The Reciprocal Lattice (REL)

(Direct lattice DL)

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

Analytically:

$$e^{i\,\vec{G}(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\,\vec{G}\,\vec{r}}$$

$$\Rightarrow\ e^{i\,\vec{G}\,\vec{R}} = 1$$

$R \in DL$
$G \in REL$

consequently: **G** perp. **R** or **GR** = n 2 π

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 $\vec{g}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\,\delta_{ij}$

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

(Achtung: 2π)

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

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

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

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

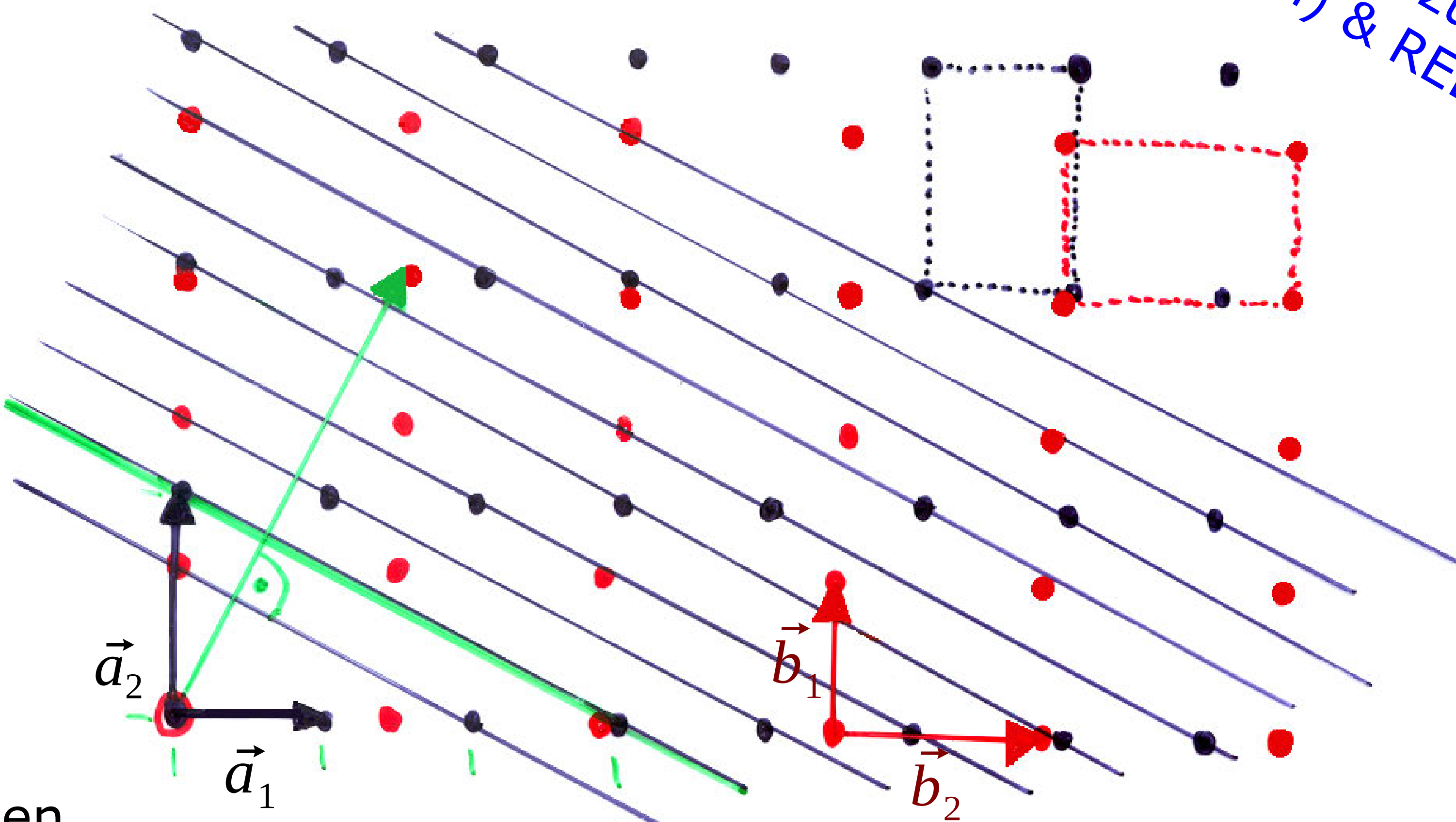
$$\Rightarrow \; e^{i\vec{G}\vec{T}} = 1 \qquad \Rightarrow \; \text{o.}k.$$

- REL ist ein Bravaisgitter (s.o.)
- REL(REL) = DL [Bew.: REL von REL sind alle **K** mit exp(i**KG**)=1.
  Das erfüllen gerade die **T** aus DL.]

