



Lezione n. 5

Diffrazione X e reticolo reciproco

Fisica dei Semiconduttori

Prof. Mara Bruzzi

<http://www.de.unifi.it/Fisica/Bruzzi/fss.html>

Posizione ed orientamento di un vettore nel reticolo cristallino

Vogliamo descrivere un vettore all'interno di un reticolo cristallino.

Sia ad esempio:

$$A = [\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}]$$

$$\underline{AB} = \underline{AO} - \underline{BO} \rightarrow$$

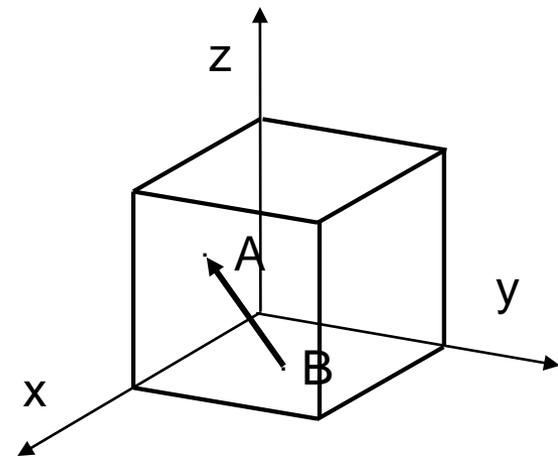
$$B = [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0]$$

$$\underline{AB} = [\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}] - [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0] = [0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$$

Se moltiplico le coordinate del vettore \underline{AB} per un numero intero positivo in modo da avere in parentesi solo numeri interi ottengo un vettore che ha stesso verso e stessa direzione di \underline{AB} :

$$\underline{p} = m \cdot \underline{AB} = 2 [0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] = [0, -1, 1]$$

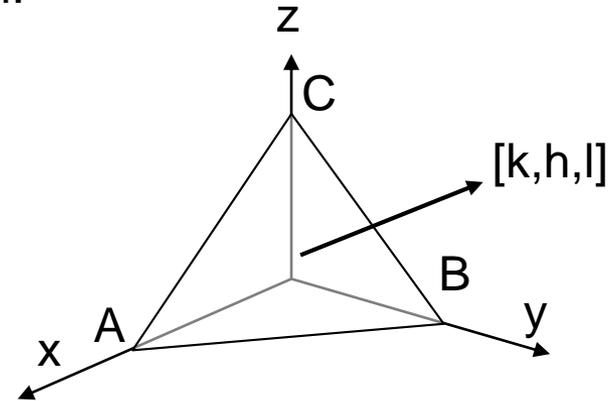
In generale, **la direzione ed il verso di un vettore nel reticolo cristallino si indicano mediante terne di numeri interi**. Il numero negativo viene indicato con una sbarra in alto. La direzione ed il verso di \underline{AB} viene quindi indicato con:
 $[0, \bar{1}, 1]$



Descrizione dell'orientamento dei piani cristallini

Un piano del cristallo è determinato da 3 punti qualsiasi non allineati. Se ciascuno dei tre punti sta su un asse cristallografico il piano può essere individuato dalla posizione di questi punti sugli assi.

Se un piano incontra i tre assi cristallografici nei tre nodi A $[m_1, 0, 0]$, B $[0, m_2, 0]$ e C $[0, 0, m_3]$, gli indici (m_1, m_2, m_3) forniscono l'orientazione del piano.



L'orientazione del piano nello spazio viene però comunemente descritta in geometria utilizzando un vettore normale al piano stesso.

Le coordinate di tale vettore $[h, k, l]$, espresse in numeri interi come descritto nella slide precedente, vengono chiamate **indici di Miller**.

Indici di Miller

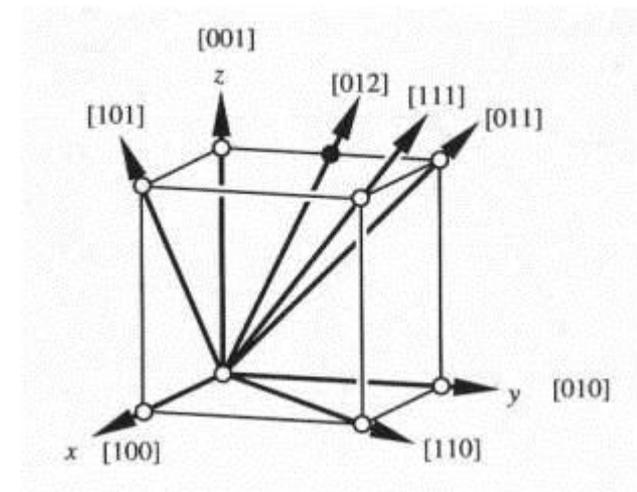
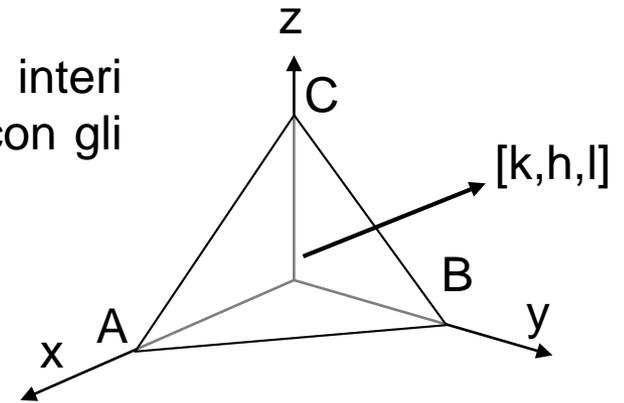
Gli indici di Miller del piano sono numeri interi inversamente proporzionali alle intercette del piano con gli assi, cioè tali che:

$$h : k : l = m_1^{-1} : m_2^{-1} : m_3^{-1}$$

Se $m_i = \infty$ il corrispondente indice di Miller è 0.

Il simbolo (hkl) viene usato per definire un numero infinito di piani paralleli tra loro equidistanti.

La direzione del vettore perpendicolare a tali piani viene indicata con [hkl].



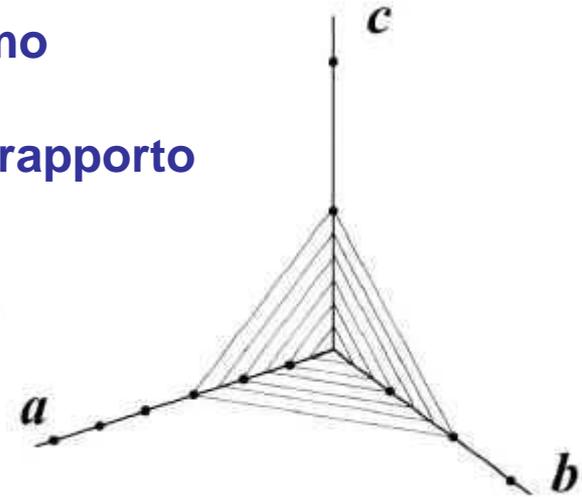
Esempio

3,2,1 \longrightarrow 1/3 1/2 1 \longrightarrow riduciamo

ai più 3 piccoli valori interi che mantengano lo stesso rapporto

\longrightarrow 2, 3, 6

famiglia di piani (2 3 6)



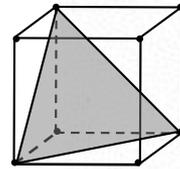
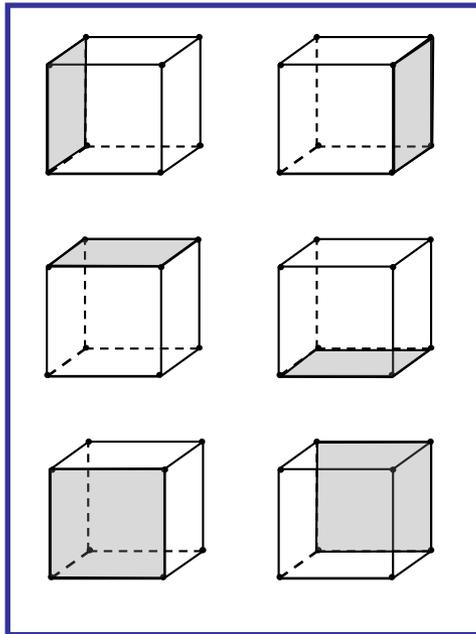
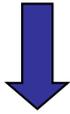
In generale: i piani della famiglia (hkl) dividono i lati della cella elementare: **a** in h parti uguali, **b** in k parti uguali e **c** in l parti uguali. L'equazione della famiglia di piani è

$$h(x/a) + k(y/b) + l(z/c) = n$$

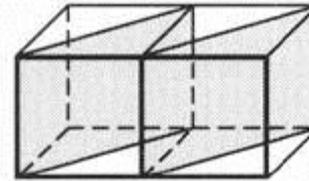
Gli indici di Miller (hkl) specificano l'orientazione del piano ed n la sua posizione rispetto all'origine.

