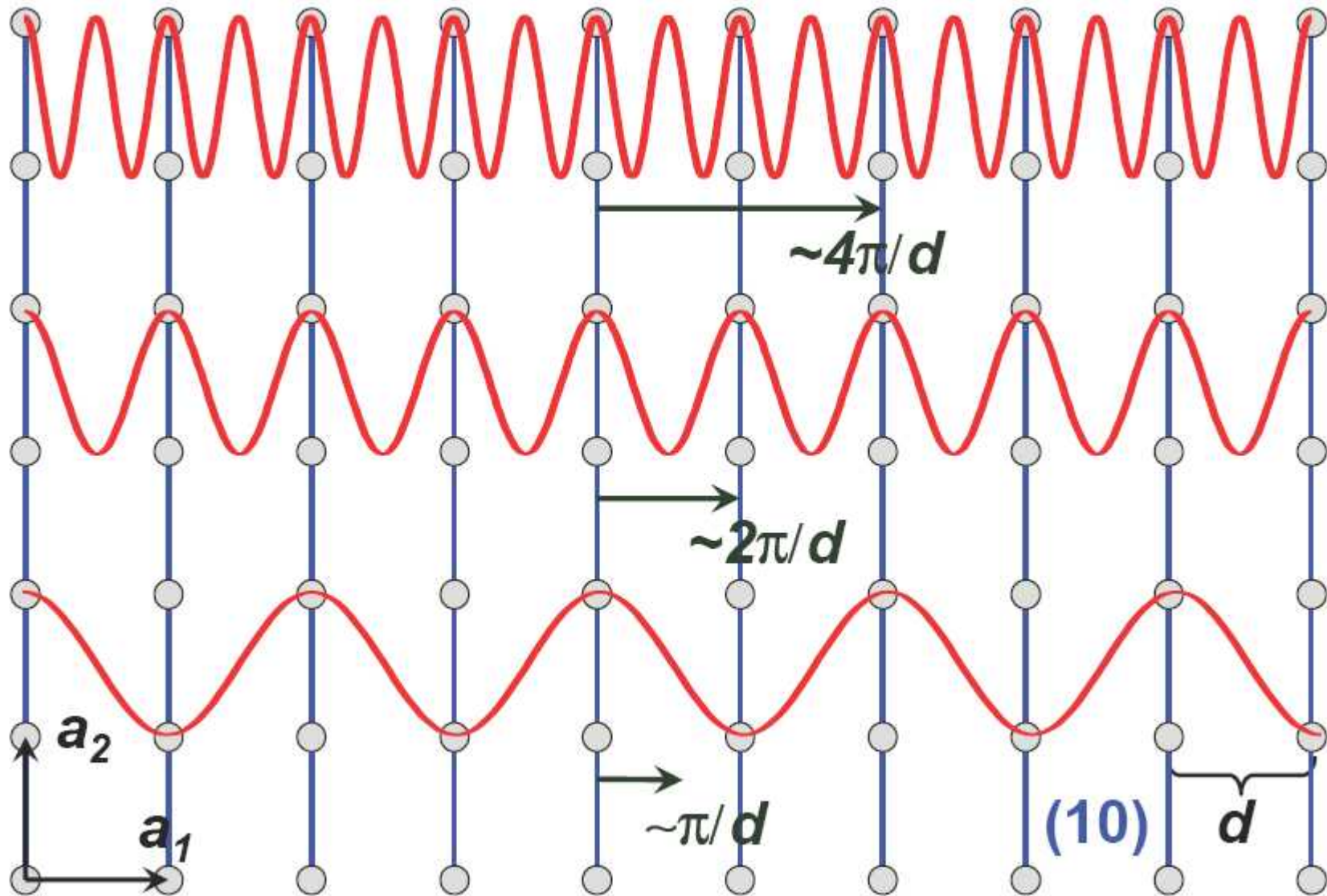


Gitterperiodische ebene Wellen



The Reciprocal Lattice (REL)

(Direct lattice DL)

The set of wavevectors \mathbf{G} that yield plane waves with the periodicity of a given Bravais lattice is its reciprocal Lattice.

Analytically:

$$\begin{aligned} e^{i \vec{G}(\vec{r} + \vec{R})} &= e^{i \vec{G} \vec{r}} \\ \Rightarrow e^{i \vec{G} \vec{R}} &= 1 \end{aligned} \quad \begin{array}{l} R \in DL \\ G \in REL \end{array}$$

consequently: \mathbf{G} perp. \mathbf{R} or $\mathbf{GR} = n 2 \pi$

Berechnung der Vektoren des reziproken Gitters

Gegeben: direktes Gitter aufgespannt durch $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$.

$\vec{g}_1, \vec{g}_2, \vec{g}_3$ spannen REL auf, wenn gilt $\vec{g}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

(Achtung: 2π)

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & ; i \neq j \\ 1 & ; i = j \end{cases}$$

$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V}$$

(und zyklisch weiter)

Definition erfüllt?

direktes Gitter $\vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad ; n_i \in \mathbb{Z}$

reziprokes Gitter $\vec{G} = h \vec{g}_1 + k \vec{g}_2 + l \vec{g}_3 \quad ; h, k, l \in \mathbb{Z}$

