Krystalografie, translační vektory, elementární buňka

Úloha 1:

Najděte primitivní buňku k elementární buňce Bravaisovy kubické, plošně centrované krystalové mřížce (fcc), zjistěte její objem, počet atomů náležejících k oběma buňkám a ukažte, že počet atomů na jednotku objemu je v obou buňkách stejný.
Přesvědčte se (algebraickým výpočtem), že nalezená primitivní buňka je romboedr a nalezněte úhly mezi generujícími vektory.

Řešení:

Elementární vektory krychlové, plošně centrované buňky označíme **a**, **b** a **c**, velikosti jsou ovšem stejné, $a = b = c$. Abychom nalezli elementární vektory primitivní buňky, musíme nalézt tři lineárně nezávislé vektory **u**, **v**, **w** spojující nejbližší sousední atomy. Takové tři dvojice zřejmě tvoří s atomem ve vrcholu krychlové buňky další tři atomy uprostřed přiléhajících stěn. V bázi $A = \{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}\}$ jsou to vektory se souřadnicemi

$$\mathbf{u}_A = \left(\tfrac{1}{2},\ \tfrac{1}{2},\ 0\right), \mathbf{v}_A = \left(\tfrac{1}{2},\ 0,\ \tfrac{1}{2}\right), \mathbf{w}_A = \left(0,\ \tfrac{1}{2},\ \tfrac{1}{2}\right).$$

Trojice vektorů **u**, **v**, **w** jednoznačně definuje rovnoběžnostěn, jehož objem je roven

$$V_{\mathbf{uvw}} = \left|\mathbf{u} \cdot \left(\mathbf{v} \times \mathbf{w}\right)\right|.$$

Připomeňme, že výraz v absolutní hodnotě se nazývá smíšený součin, který je invariantní vzhledem k cyklické záměně vektorů a je antisymetrický vzhledem k záměně libovolné dvojice vektorů. Geometricky jde o orientovaný objem rovnoběžnostěnu. Vyčíslit jej lze pomocí známého determinantu, jehož řádky tvoří souřadnice tří vektorů ze smíšeného součinu, ovšem to by platilo u souřadnic v ortonormální bázi. My máme sice ortogonální bázi ale nikoliv ortonormální, náš výpočet se od výpočtu v ortonormální bázi však bude lišit pouze jednotkou, kterou zde představuje objem $V_{\mathbf{abc}} = a^3$ a máme

$$V_{\mathbf{uvw}} = \mathrm{abs}\begin{vmatrix} u_x & u_y & u_z \\ v_x & v_y & v_z \\ w_x & w_y & w_z \end{vmatrix} a^3 = \mathrm{abs}\begin{vmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{vmatrix} a^3 = \left|-\frac{1}{4}\right| a^3 = \frac{1}{4} a^3.$$

Na objem $V_{\mathbf{abc}}$ připadají 4 atomy, 8 atomů spočívá ve vrcholech mřížky, z nichž každý se započítává jednou osminou, neboť je sdílený osmi dotýkajícími se buňkami v každém z vrcholů a pak 6 atomů ve středech stěn, u nichž se však opět z důvodů sdílení každý započítává z jedné poloviny.

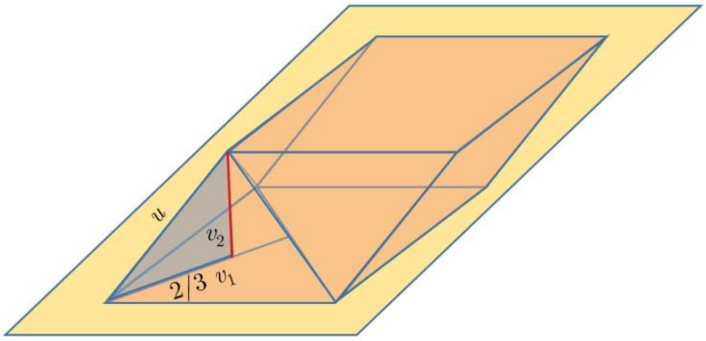
Na objem $V_{\mathbf{uvw}}$ připadá jediný atom (8 atomů pouze ve vrcholech, každý započítaný z jedné osminy) a vzhledem k tomu, že objem $V_{\mathbf{uvw}}$ nám vyšel 4× menší než objem $V_{\mathbf{abc}}$, je počet atomů na jednotku objemu v obou případech stejný.