Esempi di orientazione dei piani nel reticolo cubico

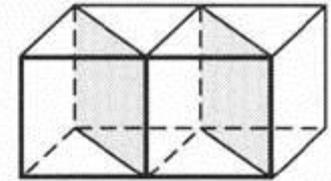
Una famiglia di piani equivalenti per simmetria è rappresentata con le parentesi $\{ \}$. Così, le sei facce di un cubo possono essere indicate con $\{100\}$.



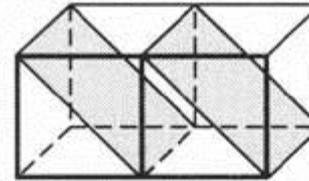
(111)



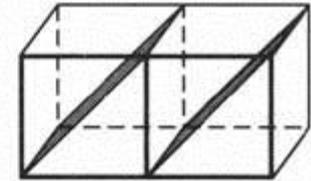
(110)



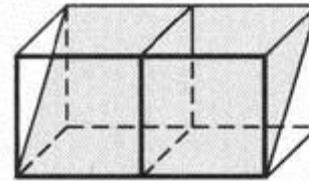
$(\bar{1}10)$



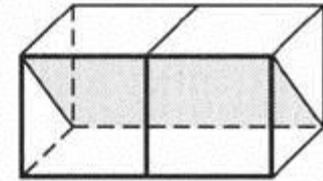
(011)



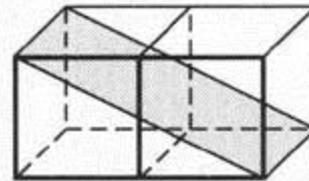
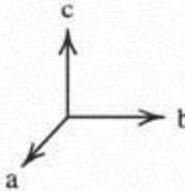
$(0\bar{1}1)$



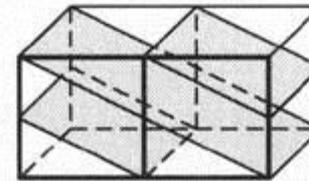
(101)



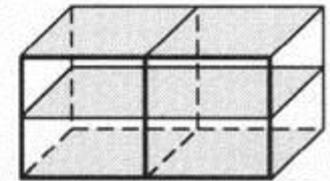
$(\bar{1}01)$



(012)



(012)



(002)

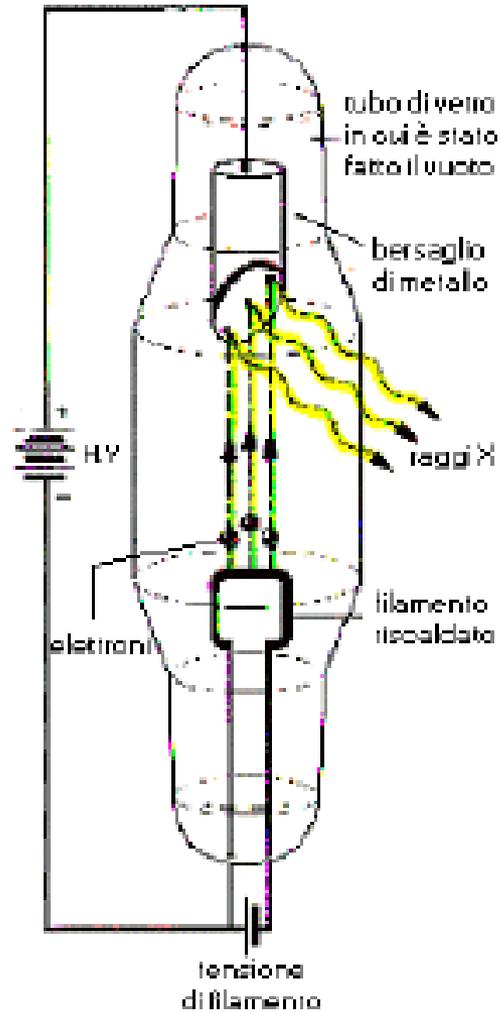
Diffrazione nei Cristalli

E' possibile esplorare la **struttura microscopica dei cristalli utilizzando delle sonde** (raggi X, neutroni, elettroni etc.). Dalle figure di diffrazione è possibile individuare la simmetria del cristallo.

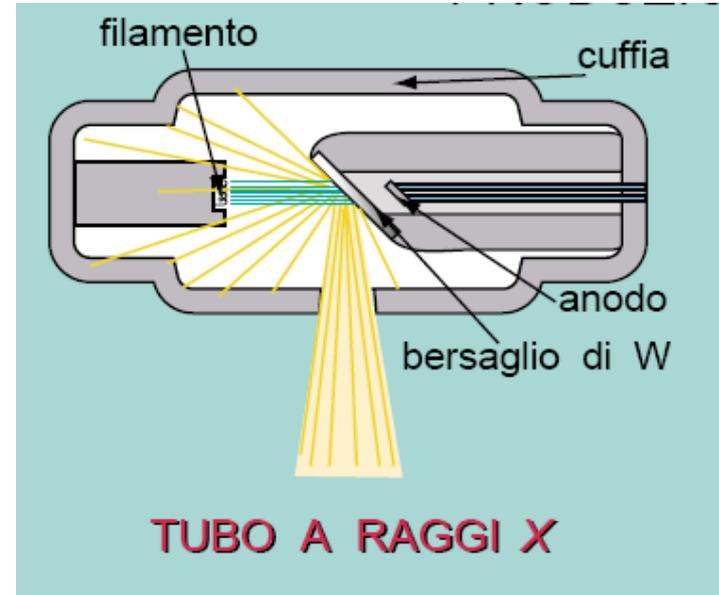
La teoria della diffrazione di raggi X da monocristalli si è sviluppata agli inizi del XX secolo, ossia pochi anni dopo la scoperta delle radiazioni, al fine di spiegare le figure di diffrazione generate da reticoli cristallini irradiati da radiazioni X. Si fonda in parte sulla fisica della diffrazione di onde luminose da reticoli di fenditure e sulla teoria della riflessione "semplice".

La teoria moderna è principalmente dovuta a scienziati quali Laue (1912), Ewald (1913), Bragg (1915-1935), ciascuno dei quali partì da un differente approccio per spiegare il fenomeno.

Produzione di raggi X



Tubo di raggi X



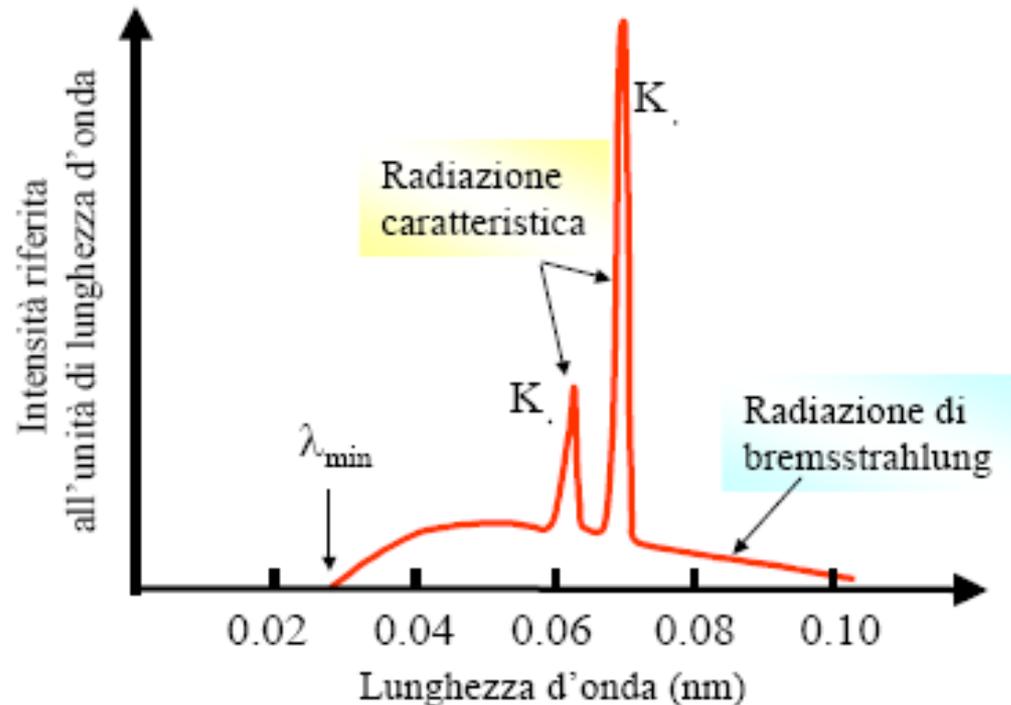
Emissione di Radiazione X

Si ha emissione di raggi X ogniqualvolta un fascio elettronico di sufficiente energia colpisce un materiale.

