



УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ДЕПАРТМАН ЗА МАТЕМАТИКУ И
ИНФОРМАТИКУ



Семинарски рад

Тема: Реципрочна решетка

Студент:
Ивана Војновић, 210/06

Ментор:
проф. др Светлана Лукић - Петровић

Садржај

1. Увод.....	3
2. Геометријске особине реципрочне решетке.....	4
2.1. Квадратна мрежа (решетка).....	4
2.2. Правоугаона мрежа (решетка).....	7
2.3. Мрежа чија је елементарна ћелија паралелограм.....	8
2.4. Реципрочна решетка у простору.....	10
3. Дифракција на кристалу и реципрочна решетка.....	12
3.1. Брагов закон.....	12
3.2. Дифракциони услови.....	13
3.3. Векторске особине реципрочне решетке.....	14
4. Литература.....	18

1. Увод

Дифракција светлости је појава "савијања", скретања светлости са праволинијског пута на малим отворима – реда таласне дужине – или оштрим ивицама, при чему се материјална средина кроз коју светлост пролази не мења. Као што на оптичкој решетки долази до дифракције светлости, тако и на кристалној решетки долази до дифракције рендгенских зрака. Дифракција таласа који интерагују са атомима и чије су таласне дужине упоредиве са међуатомским растојањем у кристалима се користи за истраживање структуре кристала.

Када рендгенски зраци падну на кристал, атоми или јони постају нови, секундарни извори зрачења. Тада кажемо да долази до расипања рендгенских зрака. Између расутих зрака долази до интеракције, део таласа се појачава, а део слаби или се међусобно поништава. Управо ова појава представља дифракцију. Постоје два начина за објашњавање дифракције. То су: Брагов закон (Bragg) и Лауеови услови за дифракцију (Laue). Уколико се појам дифракције објашњава помоћу Браговог закона, онда то значи да је дифракција последица интеракције рендгенских зрака са различитим нивозима кристалографских равни.¹ Испоставило се да је корисно да се феномен дифракције разматра као последица интеракције рендгенских зрака са тачкама у простору. Ово се постиже увођењем појма **реципрочне решетке**.

Дакле, да бисмо могли да изучавамо кристалну решетку и њене дифракционе особине морамо да познајемо карактеристике реципрочне решетке. Први научник који је заслужан за векторску анализу реципрочне решетке је Евалд (Ewald), а захваљујући Берналу (Bernal) познати су неки начини њене примене у дифракцији рендгенских зрака.

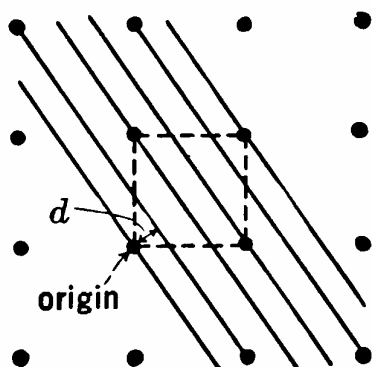
¹ Детаљније о Браговом закону на страни 12.

2. Геометријске особине реципрочне решетке

Уколико нам је дата "директна" кристална решетка, реципрочну решетку² можемо да добијемо на следећи начин: на сваку раван директне решетке конструишемо нормалу и "ограничимо" њену дужину тако да буде једнака реципрочној вредности растојања између дате равни и њој најближе паралелне равни. Прецизније, ако се ради о равни типа (hkl) , онда је дужина "ограничене" нормале једнака реципрочној вредности растојања између две узастопне (hkl) равни. Ако на крајеве сваке ограничене нормале ставимо тачку добићемо скуп тачака који представља кристалну решетку другачију од полазне. Да би се ово доказало корисно је претходно размотрити дводимензионалне решетке. У ту сврху посматраћемо мреже састављене од квадрата, правоугаоника и паралелограма, редом, односно, мреже чије су елементарне ћелије квадрат, правоугаоник и паралелограм..