Velikosti vektorů **u**, **v** a **w** jsou stejné a jsou rovny $a/\sqrt{2}$, neboť jejich koncové body leží v polovině úhlopříček stěn, což lze také ověřit výpočtem ze souřadnic. Úhly mezi vektory vyjádříme pomocí skalárního součinu:

$$\cos\gamma = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{uv} = \frac{\frac{1}{2}\frac{1}{2}a^2}{\frac{a^2}{2}} = \frac{1}{2}.$$

Podobně vyjdou i zbylé úhly α a β a máme $\alpha = \beta = \gamma = \pi/3$. Jelikož romboedr je definován jako rovnoběžnostěn, jehož všechny hrany jsou stejně dlouhé a úhly mezi generujícími vektory jsou stejné, jedná se o romboedr s úhly mezi generujícími vektory $\pi/3$.

Ukažme zde také výpočet objemu primitivní buňky bez použití smíšeného součinu, jen z velikostí vektorů generujících hledaný romboedr a vzájemných úhlů. Velikost vektoru je $|\mathbf{u}| = u = a\sqrt{2}/2$. Objem rovnoběžnostěnu je plocha základny násobená výškou. Základna je kosočtverec o stranách u a vrcholových úhlů $\pi/3$ a $2\pi/3$. Obsah jeho plochy bude opět základna krát výška, jen o jednu dimenzi níže, počítáno v rovině. Základna je u, výšku spočítáme jako třetí stranu pravoúhlého trojúhelníka o stranách u a $u/2$, což je z Pythagorovy věty $v_1 = u\sqrt{1^2 - (1/2)^2} = u\sqrt{3}/2$ a plocha základny je $S = v_1 z_1 = u^2\sqrt{3}/2 = a^2\sqrt{3}/4$. K určení výšky rovnoběžnostěnu bez skalárního a vektorového součinu je potřeba jistá invence. Třetí vektor romboedru totiž svírá jak s prvním, tak s druhým vektorem stejný úhel $\pi/3$ ale my bychom potřebovali znát úhel, jaký svírá s rovinou popřípadě s normálou k rovině základny, což je jeho doplněk do $\pi/2$. Avšak snadno zjistíme, že každá z kosočtverečných stěn romboedru je dána spojením dvou rovnostranných trojúhelníků a třetí strana translačního vektoru tak tvoří jednu z hran čtyřstěnu (viz obrázek vlevo). Výška tedy bude totožná s výškou tohoto čtyřstěnu a není nutno ji počítat za pomocí goniometrických funkcí z úhlů ale z Pythagorovy věty. Přičemž délku spodní odvěsny trojúhelníka vyznačeného na obrázku získáme z věty o těžnicích, podle které se všechny tři těžnice protínají v těžišti, které těžnice rozděluje na třetinový a dvoutřetinový úsek. Protože jde ale o pravidelný čtyřstěn, je těžiště zároveň střed trojúhelníka podstavy. Výšku tedy dostaneme jako $v_2 = \sqrt{u^2 - (2v_1/3)^2} = u\sqrt{1 - (1/\sqrt{3})^2} = u\sqrt{2/3} = 2a/\sqrt{3}$. Objem romboedru dostaneme jako základnu krát výšku, tedy $V = Sv_2 = a^2\sqrt{3}/4 \cdot 2a/\sqrt{3} = a^3/4$, co je v souladu s předchozím výsledkem.



Krystalografické roviny

Úloha 1:

Ukažte, že vzdálenost sousedních rovin daných Millerovými indexy (hkl) je pro kubickou mřížku s mřížkovou konstantou a daná vztahem

$$d_{hkl} = \frac{a}{\left(h^2 + k^2 + l^2\right)^{\frac{1}{2}}} .$$

Řešení:

Průsečíky roviny se souřadnicovými osami podle definice Millerových indexů budou

$$A = \left(\frac{a}{h},\ 0,\ 0\right), B = \left(0,\ \frac{a}{k},\ 0\right),\ C = \left(0,\ 0,\ \frac{a}{l}\right).$$

