1 Primera introducció a la xarxa recíproca.

Tres punts P, P' i P'' d'una xarxa $P = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$ que no estiguen alineats defineixen una plànol π sobre el que hi ha una subxarxa bidimensional Q. Anomenem m_i, m_i', m_i'' amb $i = 1, 2, 3$ a les coordenades dels punts. Aquest punts són els vèrtex d'un triangle. Triem els punts de manera que aquest triangle no continga cap punt de xarxa al seu interior. En tal cas els vectors $P' - P$ i $P'' - P$ són base de la subxarxa Q,

$$Q = \alpha_1(P' - P) + \alpha_2(P'' - P), \quad \alpha_1, \alpha_2 \in Z. \tag{1}$$

Si substituïm P, P' i P'' en termes de $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ és immediat comprovar que

$$Q = q_1\mathbf{a}_1 + q_2\mathbf{a}_2 + q_3\mathbf{a}_3, \quad q_i(\alpha_1, \alpha_2) \in Z, \ i = 1, 2, 3. \tag{2}$$

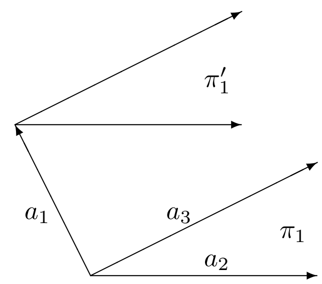
Els valors enters q_i, $i = 1, 2, 3$ corresponen als punts de tall del planol π amb els eixos definits per $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$. Aleshores, el índex de Miller del plànol π seran proporcionals a les inverses d'aquests números.

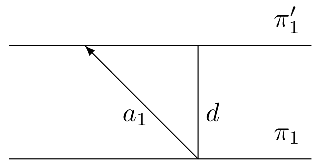
Entre totes les infinites subxarxes 2D hi ha tres que podem anomenar *naturals*, i són aquelles que podem construir amb els elements de la base agafats de dos en dos,

$$\begin{aligned} P_1 &= m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 & (3)\\ P_2 &= m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3 & (4)\\ P_3 &= m_3\mathbf{a}_3 + m_1\mathbf{a}_1 & (5) \end{aligned}$$

Cadascuna està sobre un plànol π_i definit pel vector unitari perpendicular u_i (en realitat aquest vector defineix una família infinita de planols paralels).

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3/|\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3| & (6)\\ \mathbf{u}_2 &= \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_3/|\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1| & (7)\\ \mathbf{u}_3 &= \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2/|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| & (8) \end{aligned}$$





La distància entre dues xarxes 2D consecutives la podem calcular per la distància entre els correspo- nents planols: $d = a_i \cdot \mathbf{u}_i$. Si renormalitzaem els vectors $\mathbf{u}_i$ la distància entre xarxes consecutives podem fer-les totes iguals a 1 (ó 2π, que serà la normalització que adoptarem). Aleshores definim,

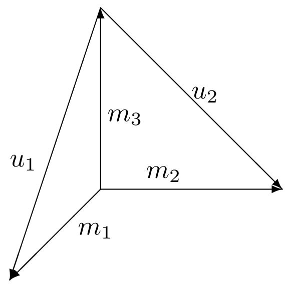
$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1^* &= 2\pi\ \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3/\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) & (9)\\ \mathbf{a}_2^* &= 2\pi\ \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_3/\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) & (10)\\ \mathbf{a}_3^* &= 2\pi\ \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2/\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) & (11) \end{aligned}$$

que anomenem *base de la xarxa recíproca.*Aquesta base defineix els planols on hi ha les tres subxarxes 2D naturals i normalitzen la distància entre dos xarxes consecutives a 2π, si la calculem mitjançant $d = \mathbf{a}_i^* \cdot \mathbf{a}_i$.

En termes d'aquesta base, el vector que defineix el planol que conté una subxarxa qualsevol presenta coordenades proporcionals als índex de Miller.

En efecte, la xarxa que talla els exios en (m_1, m_2, m_3) (vegeu figura) està situada sobre un plànol definit per,

$$\begin{aligned} w &= \mathbf{u}_1 \times \mathbf{u}_2 = (m_3\mathbf{a}_3 - m_1\mathbf{a}_1) \times (m_3\mathbf{a}_3 - m_2\mathbf{a}_2) \\ &= -m_2 m_3(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_2) - m_1 m_3(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_3) + m_1 m_2(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2). \end{aligned} \tag{12}$$



Si anomenem $V = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)/2\pi$ tenim

$$\begin{aligned} w &= m_2 m_3\, V\, \mathbf{a}_1^* + m_1 m_3\, V\, \mathbf{a}_2^* + m_1 m_2\, V\, \mathbf{a}_3^* \\ &= m_1 m_2 m_3\, V\, \left[\frac{1}{m_1}\mathbf{a}_1^* + \frac{1}{m_2}\mathbf{a}_2^* + \frac{1}{m_3}\mathbf{a}_3^* \right]. \end{aligned} \tag{13}$$

El significat més profund de xarxa recíproca el veurem però en parlar de difracció i en estudiar teoria de bandes.