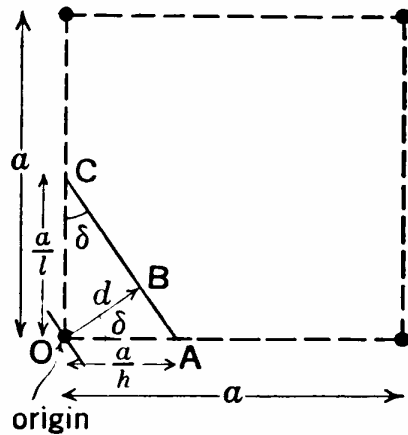
2.1. Квадратна мрежа (решетка)

Основне релације које постоје између директне и реципрочне решетке лако се могу показати у случају квадратне решетке. На слици 1. види се део ове решетке, при чему паралелне праве имају индексе (hl) , односно, на слици (32). Растојање између сваке две суседне праве је једнако и износи d . Ивица јединичне ћелије има дужину a . Једна (hl) права пролази кроз координатни почетак, а следећа, на растојању d , прави на ивицама јединичне ћелије одсечке дужине a/k и a/l . На слици 2. види се увећана јединична ћелија.



Слика 1

² Реципрочна решетка је геометријска конструкција која **не постоји у стварности**, па се за њу често користи и назив имагинарна решетка.



Слика 2

Помоћу Питагорине теореме лако може да се израчуна дужина AC.

$$AC = \sqrt{\left(\frac{a}{h}\right)^2 + \left(\frac{a}{l}\right)^2} = a \sqrt{\frac{1}{h^2} + \frac{1}{l^2}} \quad (1)$$

Због једнаких углова троуглови AOB и ACO су слични, па имамо:

$$\frac{OB}{OA} = \frac{OC}{AC} \quad (2)$$

Из (1) и (2), после сређивања израза добија се:

$$d_{(h)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + l^2}} \quad (3)$$

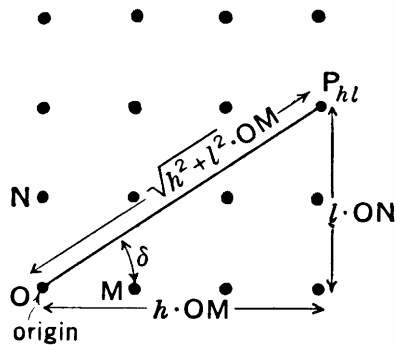
Реципрочну решетку ћемо добити тако што ћемо на сваку нормалу на праву (hl) ставити тачку P_{hl} , при чему је

$$OP_{hl} = \sigma = C \frac{1}{d_{hl}} \quad (4)$$

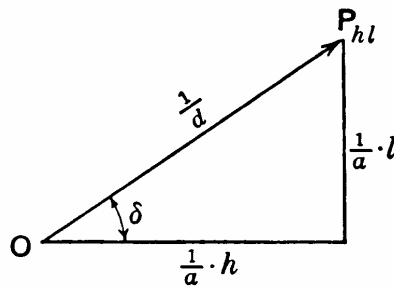
У једнакости (4) C је константа пропорционалности, при чему ћемо сматрати да је $C = 1$. Према томе, из (4) и (3) добијамо:

$$\sigma_{hl} = \frac{1}{a} \sqrt{h^2 + l^2} \quad (5)$$

Када бисмо за све могуће вредности Милерових индекса означили тачке на нормалама, на претходно описан начин, добили бисмо скуп тачака који је представљен на слици 3.



Слика 3



Слика 4

У случају праве чији су индекси $(h0)$, дуж d (слика 1) је нормална на њу и одговарајућа тачка реципрочне решетке се налази на растојању $(1/a) \cdot h$ од координатног почетка, на основу релације (5). Ако је $h=1$, та тачка је на растојању $1/a$ од координатног почетка, што је илустровано на слици 3, где је тачка M тражена тачка. Када h узима вредности $2,3,4,\dots$ одговарајуће тачке реципрочне решетке се налазе на растојањима која су $2,3,4,\dots$ пута већа од растојања $|OM|$. Слично важи и у случају праве чији су индекси $(0l)$. Када је $l=1$, одговарајућа тачка реципрочне решетке је на слици 3 означена са N .