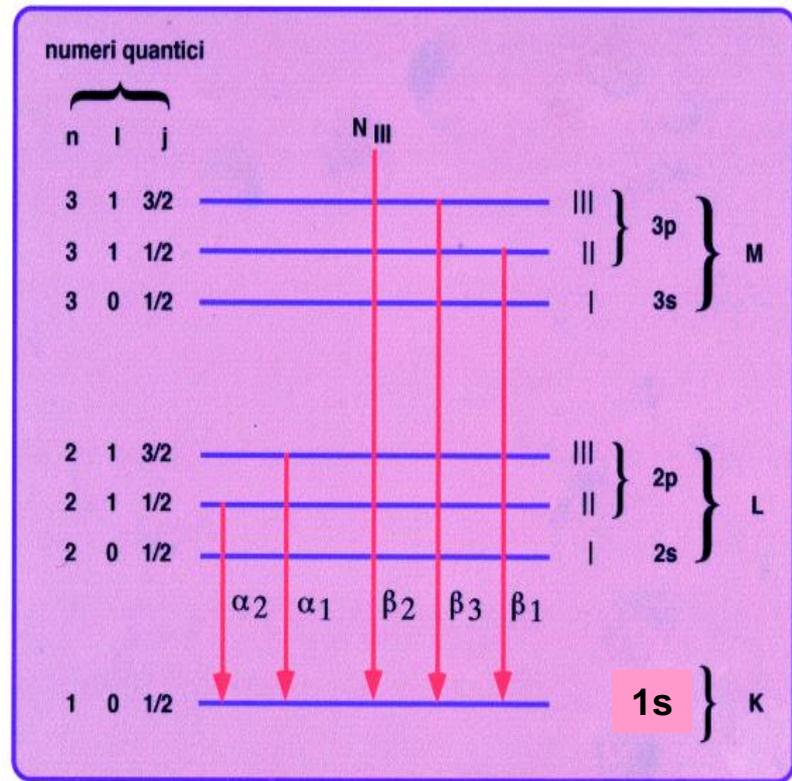
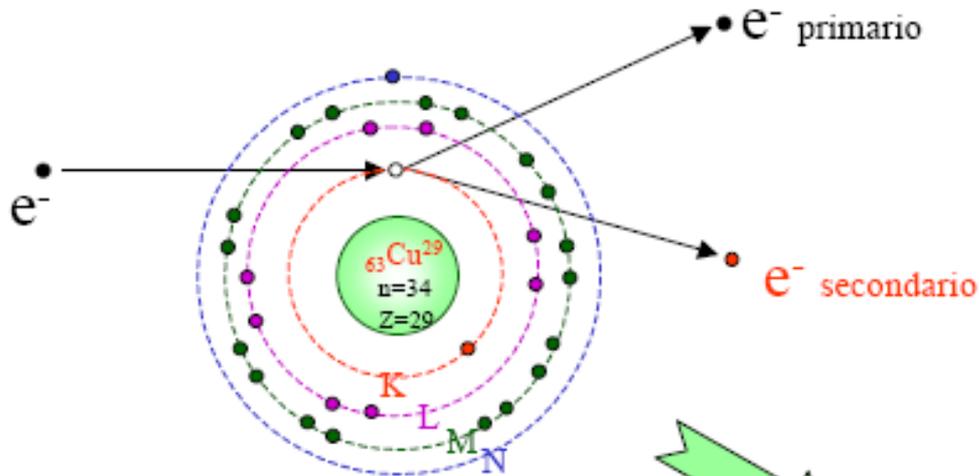
I raggi X sono prodotti da due tipi di interazione:

➤ 1- l'elettrone incidente ionizza l'atomo liberando un elettrone dai livelli interni, un elettrone da un livello superiore ricopre il posto vacante emettendo un fotone X.

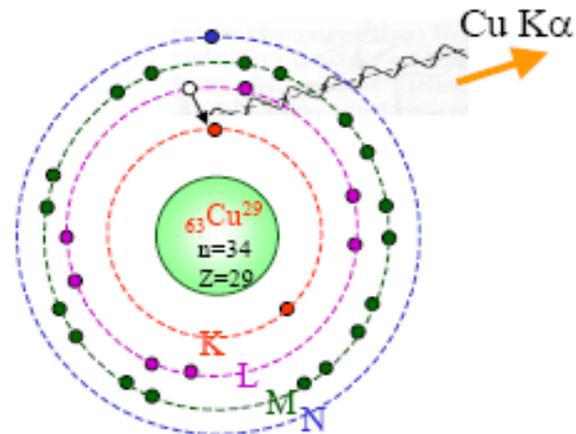
➤ 2- l'elettrone incidente viene rallentato o frenato dal campo elettrico esistente nell'intorno di nucleo atomico - poiché il decremento di energia varia da elettrone ad elettrone si ha emissione di uno spettro continuo di frenamento detto radiazione di "Bremsstrahlung"



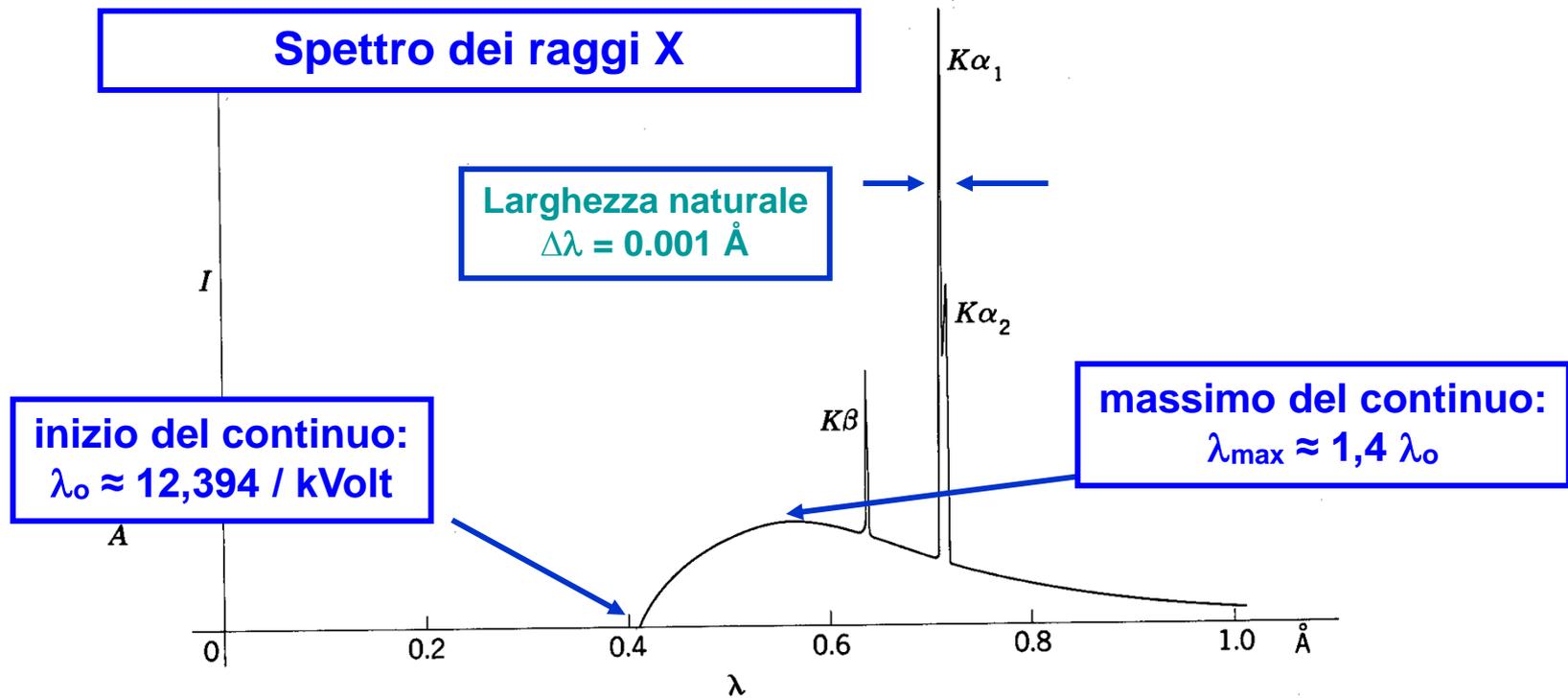
Eccitazione $K\alpha$



Sistema eccitato



Diseccitazione



LUNGHEZZA D'ONDA IN Å DELLE RIGHE EMESSE

Anodo	$K\alpha_1$	$K\alpha_2$	$K\langle\alpha\rangle$	$K\beta_1$
Cu	1,5406	1,5444	1,5418	1,3922
Mo	0,7093	0,7136	0,7107	0,6323

