

Laboratorium z Krystalografii

2 godz.

**Konstrukcja sieci odwrotnych do dwuwymiarowych sieci rzeczywistych o wybranych parametrach sieciowych.  
Konstrukcja sieci odwrotnych do trójwymiarowych sieci rzeczywistych przy zastosowaniu programu *KRYSI***

**Cel ćwiczenia:** poznanie zasad konstrukcji sieci odwrotnych do dwu- i trójwymiarowych sieci rzeczywistych o wybranych parametrach sieciowych przy zastosowaniu programu *KRYSI*.

**Część teoretyczna:**

Sieć odwrotna jest abstrakcyjnym tworem geometrycznym sprzężonym przestrzennie i wymiarowo z rzeczywistą siecią krystaliczną. Sieć odwrotna odzwierciedla obraz dyfrakcyjny kryształu i stosuje się ją do interpretacji dyfrakcyjnych zdjęć rentgenowskich.

Osie krystalograficzne sieci odwrotnej, jak również jej parametry oznacza się przez dodanie symbolu gwiazdki  $X^*, Y^*, Z^*, a_0^*, b_0^*, c_0^*, \alpha^* \beta^* \gamma^*$

**Sprzężenie przestrzenne sieci rzeczywistej i odwrotnej.**

Sprzężenie przestrzenne sieci rzeczywistej i odwrotnej polega na tym, że jednostkowe wektory translacji sieci odwrotnej są prostopadłe do płaszczyzny utworzonej przez pozostałe dwa wektory translacji sieci krystalicznej (Rys. 1a, 1b, 1c).

Wektor  $a_0^*$  jest prostopadły do wektorów  $b_0$  i  $c_0$

Wektor  $b_0^*$  jest prostopadły do wektorów  $a_0$  i  $c_0$

Wektor  $c_0^*$  jest prostopadły do wektorów  $a_0$  i  $b_0$

Warunek sprzężenia zwany warunkiem prostopadłości podaje kierunek wektora translacji sieci odwrotnej w stosunku do wektora sieci rzeczywistej.

Warunek ten w zapisie wektorowym podaje zależność:

$$\mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{b}_0 = \mathbf{a}_0 \cdot \mathbf{c}_0 = \mathbf{b}_0 \cdot \mathbf{c}_0 = \mathbf{b}_0 \cdot \mathbf{a}_0 = \mathbf{c}_0 \cdot \mathbf{a}_0 = \mathbf{c}_0 \cdot \mathbf{b}_0 = 0$$

Wektory translacji sieci odwrotnej  $\mathbf{a}_0^*, \mathbf{b}_0^*, \mathbf{c}_0^*$  oraz odpowiadające im osie krystalograficzne sieci odwrotnej  $X^*, Y^*, Z^*$  są prostopadłe odpowiednio do płaszczyzn sieci rzeczywistej (100), (010) i (001).

Kierunek w sieci rzeczywistej o symbolu  $[mnp]$  jest zawsze prostopadły do płaszczyzny sieci odwrotnej o tych samych wskaźnikach  $(mnp)^*$ .

### Sprężenie wymiarowe sieci rzeczywistej i odwrotnej.

Sprężenie wymiarowe sieci rzeczywistej i odwrotnej polega na przyjęciu, że długości wektorów translacji sieci odwrotnej są równe odwrotności odległości międzypłaszczyznowych odpowiednich płaszczyzn sieciowych w sieci rzeczywistej.

$$|a_0^*| = \frac{1}{d_{100}} \qquad |b_0^*| = \frac{1}{d_{010}} \qquad |c_0^*| = \frac{1}{d_{001}}$$

Warunek sprzężenia wymiarowego sieci rzeczywistej i odwrotnej można przedstawić za pomocą iloczynu skalarnego wektorów:

$$\mathbf{a}_0^* \cdot \mathbf{a}_0 = \mathbf{b}_0^* \cdot \mathbf{b}_0 = \mathbf{c}_0^* \cdot \mathbf{c}_0 = 1$$