Посматрајмо сада произвољну праву (hl) . Нека угао између нормале на ту праву и праве $p(O,A)$ износи δ (слика 2). Лако је уочити да је:

$$\tan \delta = \frac{a/h}{a/l} = \frac{l}{h}$$

$$\cos \delta = \frac{d}{a/h} = \frac{h/a}{1/d}$$

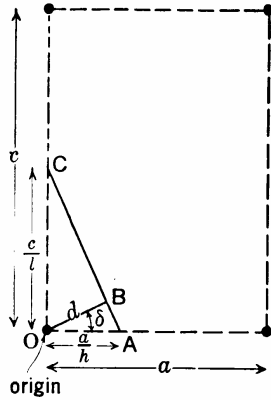
Тачка реципрочне решетке се налази на нормали на праву (hl) на растојању

$$a_{hl} = \frac{1}{a} \sqrt{h^2 + l^2} = \sqrt{\left(\frac{1}{a}h\right)^2 + \left(\frac{1}{a}l\right)^2}$$

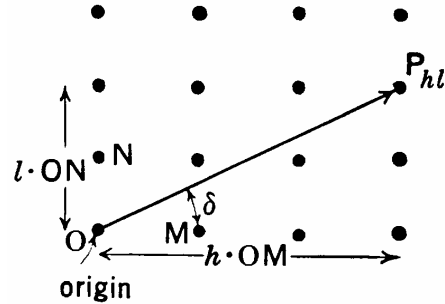
Последња формула може да се посматра и као примена Питагорине теореме на троугао који је дат на слици 4. Дакле, конструкцијом одговарајућег правоуглог троугла добијамо тачку P_{hl} реципрочне решетке, која одговара правој (hl) . Сада можемо да закључимо да скуп тачака реципрочне решетке заиста представља чворове кристалне решетке. Наиме, индекси h и l се односе као цели, узајамно прости бројеви, према другом закону кристалографије. Знамо и да су ови индекси цели бројеви. Због тога све тачке облика P_{hl} добијамо преко одговарајућих правоуглих троуглова чије катете су целобројни умношци реципрочне вредности интензитета основног вектора директне решетке $(1/a)$. Стога добијамо поново решетку чији су мотиви распоређени у теменима квадрата странице $1/a$.

2.2. Правоугаона мрежа (решетка)

Ову решетку можемо да сматрамо уопштењем претходне. Нека су интензитети основних вектора translације \mathbf{a} и \mathbf{c} (слика 5).



Слика 5



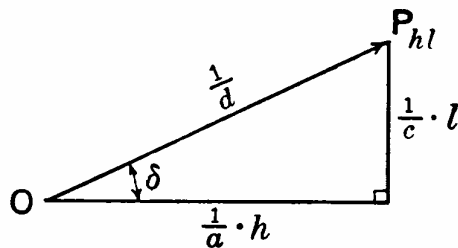
Слика 6

Слично као у претходном случају имамо: $AC = \sqrt{(a/h)^2 + (c/l)^2}$ (6).
Из сличности троуглова AOB, ACO , добијамо:

$$d_{hl} = \frac{ac/hl}{\sqrt{(a/h)^2 + (c/l)^2}} \quad (7),$$

$$\sigma_{hl} = \frac{1}{d_{hl}} = \sqrt{\left(\frac{l}{c}\right)^2 + \left(\frac{h}{a}\right)^2} \quad (8),$$

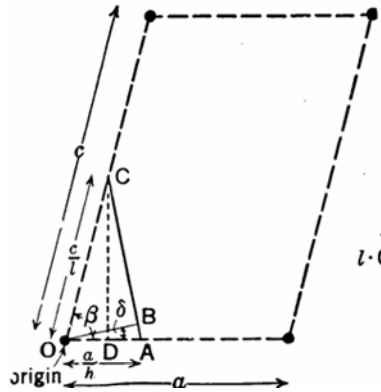
Примењујући резоновање које смо имали у случају квадратне мреже можемо да одредимо положај тачке P_{hl} (слике 6 и 7). У случају реципрочне решетке мотиви су распоређени у теменима правоугаоника чије стране имају дужине $1/a$ и $1/c$, тј, то су интензитети основних вектора translације реципрочне решетке. Видимо да је елементарна ћелија реципрочне решетке поново правоугаоник.