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

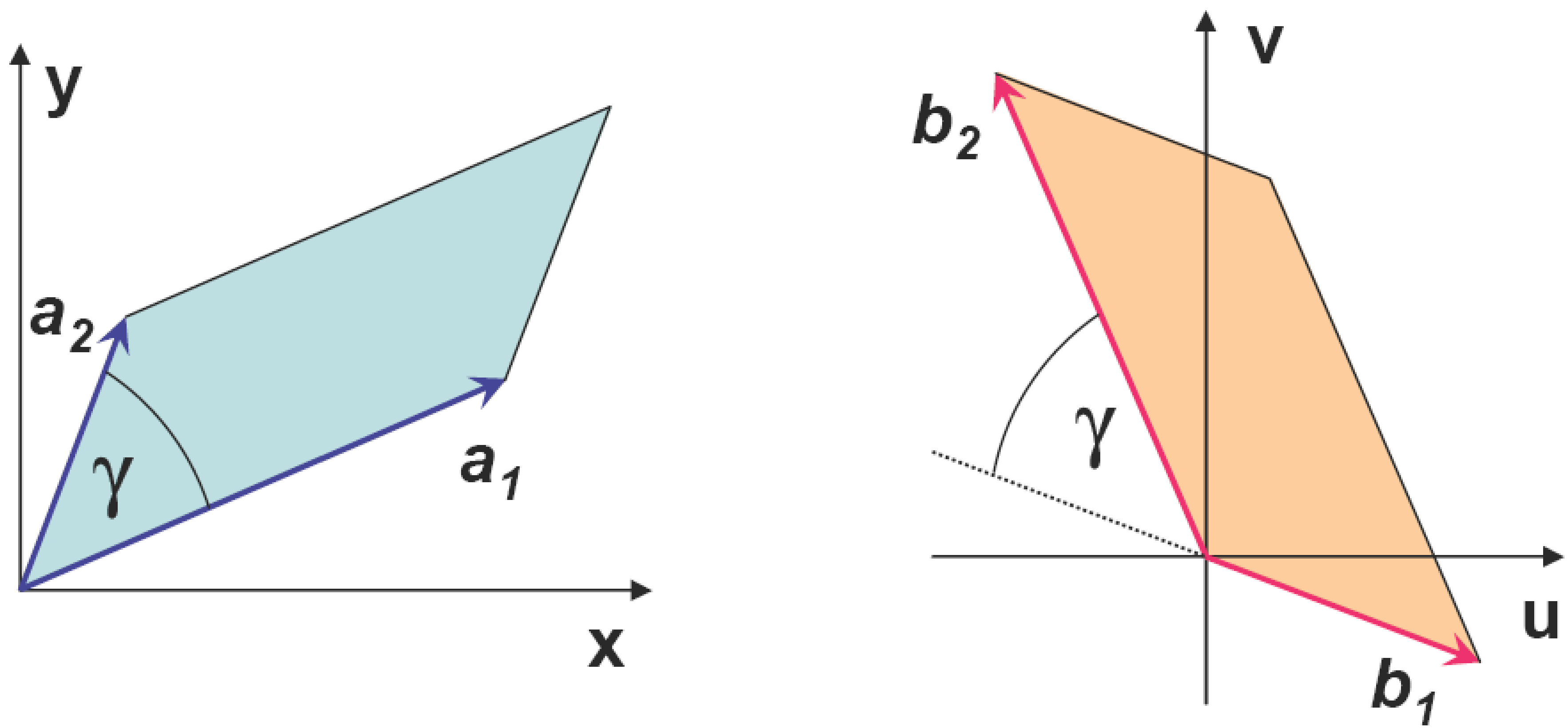
$$\vec{b}_1 = 2\pi \begin{pmatrix}2\\0\\0\end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} = \begin{pmatrix}2\pi\\0\\0\end{pmatrix} \qquad \vec{b}_2 = \begin{pmatrix}0\\\pi\\0\end{pmatrix}$$

Bild zeigt zugleich DL (m) & REL (m^{-1})