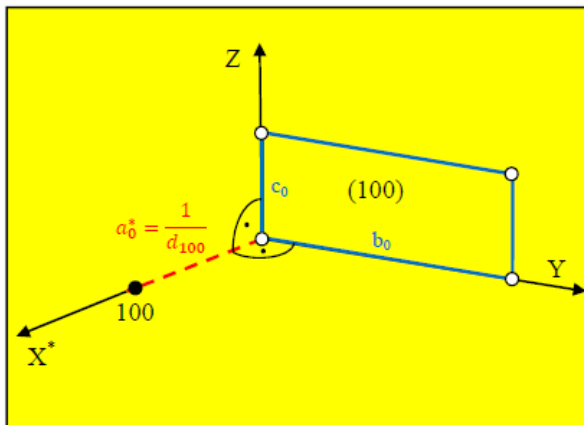
Wektory sieci odwrotnej są powiązane z wektorami komórki elementarnej kryształu za pomocą równań:

$$\mathbf{a}_0^* = (\mathbf{b}_0 \mathbf{c}_0) / V$$

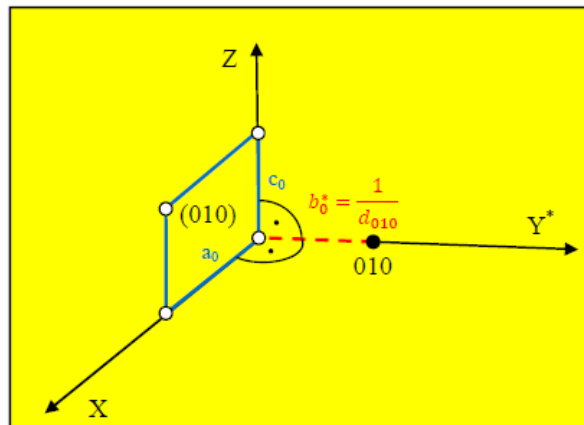
$$\mathbf{b}_0^* = (\mathbf{c}_0 \mathbf{a}_0) / V$$

$$\mathbf{c}_0^* = (\mathbf{a}_0 \mathbf{b}_0) / V$$

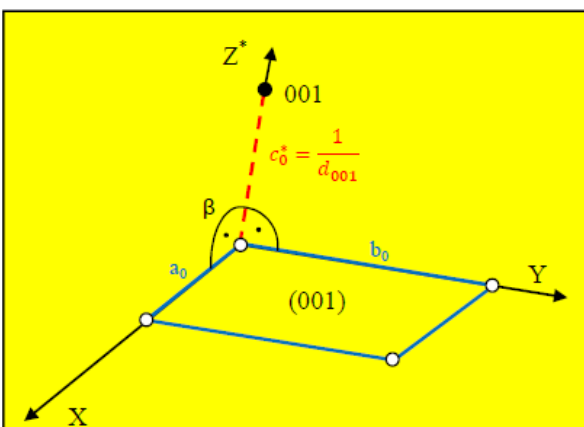
V – objętość komórki elementarnej kryształu



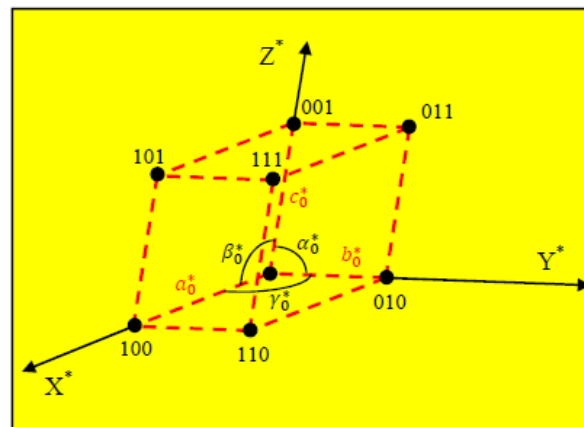
Rys. 1a. Konstrukcja osi X\* i wyznaczenie a<sub>0</sub>\*