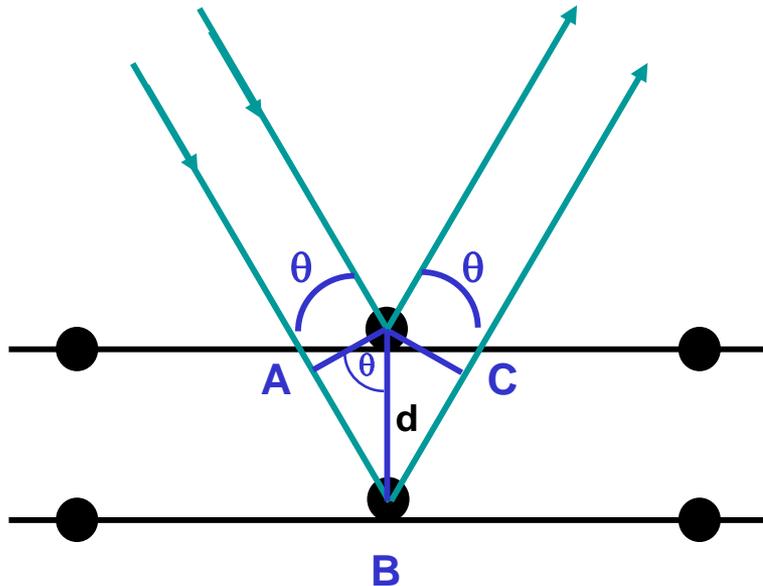
$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$$1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$E(\text{keV}) = \frac{12.4}{\lambda(\text{Å})}$$

Diffrazione dei raggi X dai cristalli

Nel 1912 Max Von Laue suggerì che, per il loro arrangiamento regolare di atomi, i cristalli potessero essere usati come reticoli di diffrazione. Questo vale in particolare per i raggi X, fasci di radiazione elettromagnetica con lunghezza d'onda di circa 1\AA , lo stesso ordine di grandezza della costante reticolare a nei cristalli. La teoria della diffrazione X è stata sviluppata da Sir William Bragg nel 1913. Bragg mostrò che un piano di atomi nel cristallo riflette la radiazione nello stesso modo nel quale la luce viene riflessa da uno specchio.



Abbiamo già visto che, perché si abbia interferenza costruttiva, deve valere la legge di Bragg:

$$AB+BC = 2d \sin \theta = n\lambda$$

Metodi di Diffrazione

Metodo di Laue

Un monocristallo è tenuto fermo in un fascio di raggi X di lunghezza d'onda continua, per esempio 0.2 – 2 Å. Il cristallo seleziona e diffrange i valori discreti di λ per cui esistono piani con separazione d ed angoli di incidenza θ soddisfacenti la legge di Bragg. Si ottiene una figura a macchie che mostra la simmetria del cristallo.

Metodo del cristallo rotante

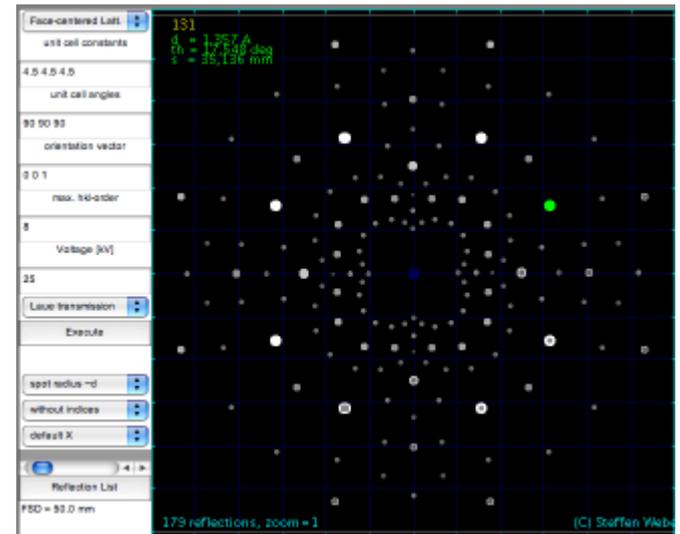
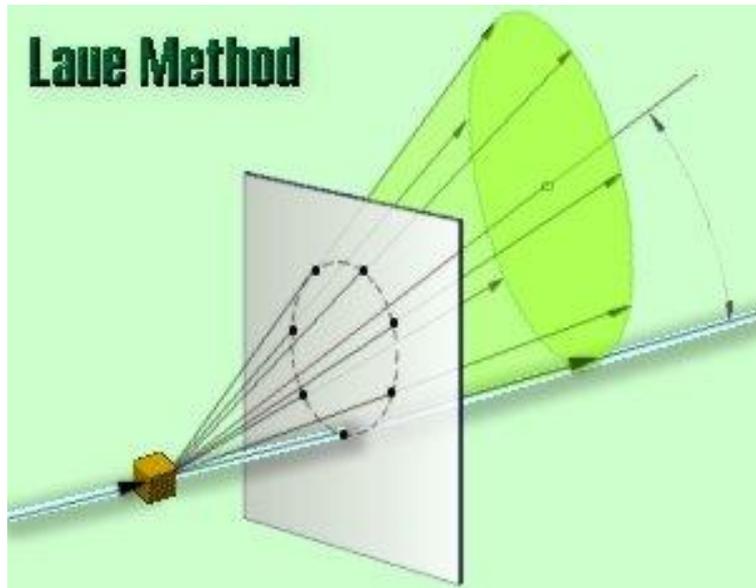
Il cristallo viene ruotato intorno ad un asse fisso. Il fascio incidente è monocromatico (per renderlo tale si utilizza un filtro o una riflessione con un cristallo) .

Metodo delle polveri

Il fascio incidente è monocromatico, il campione viene finemente polverizzato. La distribuzione delle orientazioni dei grani è quindi da ritenersi continua.

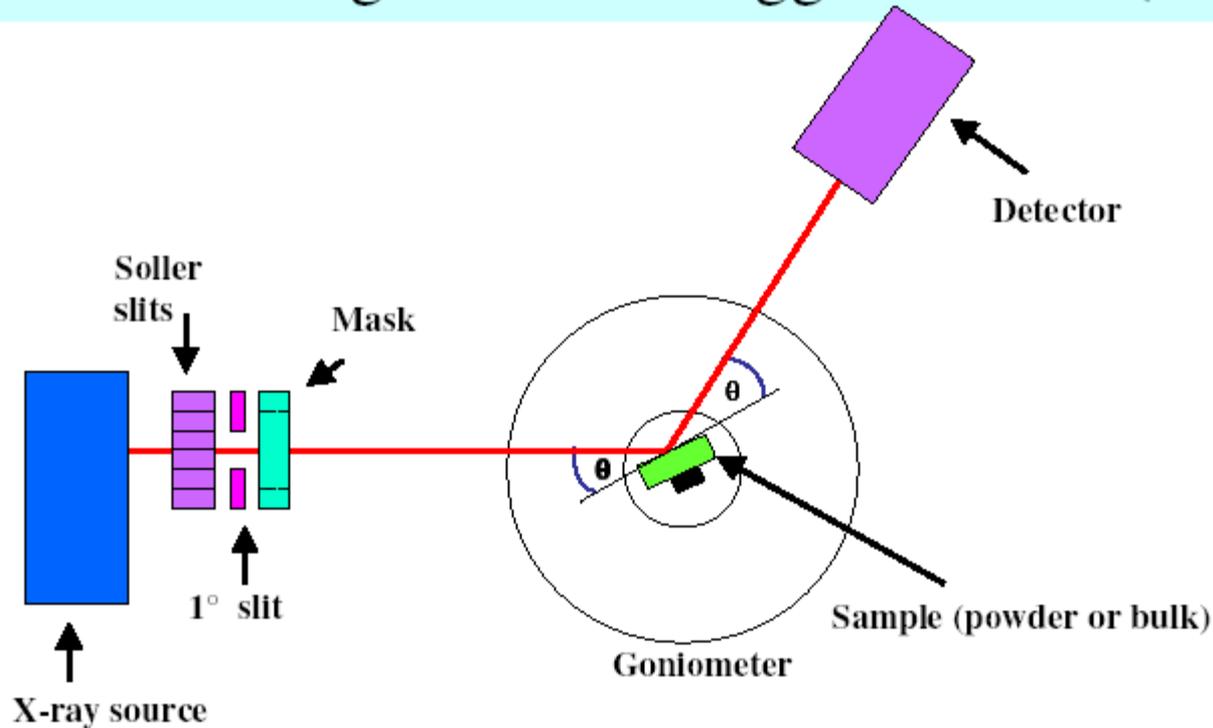
Il metodo di Laue a Trasmissione

Oltre il cristallo viene posta la pellicola fotografica per misurare i fasci che sono trasmessi attraverso il cristallo. I fasci diffratti con interferenza costruttiva giacciono su un cono che la pellicola fotografica interseca, si produce perciò una figura di diffrazione a macchie.