$$\vec{G} \cdot \vec{T} = 2\pi (hn_1 + kn_2 + ln_3)$$

$$= 2\pi (\text{ganze Zahl})$$

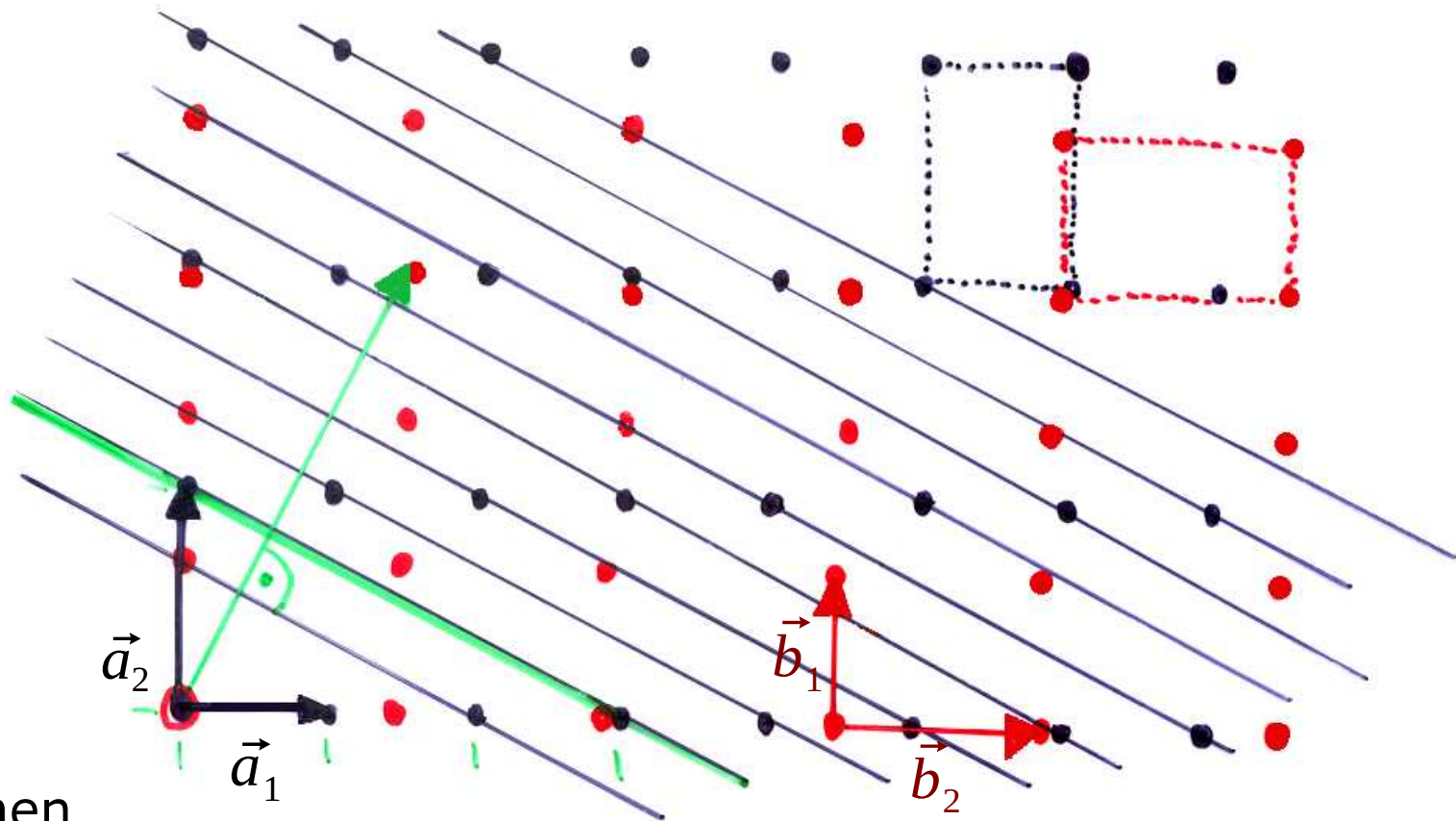
$$\Rightarrow e^{i\vec{G}\vec{T}} = 1 \quad \Rightarrow \text{o.k.}$$

- REL ist ein Bravaisgitter (s.o.)
- REL(REL) = DL [Bew.: REL von REL sind alle \mathbf{K} mit $\exp(i\mathbf{K}\mathbf{G})=1$.
Das erfüllen gerade die \mathbf{T} aus DL.]

Zusammenhang von DL (m) & REL (m⁻¹)

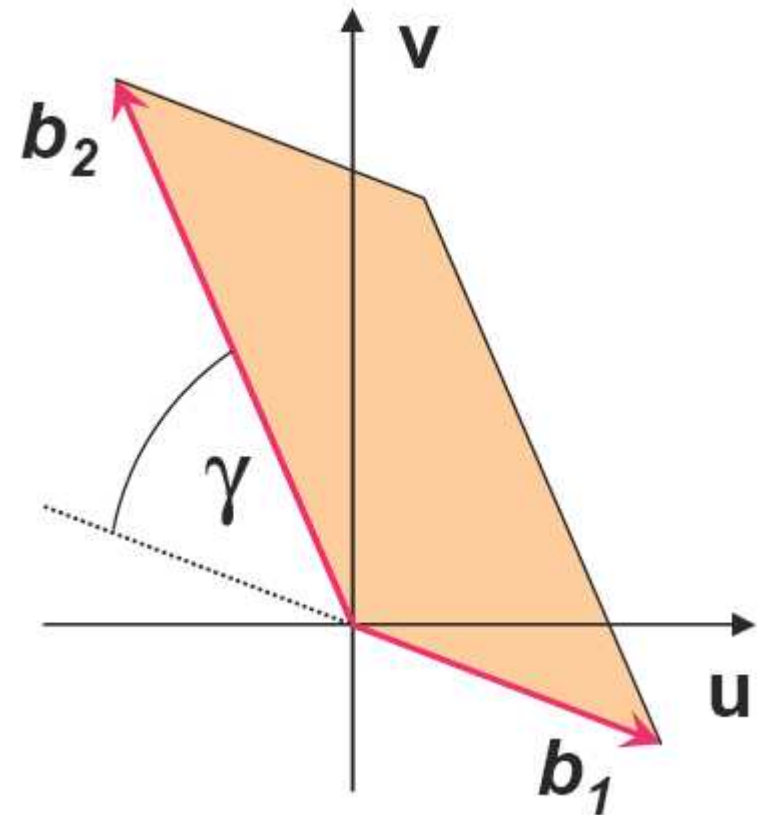
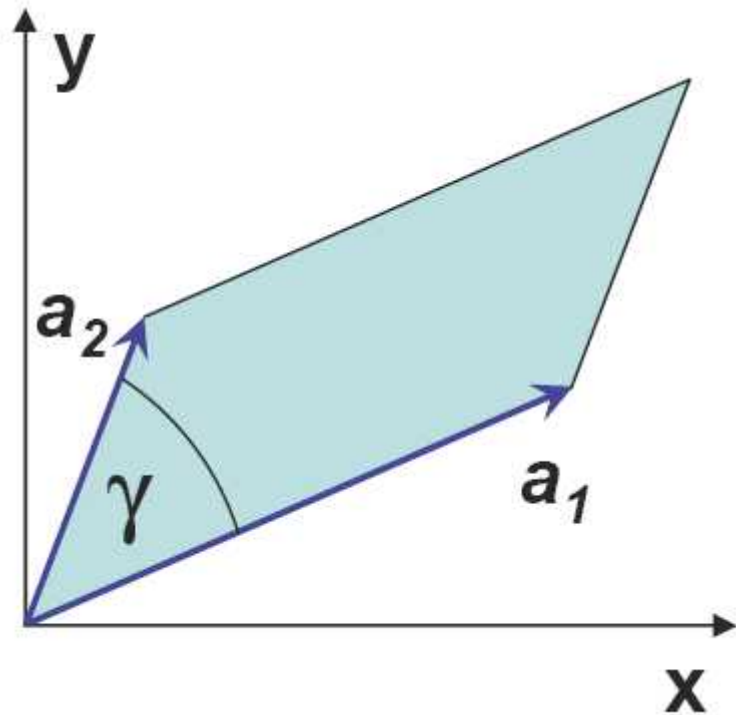
$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} = \begin{pmatrix} 2\pi \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{b}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \pi \\ 0 \end{pmatrix}$$



