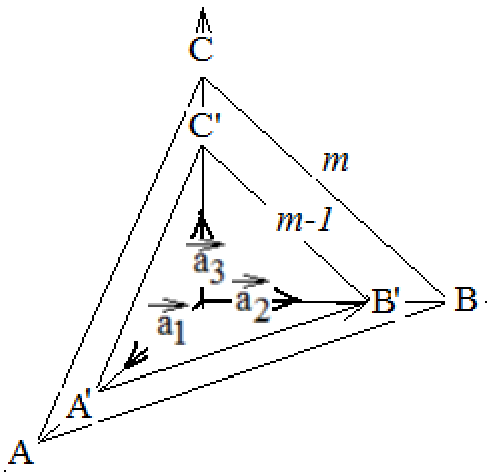
Curs 3

- **Proprietati geometrice ale retei reciproce**

- Vectorul retelei reciproce (egal cu vectorul de imprastiere pentru maxim de difractie), $\vec{G}_{hkl} = \vec{K}_{hkl} = h\,\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

este perpendicular pe planul de indici Miller (hkl) din reteaua directa.



- ✓ planul ABC, planul m din familia de plane $\{hkl\}$,
- ✓ planul $A'B'C'$, planul succesiv $m-1$, din aceeasi familie
- ✓ in planul m , $\overrightarrow{AB} = n_2\vec{a}_2 - n_1\vec{a}_1$; $\overrightarrow{AC} = n_3\vec{a}_3 - n_1\vec{a}_1$;
- ✓ produsul scalar

$$\vec{K}_{hkl}\cdot\overrightarrow{AB} = (\,h\,\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3)\cdot(n_2\vec{a}_2 - n_1\vec{a}_1) = 2\pi(kn_2 - hn_1) = 0$$

$$\vec{K}_{hkl}\cdot\overrightarrow{AC} = (\,h\,\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3)\cdot(n_3\vec{a}_3 - n_1\vec{a}_1) = 2\pi(ln_3 - hn_1) = 0$$

- ✓ $(\overrightarrow{AB}, \overrightarrow{AC}) \in ABC \Rightarrow \vec{K}_{hkl} \perp ABC$; $\vec{K}_{hkl} \perp (hkl)$

- Distanta dintre 2 plane consecutive ale familiei $\{hkl\}$, este invers proportionala cu modulul vectorului $\vec{K}_{hkl}$
- ✓ se evalueaza proiectia vectorului $\overrightarrow{AA'}$ (sau $\overrightarrow{BB'}$sau $\overrightarrow{CC'}$) pe vectorul $\vec{K}_{hkl}$

(distanta pe axe, dintre planele succesive $m, m-1$):

$$\overrightarrow{AA'} \cdot \frac{\vec{K}_{hkl}}{|\vec{K}_{hkl}|} = \left(\frac{m}{h}\vec{a}_1 - \frac{m-1}{h}\vec{a}_1\right) \cdot \frac{a}{2\pi\sqrt{h^2+k^2+l^2}}(\,h\,\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3)$$

$$\overrightarrow{AA'} \cdot \frac{\vec{K}_{hkl}}{|\vec{K}_{hkl}|} = 2\pi\left(\frac{m}{h}h - \frac{m-1}{h}h\right)\frac{a}{2\pi\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

Distanta interplanara in retelele Bravais 3D (cubice si hexagonala):

- ✓ **Structura CS**

Distanta dintre plane succesive (hkl), d_{hkl},

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

- ✓ **Structura CFC**

Distanta dintre plane succesive (hkl), d_{hkl},

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{a}{\sqrt{(-h+k+l)^2+(h-k+l)^2+(h+k-l)^2}}$$

- ✓ **Structura CVC**

Distanta dintre plane succesive (hkl), d_{hkl},

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{a}{\sqrt{(k+l)^2+(l+h)^2+(h+k)^2}}$$