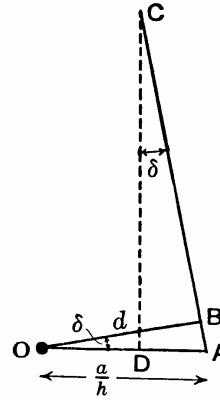
Слика 7

2.3. Мрежа чија је елементарна ћелија паралелограм

Сада ћемо да размотримо најопштији случај кристалне решетке у равни. На слици 8 је приказана елементарна ћелија.



Слика 8



Слика 9

Применом косинусне теореме добијамо:

$$AC = \sqrt{\left(\frac{a}{h}\right)^2 + \left(\frac{c}{l}\right)^2 - 2\frac{ac}{hl}\cos\beta} \quad (9)$$

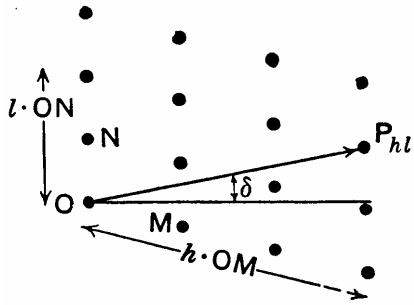
Троуглови AOB и CAD су слични, па важи:

$$\frac{OB}{OA} = \frac{CD}{CA} \quad (10)$$

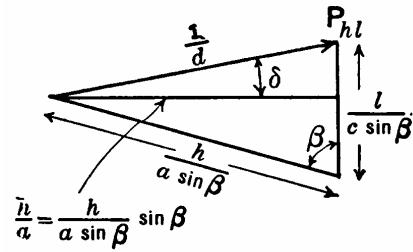
Пошто је $CD = (c/l)\sin\beta$, из претходне две једначине лако се добија:

$$d_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}} = \sqrt{\left(\frac{l}{c\sin\beta}\right)^2 + \left(\frac{h}{a\sin\beta}\right)^2 - 2\frac{hl}{a\sin\beta c\sin\beta}\cos\beta} \quad (11)$$

Графичка интерпретација формуле (11) је дата на слици 11. Дужине $1/(a\sin\beta)$ и $1/(c\sin\beta)$ су дужине јединичних вектора за реципрочну решетку. То се једноставно добија када за (hl) узмемо, редом, вредности (10) и (01) . Ако у оба случаја израчунамо и вредности одговарајућег угла δ , добићемо положаје тачака М и N (слика 10). Помоћу њих може се одредити и положај произвољне тачке P_{hkl} и може се доказати да све такве тачке леже у теменима паралелограма, односно да формирају раванску решетку.



Слика 10



Слика 11

Дакле, реципрочна решетка било које решетке у равни (мреже), је кристална решетка чији мотиви су распоређени у теменима оне геометријске фигуре која одговара распореду мотива у полазној мрежи. При томе, димензије полазне и новодобијене фигуре се разликују, а ни оријентација им није иста. Видели смо и да је назив "реципорчна решетка" оправдан, пошто тачке које смо конструисали заиста образују решетку.

2.4. Реципрочна решетка у простору

Претходна разматрања у вези са решеткама у равни требе да нам олакшају разумевање појма реципрочне решетке у случају тродимензионалне просторне решетке. Већ нам је познато да нам је за конструкцију тачке реципрочне решетке која одговара равни (hkl) потребно да знамо растојање између две узастопне (hkl) равни. Важи:

