
ATTI ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI
CLASSE SCIENZE FISICHE MATEMATICHE NATURALI
RENDICONTI

ANTONIO CAVINATO, GIORGIO MAGNANO

**Principio di equivalenza tra segmenti reticolari agli
effetti metrico-interferenziali**

*Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche,
Matematiche e Naturali. Rendiconti, Serie 8, Vol. 66 (1979), n.5, p. 429–434.*

Accademia Nazionale dei Lincei

<http://www.bdim.eu/item?id=RLINA_1979_8_66_5_429_0>

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Cristallografia. — *Principio di equivalenza tra segmenti reticolari agli effetti metrico-interferenziali* (*). Nota di ANTONIO CAVINATO e GIORGIO MAGNANO, presentata (**) dal Corrisp. A. CAVINATO.

SUMMARY. — The paper demonstrates in an elementary way a geometrical property of the crystal lattice (a dotted homogeneous periodical space).

From this property it follows that:

- 1) the X-ray diffraction by the scattering centres of the space lattice requires, as is well known, that the interference phenomenon look geometrically like a usual reflection from a lattice plane;
- 2) the concept of equivalent lattice segments, with regard to the metric-interferential effects, can be stated;
- 3) some immediate relations between Laue's equations and Bragg's formula are derived in a formally rigorous way.

1. LEMMA GEOMETRICO.

1.1. Siano π e π' piani paralleli, $\overline{DO}$ la loro distanza, i ed r due rette simmetriche rispetto ad uno dei due piani, f la retta appartenente al piano π' e bisecante l'angolo $\hat{i}r = 2\vartheta$. Per costruzione dunque $i, r, f, \overline{DO}$ appartengono ad un piano normale a π' ed a π (fig. 1).

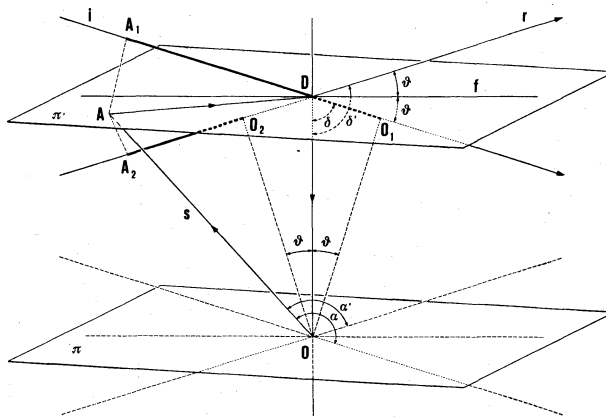


Fig. 1.

Dimostriamo la seguente proposizione. « È costante ed uguale a $2 \overline{DO} \sin \vartheta$ la differenza tra le proiezioni ortogonali sulle rette r ed i dei segmenti delimitati dai due piani ».

(*) Lavoro eseguito nell'Istituto di Giacimenti minerali e Geologia applicata del Politecnico di Torino, diretto dal Prof. Stefano Zucchetti.

(**) Nella seduta del 12 maggio 1979.

Sia $s = \overline{OA}$ uno di questi segmenti e siano α e α' gli angoli di esso con le direzioni di i ed r . Proiettando la poligonale chiusa OADO su i e su r , con riferimento ai versi indicati in figura, si ha rispettivamente:

$$\overline{OA} \cos \alpha + \overline{AD} \cos \hat{A}DA_1 + \overline{DO} \cos \delta = 0,$$

$$\overline{OA} \cos \alpha' + \overline{AD} \cos \hat{A}DA_2 + \overline{DO} \cos \delta' = 0.$$

Osservato che $\hat{A}DA_1 = \hat{A}DA_2$, $\cos \delta = \sin \vartheta$ e $\cos \delta' = -\sin \vartheta$, sottraendo la prima eguaglianza dalla seconda si ottiene:

$$(1) \quad \overline{OA} (\cos \alpha' - \cos \alpha) = 2 \overline{DO} \sin \vartheta = \Delta = \text{costante}.$$

Dunque il segmento s può variare sia in lunghezza, a partire da un minimo $s = \overline{OD}$, sia in direzione (e conseguentemente variano gli angoli α e α'), mentre il segmento Δ conserva lunghezza costante. La lunghezza di Δ varia solo con il variare dell'angolo ϑ .