Zatím předpokládáme nenulovost všech Millerových indexů, případ bude-li některý z nich nulový vyřešíme zvlášť. Trojice bodů A, B a C jednoznačně definuje rovinu (přesvědčte se, že body nemohou ležet na jedné přímce). Normálu určíme jako vektorový součin dvou různoběžných vektorů ležících v rovině. Vybereme například vektory

$$\mathbf{u} = \overline{AB} = \left(-\frac{a}{h},\ \frac{a}{k},\ 0\right), \mathbf{v} = \overline{AC} = \left(-\frac{a}{h},\ 0,\ \frac{a}{l}\right)$$

A normálu získáme jako

$$\mathbf{n} = \mathbf{u} \times \mathbf{v} = \left(-\frac{a}{h},\ \frac{a}{k},\ 0\right) \times \left(-\frac{a}{h},\ 0,\ \frac{a}{l}\right) = \left(\frac{a^2}{kl},\ \frac{a^2}{hl},\ \frac{a^2}{hk}\right).$$

Jako nejbližší sousední rovinu k rovině (hkl) vezmeme rovinu, která bude procházet počátkem souřadnicové soustavy. Tím bude vždy nějaká z rovin procházet, promyslete si všechny možnosti, bude-li jeden z Millerových indexů roven 1 bude jeden z průsečíků roviny a osy ležet v koncovém bodě některého z vektorů elementární buňky. To je však vždy počátek souřadnicové soustavy jedné ze sousedních buněk. Nebude-li žádný z Millerových indexů 1, bude elementární buňka obsahovat více rovin, tj. budeme-li mít například rovinu (333), bude tato rovina ekvivalentní také rovnoběžným rovinám (222) a (111), z nichž poslední také prochází počátkem nějaké sousední elementární buňky. Vzdálenost rovin bude průmět vektoru mezi libovolnými body ležícími v jedné a ve druhé rovině do normálového směru, neboť to je délka úsečky spojující obě roviny kolmo. Za jeden bod vezmeme bez újmy na obecnosti průsečík A a za druhý bod vezměme počátek. Máme tedy

$$d_{hkl} = \frac{\mathbf{n}}{n} \times \left(\left(\frac{a}{h},\ 0,\ 0\right) - \left(0,\ 0,\ 0\right)\right) = \frac{\dfrac{a^3}{hkl}}{\sqrt{\dfrac{a^4}{(kl)^2} + \dfrac{a^4}{(hl)^2} + \dfrac{a^4}{(hk)^2}}} = \frac{a}{\sqrt{\left(h^2 + k^2 + l^2\right)}},$$

což jsme měli dokázat.

Bude-li některý z indexů nulový, nebude existovat průsečík roviny s příslušnou souřadnicovou osou, v tom případě jako jeden z vektorů ležících v rovině vezmeme ten elementární vektor, který je s rovinou rovnoběžný. Budou-li dva nulové Millerovy indexy, můžeme vzít za normálu bez dalších výpočtů třetí elementární vektor. Ve všech případech dostaneme týž výsledný vzorec.

Úloha 2:

Jsou zadány mřížkové elementární vektory **a**, **b** a **c** a úhly mezi nimi jsou α, β a γ (použijte konvenci, že úhel mezi vektory **a** a **b** je γ a cyklicky). Položte vektor **a** ve směru osy *x* pravoúhlé souřadnicové soustavy (x, y, z), vektor **b** umístěte do roviny (*x*, *y*) a nalezněte úhel ϕ mezi vektorem **c** a osou *y* a úhel Θ mezi vektorem **c** a osou z.

Řešení:

Zavedeme ortonormální bázi $E=\left\{\mathbf{e}_x,\mathbf{e}_y,\mathbf{e}_z\right\}$ s jednotkovými vektory ve směru souřadnicových os. Vektor **a**, bude mít v bázi *E* podle zadání souřadnice

$$\mathbf{a}_E=(a,0,0),$$

vektor **b** leží v rovině (*x*, *y*) a svírá s vektorem **b** a tedy i s osou *x* úhel γ, souřadnice tedy budou velikosti odvěsen pravoúhlého trojúhelníka a snadno nalezneme

$$\mathbf{b}_E=(b\cos\gamma,\ b\sin\gamma,\ 0).$$

Zadané úhly mezi vektory **c** a **a** a mezi vektory **c** a **b** vyjádřeme pomocí skalárních součinů

$$\mathbf{c}\cdot\mathbf{a}=ca\cos\beta,$$
$$\mathbf{c}\cdot\mathbf{b}=cb\cos\alpha,$$

což je v souřadnicích v bázi *E*

$$(c_x,c_y,c_z)\cdot(a,0,0)=ca\cos\beta,$$
$$(c_x,c_y,c_z)\cdot(b\cos\gamma,\ b\sin\gamma,\ 0)=cb\cos\alpha$$

a po provedení skalárního součinu dostaneme snadno řešitelnou soustavu rovnic pro c_x a c_y s řešením

$$c_x=c\cos\beta,$$
$$c_y=c\frac{\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma}.$$