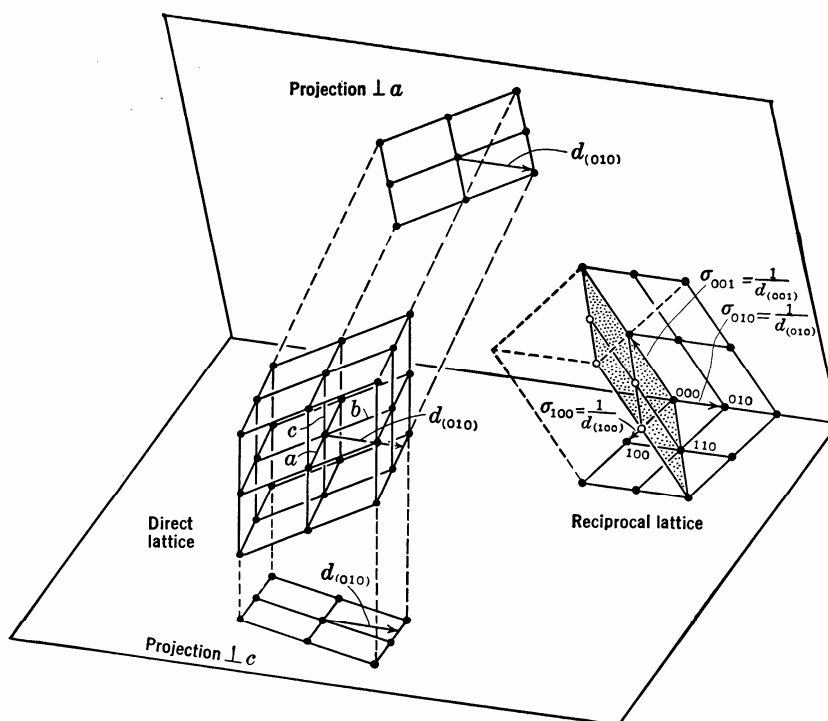
$$d_{hkl} = C \frac{1}{\sigma_{hkl}},$$

при чему је вектор $\vec{\sigma}_{hkl}$ паралелан вектору растојања \vec{d}_{hkl} , који је нормалан на равни (hkl). Поново, C је константа пропорционалности и сматраћемо да је C=1. Потребно је показати да скуп тачака који се формира на овакав начин образује решетку, што ћемо овде изоставити. Доказаћемо две леме које се користе у доказу, а заинтересовани могу више о овоме да прочитају у [1].

* Лема1

Пројекција просторне решетке на равни која је нормална на било који правац решетке је решетка у равни.

Ова лема је јасна ако се зна чињеница да је пројекција правца на равни која је на њега нормална тачка. Дакле, пројекције свих међусобно паралелних правца биће тачке у равни које образују мрежу. Ово је илустровано на слици 12, при чему се може уочити да је тродимензионална решетка пројектована на две различите равни.



Слика 12

* **Лема2**

Ако је решетка у равни формирана на начин који је описан у Леми 1, онда су растојања између две узастопне паралелне праве једнака растојањима између две одговарајуће паралелне, узастопне равни у просторној решетки.

На слици 12 се може видети илустрација ове леме на примеру равни (010). Лема је тачна зато што су одговарајући вектори растојања између равни паралелни са равни на коју се пројектује.

Сматраћемо да су вектори $\vec{a}_{010}, \vec{a}_{100}, \vec{a}_{001}$ елементарни вектори translације реципрочне решетки. Уобичајено је да се интензитети одговарајућих вектора и углова код полазне решетки означе са $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$, а код реципрочне решетки са $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$. На основу претходног важи:

$$a^* = \frac{1}{d(100)}, b^* = \frac{1}{d(010)}, c^* = \frac{1}{d(001)}$$

Пошто је реципрочна решетка реципрочне решетки полазна решетка, важи и:

