular d'una família de plans (hkl) a partir dels vectors del reticle recíproc:

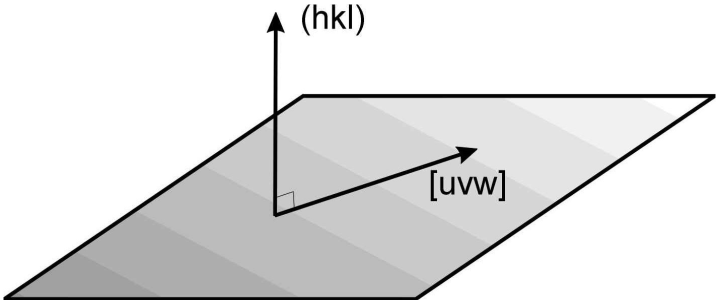
$$r^*_{hkl} \cdot r^*_{hkl} = \left|r^*_{hkl}\right| \cdot \left|r^*_{hkl}\right| \cdot \cos 0^\circ = \frac{1}{d^2_{hkl}}$$

d'on es dedueix que

$$d_{hkl} = \sqrt{\frac{1}{r_{hkl}}}$$

RELACIONS ENTRE FILERES I PLANS RETICULARS

A) La condició perquè una filera reticular [uvw] estigui inclosa en un pla reticular (hkl) és



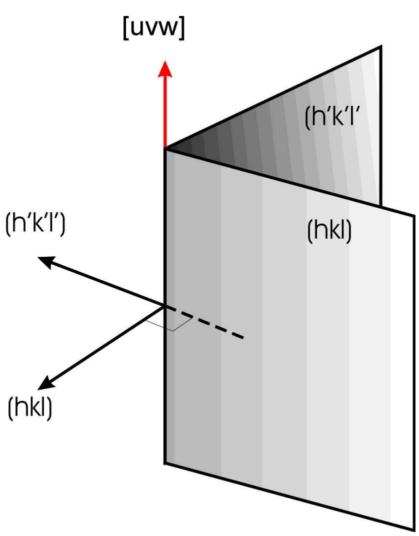
$$hu + kv + lw = 0$$

D'acord amb la figura adjunta, el vector r*(hkl) del reticle recíproc és perpendicular al pla (hkl) i per tant, també ho és al vector [uvw] del reticle directe que representa la filera reticular, per tant, el seu producte escalar serà zero:

$$(hkl)\cdot[uvw] = \left(h\vec{a}* + k\vec{b}* + l\vec{c}*\right)\cdot(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})$$

desenvolupant el producte dels dos polimonis,

$$\begin{aligned} &hu(a*\cdot a) + hv(a*\cdot b) + hw(a*\cdot c) + \\ &\quad + ku(b*\cdot a) + kv(b*\cdot b) + kw(b*\cdot c) + \\ &\qquad + lu(c*\cdot a) + lv(c*\cdot b) + lw(c*\cdot c) = (hu + kv + lw) \end{aligned}$$



on $a*\cdot b = a*\cdot c = b*\cdot c = 0$; i $a*\cdot a = b*\cdot b = c*\cdot c = 1$

I si els dos vectors són perpendiculars, el resultat ha de ser zero.

B) Per calcular la filera reticular en la qual s'intersecten dos plans reticulars (hkl) i (h'k'l'), es pot recorrer al producte vectorial dels dos vectors del reticle recíproc que representen aquests plas, tal com es mostra a la figura

$$(hkl)\times(h'k'l') = [uvw]$$

desenvolupant el producte $(ha* + kb* + lc*)\times(h'a* + k'b* + l'c*)$, resulta

$$hh'(a^*\times a^*)+hk'(a^*\times b^*)+hl'(a^*\times c^*)+$$
$$+kh'(b^*\times a^*)+kk'(b^*\times b^*)+kl'(b^*\times c^*)+$$
$$+lh'(c^*\times a^*)+lk'(c^*\times b^*)+ll'(c^*\times c^*)$$

on els productes vectorials d'un vector per si mateix, s'anulen:

