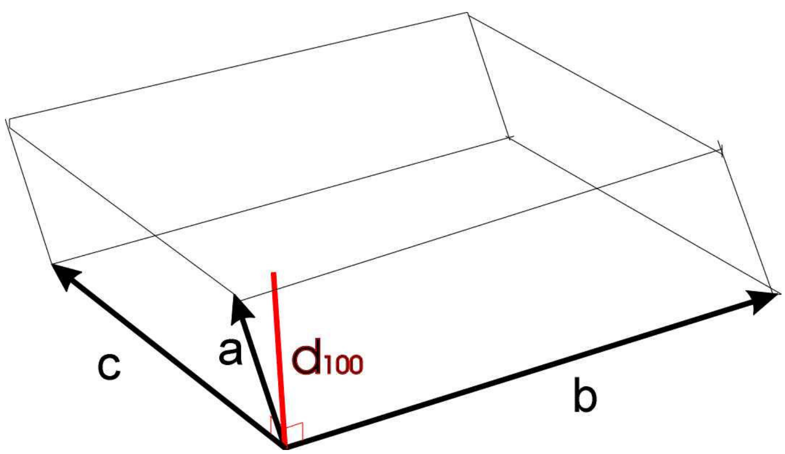
RETÍCULO RECÍPROCO

A partir del retículo definido anteriormente, en el que como cada nudo corresponde a un motivo o llamaremos **retículo directo**, es posible definir otro retículo (que llamaremos **recíproco**) en el cual los tres vectores fundamentales son:

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

por tanto, cualquier vector de este retículo se expresa como

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



Si se analizan sus módulos (por ejemplo en el caso del *a**)

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

el numerador representa un vector perpendicular a *b* y *c,* el modulo del cual es el área del paralelogramo definido por *b* y *c*, dado que

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

mientras que el denominador es el volumen de la celda fundamental del retículo directo definida por *a, b* y *c* (Vc). Por tanto, el modulo de a* vale

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

y como el volumen es igual al área del paralelogramo definido por *c* y *b*, por la altura - que es el espaciado reticular de los planos definidos por *b* y *c*, es decir los (100) - , se puede escribir

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

igualmente, se puede deducir que $|b^*| = \dfrac{1}{d_{010}}$ y $|c^*| = \dfrac{1}{d_{001}}$

De las anteriores expresiones que definen los vectores fundamentales a*, b* y c* se puede deducir

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

dado que si se multiplica por *a* los dos términos de la definición de *a**, queda

$$a \cdot a^* = \frac{a \cdot (b \times c)}{a \times b \cdot c} = \frac{V_c}{V_c} = 1, \qquad \text{y igualmente para } b^* \text{ y } c^*.$$

También, a partir de las definiciones de los vectores a*, b* y c* se deduce que

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

ya que el vector *a** es perpendicular a *b* y *c*, *b** lo es a *a* y *c*, y *c** a *a* y *b*.

El retículo recíproco tiene dos propiedades fundamentales:

a) un vector r*(hkl) del retículo recíproco es perpendicular al plano (hkl) del retículo directo.

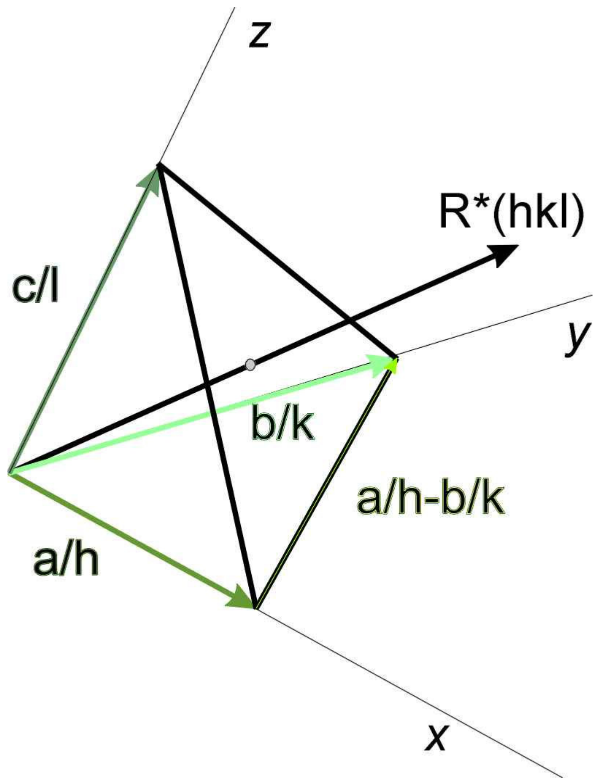
b) el modulo del vector r*(hkl) es igual al inverso del espaciado reticular de los planos (hkl) del retículo directo.