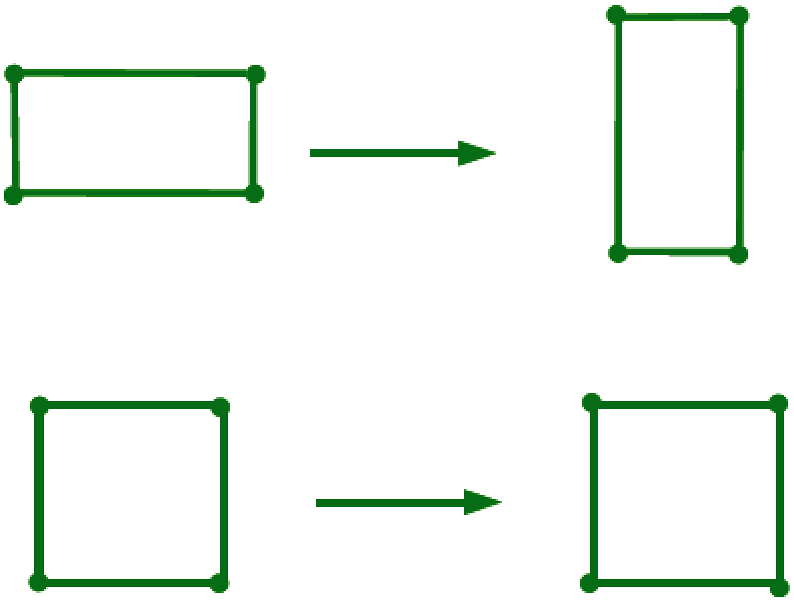


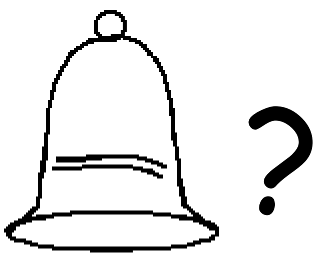
(1 3) Ebenen

Primitive vectors of DL and REL in 2D



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





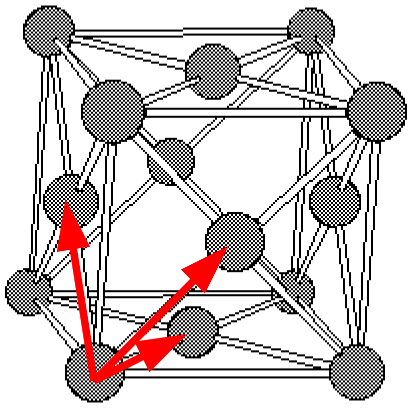
REL: Wichtige Beispiele

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. $(2\pi/a)^3$

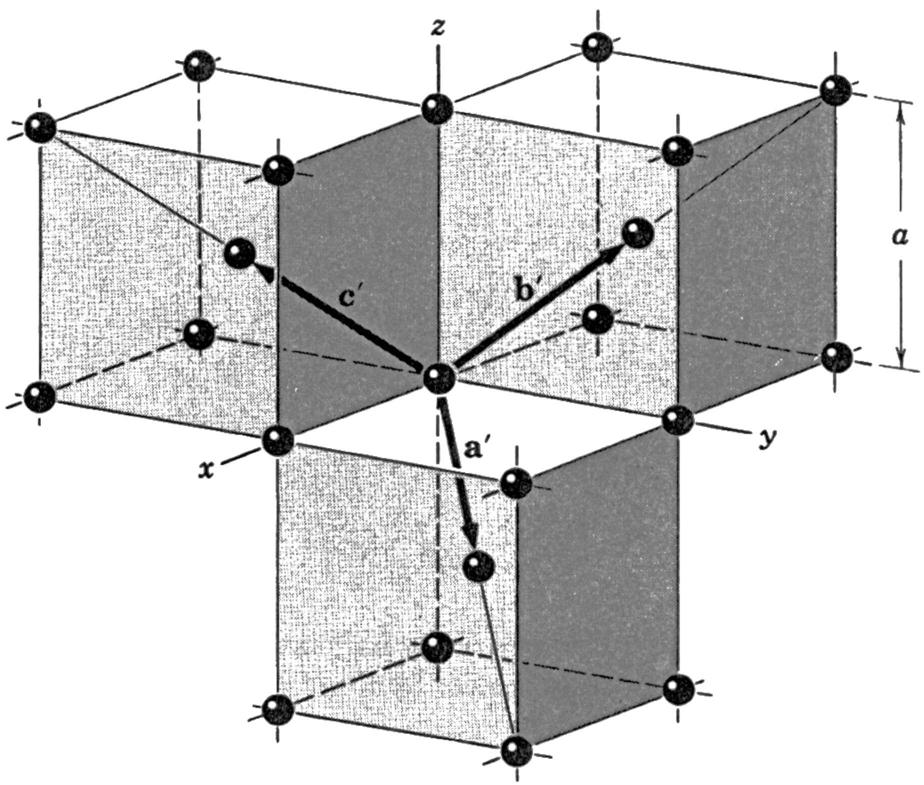


fcc:

$$a_1 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}),\quad a_2 = \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x}),\quad a_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}),$$

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

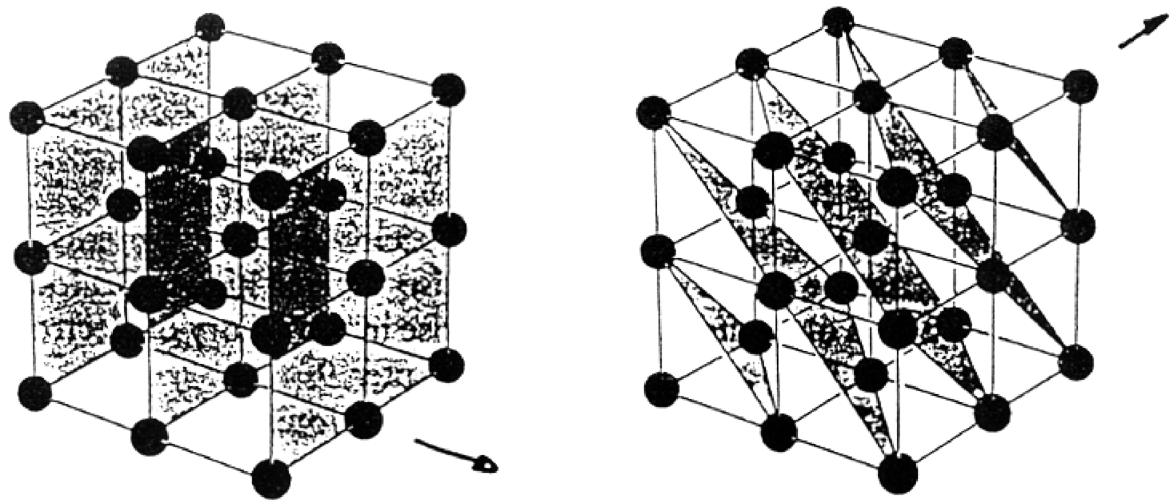
$$b_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x}\right), \quad b_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y}\right), \quad b_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}\right)$$



Das sind i.w. die

a$_i$ des bcc-Gitters

Zusammenhang REL - Gitterebenenscharen



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

Für Gitterebenenschar (Abstand d, enthält alle **R** aus DL)

gibt es **G** aus REL mit **G** ⊥ Ebenen und minimaler Länge $2\pi/d$.

Und umgekehrt:

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

$\mathbf{G_0}$ ist der kürzeste Vektor des REL parallel zu **G.**

Für Gitterebenen im Abstand d gibt es **G** aus REL, steht senkrecht auf Ebenen, G_{min} = d/2π.

Beweis Teil 1 (⇒):

Gegeben Ebenenschar, die alle **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 **G**

und gleicher Wert auf Ebenen im Abstand $\lambda = 2\pi / G$

Auf der Ebene, die **R**=**0** enthält, ist exp(i**GR**)=1.