2. APPLICAZIONE AI RETICOLI CRISTALLINI.

2.1. Condizione geometrica necessaria per la diffrazione concorde dei raggi X.

Ci proponiamo di illustrare alcune applicazioni della proprietà generale su dimostrata, e a tal fine mettiamo anzitutto in evidenza che la (1) è l'espressione più idonea a rappresentare lo *status* geometrico-strutturale che fa da presupposto necessario al fenomeno della diffrazione dei raggi X da parte dei reticoli cristallini.

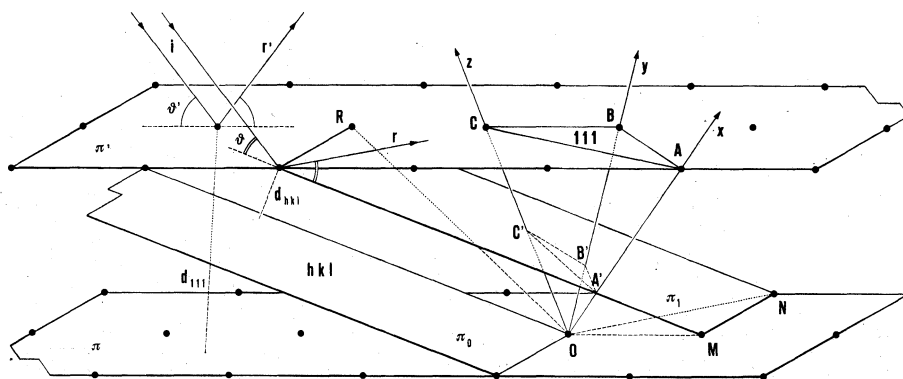


Fig. 2.

Consideriamo pertanto un reticolo triclinico semplice, individuato dalle traslazioni $\overline{OA}$, $\overline{OB}$, $\overline{OC}$ lungo gli assi $Oxyz$ (fig. 2). Siano: i la direzione di un fascio di raggi X monocromatico di lunghezza d'onda λ , incidente sui

centri diffusori del reticolo ⁽¹⁾ e formante gli angoli ϑ e ϑ' rispettivamente con i piani hkl e 111 ; r ed r' le direzioni di due pennelli di raggi diffratti, formanti con i gli angoli $i \wedge r = 2\vartheta$ e $i \wedge r' = 2\vartheta'$.

Applichiamo la (1) ai segmenti reticolari $OA, OB, \dots OR$, compresi tra i piani paralleli adiacenti π e π' della famiglia 111 . Chiamando $\alpha', \beta', \dots, \rho'$ e $\alpha_0, \beta_0, \dots, \rho_0$ gli angoli di questi segmenti con r' e con i rispettivamente, si ha:

$$(2) \quad \overline{OA} (\cos \alpha' - \cos \alpha_0) = \overline{OB} (\cos \beta' - \cos \beta_0) = \dots = \overline{OR} (\cos \rho' - \cos \rho_0) = \\ = 2 d_{111} \sin \vartheta' = \Delta,$$

dove Δ viene ad assumere il significato di differenza di cammino ottico fra i raggi diffusi dai due centri posti agli estremi dei rispettivi segmenti.

Ne consegue che per la diffrazione concorde dei centri diffusori giacenti nei piani π e π' , e quindi dei centri dell'intero reticolo, è condizione necessaria, ma non bastevole, che Δ sia costante, qualunque sia la lunghezza dei predetti segmenti: il che può aversi, a norma della (1), soltanto se le direzioni di i e di r' sono simmetriche rispetto ai piani reticolari considerati, di guisa che il fenomeno della diffrazione si configuri geometricamente quale un'ordinaria riflessione sui piani stessi. Affinchè questa condizione sia anche sufficiente dev'essere, notoriamente, $2d \geq \lambda$ e $\Delta = n\lambda$, dove il numero intero n indica l'ordine di riflessione selettiva.

Ritroviamo così in breve, partendo dalla (1), concetti fondamentali che si deducono anche per altra via, quale la classica rappresentazione vettoriale di Ewald.

2.2. Segmenti reticolari equivalenti.

Per il lemma che sta alla base della presente trattazione, la (2) è valida *geometricamente* non soltanto per gli m^2 segmenti che uniscono ciascuno degli m centri diffusori di un piano con gli m centri dell'altro, ma altresì per qualunque segmento appartenente ad altri filari, od anche privo di significato cristallografico reticolare, purché delimitato da π e π' . In ogni caso, ripetiamo, il valore di Δ è costante ed indipendente dal tipo di segmento considerato e dalla sua lunghezza.