$$a = \frac{1}{d^*(100)}, b = \frac{1}{d^*(010)}, c = \frac{1}{d^*(001)}$$

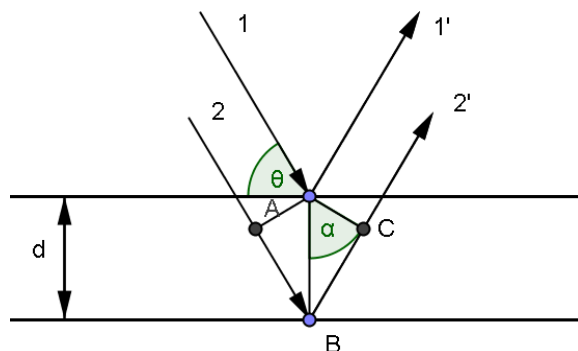
Кад су нам познати основни вектори translације, једноставно можемо да добијемо произвољну тачку реципрочне решетки. Тачка која одговара равни (hkl) одређена је следећим вектором: $\vec{a}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$. Ово следи на основу става да је вектор $h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ нормалан на раван (hkl) директне решетки, као и става по коме је $|\vec{a}_{hkl}| = 1/d_{hkl}$. Да би се ови ставови доказали потребно је одредити везу између основних вектора translације директне и реципрочне решетки, што се разматра у следећем поглављу.

3. Дифракција на кристалу и реципрочна решетка

3.1. Брагов закон

У уводу је већ истакнуто да се за објашњавање феномена дифракције користе Брагов закон и Лауеови услови.

Кроз кристалну решетку је могуће поставити низ еквиливантних равни. Сматраћемо да ове равни делују на рендгенске зраке као полупровидна огледала. То значи да се један део зрака одбија са горње равни, а други део пролази и одбија се са следеће равни или прође кроз цео кристал. На слици 13 су приказана два снопа рендгенских зрака, 1 и 2, који падају на суседне равни. Треба одредити под којим условима ће одбијени зраци, 1' и 2', бити у фази, односно, кад ће доћи до конструктивне интерференције.



Слика 13

Сноп 22' треба да пређе дужи пут од снопа 11' и то за део ABC . Пошто 1' и 2' треба да буду у фази, разлика путева мора бити једнака целобројном умношку таласне дужине, тј. $ABC = n\lambda$. Како је $\theta = \alpha$, добија се да је $AB = BC = d \sin \theta$, односно $ABC = 2d \sin \theta$, па је према томе:

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

Последњи израз је познат као Брагов закон или Брагова константа. Иако се одбијање од сваке равни сматра правилним, само за одређене вредности угла θ ће се зраци одбијени од свих равни сабирати у фази и резултат ће бити снажан дифрактан сноп зрака.

3.2. Дифракциони услови

Појам дифракције можемо да разматрамо и као последицу интеракције рендгенских зрака са чворовима решетке. Претпоставља се да се у сваком чвору решетке налазе идентични тачкасти центри расејавања. Свакој тачки придружујемо одговарајући вектор $\vec{r} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, где су m, n, p цели бројеви. Са $\Delta\vec{k}$ значићемо разлику између "расејаног" таласног вектора и упадног таласног вектора. Да би се образовао јак дифрактовани зрак следеће три једначине морају истовремено да буду задовољене:

$$\vec{a} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi q,$$

$$\vec{b} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi r,$$

$$\vec{c} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi s.$$

Ове једначине се називају **Лауеове једначине** и еквивалентне су са Браговим законом. Оне могу да се реше по вектору $\Delta\vec{k}$, за шта је потребно увести појам реципрочне решетке. Наиме, испоставило се да је реципрчна решетка погодна за разматрање свих проблема који су у вези са таласним кретањима у кристалима.

3.2.1. Векторске особине реципрочне решетке

Нека је $\Delta\vec{k} = q\vec{a}^* + r\vec{b}^* + s\vec{c}^*$, где су $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ вектори које треба да одредимо. Заменом израза за $\Delta\vec{k}$ у Лауеове једначине видимо да је $\Delta\vec{k}$ решење система, ако су следеће релације задовољене:

$$\begin{aligned} \vec{a}^* \cdot \vec{a} &= 2\pi, & \vec{b}^* \cdot \vec{a} &= 0, & \vec{c}^* \cdot \vec{a} &= 0, \\ \vec{a}^* \cdot \vec{b} &= 0, & \vec{b}^* \cdot \vec{b} &= 2\pi, & \vec{c}^* \cdot \vec{b} &= 0, \\ \vec{a}^* \cdot \vec{c} &= 0, & \vec{b}^* \cdot \vec{c} &= 0, & \vec{c}^* \cdot \vec{c} &= 2\pi. \end{aligned}$$