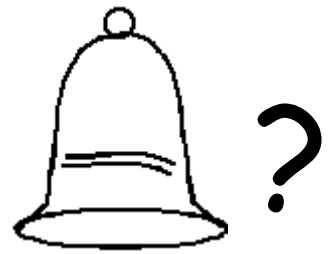
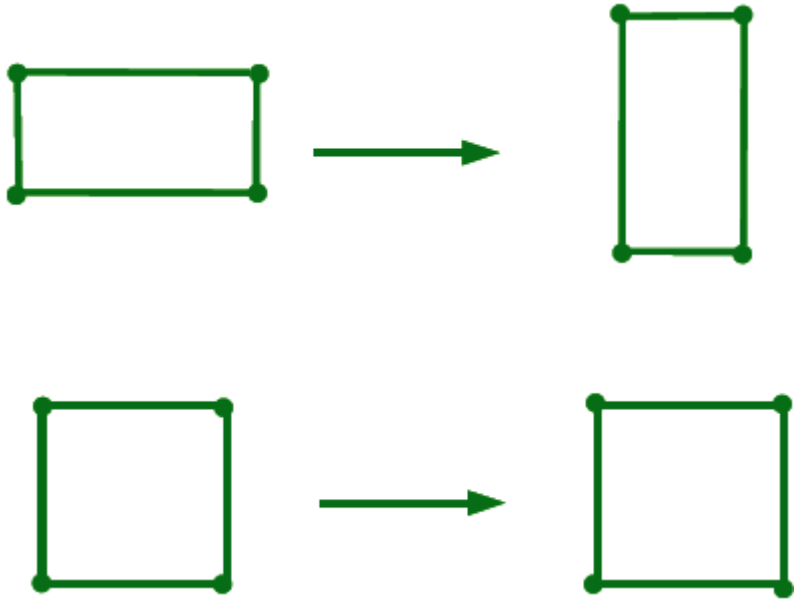
(1 3) Ebenen

Primitive vectors of DL and REL in 2D



© WSI München

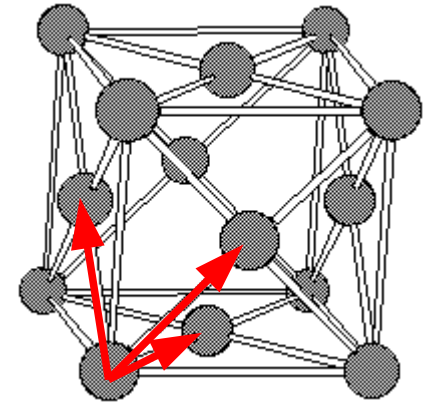
- symmetry of DL maintained
- primitive vectors orthogonal to those of DL
- reciprocal dimensions



REL: Wichtige Beispiele

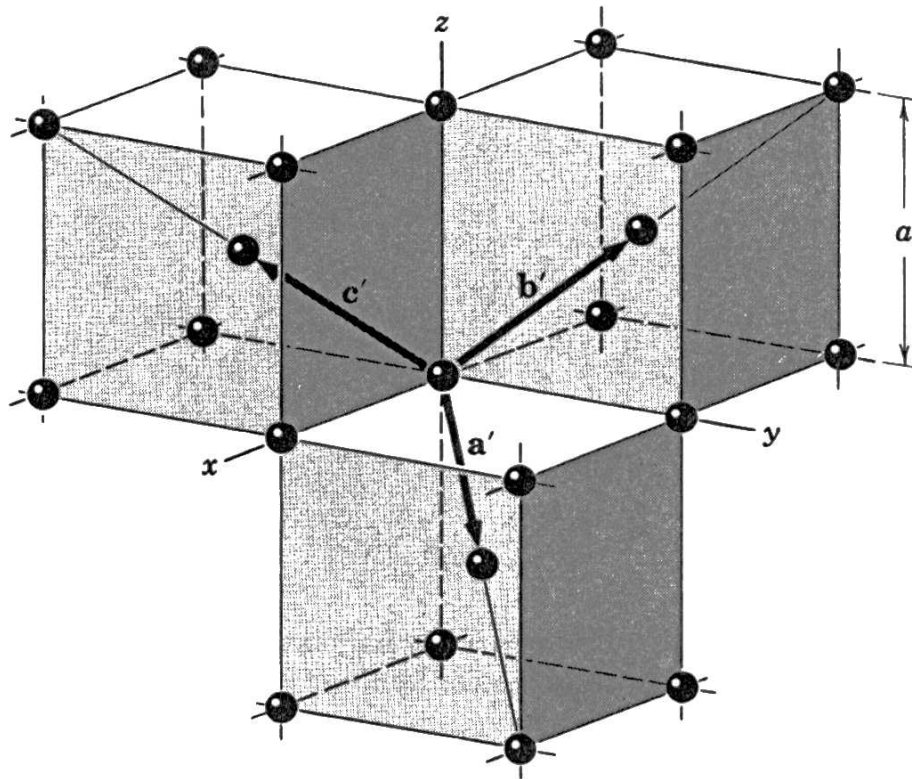
sc: $a_1 = a \hat{x}, \quad a_2 = a \hat{y}, \quad a_3 = a \hat{z}$
 $b_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x}, \quad b_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}, \quad b_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{z}$

Volumina: a^3 bzw. $(2\pi/a)^3$



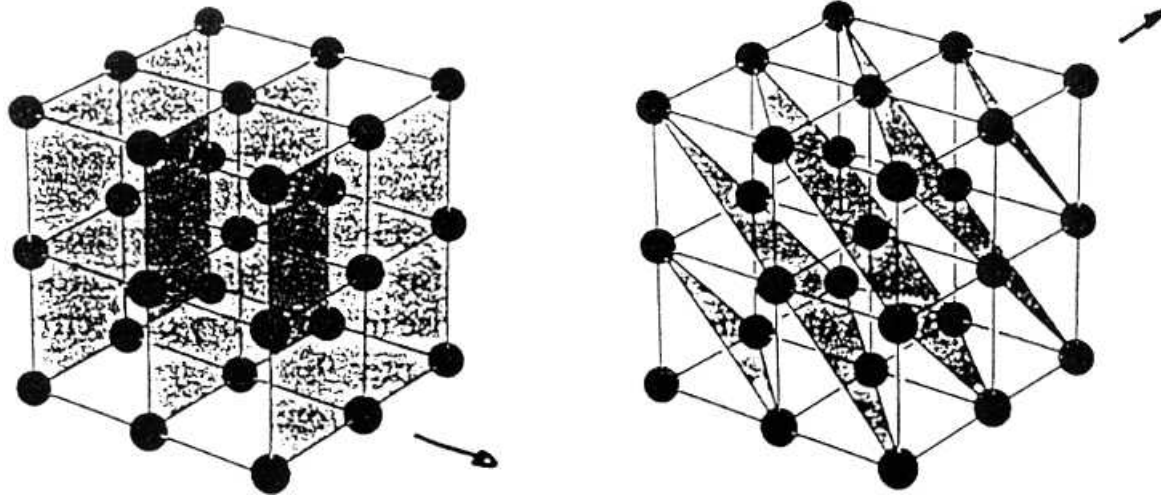
fcc: $a_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \quad a_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}), \quad a_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}),$
 $b_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x}), \quad b_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y}), \quad b_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$

$$b_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x}), \quad b_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y}), \quad b_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$



Das sind die \mathbf{a}_i
eines bcc-Gitters

Zusammenhang REL - Gitterebenen



Two ways of representing a simple cubic Bravais lattice as a family of lattice planes (shaded)

Für Gitterebenen (Abstand d , enthält alle \mathbf{R} aus DL)

gibt es \mathbf{G} aus REL mit $\mathbf{G} \perp$ Ebenen und minimaler Länge $2\pi/d$.