Rys. 1b. Konstrukcja osi Y\* i wyznaczenie b<sub>0</sub>\*



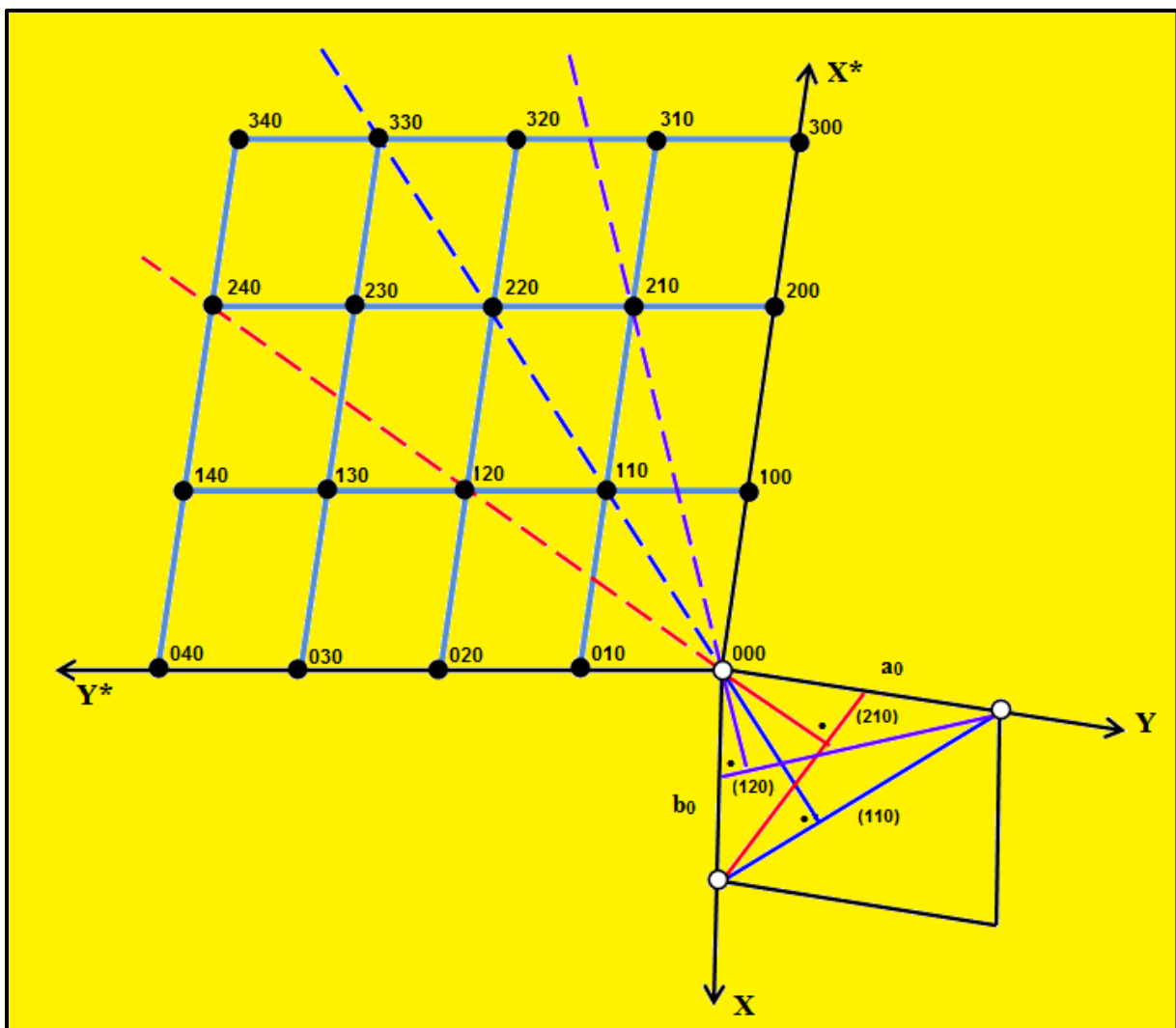
Rys. 1c. Konstrukcja osi Z\* i wyznaczenie c<sub>0</sub>\*