Souřadnici c_z získáme ze vztahu pro velikost $c^2=c_x^2+c_y^2+c_z^2$ a po dosazení zbylých dvou souřadnic máme

$$c_z=c\sqrt{1-\cos^2\beta-\frac{(\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma)^2}{\sin^2\gamma}}.$$

Výraz pod odmocninou lze ještě upravit do symetričtějšího tvaru

$$1-\cos^2\beta-\frac{(\cos\alpha-\cos\beta\cos\gamma)^2}{\sin^2\gamma}=1-\cos^2\beta-\frac{\cos^2\alpha-2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\cos^2\beta\cos^2\gamma}{\sin^2\gamma}=1-\cos^2\beta-$$
$$-\frac{\cos^2\alpha-2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma+\cos^2\beta-\cos^2\beta\sin^2\gamma}{\sin^2\gamma}=\frac{1-2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma}{\sin^2\gamma}$$

a dostáváme

$$c_z=\frac{c}{\sin\gamma}\sqrt{1-2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma}.$$

Protože hledané úhly ϕ a Θ souvisí se souřadnicemi pro c_x a c_y jednoduchými vztahy

$$c_y = c\cos\phi,\ c_z = c\cos\Theta,$$

Dostaneme pro hledané úhly vztahy

$$\cos\phi = \frac{\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma}{\sin\gamma},$$

$$\cos\Theta = \frac{\sqrt{1-2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma}}{\sin\gamma}$$

Poznámka 1: Všimněte si, že poslední výraz se nezmění při záměně $\alpha \leftrightarrow \beta$, což odpovídá očekávání, neboť vektory **a** a **b** vystupují vzhledem k vektoru **c** zcela symetricky a výsledek nesmí záviset na záměně jejich označení.

Poznámka 2: Přesvědčte se, že v případě pravoúhlé mřížky (kubické, čtverečné nebo kosočtverečné) s úhly $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$ dostanete $\mathbf{c}_E = (0,\ 0,\ c)$.

Úloha 3:

Nalezněte vzdálenost rovin daných Millerovými indexy (*hkl*) pro trojklonnou mřížku s vektory **a**, **b**, **c** a vzájemnými úhly α, β a γ. Využijte výsledků úlohy 2.

Řešení:

Tato úloha je technicky náročnější, ke zkoušce ji nebudu vyžadovat. Časem ji však do tohoto textu doplním, z referenčních důvodů, neboť jde o nejobecnější úlohu tohoto typu a mohlo by být užitečné mít tyto vzorce spočítané. V žádné z učebnic jsem je nenalezl.

Difrakce na krystalech, reciproká mříž

Úloha 1:

Označme mřížkové vektory elementární buňky $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3.$ a odpovídající vektory reciproké mříže $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*.$ Ukažte, že definiční vztahy reciprokých vektorů

$$\mathbf{a}_j^* \cdot \mathbf{a}_k = 2\pi\delta_{\mathrm{jk}}, \quad j, k = 1, 2, 3, \tag{1}$$

jsou ekvivalentní vztahům s explicitním vyjádřením vektorů reciproké mříže

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{2\pi\, \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)},\ \mathbf{a}_2^* = \frac{2\pi\, \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)},\ \mathbf{a}_3^* = \frac{2\pi\, \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}. \tag{2}$$

Řešení:

Prozkoumejme nejprve sady rovnic (1) a (2) z hlediska počtu rovnic. Soustava (1) představuje devět skalárních rovnic, soustavu (2) tvoří tři rovnice vektorové, jejichž vektory jsou z třírozměrného prostoru a tedy každá vektorová rovnice je ekvivalentní třem nezávislým rovnicím skalárním (například rozepsáním do třech různých směrů nebo rozepsáním do souřadnic v nějaké bázi). Z hlediska počtu rovnic jsou obě soustavy ekvivalentní.