Ma se consideriamo l'aspetto fisico del fenomeno d'interferenza, ben s'intende che dovremo chiamare in causa solo segmenti appartenenti a direzioni caratterizzate da una successione regolare periodica di centri diffusori, quali sono i filari.

(1) La distribuzione dei punti nodali in fig. 2 corrisponde al reticolo della calcantite (normalmente definito dalle più corte traslazioni, sugli assi BA, OB, BC). La proiezione è clinografica, con $\delta = 18^\circ 26'$ intorno a BC ed $\epsilon = 9^\circ 28'$. Per necessità di rappresentazione si è ruotata la proiezione di 90° nel suo piano e si è effettuato un cambiamento di assi: fermo restando $[010]$, gli assi $[110]$ e $[011]$ della calcantite sono stati assunti rispettivamente come $[100]$ e $[001]$. Nel disegno sono arbitrari i tracciati di i, r, r', d_{hkl} .

Volendo sviluppare ulteriormente questo argomento, consideriamo ora i piani reticolari paralleli ed adiacenti π_0 e π_1 , appartenenti ad una famiglia hkl , rappresentati in fig. 2 dalle rispettive maglie semplici ⁽²⁾.

È evidente dal disegno che i segmenti reticolari compresi fra π_0 e π_1 sono di due tipi (o riconducibili ai medesimi):

I) segmenti come OM, ON, OR, i cui estremi M, N, R sono nodi reticolari su π_1 ; essi rappresentano le traslazioni lungo le rispettive direzioni e pertanto conveniamo di chiamarli *parametri reticolari*;

II) segmenti come OA', OB', OC', i cui estremi A', B', C' non sono nodi del reticolo: per questo conveniamo di chiamarli genericamente *segmenti di filare*; facciamo poi notare che le loro lunghezze sono sottomultipli interi dei periodi d'identità dei rispettivi filari (sempre che si considerino piani hkl adiacenti, come nel caso qui contemplato).

La distinzione fatta tra i due tipi di segmenti, da tenere presente all'occorrenza ⁽³⁾, non li diversifica però agli effetti *metrico-interferenziali*, in quanto applicando la (1) a qualsivoglia dei predetti segmenti si ottiene il medesimo valore di Δ . Ciò è espresso dalle eguaglianze

$$(3) \quad \overline{OM} (\cos \mu - \cos \mu_0) = \overline{ON} (\cos \nu - \cos \nu_0) = \dots = \\ = \overline{OA'} (\cos \alpha - \cos \alpha_0) = \overline{OB'} (\cos \beta - \cos \beta_0) = \dots = 2 d_{hkl} \sin \vartheta = \Delta,$$

nelle quali $\mu, \nu, \dots, \alpha, \beta, \dots$ e $\mu_0, \nu_0, \dots, \alpha_0, \beta_0, \dots$ indicano gli angoli dei segmenti reticolari OM, ON, ..., OA', OB', ... rispettivamente con r e con i .

Dalle argomentazioni svolte deriva il *principio di equivalenza* definito dalla seguente proposizione: «i segmenti reticolari delimitati da due piani paralleli sono equivalenti tra loro agli effetti metrico-interferenziali e possono vicendevolmente sostituirsi».

Il numero di segmenti *equivalenti* e quindi *vicarianti* che possono figurare in espressioni come la (2) e la (3) è dunque illimitato.

Questa possibilità di molteplice rappresentazione con termini equivalenti fa risaltare il carattere unitario del fenomeno d'interferenza, il quale può venire sintetizzato con la relazione

$$(4) \quad s_{hkl} (\cos \sigma - \cos \sigma_0) = 2 d_{hkl} \sin \vartheta = n\lambda,$$

dove s_{hkl} è qualunque segmento reticolare delimitato da piani adiacenti di indici hkl , e σ e σ_0 sono gli angoli di s_{hkl} con le direzioni r ed i , le quali debbono essere simmetriche rispetto ai piani hkl .

Se nella (4) in luogo di s_{hkl} si pongono successivamente tre segmenti reticolari non complanari ed i relativi valori angolari, ne consegue una terna di equazioni di Laue associate ai piani riflettenti hkl , come verrà esemplificato dettagliatamente qui appresso.

(2) In base alla scelta degli assi effettuata, i piani considerati hanno indici 432.