Rys. 1d. Komórka elementarna sieci odwrotnej

### Konstrukcja geometryczna dwuwymiarowej sieci odwrotnej.

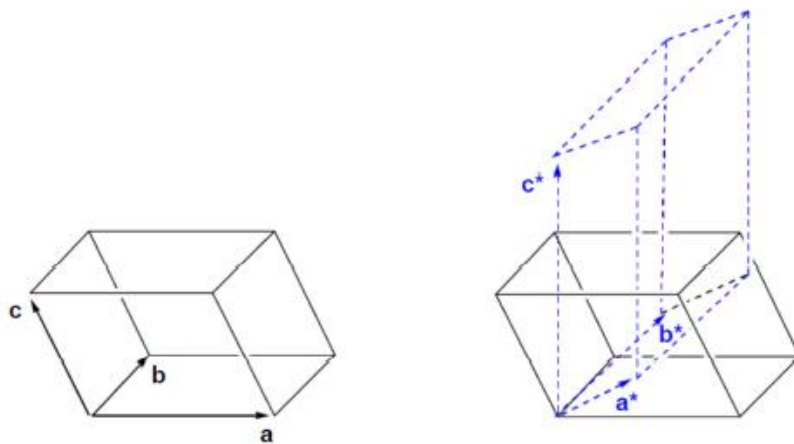
Sieć odwrotną konstruujemy w ten sposób, że wybieramy jej punkt początkowy w jednym z węzłów sieci rzeczywistej. Następnie zgodnie z warunkiem sprzężenia przestrzennego prowadzimy z początku układu normalne prostopadłe do każdej rodziny płaszczyzn sieciowych (hkl) sieci rzeczywistej. Zgodnie z warunkiem sprzężenia wymiarowego wzdłuż normalnych zaznacza się punkty położone w odległościach  $n \cdot 1/d_{hkl}$  od węzła 000 (n – liczba całkowita). Każdy węzeł sieci odwrotnej przedstawia rodzinę płaszczyzn sieciowych sieci rzeczywistej o tych samych wskaźnikach pomnożonych przez rząd refleksu  $n$ . Refleksy wyższych rzędów od tej samej rodziny płaszczyzn sieciowych układają się w równych odstępach na wspólnej prostej. Zasadę geometrycznej konstrukcji płaszczyzny  $X^* Y^*$  sieci odwrotnej do danej dwuwymiarowej sieci rzeczywistej przedstawiono na rysunku 2.



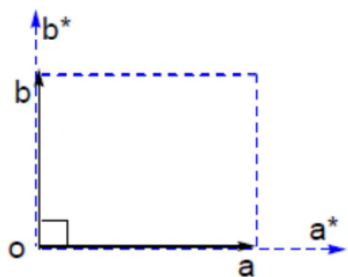
Rys. 2. Konstrukcja dwuwymiarowej sieci odwrotnej

# KONSTRUKCJA SIECI ODWROTNEJ DLA UKŁADU JEDNOSKOŚNEGO I TRÓJSKOŚNEGO

## 1. Układ jednoskośny

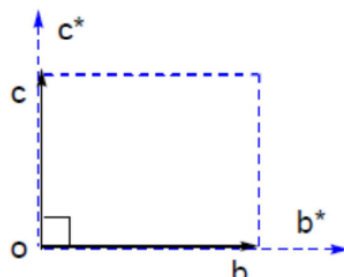


Rys. 3. Schemat komórki elementarnej układu jednoskośnego dla sieci rzeczywistej oraz sieci odwrotnej.