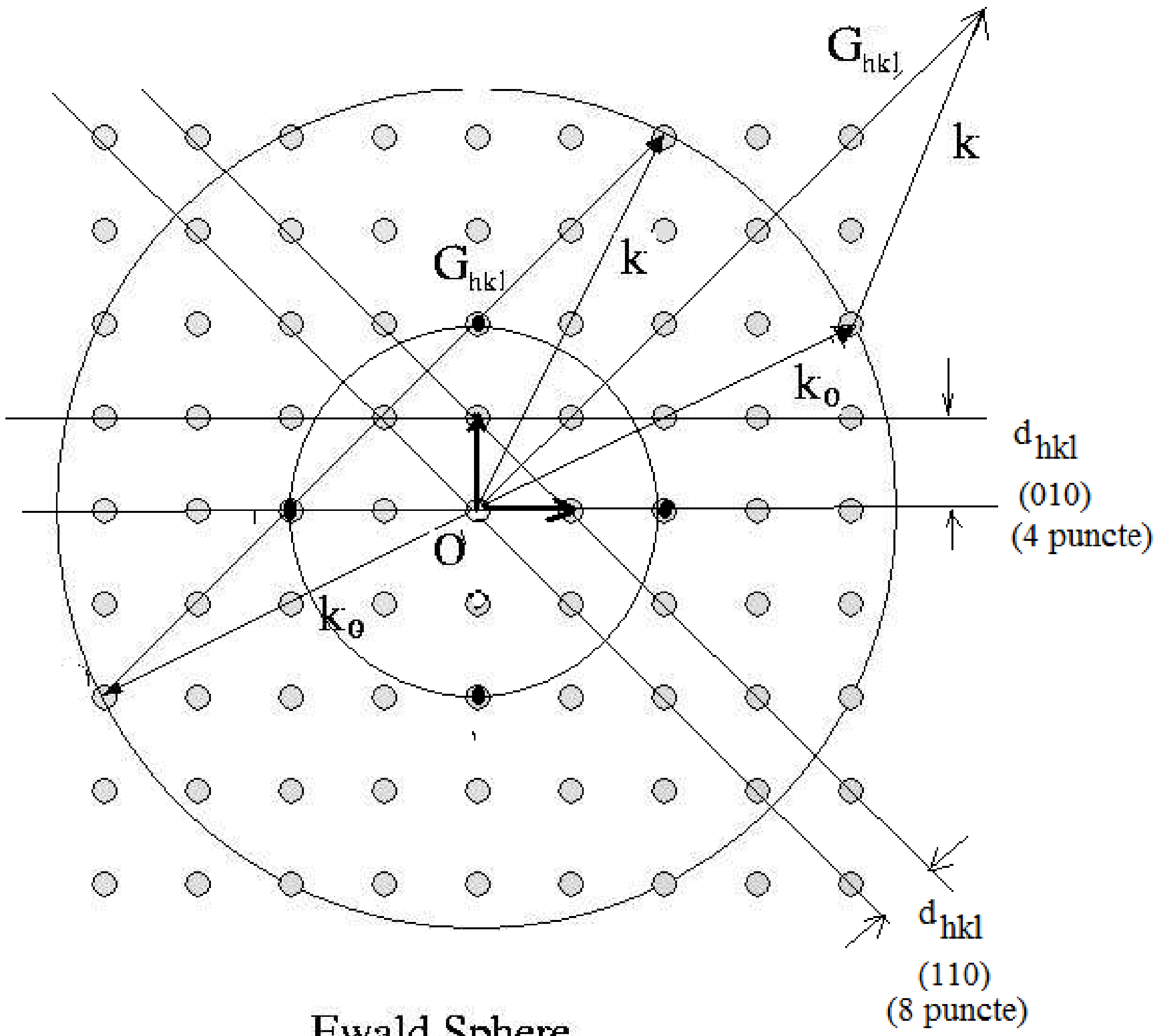
- ✓ **Structura HC**

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}}}$$

- **Sfera Ewald**

Constructia Ewald permite determinarea tuturor pozitiilor din reteau reciproca a unui cristal, in care se gasesc atomi pe care este imprastiata o radiatie X cu vectorul de unda $\vec{k}_0$, incidenta pe cristal sun un unghi θ. In cazul imprastierii elastice, $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$; sfera de raza $|\vec{k}_0|$va trece printr-un numar de puncte din spatiul $\vec{k}$, dintre care unele vor fi chiar noduri ale retelei reciproce identificate prin vectorul retelei reciproce $\vec{G}_{hkl} = \vec{k} - \vec{k}_0$. Pentru aceste noduri este indeplinita conditia de difractie Laue si ele vor da un maxim de imprastiere pe imaginea de difractie.

Numarul de puncte ale retelei reciproce $\vec{G}_{hkl}$ de pe sfera, depinde de orientarea cristalului fata de directia fasciculului, si de asemenea, de raza sferei $|\vec{k}_0| = \frac{2\pi}{\lambda}$. Astfel, simetria dispunerii spoturilor pe imaginea de difractie reflecta simetria dispunerii atomilor in reteaua reciproca, iar aceasta are aceeasi simetrie cu reteaua directa a cristalului.



Ewald Sphere

- **Restrictii asupra λ a radiatiei X**

Pentru λ cu valori mici, raza sferei creste si numarul de puncte de imprastiere creste. Din conditia de difractie, $2dsin\theta = n\lambda$, pentru $n = 1, 2dsin\theta = \lambda$:

- ✓ pentru $\theta = 0;\ \lambda \to 0$
- ✓ pentru $\theta = \frac{\pi}{2};\ \lambda \to \lambda_{max} = 2d$

Pentru a obtine imagine de difractie cu un fascicul dat (cu λ dat), acesta trebuie sa indeplineasca conditia $\lambda < \lambda_{max}$ pentru cristalul studiat.