a) Implikace (2) $\Rightarrow$ (1) je jednodušší, dokáže se dosazením. Například dosazením vztahu pro $\mathbf{a}_1^*$ z příslušné rovnice soustavy (2) do vztahu (1) pro j = 1 a k = 1 dostaneme

$$\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi$$

atd. Budou-li indexy na levé straně rovnice rozdílné, bude smíšený součin v čitateli nulový, neboť dva z jeho vektorů budou totožné.

b) Implikaci (1) $\Rightarrow$ (2) dokážeme tak, že soustavu (1) vyřešíme vzhledem k reciprokým vektorům $\mathbf{a}_k^*$. Vyřešme například $\mathbf{a}_1^*$: Tento vektor je obsažen v rovnicích $\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi, \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2 = 0,\ \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3 = 0.$ Z druhého a z třetího vztahu plyne, že vektor $\mathbf{a}_1^*$ bude kolmý k vektorům $\mathbf{a}_2$ a $\mathbf{a}_3$. Lze ho tedy vyjádřit jako jejich vektorový součin $\mathbf{a}_1^* = K\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3$. Konstantu úměrnosti K najdeme z prvního vztahu, do něhož dosadíme a dostaneme rovnic $\mathbf{a}_1 \cdot K(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = 2\pi$, z čehož můžeme vyjádřit $K = 2\pi/\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ a dostaneme

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{2\pi\, \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)},$$

což je první vztah (2). Zbylé vztahy obdržíme stejným postupem s cyklickou záměnou indexů 1, 2, 3.

c) Implikaci (1) $\Rightarrow$ (2) můžeme také dokázat v kartézských souřadnicích. To je algebraicky těžší ale nemusíme předpokládat skalární a vektorové součiny a jejich vlastnosti. Důkaz provedeme vyřešením devíti rovnic (1) vzhledem k devíti složkám tří vektorů reciproké mříže $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*.$ Vyřešme například x-ovou složku a_{1x}^* vektoru $\mathbf{a}_1^*$. Rovnice soustavy (1) obsahující tuto složku jsou

$$\begin{aligned} a_{1x}^* a_{1x} + a_{1y}^* a_{1y} + a_{1z}^* a_{1z} &= 2\pi, \\ a_{1x}^* a_{2x} + a_{1y}^* a_{2y} + a_{1z}^* a_{2z} &= 0, \\ a_{1x}^* a_{3x} + a_{1y}^* a_{3y} + a_{1z}^* a_{3z} &= 0. \end{aligned} \tag{3}$$

Tyto tři rovnice můžeme chápat jako soustavu tří rovnic pro tři neznáme $a_{1x}^*, a_{1y}^*, a_{1z}^*$, z nichž druhou a třetí neznámou eliminujeme a první vyřešíme. Neznámé a_{1y}^* a a_{1z}^* vyjádříme z druhé a třetí rovnice soustavy (3) a jejich dosazením do rovnice první. Například vynásobením druhé rovnice a_{3y} a třetí rovnice $-a_{2y}$ a sečtením dostaneme $a_{1x}^*\left(a_{2x}a_{3y}-a_{3x}a_{2y}\right)+a_{1z}^*\left(a_{2z}a_{3y}-a_{3z}a_{2y}\right)=0$, z čehož vyjádříme

$$a_{1z}^* = a_{1x}^* \frac{a_{2x}a_{3y}-a_{2y}a_{3x}}{a_{2z}a_{3y}-a_{2y}a_{3z}}. \tag{4}$$

Podobně vyjádříme proměnnou

$$a_{1y}^* = a_{1x}^* \frac{a_{2x}a_{3z}-a_{2z}a_{3x}}{a_{2y}a_{3z}-a_{2z}a_{3y}}. \tag{5}$$

Obě proměnné (4) a (5) nyní dosaďme do první rovnice soustavy (3) a máme

$$a_{1x}^*a_{1x}+a_{1x}^*a_{1y}\frac{a_{2x}a_{3z}-a_{2z}a_{3x}}{a_{2y}a_{3z}-a_{2z}a_{3y}}+a_{1x}^*a_{1z}\frac{a_{2x}a_{3y}-a_{2y}a_{3x}}{a_{2z}a_{3y}-a_{2y}a_{3z}}=2\pi\,.$$