Also Welle = 1 auf all diesen Ebenen.

Die Ebenen enthalten alle **R** des DL.

Also exp(i**GR**)=1 für alle **R** des DL.

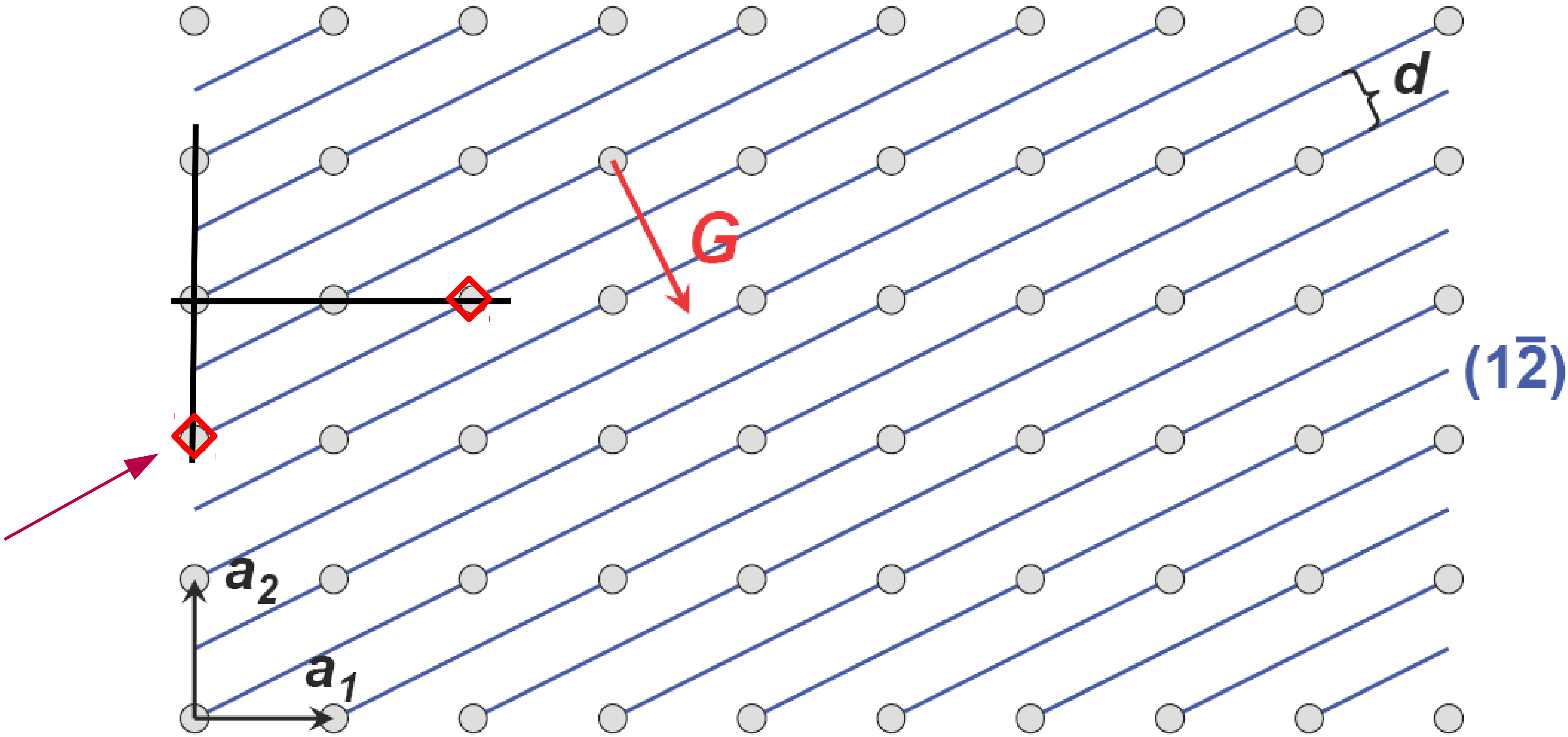
Also ist **G** ein Vektor des REL.

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 a_1, a_2, a_3: 2, -1, ∞

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 ist der

kürzeste reziproke Gittervektor, der senkrecht auf Ebenen steht.