Und umgekehrt:

Zu jedem \mathbf{G} gibt es eine Ebenenschar mit Abstand $2\pi/G_0$.

\mathbf{G}_0 ist der kürzeste Vektor des REL parallel zu \mathbf{G} .

Für Gitterebenen im Abstand d gibt es \mathbf{G} aus REL, steht senkrecht auf Ebenen, $G_{\min} = d/2\pi$.

Beweis Teil 1 (\Rightarrow):

Gegeben Ebenenschar, die alle \mathbf{R} des DL enthält. Sei $\hat{n} \perp$ Ebenen.

Zeige: $\vec{G} = 2\pi \hat{n} / d \in REL$

$e^{i\vec{G}\vec{r}}$ ist ebene Welle, konstant in Ebenen senkrecht zu \mathbf{G}
und gleicher Wert auf Ebenen im Abstand $\lambda = 2\pi / G$

Auf der Ebene, die $\mathbf{R}=\mathbf{0}$ enthält, ist $\exp(i\mathbf{G}\mathbf{R})=1$.

Also Welle = 1 auf all diesen Ebenen.

Die Ebenen enthalten alle \mathbf{R} des DL.

Also $\exp(i\mathbf{G}\mathbf{R})=1$ für alle \mathbf{R} des DL.

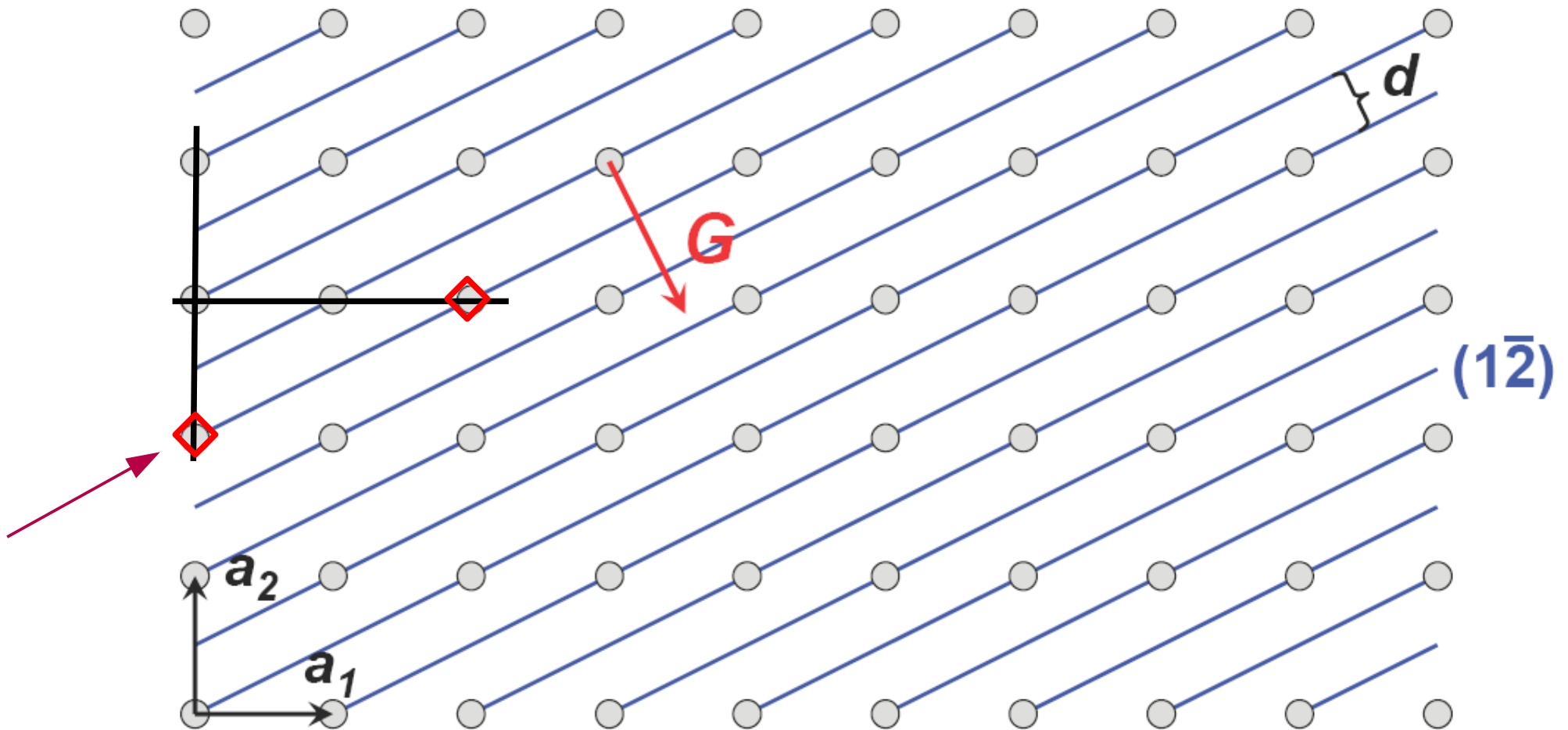
Also ist \mathbf{G} ein Vektor des REL.

Es ist der kürzeste senkrecht zu Ebenen,

denn jeder kürzere gibt Wellenlänge größer als d .

Millerindex einer Ebenenschar

Bravais-Gitter mit den primitiven Vektoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 ($\mathbf{a}_3 \perp$ dazu)



Achsenabschnitte in Einheiten von $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$: $2, -1, \infty$

Kehrwerte: $1/2, -1, 0$

suche Multiplikator (hier 2), der daraus kleine ganze Zahlen macht

Millerindex: $(1\ -2\ 0)$ vergleiche mit $\mathbf{G} = 2\pi(1, -2)$

Reziprokes Gitter & Millerindex

Der Millerindex einer Ebenenschar gibt den kürzesten reziproken Gittervektor senkrecht zu den Ebenen an.