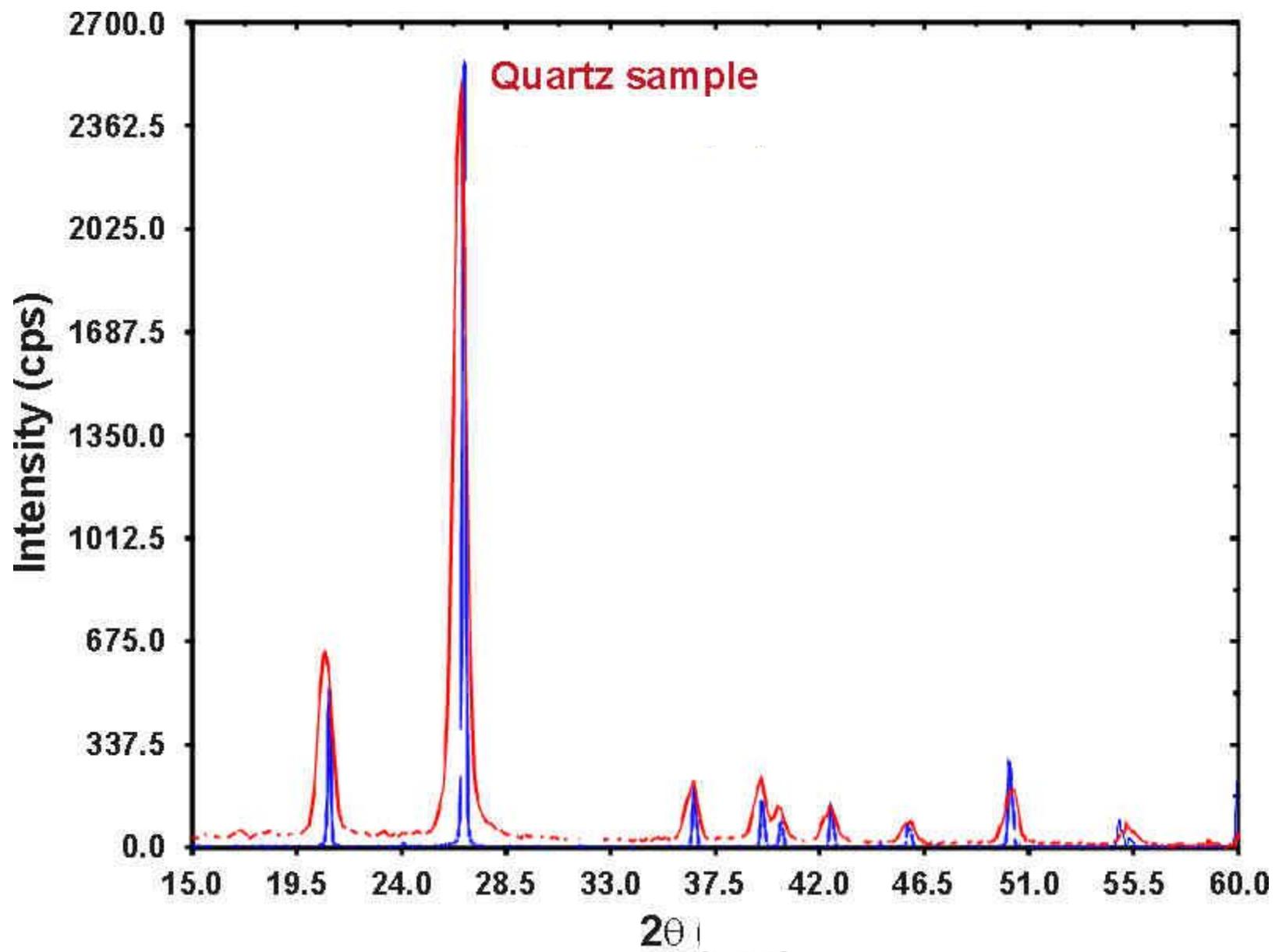


Metodo del cristallo rotante

Schema della geometria Bragg-Brentano (BB)

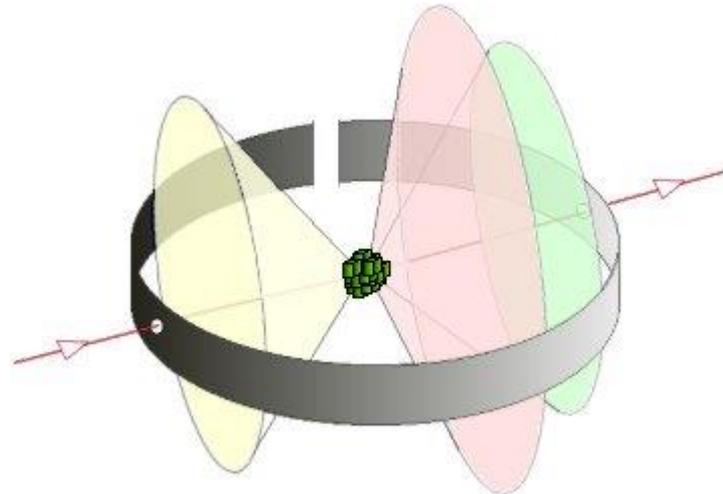


La misura si effettua facendo ruotare insieme il campione ed il rivelatore ($\theta:2\theta$ scan o Gonio)



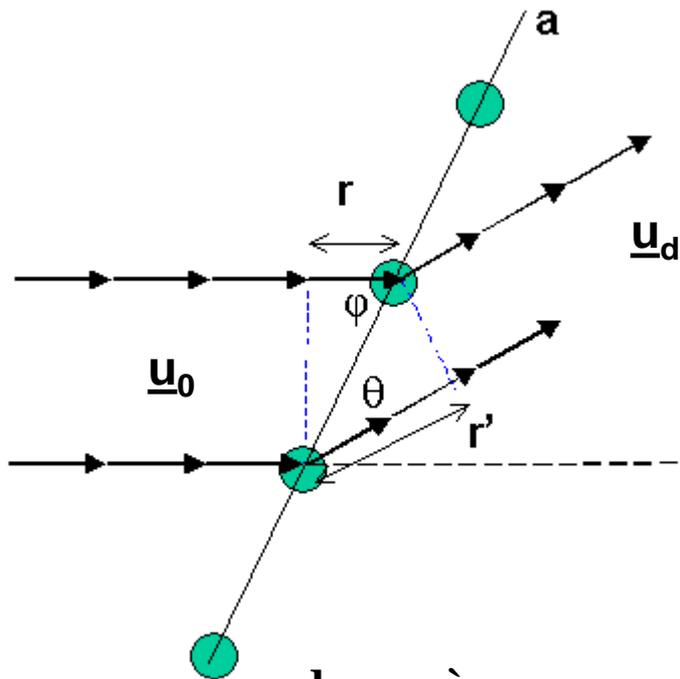
Metodo delle polveri

Un campione polverizzato produce raggi diffratti formanti un cono continuo. Per determinare la figura di diffrazione si utilizza una pellicola fotografica disposta circolarmente, ogni cono interseca il film producendo linee di diffrazione (archi impressionati sulla pellicola).



Interpretazione di Laue

L'interpretazione di von Laue si basa su un modello cristallino come rete tridimensionale di filari atomici, ripetizione in tre dimensioni di un ipotetico cristallo monodimensionale fatto di centri diffusori localizzati ai siti reticolari.



La radiazione incide sul filare di periodo a con versore \underline{u}_0 e angolo di incidenza φ . La differenza di cammino ottico tra onde emesse da centri diffusori diversi deve essere uguale ad un numero intero di lunghezze d'onda affinché l'onda diffusa in direzione \underline{u}_d (che forma angolo θ con lo stesso filare) dia interferenza costruttiva.