Se poate stabili urmatoarea relatia ***RD-RR-imagine de difractie***:

Cristal (RD)	**Reteaua reciproca (RR)**	**Imagine de difractie**
Familia de plane $\{hkl\}$, pentru care este indeplinita conditia (conditia Bragg) $2d_{hkl}sin\theta = \lambda$; $d_{hkl} = \frac{2\pi}{\lvert\vec{G}_{hkl}\rvert}$	Punct in reteaua reciproca RR, pentru care $\vec{K} = \vec{G}_{hkl}$ (conditia Laue) (pe sfera Ewald)	Spot indexat hkl pe imaginea de difractie; familie de plane in reteaua directa

❖ Celula primitiva a retelei reciproce. Zone Brillouin

Scriem conditia de difractie sub forma

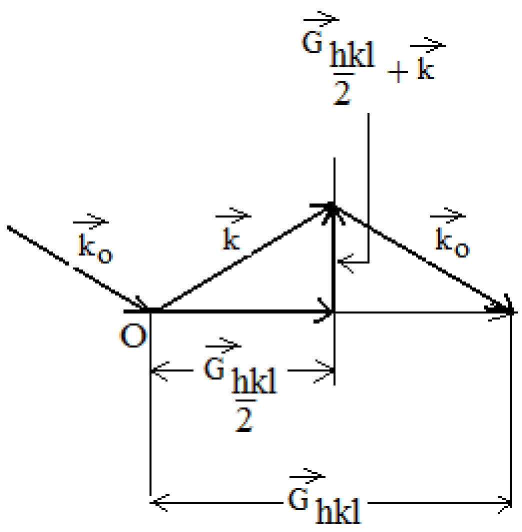
$$\vec{k} = \vec{G}_{hkl} + \vec{k}_0$$

$$\vec{k}^2 = \vec{G}_{hkl}^{\ 2} + 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k}_0 + \vec{k}_0^{\ 2}$$

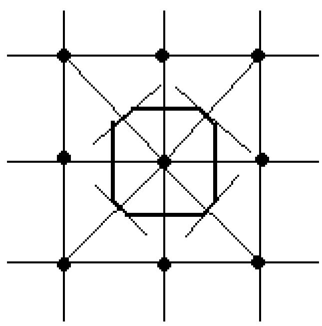
$$\vec{k}^2 = \lvert\vec{k}\rvert^2;\ \vec{k}_0^{\ 2} = \lvert\vec{k}_0\rvert^2$$

$$\vec{G}_{hkl} \cdot \left(\frac{\vec{G}_{hkl}}{2} + \vec{k}\right) = 0$$

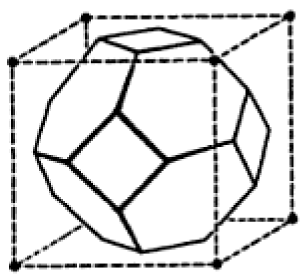
$$\vec{G}_{hkl} \perp \left(\frac{\vec{G}_{hkl}}{2} + \vec{k}\right)$$



- ✓ $\vec{G}_{hkl}$ este normala planului mediator ($\frac{\vec{G}_{hkl}}{2} + \vec{k}$).
- ✓ Toti vectorii $\vec{k}$ cu varful pe planul mediator vectorului $\vec{G}_{hkl}$ din RR, indeplinesc conditia de difractie Laue. In teoria propagarii undelor, undele care pornesc din origine sunt reflectate de planul ($\frac{\vec{G}_{hkl}}{2} + \vec{k}$).
- ✓ Considerand toate celelalte noduri i, si construind planele mediatoare vectorilor lor $\vec{G}_i$, se obtin contururi poliedrale din intersectia acestor plane.
- ✓ Daca se considera numai atomii vecini nodului O, planele mediatoare ale vectorilor lor de pozitie (vectori $\vec{G}$) se intersecteaza si se obtine poliedrul de volumul cel mai mic si care contine un singur nod. Acesta constituie ***celula primitiva*** a retelei reciproce.



celula primitiva
a retelei reciproce patratice plane



celula primitiva
a retelei reciproce CVC

- ✓ Ca si in RD, celula primitiva este unitatea simetrica a RR. Valorile distincte ale vectorilor $\vec{k}$ sunt numai cele cuprinse in interiorul celulei primitive, de la 0 pana la $\frac{\vec{G}_{hkl}}{2}$, respectiv de la 0 la $-\frac{\vec{G}_{hkl}}{2}$. Astfel, pe directiile fundamentale ale retelei reciproce cubice, valorile distincte ale vectorului $\vec{k}$ vor fi $k_x \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right], k_y \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right], k_z \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$.
- ✓ In spatiul reciproc (spatiul Fourier, spatiul vectorilor de unda), volumul cel mai mic, care contine toate valorile distincte ale vectorilor $\vec{k}$, se numeste ***prima zona Brillouin*** *(IBZ)*.