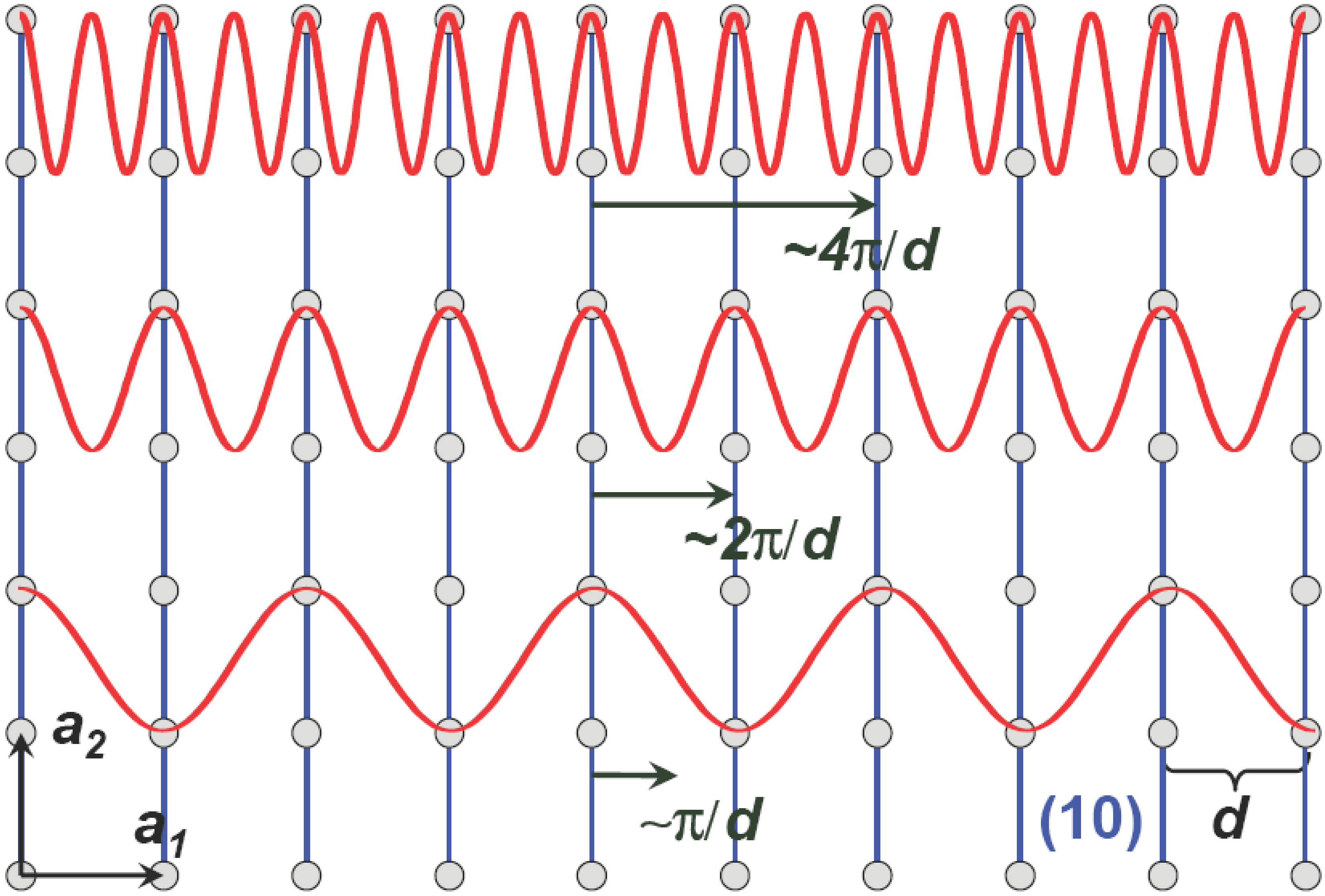
d. h. (hkl) senkrecht zu $\mathbf{G}_{\mathbf{hkl}} = h\,\mathbf{g}_1 + k\,\mathbf{g}_2 + l\,\mathbf{g}_3$

(Bew.: Schauen Sie sich Hesse'sche Normalenform an.)