La condizione di interferenza costruttiva diviene:

$$r' - r = a \cos(\theta) - a \cos(\varphi) = p \lambda$$

dove p è un numero intero. In termini vettoriali diviene:

$$r' - r = \underline{a} \cdot (\underline{u}_d - \underline{u}_0) = p \lambda$$

Se consideriamo anche i filari nelle altre due direzioni, possiamo scrivere analoghe equazioni in tutte le direzioni. Otteniamo le **condizioni di Laue per la diffrazione**:

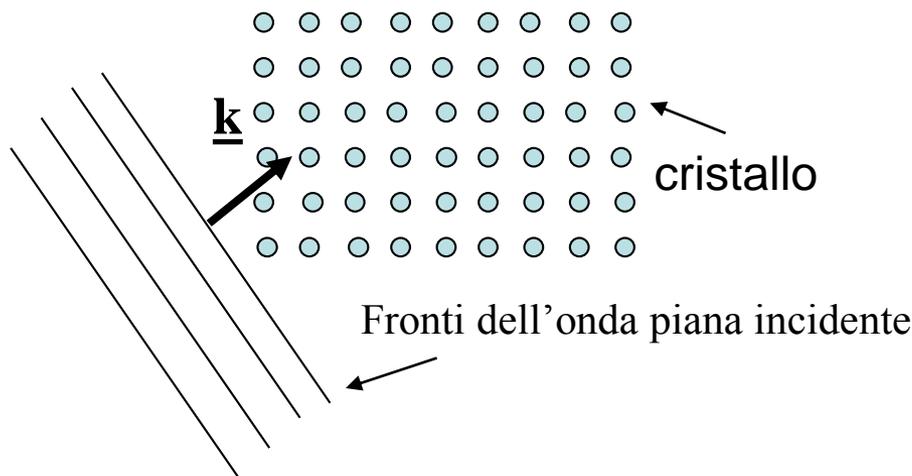
$$\begin{aligned}\underline{a}_1 \cdot (\underline{u}_d - \underline{u}_0) &= p \lambda \\ \underline{a}_2 \cdot (\underline{u}_d - \underline{u}_0) &= q \lambda \\ \underline{a}_3 \cdot (\underline{u}_d - \underline{u}_0) &= s \lambda\end{aligned}$$

Con p, q, s numeri interi

$\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$ vettori primitivi del reticolo di Bravais

Per avere interferenza costruttiva, le tre relazioni devono essere tutte contemporaneamente soddisfatte.

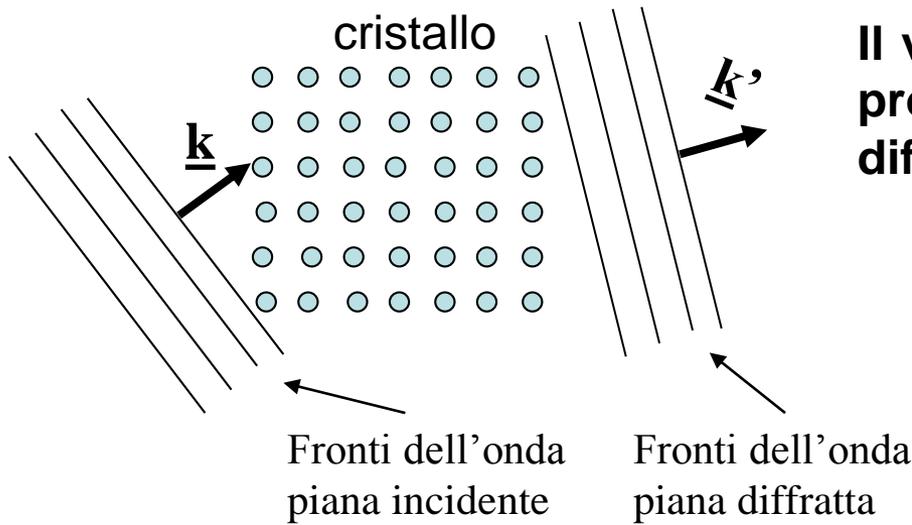
Considero ora un'onda piana incidente sul cristallo, caratterizzata dal vettore d'onda \underline{k} , dalla pulsazione ω e dalla lunghezza d'onda λ .



$$\underline{F}(\underline{r}, t) = \underline{F}_0 \cdot e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$$

Il vettore \underline{k} ha la direzione ed il verso di propagazione dell'onda piana, \underline{u}_0 .

$$\underline{k} = \frac{2 \pi}{\lambda} \underline{u}_0$$



Il vettore \underline{k}' ha direzione e verso di propagazione dell'onda piana diffratta \underline{u}_d :

$$\underline{k}' = \frac{2\pi}{\lambda} \underline{u}_d$$

Allora posso riscrivere le equazioni di von Laue come:

equazioni di Laue

(*)

$$\underline{a}_1 \cdot \Delta \underline{k} = 2\pi p$$

$$\underline{a}_2 \cdot \Delta \underline{k} = 2\pi q$$

$$\underline{a}_3 \cdot \Delta \underline{k} = 2\pi s$$

Con $\Delta \underline{k} = (\underline{k}' - \underline{k})$

e p,q,s numeri interi

Vogliamo ora determinare, data una terna di vettori primitivi $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$, i vettori $\Delta \underline{k}$ che sono soluzione di tali equazioni.

Reticolo Reciproco

Definiamo reticolo reciproco l'insieme di punti dello spazio descritti

dal vettore: $\underline{\mathbf{G}} = h\underline{\mathbf{A}}_1 + k\underline{\mathbf{A}}_2 + l\underline{\mathbf{A}}_3$ con h, k, l numeri interi e:

Vettori Primitivi del Reticolo Reciproco

$$\underline{\mathbf{A}}_1 = 2\pi \frac{\underline{\mathbf{a}}_2 \times \underline{\mathbf{a}}_3}{\underline{\mathbf{a}}_1 \cdot \underline{\mathbf{a}}_2 \times \underline{\mathbf{a}}_3} \quad \underline{\mathbf{A}}_2 = 2\pi \frac{\underline{\mathbf{a}}_3 \times \underline{\mathbf{a}}_1}{\underline{\mathbf{a}}_1 \cdot \underline{\mathbf{a}}_2 \times \underline{\mathbf{a}}_3} \quad \underline{\mathbf{A}}_3 = 2\pi \frac{\underline{\mathbf{a}}_1 \times \underline{\mathbf{a}}_2}{\underline{\mathbf{a}}_1 \cdot \underline{\mathbf{a}}_2 \times \underline{\mathbf{a}}_3}$$

Dove $\underline{\mathbf{a}}_1, \underline{\mathbf{a}}_2, \underline{\mathbf{a}}_3$ sono vettori primitivi del reticolo di Bravais. Otteniamo:

$$\underline{\mathbf{a}}_i \cdot \underline{\mathbf{A}}_j = 0 \quad \underline{\mathbf{a}}_i \cdot \underline{\mathbf{A}}_i = 2\pi \quad \text{Per ogni } i, j = 1, 2, 3 \quad i \neq j$$

Si mostra facilmente che l'insieme dei vettori $\underline{\mathbf{G}}$ così determinati costituisce reticolo di Bravais con vettori primitivi $\underline{\mathbf{A}}_1, \underline{\mathbf{A}}_2, \underline{\mathbf{A}}_3$. Il reticolo con vettori primitivi $(\underline{\mathbf{a}}_1, \underline{\mathbf{a}}_2, \underline{\mathbf{a}}_3)$ si chiama 'diretto' per distinguerlo da quello reciproco, così chiamato perché i vettori reciproci hanno dimensione inversa alla lunghezza (si misurano in m^{-1}).

Consideriamo ora le condizioni di Laue per la diffrazione :

$$\underline{a}_1 \cdot \underline{\Delta k} = 2\pi p$$

$$\underline{a}_2 \cdot \underline{\Delta k} = 2\pi q$$

$$\underline{a}_3 \cdot \underline{\Delta k} = 2\pi s$$

esse equivalgono a imporre: $\underline{\Delta k} = \underline{G}$

con \underline{G} vettore di traslazione del reticolo reciproco: $\underline{G} = p\underline{A}_1 + q\underline{A}_2 + s\underline{A}_3$

Infatti, dato che: $\underline{A}_1 \perp \underline{a}_2, \underline{a}_3$, $\underline{A}_2 \perp \underline{a}_1, \underline{a}_3$, $\underline{A}_3 \perp \underline{a}_1, \underline{a}_2$

otteniamo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{a}_1 \cdot (p\underline{A}_1 + q\underline{A}_2 + s\underline{A}_3) = 2\pi p \\ \underline{a}_2 \cdot (p\underline{A}_1 + q\underline{A}_2 + s\underline{A}_3) = 2\pi q \\ \underline{a}_3 \cdot (p\underline{A}_1 + q\underline{A}_2 + s\underline{A}_3) = 2\pi s \end{array} \right.$$

Relazione tra i vettori del reticolo Reciproco e quelli del Reticolo Diretto

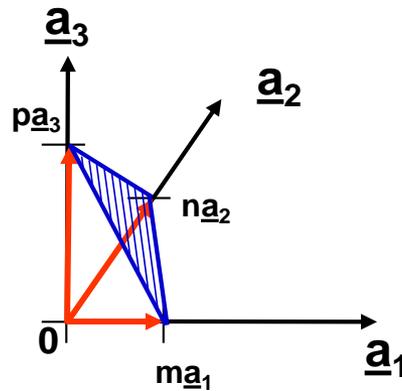
Siano: $\underline{R} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3$ vettore del reticolo di Bravais diretto
 $\underline{G} = p \underline{A}_1 + q \underline{A}_2 + s \underline{A}_3$ vettore del reticolo reciproco

Allora si verifica che : $\underline{R} \cdot \underline{G} = 2\pi n$ con n numero intero.

Posso allora scrivere: $e^{i \underline{R} \cdot \underline{G}} = 1$

OGNI VETTORE DEL RETICOLO RECIPROCO E' NORMALE AD UN PIANO DEL RETICOLO CRISTALLINO.