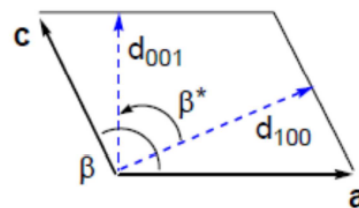
$$\gamma = \gamma^* = 90^\circ$$

$$b \perp a^*, a \perp b^*$$



$$\alpha = \alpha^* = 90^\circ$$

$$b \perp c^*, c \perp b^*$$



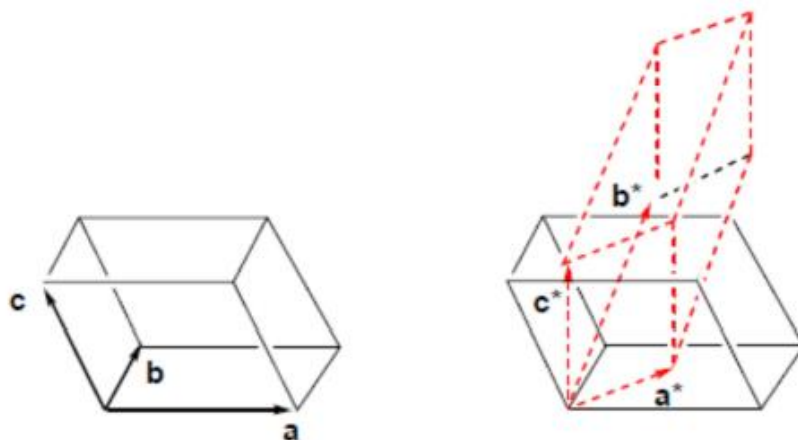
$$d_{100} = a \sin(180 - \beta) = a \sin \beta$$

$$a^* = 1/d_{100} = 1/(a \sin \beta)$$

Tabela 1. Bezpośrednie relacje pomiędzy parametrami sieci rzeczywistej, a parametrami sieci odwrotnej w układzie jednoskośnym.

$a^* = 1/(a \sin \beta)$	$a = 1/(a^* \sin \beta^*)$	$\alpha = \gamma = \alpha^* = \gamma^* = 90^\circ$
$b^* = 1/b$	$b = 1/b^*$	$\beta^* = 180 - \beta$
$c^* = 1/(c \sin \beta)$	$c = 1/(c^* \sin \beta^*)$	$V^* = 1/V = a^* b^* c^* \sin \beta$
		$V = 1/V^* = abc \sin \beta$

## 2. Układ trójskośny



Rys. 4. Schemat komórki elementarnej układu trójskośnego dla sieci rzeczywistej oraz sieci odwrotnej.

Tabela 2. Bezpośrednie relacje pomiędzy parametrami sieci rzeczywistej, a parametrami sieci odwrotnej w układzie trójskośnym

$a^* = (bc \sin\alpha)/V$	$b^* = (ac \sin\beta)/V$	$c^* = (ab \sin\gamma)/V$
$\sin \alpha^* = V/(abc \sin\beta \sin\gamma)$	$\cos \alpha^* = (\cos\beta \cos\gamma - \cos\alpha)/(\sin\beta \sin\gamma)$	
$\sin \beta^* = V/(abc \sin\alpha \sin\gamma)$	$\cos \beta^* = (\cos\alpha \cos\gamma - \cos\beta)/(\sin\alpha \sin\gamma)$	
$\sin \gamma^* = V/(abc \sin\alpha \sin\beta)$	$\cos \gamma^* = (\cos\alpha \cos\beta - \cos\gamma)/(\sin\alpha \sin\beta)$	
$V = 1/V^* = abc(1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha \cos\beta \cos\gamma)^{1/2} =$ $= abc \sin\alpha \sin\beta \sin\gamma^* = abc \sin\alpha \sin\beta^* \sin\gamma = abc \sin\alpha^* \sin\beta \sin\gamma$		

## Ćwiczenie 1.

### Wyznaczanie parametrów dwuwymiarowej sieci odwrotnej za pomocą programu *KRYS1*.

➤ Wejść do programu **KRYS1**.

● Wybrać opcję **Sieć odwrotna**

o Następnie podopcję **Konstrukcja 2D**

1. Wpisać parametry dwuwymiarowej sieci rzeczywistej  $\alpha$ ,  $\beta$  i  $\gamma$ .

Sprawdzić uzyskane w ćwiczeniu 1 obliczenia wartości parametrów dwuwymiarowej sieci odwrotnej.