a) El plano (hkl) más próximo al origen corta los ejes *x, y* y *z* a a/h, b/k, c/l, respectivamente, por tanto el vector $\left(a/h - b/k\right)$ está contenido en el plano (hkl), y si es así, el producto vectorial de ambos deberá ser nulo:

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

desarrollando la expresión:

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



considerando que algunos de los términos se anulan porque a^* es perpendicular a b y c, etc., queda

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

por tanto r*(hkl) es perpendicular a $\left(a/h - b/k\right)$

Igualmente se puede demostrar que r*(hkl) es perpendicular a cualquiera de los otros vectores contenidos en el plano (hkl): $\left(c/l - b/k\right)$ o $\left(a/h - c/l\right)$, y por tanto es perpendicular a (hkl).

b) Si **n** es un vector unitario perpendicular al plano (hkl), la distancia entre planos (el espaciado reticular d(khl)) será

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

y como que $(a \cdot \cos\varphi) = |\vec{a}| \cdot |\vec{n}| \cdot \cos\varphi = \vec{a} \cdot \vec{n}$, la anterior ecuación se puede escribir como

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

el vector unitario n equivalente al vector r*(hkl) dividido por su modulo,

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

y por tanto

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

el producto $\vec{a}/h \cdot r^*_{hkl}$ vale la unidad, y por tanto

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

Porqué el segundo y tercer términos se anulan y el primero vale uno.

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

Es fácil demostrar, además, que *el retículo recíproco del retículo recíproco es el retículo directo*

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

Si se multiplicara por a·a*=1 el segundo termino de la expresión de los vectores fundamentales (a*)*,

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

y por tanto, $(a^*)^* = a$; $(b^*)^* = b$; $(c^*)^* = c$

De todo lo que se ha deducido hasta ahora se puede concluir que **los vectores del retículo recíproco representan familias de planos del retículo directo, de tal manera que cada vector r*(hkl) es perpendicular a (hkl) i su modulo es inversamente proporcional al espaciado reticular de esta familia de planos**.

Consecuentemente, es posible calcular el espaciado reticular de una familia de planos (hkl) a partir de los vectores del retículo recíproco:

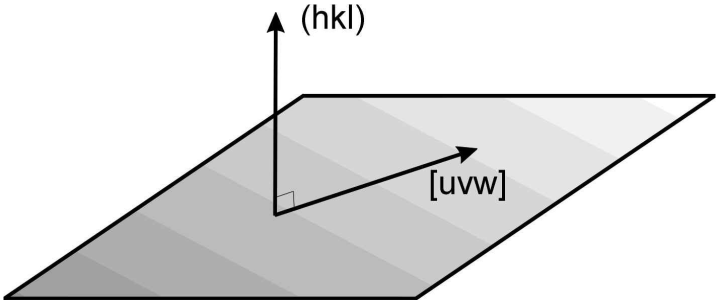
$$r^*_{hkl} \cdot r^*_{hkl} = \left|r^*_{hkl}\right| \cdot \left|r^*_{hkl}\right| \cdot \cos 0^\circ = \frac{1}{d^2_{hkl}}$$

donde se deduce que

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

RELACIONES ENTRE FILAS Y PLANOS RETICULARES

A) La condición para que una fila reticular [uvw] esté incluida en un plano reticular (hkl) es



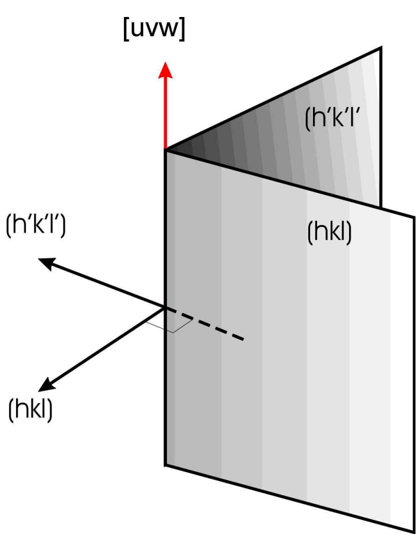
$$hu + kv + lw = 0$$

De acuerdo con la figura adjunta, el vector r*(hkl) del retículo recíproco es perpendicular al plano (hkl) y por tanto, también lo es al vector [uvw] del retículo directo que representa la fila reticular, por tanto, su producto escalar será cero:

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

desarrollando el producto de los dos polinomios,

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



donde $a*\cdot b = a*\cdot c = b*\cdot c = 0$; y
$a*\cdot a = b*\cdot b = c*\cdot c = 1$

Y si los dos vectores son perpendiculares, el resultado ha de ser cero.