На основу једначина у првој колони закључује се да је вектор \vec{a}^* нормалан на векторе \vec{b}, \vec{c} . Из векторске алгебре је познато да је векторски производ $\vec{b} \times \vec{c}$ нормалан на векторе \vec{b} и \vec{c} . Да би била задовољена и прва једначина у првој колони треба нормирати вектор $\vec{b} \times \vec{c}$. Све претходне једначине су задовољене следећим избором вектора:

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \quad \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \quad \vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

Већ смо увели вектор реципрочне решетке $\vec{\sigma}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$, који одговара равни (hkl). Уочава се да је $\vec{\sigma}_{hkl} \cdot \vec{r} = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}) = 2\pi C$, где је C цео број. Видимо да су Лауеове једначине за дифракцију задовољене ако је $\Delta\vec{k}$ једнако било ком вектору реципрочне решетке. Дакле, дифракциони услов је: $\Delta\vec{k} = \vec{\sigma}_{hkl}$.

Сада, када су нам познати изрази за основне векторе³ translације реципрочне решетке, можемо да изведемо низ њених особина. Да бисмо одредили параметре реципрочне јединичне ћелије за седам кристалографских система посматраћемо произвољну триклиничну ћелију (слика 14).

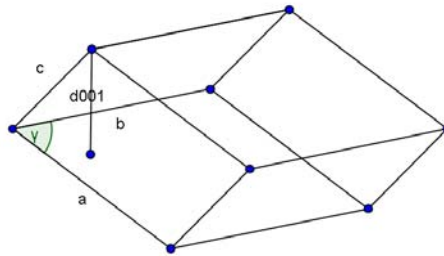
Триклиничну ћелију у директном простору карактеришу три различита угла и три различите периоде, па се аналогно очекује и у реципрочном простору. За одређивање запремине јединичне ћелије користићемо формулу:

³ У даљем тексту ћемо сматрати да је фактор пропорционалности 1, уместо 2π .

$V = abc\sqrt{1 - (\cos\alpha)^2 - (\cos\beta)^2 - (\cos\gamma)^2 + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$. Са a, b, c су означени интензитети основних вектора трансације директне решетке.

Како је израз $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}$ једнак запремини јединичне ћелије, добијамо да интензитети основних вектора трансације реципрочне решетке износе:

$$a^* = \frac{bc \sin \alpha}{V}, b^* = \frac{ac \sin \beta}{V}, c^* = \frac{ab \sin \gamma}{V},$$



Слика 14

Користећи идентитет $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b}(\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c}(\vec{a} \cdot \vec{b})$ и формулу $\cos\gamma^* = \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* / a^* \cdot b^*$ добијамо да важи:

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

Аналогно се изводе и следеће формуле:

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

Помоћу израза за основне векторе трансације реципрочне решетке лако се добија формула која одређује запремину реципрочне јединичне ћелије.

$$V^* = \vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \times \vec{c}^*) = \frac{1}{V}.$$

Ако фактор пропорционалности износи 2π , онда бисмо добили: $V^* = (2\pi)^3/V$

На основу параметара триклиничне реципрочне јединичне ћелије могу се добити и параметри јединичних ћелија свих осталих система. Ови резултати су приказани у Табели 1.

<i>Систем</i>	<i>Параметри јединичне хелије</i>	<i>Параметри реципрочне јединичне хелије</i>
Кубни	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $V = a^3$	$a^* = b^* = c^* = \frac{1}{a}$ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$
Тригонални	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$ $V = a^3 \sqrt{1 + 2(\cos \alpha)^3 - 3(\cos \alpha)^2}$	$a^* = b^* = c^*$ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^*$ $\cos \alpha^* = \frac{\cos \alpha (\cos \alpha - 1)}{(\sin \alpha)^2}$
Тетрагонални	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $V = a^2 c$	$a^* = b^* = \frac{1}{a}, c^* = \frac{1}{c}$ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$
Хексагонални	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ $V = a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}$	$a^* = b^* = \frac{2}{a\sqrt{3}}, c^* = \frac{1}{c}$ $\alpha^* = \beta^* = 90^\circ$ $\gamma^* = 60^\circ$
Орторомбични	$a \neq b \neq c \neq a$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $V = abc$	$a^* = \frac{1}{a}, b^* = \frac{1}{b}, c^* = \frac{1}{c}$ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$
Моноклинични	$a \neq b \neq c \neq a$ $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ $V = abc \sin \beta$	$a^* = \frac{1}{a \sin \beta}, b^* = \frac{1}{b}$ $c^* = \frac{1}{c \sin \beta}$ $\alpha^* = \gamma^*, \beta^* = 180^\circ - \beta$