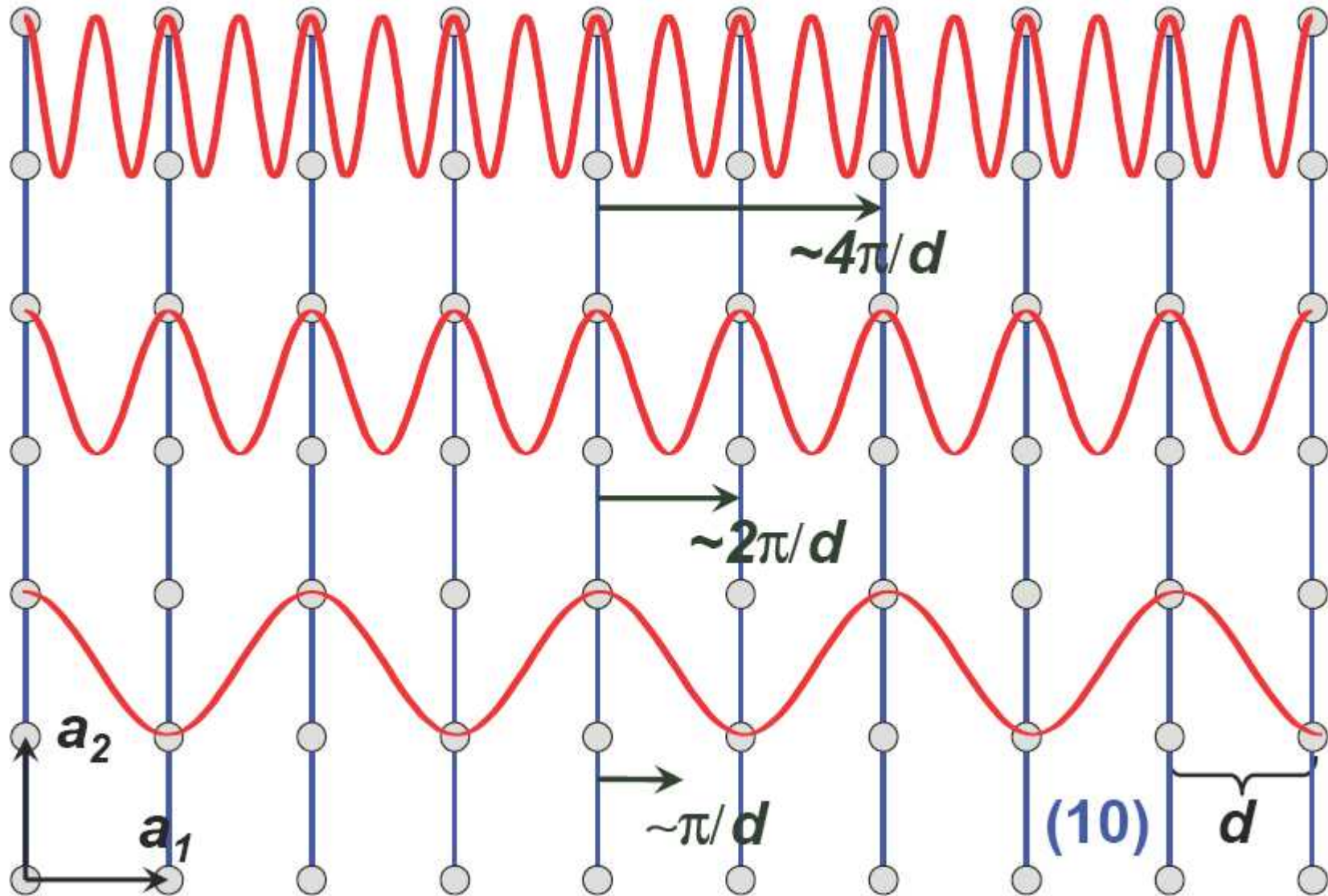
d. h. (hkl) senkrecht zu $\mathbf{G}_{hkl} = h \mathbf{g}_1 + k \mathbf{g}_2 + l \mathbf{g}_3$

(Bew.: Hesse'sche Normalform)