B) Para calcular la fila reticular en la cual se intersecan dos planos reticulares (hkl) y (h'k'l'), se puede recorrer al producto vectorial de los dos vectores del retículo recíproco que representan estos planos, tal como se muestra en la figura

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

desarrollando el producto

$$\left(ha^* + kb^* + lc^*\right)\times\left(h'a^* + k'b^* + l'c^*\right)$$, resulta

$$\begin{aligned} & hh'(a^*\times a^*) + hk'(a^*\times b^*) + hl'(a^*\times c^*) + \\ & \quad + kh'(b^*\times a^*) + kk'(b^*\times b^*) + kl'(b^*\times c^*) + \\ & \qquad + lh'(c^*\times a^*) + lk'(c^*\times b^*) + ll'(c^*\times c^*) \end{aligned}$$

donde los productos vectoriales de un vector por si mismo, se anulan:

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

y para el resto de términos, hay que considerar las definiciones que los vectores *a, b* y *c* se pueden expresar en función de los vectores fundamentales del retículo recíproco

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

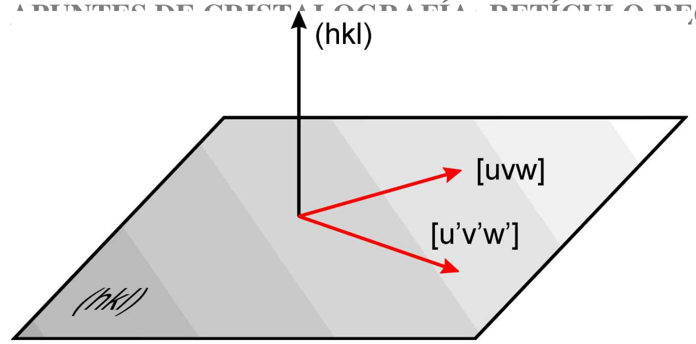
a partir de las cuales, los productos vectoriales entre vectores fundamentales *a*, b** y *c**, se pueden expresar en función de los del retículo directo, y el anterior producto queda

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

y dividiendo por el factor común V_c^* quedan los coeficientes de un vector del retículo directo

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

Este vector equivale a la solución del siguiente determinante



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

C) De manera similar al caso anterior, se puede calcular cual es el plano reticular definido por dos filas

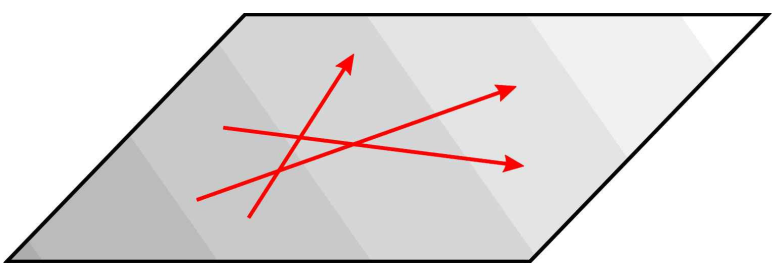
Haciendo el producto vectorial de [uvw] por [u'v'w'] se obtiene un vector perpendicular a las dos filas, y por tanto al plano que forman, que expresado en función de los vectores fundamentales del retículo recíproco, sus coeficientes serán los índices de Miller de este plano.

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

que equivale a la solución del determinante

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

(Se sugiere que el estudiante lo deduzca por su cuenta)



D) De manera análoga, se puede plantear si tres filas reticulares son coplanarias. En este caso su producto mixto equivale al volumen del paralelepípedo que forman, y si son coplanarias, este es cero, por tanto

$$[u_1v_1w_1]\cdot[u_2v_2w_2]\times[u_3v_3w_3] = \begin{pmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{pmatrix} = 0$$