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

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

Abtasten einer Welle durch ein Gitter

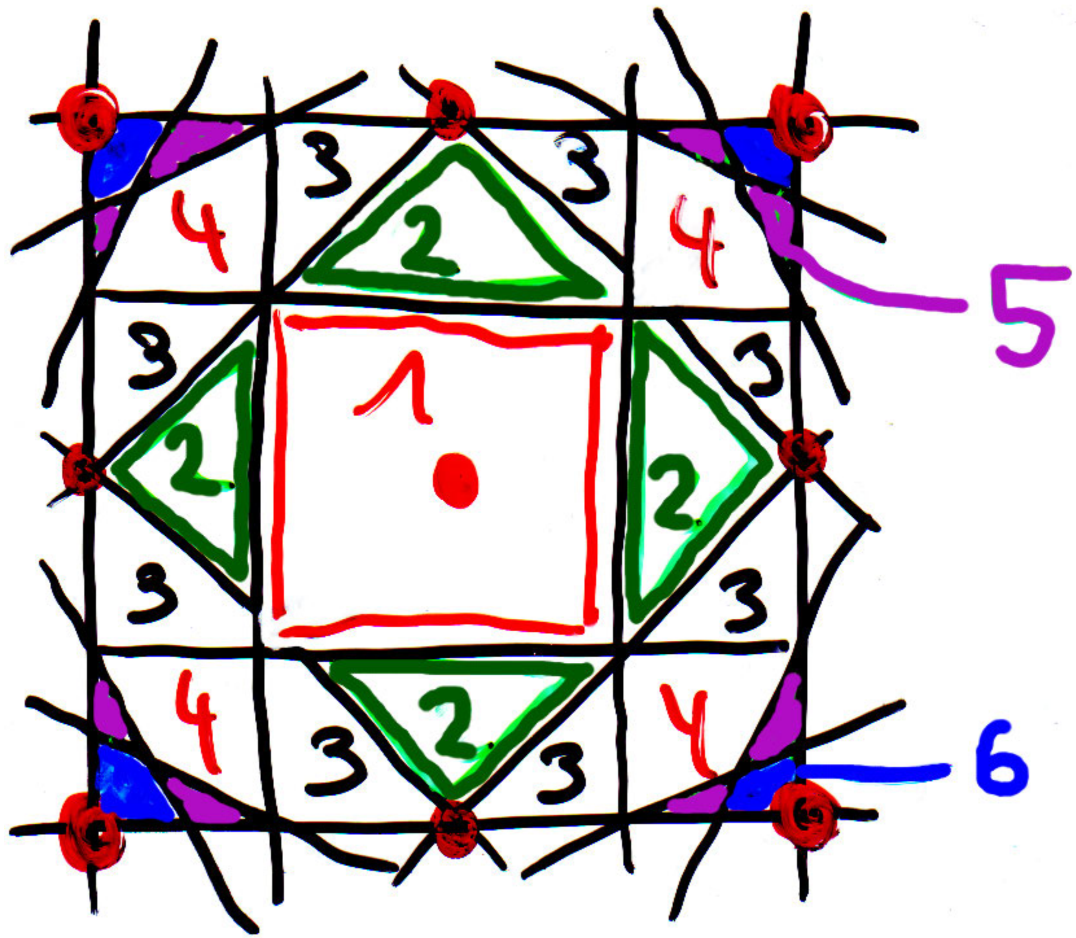


'Maximaler' Wellenvektor $|\mathbf{k}_{max}| = \pi/d$

Brillouinzonen

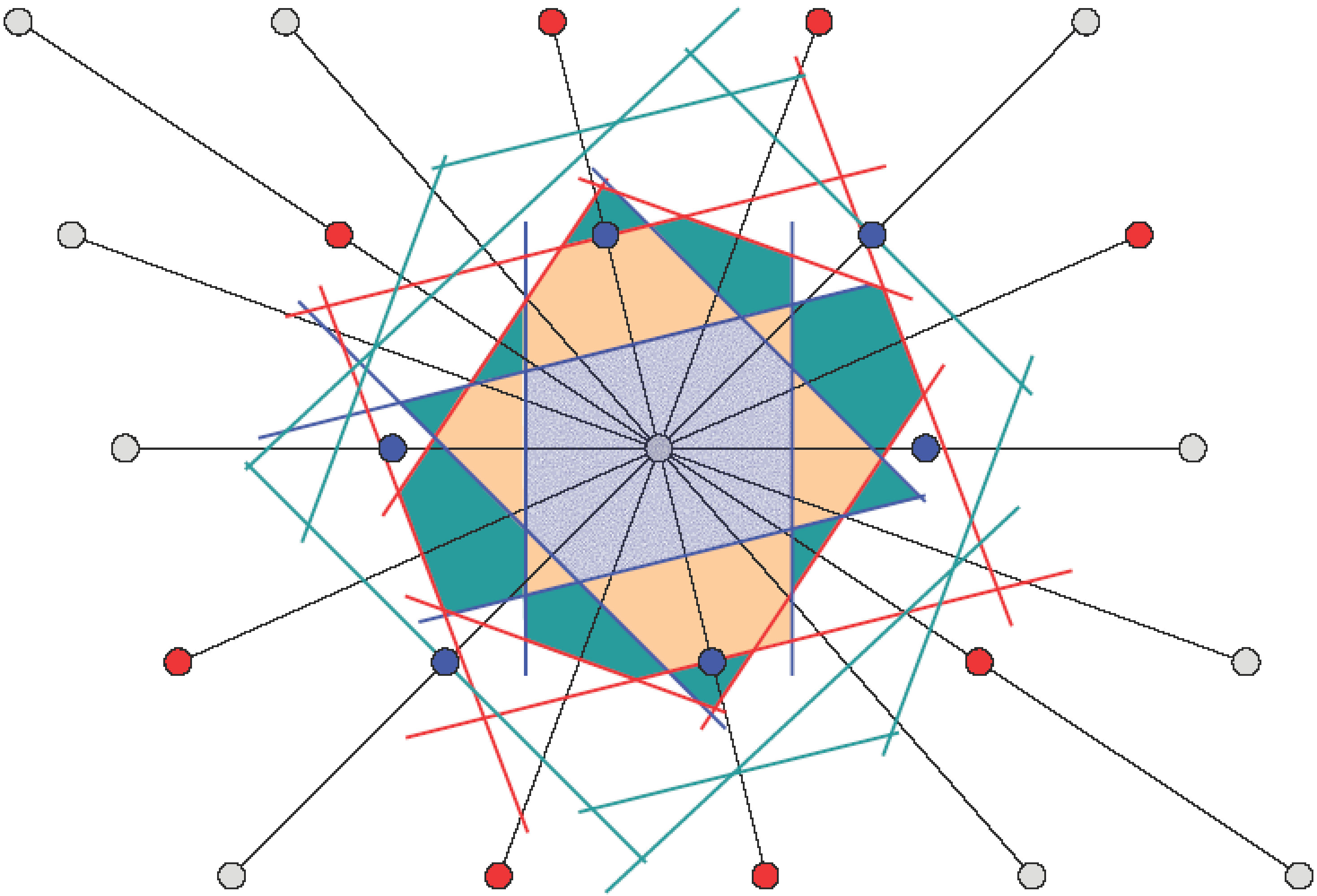
1. BZ: Menge der k-Punkte, die von k=0 (Γ-Punkt) erreichbar sind,
ohne eine Braggebene zu durchqueren

n. BZ: {k}, die von (n-1). BZ über eine Braggebene erreichbar
und nicht zu (n-1). BZ selbst gehören