$$[G] = m^{-1} \quad d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$$

In kubischen Kristallen gilt: $(h k l) \perp [h k l]$

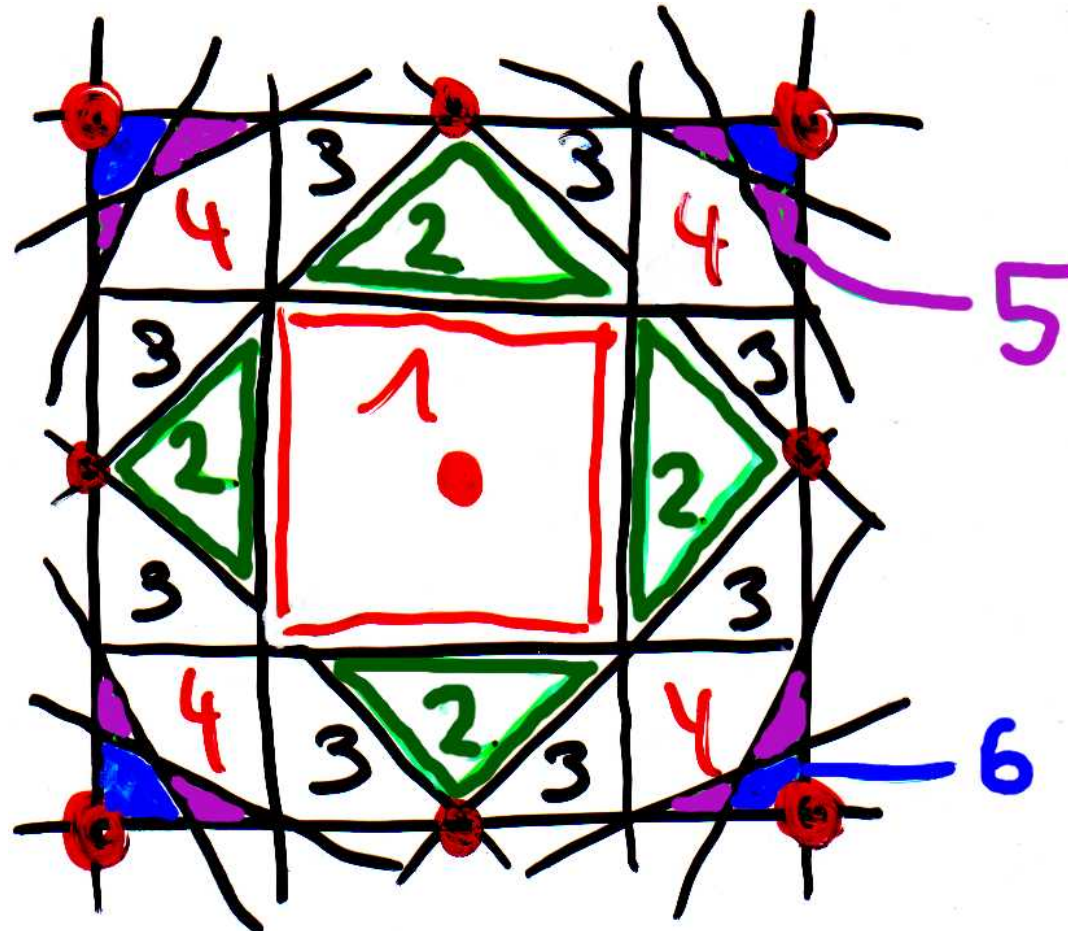
Abtasten einer Welle durch ein Gitter



Maximaler 'nützlicher' Wellenvektor $|\mathbf{k}_{\max}| = \pi/d$

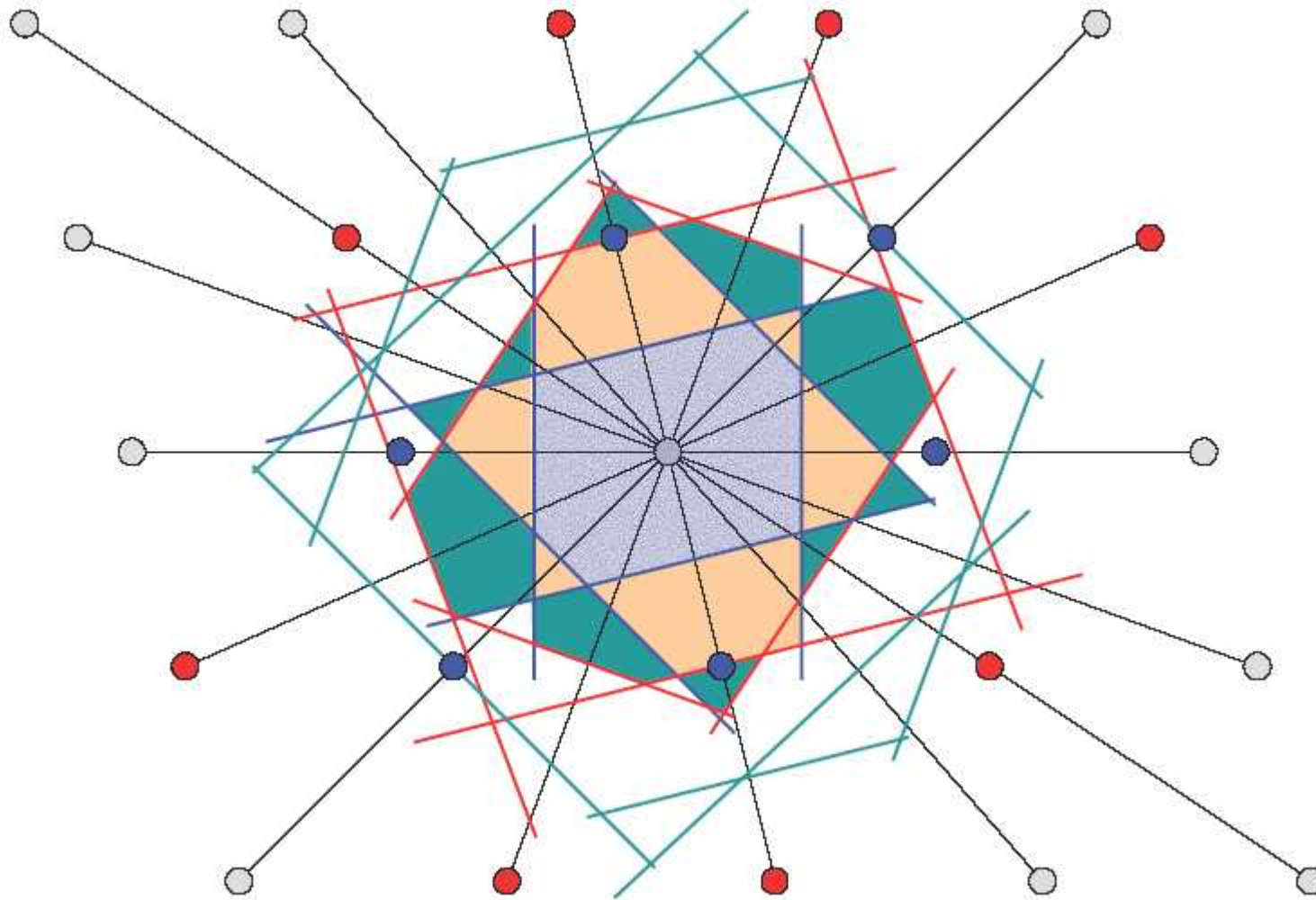
Brillouinzonen

1. BZ: Menge der k -Punkte, die von $k=0$ (Γ -Punkt) erreichbar sind, ohne eine "Mittelsenkrechenebene" zu durchqueren
- n. BZ: $\{k\}$, die von $(n-1)$. BZ über eine MSE erreichbar und nicht zu $(n-1)$. BZ selbst gehören

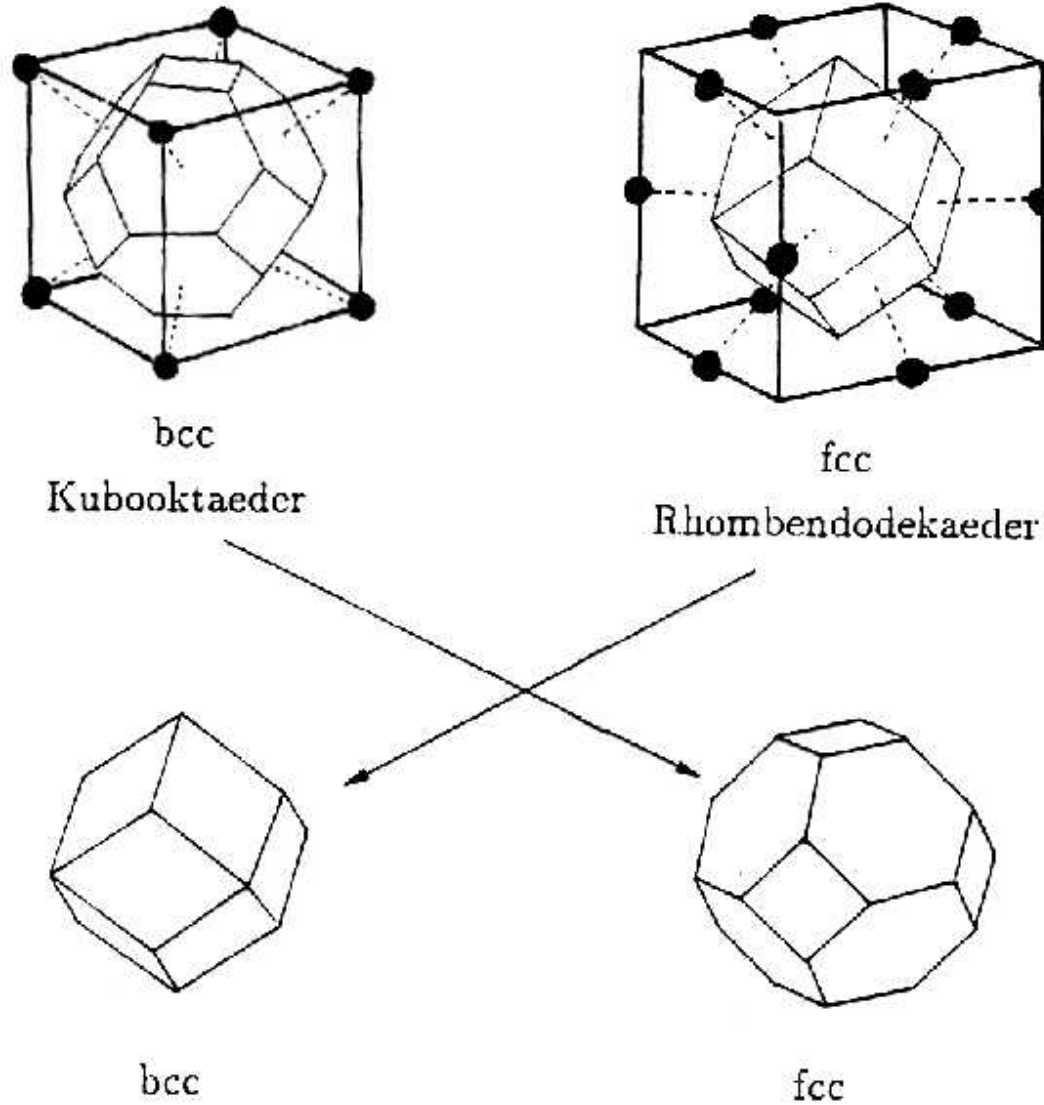


n.b.: Nur Zonen 1, 2, 3 liegen vollständig im dargestellten Bereich.