Dostaneme tak jednu rovnici pro neznámou a_{1x}^*, kterou vyjádříme a po úpravách dostaneme

$$a_{1x}^* = 2\pi\frac{a_{2y}a_{3z}-a_{2z}a_{3y}}{a_{1x}\left(a_{2y}a_{3z}-a_{2z}a_{3y}\right)+a_{1y}\left(a_{2z}a_{3x}-a_{2x}a_{3z}\right)+a_{1z}\left(a_{2x}a_{3y}-a_{2y}a_{3x}\right)},.$$

Což je ale x-ová složka první rovnice ze soustavy (2). Jedna devítina byla dokázána, zbylých osm devítin dostaneme cyklickou záměnou souřadnic x, y, z a indexů 1, 2, 3.

Poznámka:

V úloze 1. jsme dokázali ekvivalenci soustav (1) a (2) , je tedy jedno, kterou použijeme k definici vektorů reciproké mříže. V učebních textech se vyskytují obě varianty, záleží na preferencích autora.

Úloha 2:

Ukažte, že normála roviny (*hkl*) má směr $\mathbf{G}=h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*$, kde vektory $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ jsou vektory reciproké mříže.

Řešení:

Podle definice Millerových indexů, průsečíky rovin s přímkami, na nichž leží elementární vektory **a**, **b**, **c** budou

$$\frac{\mathbf{a}}{h}, \frac{\mathbf{b}}{k}, \frac{\mathbf{c}}{l}.$$

Vezměme nyní libovolnou dvojici nezávislých vektorů ležících v rovině (*hkl*) a spočítejme jejich vektorový součin, který bude normálou roviny

$$\mathbf{n}=\left(\frac{\mathbf{b}}{k}-\frac{\mathbf{a}}{h}\right)\times\left(\frac{\mathbf{c}}{l}-\frac{\mathbf{a}}{h}\right)=\frac{1}{kl}\mathbf{b}\times\mathbf{c}+\frac{1}{hk}\mathbf{a}\times\mathbf{b}+\frac{1}{hl}\mathbf{c}\times\mathbf{a}.$$

Vzhledem k tomu, že vektory reciproké mříže můžeme napsat jako

$$\mathbf{a}^*=2\pi\frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})} \text{ a cyklicky,}$$

můžeme ve vyjádření normály jednotlivé vektorové součiny nahradit reciprokými vektory a dostáváme vyjádření normály pomocí vektorů reciproké mříže

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}{2\pi}\left(\frac{\mathbf{a}^*}{kl}+\frac{\mathbf{b}^*}{hl}+\frac{\mathbf{c}^*}{hk}\right) = \frac{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}{2\pi hkl}\left(h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*\right) = \frac{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})}{2\pi hkl}\mathbf{G} \prec \mathbf{G},$$

což jsme měli dokázat.

Úloha 3:

Vyjádřete vzdálenost meziatomových rovin (*hkl*) pomocí mřížkového vektoru reciproké mříže **G**.

Řešení:

Vzdálenost rovin vyjádříme jako velikost průmětu spojnice dvou libovolných bodů z obou rovin do normálového směru, jako body vezměme počátek (viz úloha na vzdálenost dvou atomových rovin pro kubickou mříž) a například průsečík **a**/*h* a dostaneme

$$d_{hkl} = \frac{\mathbf{a}}{h}\times\frac{\mathbf{n}}{n} = \frac{\mathbf{a}}{h}\times\frac{h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*}{\left|h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*\right|} = \frac{2\pi}{\left|h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*\right|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|}.$$

Úloha 4:

Elementární mřížkové vektory jsou zadány jako

$\mathbf{a} = \mathbf{x}_0$; $\mathbf{b} = \frac{a}{2}\mathbf{x}_0 + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y}_0$; $\mathrm{c} = \frac{a}{2}\mathbf{x}_0 + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{z}_0$ kde $\mathbf{x}_0$; $\mathbf{y}_0$ a $\mathbf{z}_0$ jsou vektory ortonormální báze a a je zadaný mřížkový parametr.

a) Najděte velikosti mřížkových vektorů a vzájemné úhly,

b) nakreslete elementární buňku, najděte všechny osy rotačních symetrií a určete jejich četnosti,

c) spočítejte objem elementární buňky,

d) najděte elementární vektory reciproké mříže,

e) spočítejte objem buňky reciproké mříže.