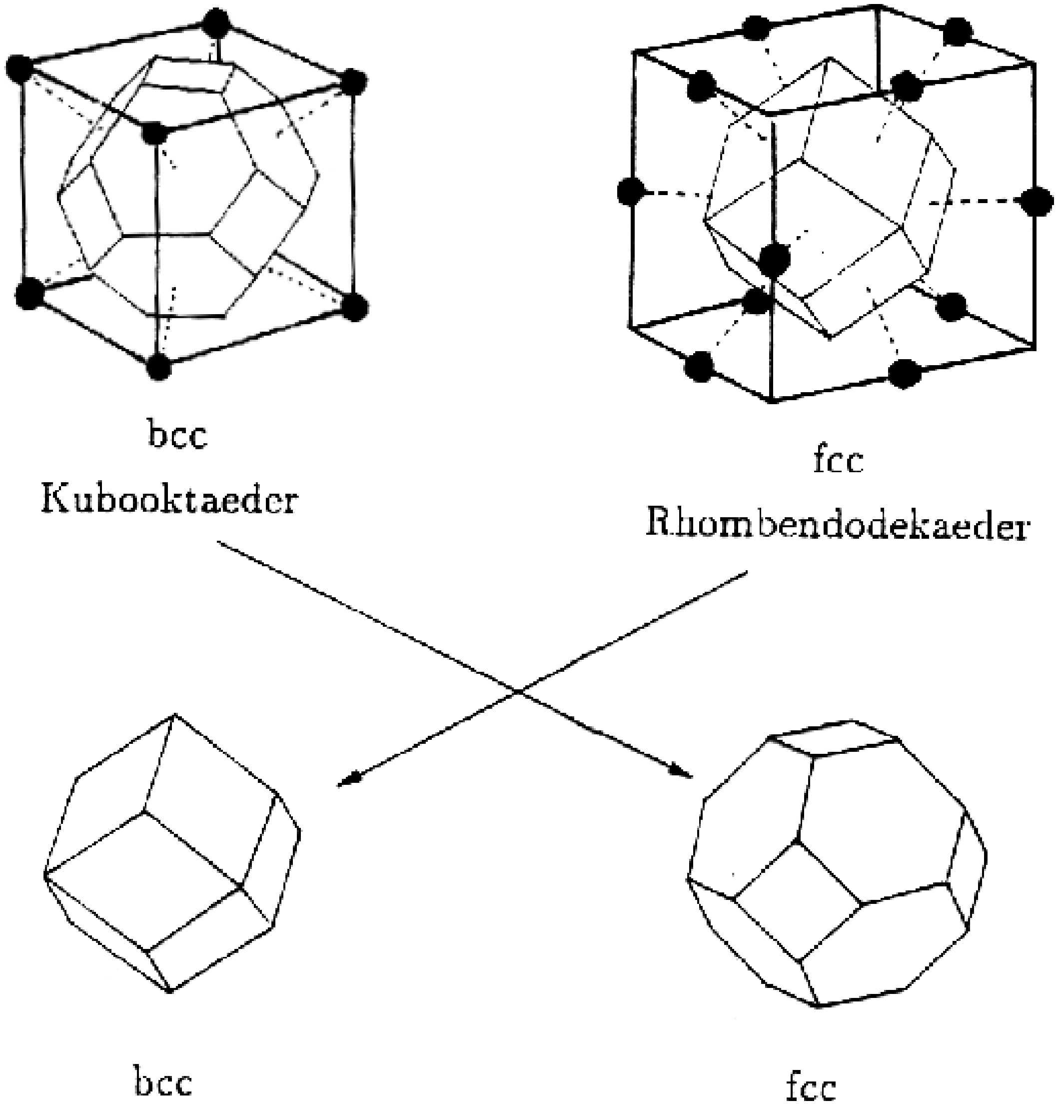


n.b.: Nur Zonen 1, 2, 3 liegen vollständig im dargestellten Bereich.