\underline{G} è normale al piano passante per i 3 punti $(ma_1, 0, 0)$; $(0, na_2, 0)$; $(0, 0, pa_3)$ del reticolo cristallino se è normale ad ogni vettore che giace in quel piano.



In particolare i vettori $m\underline{a}_1 - n\underline{a}_2$; $m\underline{a}_1 - p\underline{a}_3$; $n\underline{a}_2 - p\underline{a}_3$ giacciono in tale piano. Allora deve valere:

$$\underline{G} \cdot (m\underline{a}_1 - n\underline{a}_2) = \underline{G} \cdot (m\underline{a}_1 - p\underline{a}_3) = \underline{G} \cdot (n\underline{a}_2 - p\underline{a}_3) = 0$$

$$(h\underline{A}_1 + k\underline{A}_2 + l\underline{A}_3) \cdot (m\underline{a}_1 - n\underline{a}_2) = (hm - kn) 2\pi = 0$$

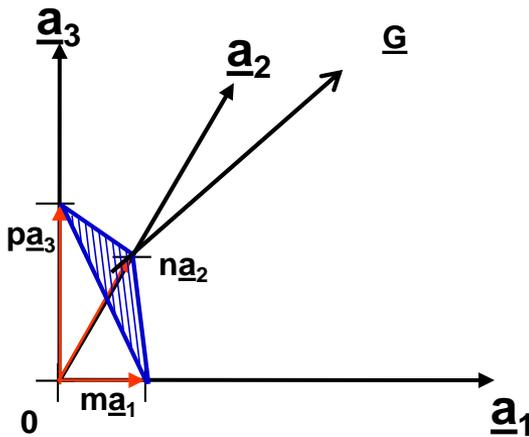
Poiché

$$\begin{aligned} \underline{a}_i \cdot \underline{A}_i &= 2\pi & \text{Per ogni } i, j = 1, 2, 3 \\ \underline{a}_i \cdot \underline{A}_j &= 0 & i \neq j \end{aligned}$$

Da cui otteniamo $hm = kn$ e similmente: $hm = pl$; $nk = pl$.

Le tre equazioni sono soddisfatte se: $m = \frac{1}{h}$; $n = \frac{1}{k}$; $p = \frac{1}{l}$.

Quindi gli k, h, l corrispondono agli indici di Miller del piano passante per i punti $(m\underline{a}_1, 0, 0)$; $(0, n\underline{a}_2, 0)$; $(0, 0, p\underline{a}_3)$ ed il vettore \underline{G} è perpendicolare al piano di indici (hkl) .



Riassumendo: associati ad ogni struttura periodica si hanno due reticoli:

RETICOLO DIRETTO corrisponde alla struttura reticolare reale, che descrive la struttura ordinata e periodica con cui sono disposti gli atomi nello spazio

RETICOLO RECIPROCO determina come la struttura periodica del reticolo diretto **INTERAGISCE CON LE ONDE**.

Tutti i vettori del reticolo reciproco, **K**, sono definiti dalla condizione:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1 \qquad \mathbf{K}\cdot\mathbf{R} = 2\pi n \quad n \text{ intero}$$



con **R** vettore del reticolo diretto. Questa espressione può essere soddisfatta se **K** è espresso a partire dai vettori primitivi di reticolo reciproco A_1, A_2, A_3 .

Crystallography and the reciprocal space

crystallography and reciprocal space

<http://www.youtube.com/watch?v=DFFU39A3fPY>

Protein crystal diffraction

<http://www.youtube.com/watch?v=fZ0m8wustVk>

Reticolo reciproco ed analisi di Fourier

La periodicità della densità elettronica nel reticolo diretto : $n(\underline{r} + \underline{R}) = n(\underline{r})$ (\underline{R} = vettore di reticolo diretto) crea una situazione ideale per l'applicazione dell'analisi di Fourier. Le più importanti proprietà dei cristalli sono direttamente legate alle componenti di Fourier della densità elettronica. In una dimensione, con a costante reticolare:

$$n(x) = n_0 + \sum_{m>0} \left[C_m \cos \left(2\pi m \frac{x}{a} \right) + S_m \sin \left(2\pi m \frac{x}{a} \right) \right]$$

con m intero e C_m , S_m costanti reali (coefficienti dell'espansione). Il fattore $2\pi/a$ assicura che $n(x)$ abbia periodo a , infatti :

$$n(x+a) = n_0 + \sum_{m>0} \left[C_m \cos \left(2\pi m \frac{x}{a} + 2\pi m \right) + S_m \sin \left(2\pi m \frac{x}{a} + 2\pi m \right) \right] = n(x) \quad (*)$$

Diciamo che $2\pi n/a$ è un **punto del reticolo reciproco** o dello spazio di Fourier del cristallo (detto anche spazio \mathbf{k}). I punti del reticolo reciproco ci dicono quali sono i termini ammessi nella serie di Fourier (*) che può essere anche riscritta:

$$n(x) = \sum_{m>0} A_m e^{\frac{i2\pi mx}{a}}$$

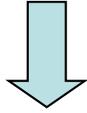
Prima Zona di Brillouin

La cella di Wigner Seitz può essere definita anche per il reticolo reciproco. In questo caso viene chiamata prima zona di Brillouin.

Determiniamo la prima Zona di Brillouin per i reticoli reciproci dei reticoli di Bravais BCC (cubico a corpo centrato) e FCC (a facce centrate) .

Reticolo Reciproco del reticolo cubico a corpo centrato BCC

Scegliamo questa terna di vettori primitivi per il reticolo di Bravais bcc



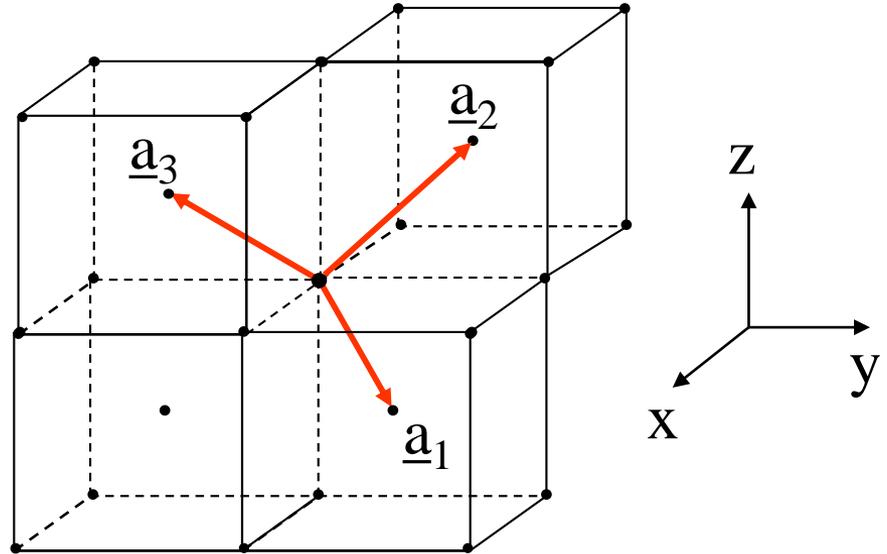
$$\underline{a}_1 = a/2 (\underline{u}_x + \underline{u}_y - \underline{u}_z)$$

$$\underline{a}_2 = a/2 (-\underline{u}_x + \underline{u}_y + \underline{u}_z)$$

$$\underline{a}_3 = a/2 (\underline{u}_x - \underline{u}_y + \underline{u}_z)$$

Il volume della cella è:

$$V = \underline{a}_1 \cdot \underline{a}_2 \times \underline{a}_3 = \frac{a^3}{2}$$



Calcoliamo quindi le espressioni dei vettori primitivi nel reticolo reciproco:

$$\underline{A}_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(-u_x + u_y + u_z) \times \frac{a}{2}(u_x - u_y + u_z)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(u_x + u_y)$$

$$\underline{A}_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(u_x - u_y + u_z) \times \frac{a}{2}(u_x + u_y - u_z)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(u_y + u_z)$$