Konstruktion der 1. Brillouin-Zone

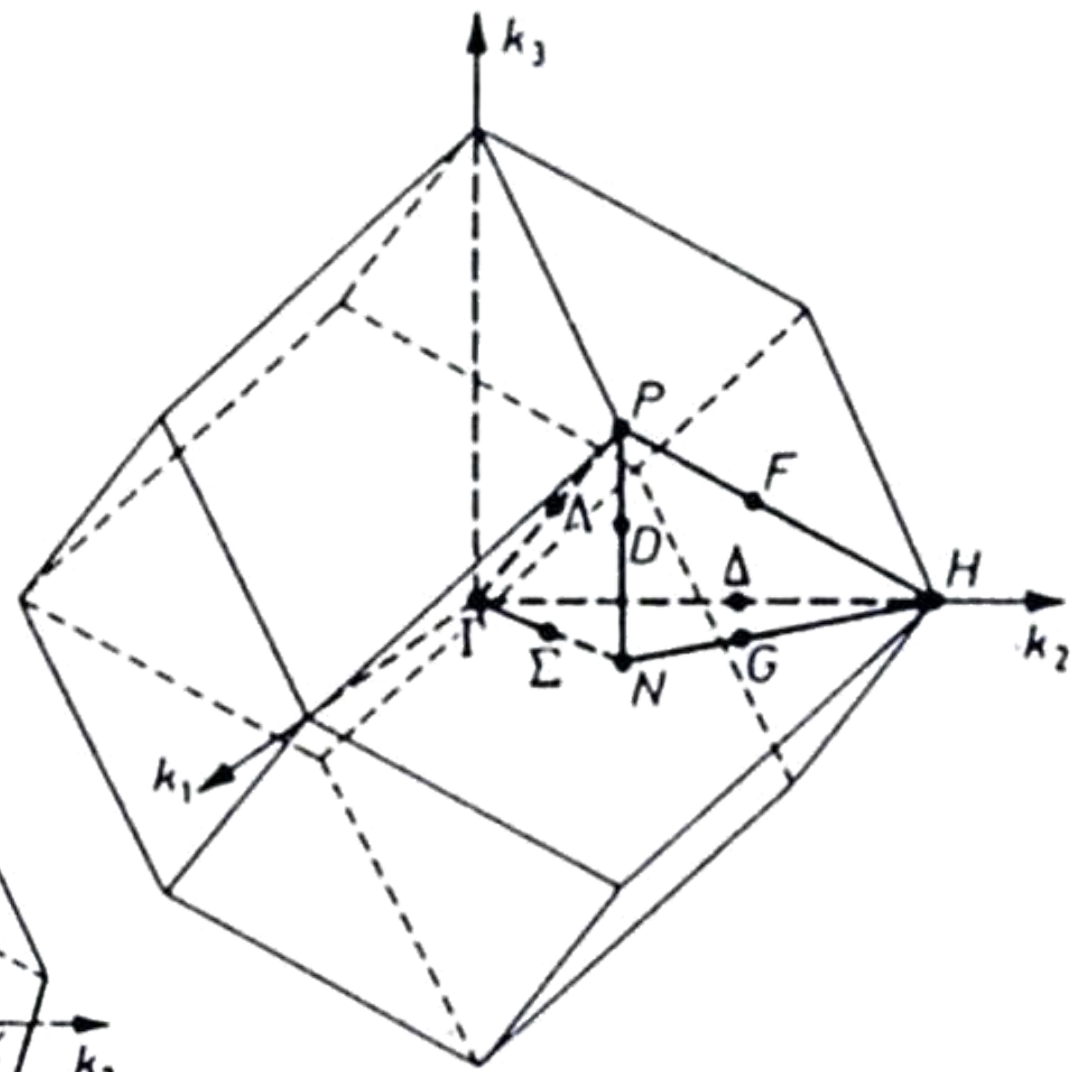
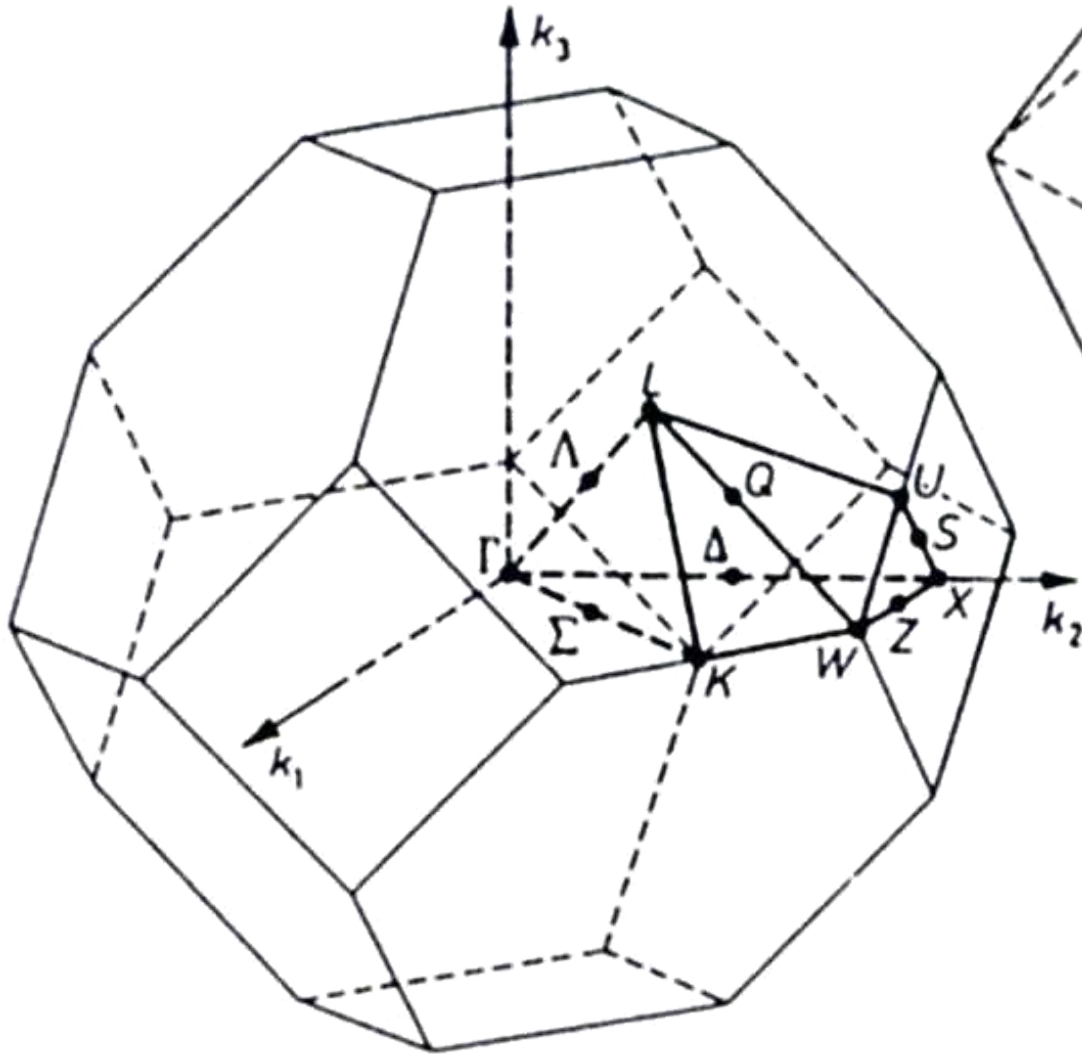