2. Wpisać parametry dwuwymiarowej sieci rzeczywistej  $\alpha$ ,  $\beta$  i  $\gamma$ :

- wartości parametrów  $\alpha$ ,  $\beta$  z przedziału  $\langle 0.5; 2 \rangle$
- wartości kąta  $\gamma$  z zakresu  $\langle 50^\circ; 130^\circ \rangle$

Naciskając klawisz ENTER przeanalizować kolejne etapy konstrukcji sieci odwrotnej.

## Ćwiczenie 2.

### Geometryczne sprzężenie sieci rzeczywistej i związanej z nią sieci odwrotnej.

➤ Wejść do programu **KRYS1**.

● Wybrać opcję **Sieć odwrotna**

o Następnie podopcję **Sprzężenie**

2. Znaleźć parametry sieci dwuwymiarowej, przy których sieć rzeczywista i odwrotna są identyczne.

3. Zdefiniuj wpływ zmiany parametrów sieci rzeczywistej na wartości parametrów sieci odwrotnej.

## Ćwiczenie 3.

### Konstrukcja sieci odwrotnych do trójwymiarowych sieci rzeczywistych przy zastosowaniu programu *KRYS1*.

➤ Wejść do programu **KRYS1**

● Wybrać opcję **Sieć odwrotna**

o Następnie podopcję **Konstrukcja 3D**

Wybrać układ krystalograficzny i przeanalizować kolejne etapy konstrukcji trójwymiarowej sieci odwrotnej. Ćwiczenie powtórzyć dla wszystkich układów krystalograficznych przedstawionych w programie.

Korzystając z programu *KRYSI* rozwiązać **zadania o numerach 16, 18, 20, 22** znajdujące się na stronie internetowej Olimpiady Krystalograficznej 2016

<http://www.komkryst.pan.pl/index.php/en/olimpiada-2016>

## Zadania dodatkowe

### Zadanie 1.

#### Konstrukcja dwuwymiarowej sieci odwrotnej. Obliczanie parametrów sieci odwrotnej.

Korzystając z warunków sprzężenia przestrzennego i sprzężenia wymiarowego wykonać konstrukcję dwuwymiarowej sieci odwrotnej. Przeprowadzić obliczenia parametrów dwuwymiarowej sieci odwrotnej. Parametry dwuwymiarowej sieci rzeczywistej wynoszą:

$$a = 2 \text{ \AA}; b = 4 \text{ \AA}; \gamma = 60^\circ;$$

Przedstawić konstrukcję dwuwymiarowej sieci odwrotnej na papierze milimetrowym. Dołączyć przeprowadzone obliczenia parametrów sieci.

### Zadanie 2

Sprawdzić graficznie i analitycznie, jakie węzły sieci odwrotnej o parametrach  $a_0^* = 0.4 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $b_0^* = 0.2 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $\gamma^* = 90^\circ$  będą mogły brać udział w dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego o długości fali  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ . Przyjąć, że monokryształ obraca się wokół osi prostopadłej do płaszczyzny rysunku.

### Zadanie 3.

Na płaszczyznę sieci odwrotnej  $a_0^* = 0.6 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $b_0^* = 0.4 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $\gamma^* = 90^\circ$  pada wiązka promieniowania o długości fali  $\lambda = 0.67 \text{ \AA}$ , zgodnie z kierunkiem osi  $X^*$ . Monokryształ jest nieruchomy. Węzeł 130 znajduje się na sferze Ewalda. Znaleźć graficznie i analitycznie kąt ugięcia promienia dyfrakcyjnego na tym węźle.