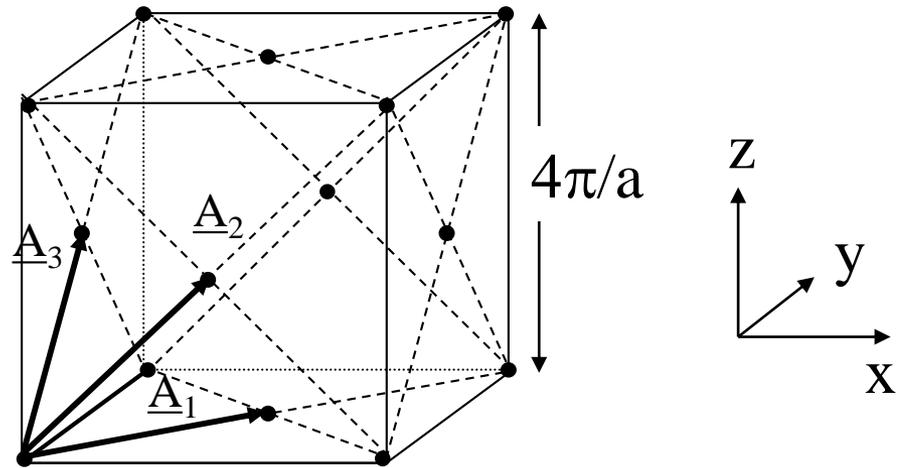
$$\underline{A}_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(u_x + u_y - u_z) \times \frac{a}{2}(-u_x + u_y + u_z)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(u_x + u_z)$$

Le espressioni vettoriali trovate corrispondono ai vettori primitivi di un FCC

$$\underline{A}_1 = \frac{2\pi}{a}(u_x + u_y)$$

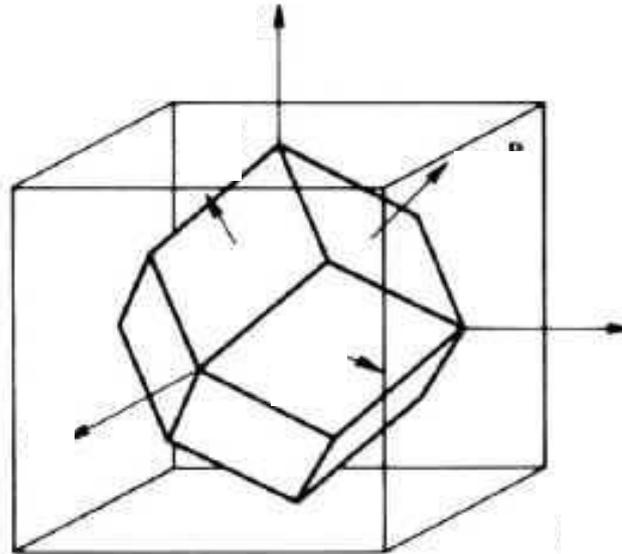
$$\underline{A}_2 = \frac{2\pi}{a}(u_y + u_z)$$

$$\underline{A}_3 = \frac{2\pi}{a}(u_x + u_z)$$



Il reticolo reciproco di un reticolo cubico a corpo centrato è un reticolo cubico a facce centrate.

La prima zona di Brilluoin di un reticolo bcc è un dodecaedro rombico



Reticolo Reciproco del reticolo cubico a facce centrate FCC

Scegliamo questa terna di vettori primitivi per il reticolo di Bravais fcc



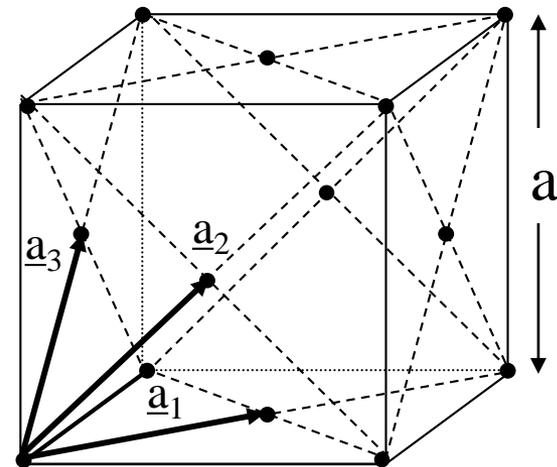
$$\underline{a}_1 = a/2 (\underline{u}_x + \underline{u}_y)$$

$$\underline{a}_2 = a/2 (\underline{u}_x + \underline{u}_z)$$

$$\underline{a}_3 = a/2 (\underline{u}_y + \underline{u}_z)$$

Il volume della cella è:

$$V = \underline{a}_1 \cdot \underline{a}_2 \times \underline{a}_3 = \frac{a^3}{4}$$



Calcoliamo quindi le espressioni dei vettori primitivi nel reticolo reciproco:

$$\underline{A}_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(u_y + u_z) \times \frac{a}{2}(u_x + u_z)}{\frac{a^3}{4}} = \frac{2\pi}{a} (u_x + u_y - u_z)$$

$$\underline{A}_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(u_x + u_z) \times \frac{a}{2}(u_x + u_y)}{\frac{a^3}{4}} = \frac{2\pi}{a} (-u_x + u_y + u_z)$$

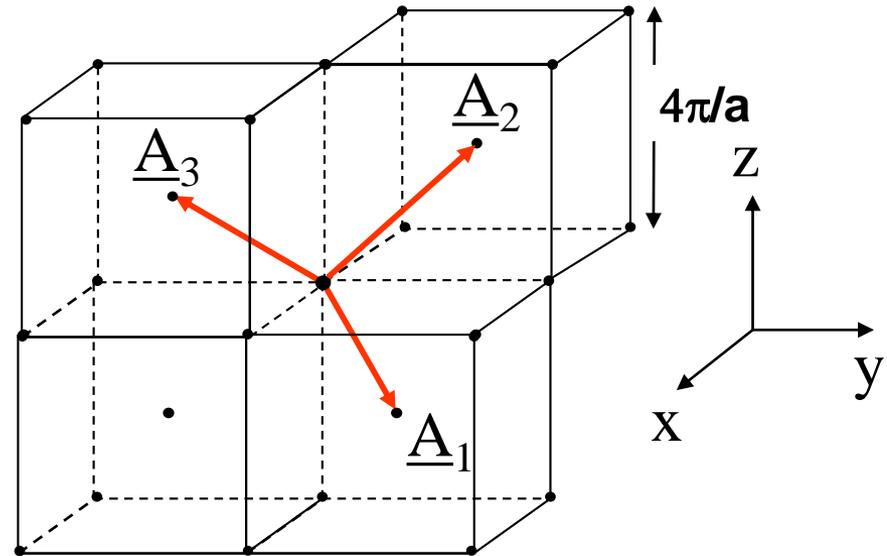
$$\underline{A}_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} = 2\pi \frac{\frac{a}{2}(u_x + u_y) \times \frac{a}{2}(u_y + u_z)}{\frac{a^3}{4}} = \frac{2\pi}{a} (u_x - u_y + u_z)$$

Le espressioni vettoriali trovate corrispondono ai vettori primitivi di un BCC

$$\underline{A}_1 = \frac{2\pi}{a}(u_x + u_y - u_z)$$

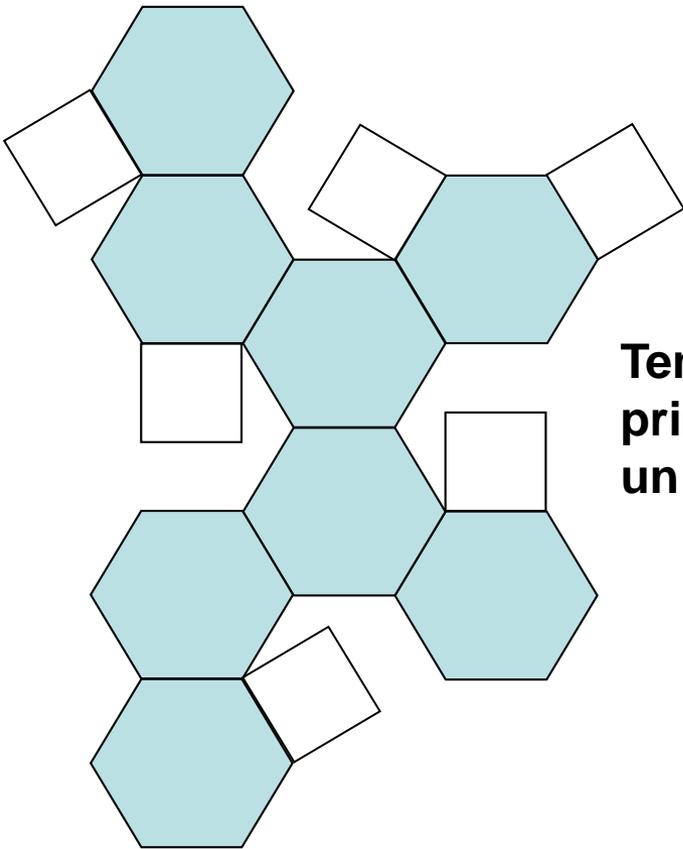
$$\underline{A}_2 = \frac{2\pi}{a}(-u_x + u_y + u_z)$$

$$\underline{A}_3 = \frac{2\pi}{a}(u_x - u_y + u_z)$$



Il reticolo reciproco di un reticolo cubico a facce centrate è un reticolo cubico a corpo centrato.

La prima zona di Brilluoin di un reticolo fcc è un ottaedro troncato



←
**Template per costruire la
prima zona di Brilluoin di
un reticolo a facce centrate**