Табела 1

Показаћемо да је реципрочна решетка Бравеове кубне површински центриране решетки запремински центрирана кубна решетка.

Наиме, познато је да су основни вектори translације површински центриране кубне Бравеове решетки следећи вектори:

$$\vec{r}_1 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j}), \quad \vec{r}_2 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{r}_3 = \frac{a}{2}(\vec{k} + \vec{i}).$$

Помоћу одговарајуће детерминанте можемо да израчунамо запремину ћелије одређене векторима $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$.

$$V = \det \begin{pmatrix} a/2 & a/2 & 0 \\ 0 & a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 & a/2 \end{pmatrix} = \frac{a^3}{4}.$$

Пошто је $\vec{r}_1^* = \vec{r}_2 \times \vec{r}_3 / V$ потребно је још одредити вектор $\vec{r}_2 \times \vec{r}_3$.

$$\vec{r}_2 \times \vec{r}_3 = \det \begin{pmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 0 & a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 & a/2 \end{pmatrix} = \frac{a^2}{4}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

Следи да је

$$\vec{r}_1^* = \frac{1}{a}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}).$$

Слично се добија и

$$\vec{r}_2^* = \frac{1}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{r}_3^* = \frac{1}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}).$$

На исти начин се може показати и да је реципрочна решетка запремински центриране Бравеове кристалне решетки површински центрирана кубна решетка.

Уколико је дат вектор реципрочне решетки $\vec{\rho} = r\vec{a}^* + s\vec{b}^* + t\vec{c}^*$, онда је тај вектор нормалан на фамилију равни директне решетки (hkl) ако је задовољен однос: $r_1 s_1 t_1 = h_1 k_1 l_1$.

Да бисмо ово доказали посматраћемо раван која пролази кроз чворове дефинисане векторима директне решетки $m\vec{a}, n\vec{b}, p\vec{c}$. Ако је вектор $\vec{\rho}$ нормалан на ту раван, онда је он нормалан и на сваки вектор који лежи у тој равни. Пошто су h, k, l Милерови индекси важи $1/m, 1/n, 1/p = h_1 k_1 l_1$. У равни коју посматрамо леже и вектори $\vec{R} = n\vec{b} - m\vec{a}, \vec{P} = p\vec{c} - n\vec{b}, \vec{Q} = m\vec{a} - p\vec{c}$, па је скаларни производ сваког од ових вектора са вектором $\vec{\rho}$ једнак нули. Нека је $\vec{G} = \vec{\rho}$. Из услова $\vec{G} \cdot \vec{R} = \vec{G} \cdot \vec{P} = \vec{G} \cdot \vec{Q} = 0$ добијамо:

$$sn - rm = 0, \quad rm - pt = 0, \quad pt - sn = 0,$$

одакле следи $sn = rm = pt$, па за $s = 1/n, r = 1/m, t = 1/p$ добијамо тражени однос.

4. Литература

- I. M. J. Buerger – “*X - Ray Crystallography*”, New York, John Willey & Sons, Inc., 1958.
- II. Љиљана Карановић, Дејан Полети – “*Рендгенска структурна анализа*”, Завод за уџбенике и наставна средства, Београд, 2003.
- III. Чарлс Кител – “*Увод у физику чврстог стања*”, Савремена администрација, Београд, 1970.
- IV. Драгослав М. Петровић, Светлана Р. Лукић – “*Експериментална физика кондензоване материје*”, Нови Сад, 2000.
- V. Andre Authier – “*The Reciprocal Lattice*”, University College Cardiff Press, Cardiff, Wales, 2001.