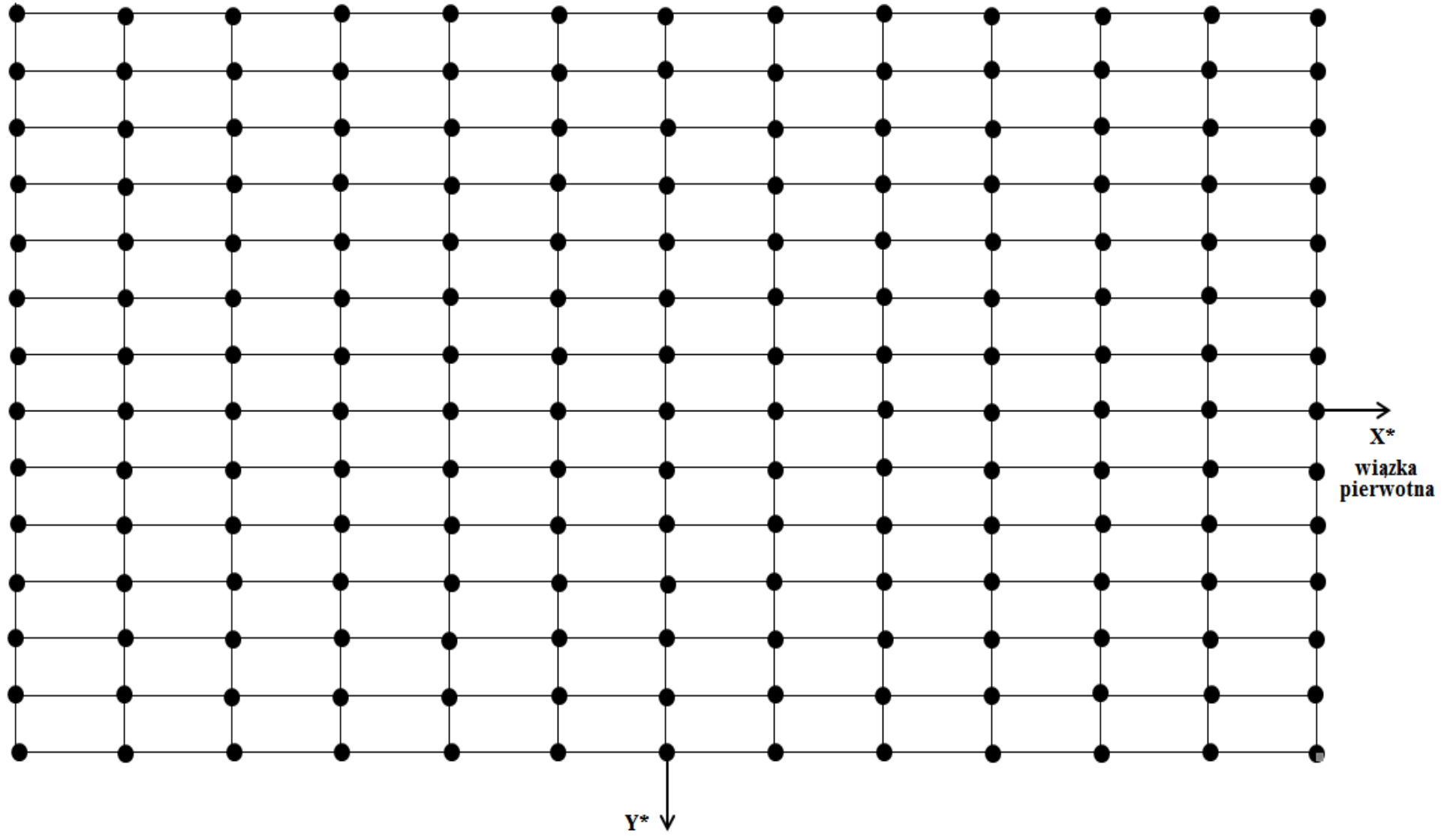
### Zadanie 4.

Na dwuwymiarową sieć odwrotną  $a_0^* = b_0^* = 0.2 \text{ \AA}^{-1}$  i  $\gamma^* = 90^\circ$  pada wiązka promieni równoległa do osi  $X^*$ . Powstały promień dyfrakcyjny dla węzła o symbolu 220 tworzy kąt  $\theta = 45^\circ$ . Wykreślić sferę Ewalda dla tego przypadku dyfrakcji oraz obliczyć długość fali padającego promieniowania.