Konstruktion der 1. Brillouin-Zone

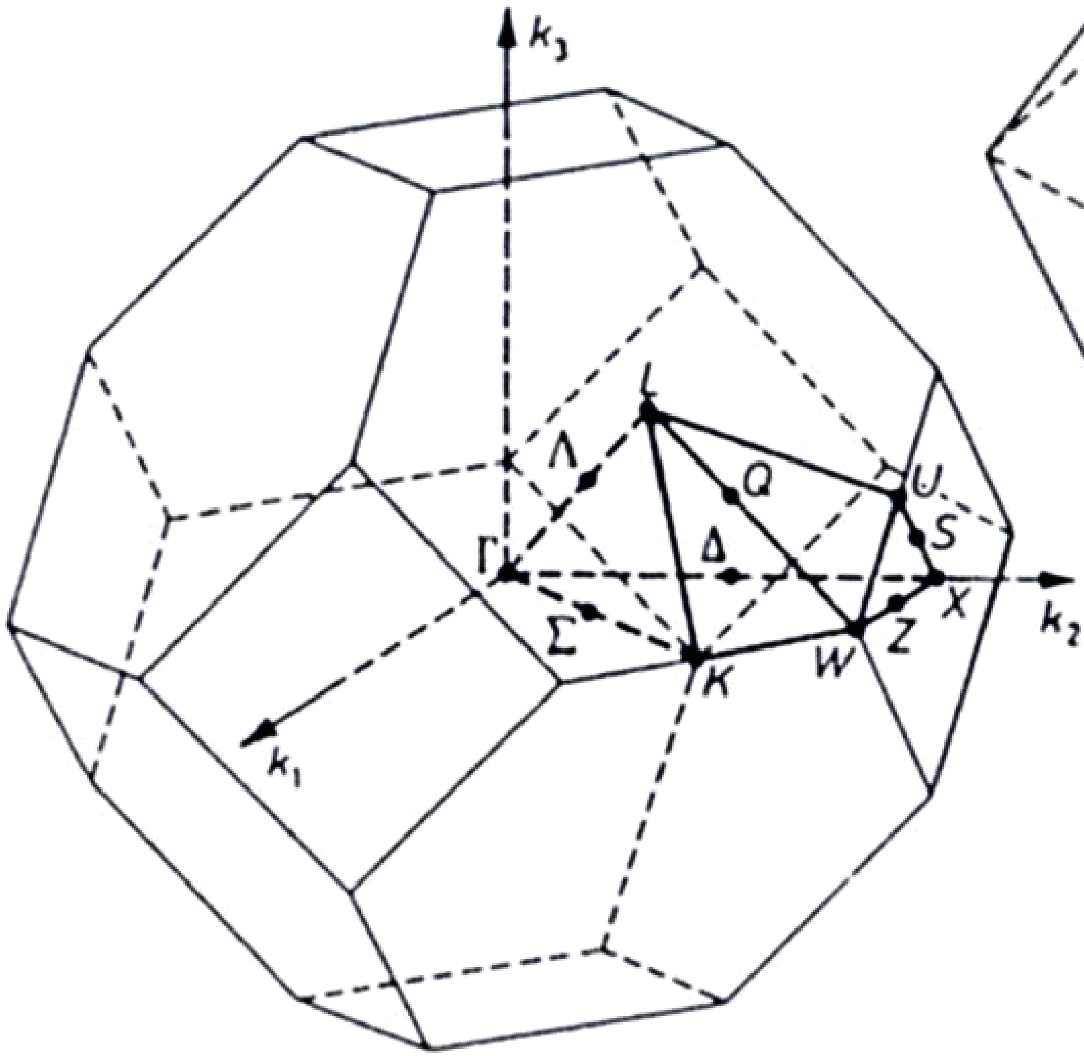


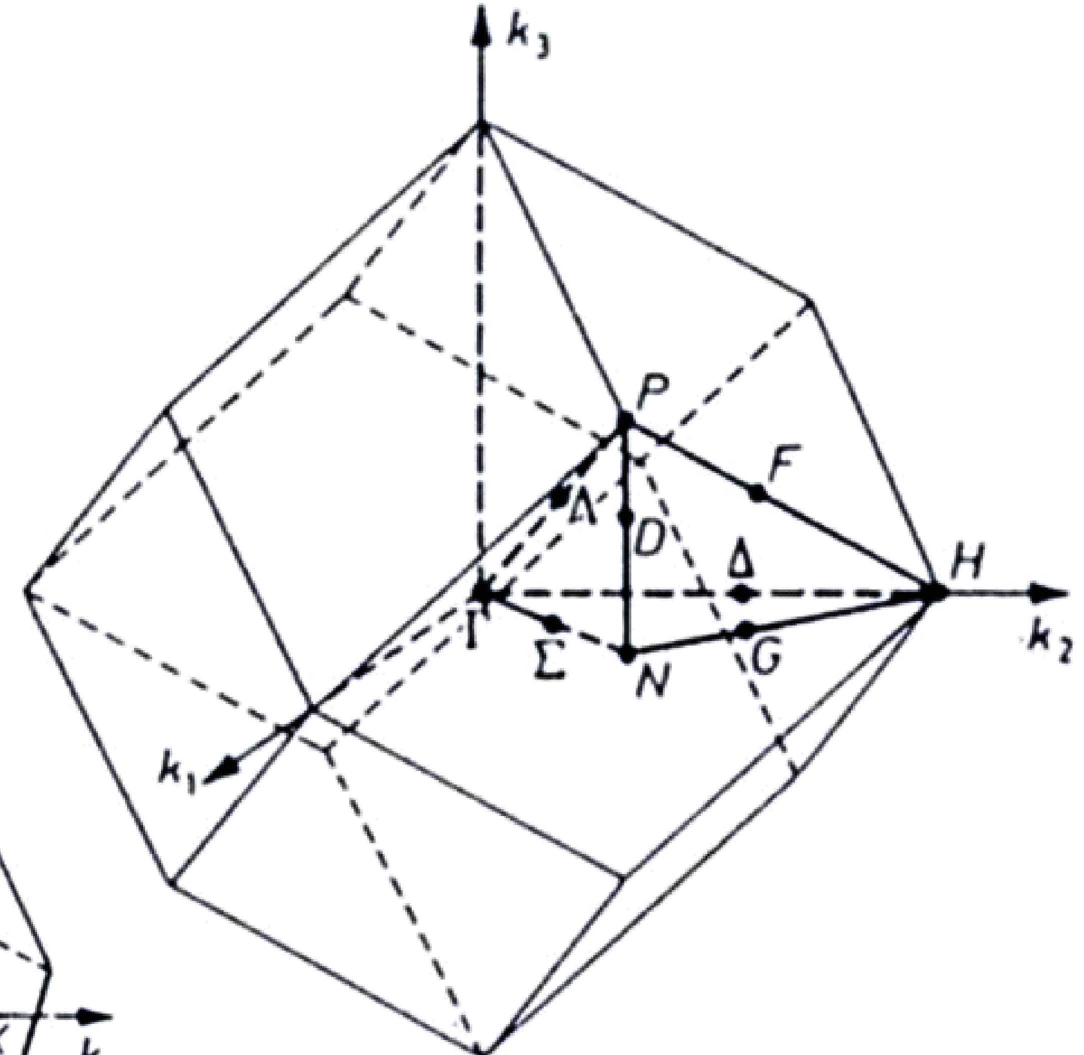
Wigner-Seitz-Zelle im Ortsgitter



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

Symmetriepunkte im REL - fcc, bcc





Fourieranalyse gitterperiodischer Funktionen

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

Gittersymmetrie $\qquad \rho\,(\vec{r}\,) = \rho\,(\vec{r} + \vec{T}\,) \qquad \forall\, \vec{T} \in DL$

erzwingt:

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

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

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.

Diese Idee wird immer wieder auftauchen.

(Elektronen, Phononen, Plasmonen, Magnonen, Anyonen usf.)