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

i per la reste de termes, cal considerar les definicions que els vectors *a, b* i *c* es poden expressar en funció dels vectors fonamentals del reticle recíproc

$$a=\frac{b^*\times c^*}{V_c^*};\quad b=\frac{c^*\times a^*}{V_c^*};\quad c=\frac{a^*\times b^*}{V_c^*}$$

a partir de les quals, els productes vectorials entre vectors fonamentals *a**, *b** i *c**, es poden expressar en funció dels del reticle directe, i l'anterior producte queda

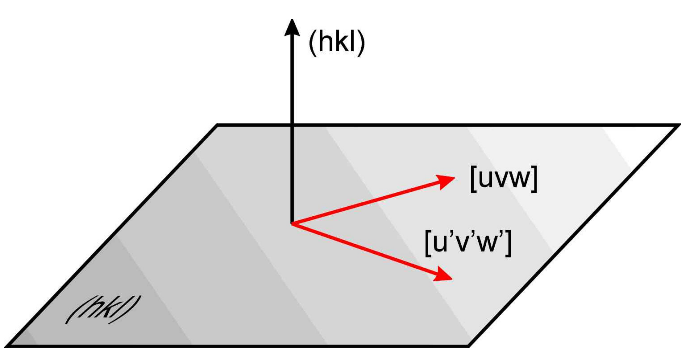
$$(hkl)\times(h'k'l')=\left(hk'V_c^*-kh'V_c^*\right)\cdot c+$$
$$+\left(lh'V_c^*-hl'V_c^*\right)\cdot b+$$
$$+\left(kl'V_c^*-lk'V_c^*\right)\cdot a$$

i dividint pel factor comú V_c^* queden els coeficient d'un vector del reticle directe

$$u=(kl'-lk');\quad v=(lh'-hl');\quad w=(hk'-kh')$$

Aquest vector equival a la solució del següent determinant

$$\begin{vmatrix}\vec{a} & \vec{b} & \vec{c}\\ h & k & l\\ h' & k' & l'\end{vmatrix}$$



C) De manera similar al cas anterior, es pot calcular quin és el pla reticular definit per dues fileres

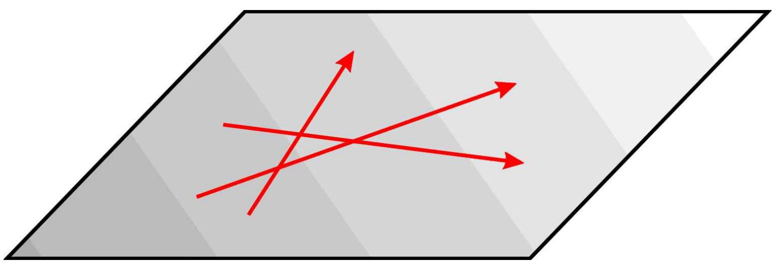
Fent el producte vectorial de [uvw] per [u'v'w'] s'obté un vector perpendilar a les dues fileres, i per tant al pla que formen, que expressat en funció dels vectors fonamentals del reticle recíproc, els seus coeficient seran els índex de Miller d'aquest pla.

$$[uvw] \times [u'v'w'] = (hkl)$$

que equival a la solució del determinant

$$\begin{vmatrix} \vec{a}\,^* & \vec{b}\,^* & \vec{c}\,^* \\ u & v & w \\ u' & v' & w' \end{vmatrix}$$

(Es suggereix que l'estudiant ho dedueixi pel seu compte)



D) De manera anàloga, es pot plantejar si tres fileres reticulars són coplanàries. En aquest cas el seu producte mixte equival al volum del paral·lelepíped que formen, i si són coplanàries, aquest és zero, per tant

$$[u_1 v_1 w_1] \cdot [u_2 v_2 w_2] \times [u_3 v_3 w_3] = \begin{pmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{pmatrix} = 0$$