## Literatura:

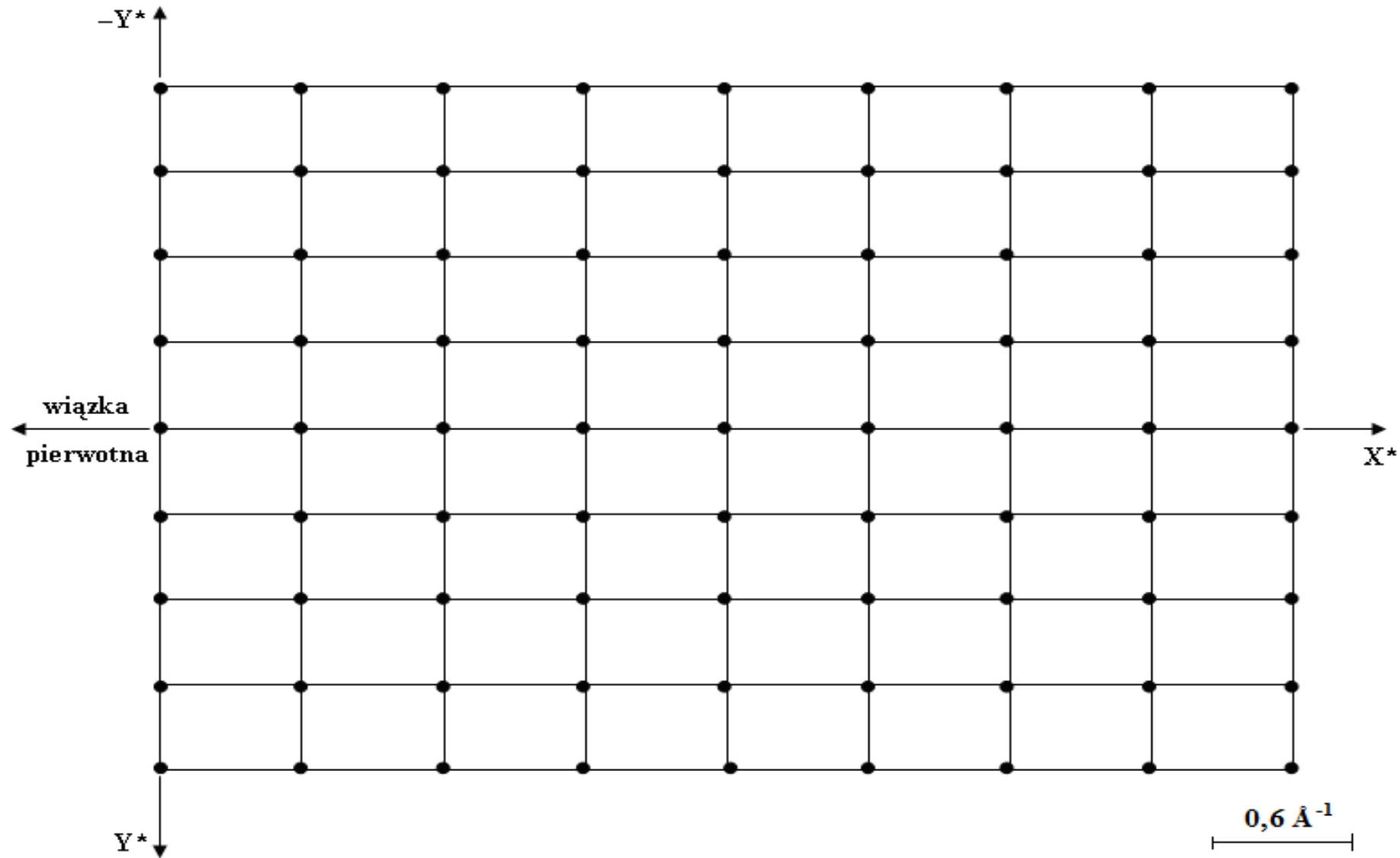
1. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż i M. Surowiec, *Krystalografia. Podręcznik wspomagany komputerowo*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2001.
2. Z. Kosturkiewicz, *Metody krystalografii*, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2004.
3. Z. Trzaska-Durski i H. Trzaska-Durska, *Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1994.

Zadanie 2





Zadanie 3



Zadanie 4.