Wigner-Seitz-Zelle im Ortsgitter

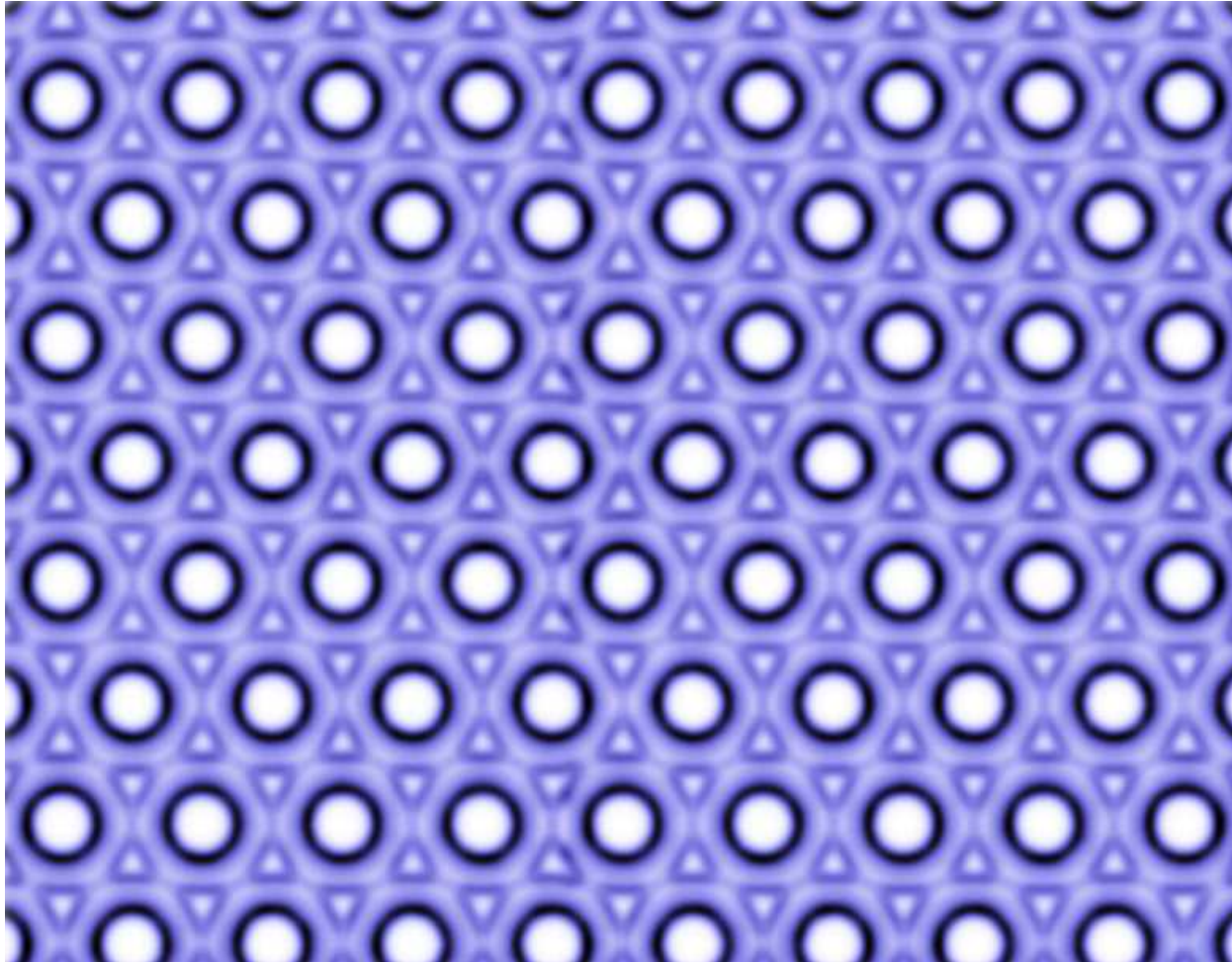


1. Brillouinzone = Wigner-Seitz-Zelle im reziproken Gitter

Symmetriepunkte im REL - fcc, bcc



Eine gitterperiodische Funktion $\rho(\mathbf{r})$



Idee (schematisch)

Fourieranalyse 1D

Beliebige Funktion: Fourierintegral

$$\rho(r) = \int dk \rho_k e^{ikr} \quad \rho_k = \rho(k) = \frac{1}{2\pi} \int dr e^{-ikr} \rho(r)$$

Periodische Funktion: Fourierreihe

$$k = j k_0 ; \quad \rho(r) = \sum_j \rho_j e^{ijk_0 r}$$

Periodische Funktion in 3D?

$$k \rightarrow \vec{k} = (h, k, l) \begin{pmatrix} \vec{k}_{0x} \\ \vec{k}_{0y} \\ \vec{k}_{0z} \end{pmatrix}$$

in nicht-kubischen Gittern besser 1, 2, 3 statt x, y, z


Fourieranalyse gitterperiodischer Funktionen

Bekannt: $\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \rho_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$ $\rho_{\vec{k}} = \frac{1}{V} \int dV e^{-i\vec{k}\vec{r}} \rho(r)$

Gittersymmetrie erzwingt: $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{T}) \quad \forall \vec{T} \in DL$

Einsetzen: $\rho(\vec{r} + \vec{T}) = \sum_{\vec{k}} \rho_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{T}} = \rho(\vec{r})$

Erfüllt für \mathbf{k} mit: $e^{i\vec{k}\vec{T}} = 1$

Das sind die Vektoren $\vec{k} = \vec{G}_{hkl}$ des reziproken Gitters 

Resultat:

Die Fourieranalyse gitterperiodischer Funktionen umfasst nur solche Wellenvektoren, die Vektoren \mathbf{G}_{hkl} des reziproken Gitters sind.

Dieses Ergebnis ist "überall" wichtig: z. B. bei Elektronen, Phononen, Plasmonen, Magnonen, Anyonen.