(3) Si vedano gli esempi addotti in 2.3.2.

2.3. *Esempio dimostrativo: espressione delle equazioni di Laue e relazioni formali con l'equazione di Bragg.*

2.3.1. Nel caso considerato in 2.1, cioè quando il fenomeno della diffrazione si configura come una riflessione sui piani reticolari di indici 111, le tre equazioni di Laue si eguagliano fra loro e con l'equazione di Bragg, come si deduce immediatamente dalle (2) facendo intervenire i *parametri reticolari* $\overline{OA} = a$, $\overline{OB} = b$, $\overline{OC} = c$ e ponendo $\Delta = n\lambda$. Scriviamo dunque:

$$(5) \quad a(\cos \alpha' - \cos \alpha_0) = b(\cos \beta' - \cos \beta_0) = c(\cos \gamma' - \cos \gamma_0) = \\ = 2 d_{111} \sin \vartheta' = n\lambda$$

ed osserviamo che l'ordine di riflessione n di Bragg coincide con il numero d'ordine dei tre coni di diffrazione di Laue.

2.3.2. Nel caso più generale, cioè quando i piani riflettenti hanno indici hkl , il *principio di equivalenza* offre varie possibilità di confronto, a seconda che si voglia esprimere le equazioni di Laue in modo generico, utilizzando qualunque terna di segmenti reticolari non complanari, oppure in forma canonica, ricorrendo ai segmenti reticolari che stanno sulla terna assiale di riferimento.

Non ci addentriamo nella casistica, ma ci limitiamo a fornire due esempi relativi ai piani hkl della fig. 2, dove $h, k, l \neq 1, 0$.

2.3.2.1. Ponendo nella (4) una terna di *parametri reticolari*, per esempio OM, ON, OR , possiamo ancora eguagliare direttamente le equazioni di Laue e di Bragg, scrivendo le

$$(6) \quad \overline{OM}(\cos \mu - \cos \mu_0) = \overline{ON}(\cos \nu - \cos \nu_0) = \overline{OR}(\cos \rho - \cos \rho_0) = \\ = 2 d_{hkl} \sin \vartheta = n\lambda,$$

analoghe alle (5) sia per la forma che per l'interpretazione. Infatti ciò significa fare assumere alle direzioni OM, ON, OR il ruolo di nuovi assi di riferimento, rispetto ai quali i piani hkl avrebbero indici 111.

2.3.2.2. Facendo invece ricorso ai *segmenti di filare* OA', OB', OC' , cioè ai parametri che il piano π_1 intercetta sulla terna assiale $Oxyz$, le cui misure sono date da $\overline{OA'} = a/h$, $\overline{OB'} = b/k$, $\overline{OC'} = c/l$, si ottengono le equazioni

$$(7) \quad a/h(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = b/k(\cos \beta - \cos \beta_0) = c/l(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = \\ = 2 d_{hkl} \sin \vartheta = n\lambda.$$

Per giungere ad una esplicitazione formalmente rigorosa delle tre equazioni di Laue basterà scrivere separatamente le (7), come segue:

$$(8) \quad \begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= 2 h d_{hkl} \sin \vartheta = h n \lambda = h' \lambda, \\ b(\cos \beta - \cos \beta_0) &= 2 k d_{hkl} \sin \vartheta = k n \lambda = k' \lambda, \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= 2 l d_{hkl} \sin \vartheta = l n \lambda = l' \lambda. \end{aligned}$$

In base al lemma dimostrato in 1.1, valevole anche per piani paralleli non adiacenti, è chiaro che l'operazione effettuata nel passare dalle (7) alle (8) equivale geometricamente a proiettare su i e su r , in luogo dei segmenti a/h , b/k , c/l compresi fra π_0 e π_1 , i parametri reticolari a , b , c , delimitati da π_0 e dai piani a questo paralleli π_4 , π_3 , π_2 (non segnati in fig. 2 per non complicarla ulteriormente), passanti rispettivamente per A, B, C.

Risultano così direttamente evidenziate anche le note relazioni che legano gl'indici di Laue h' , k' , l' (cioè i numeri d'ordine dei coni di diffrazione rispetto ai tre filari di riferimento) con gl'indici hkl (primi fra loro) del piano riflettente e con l'ordine n di riflessione dell'equazione di Bragg: $h' = hn$, $k' = kn$, $l' = ln$.