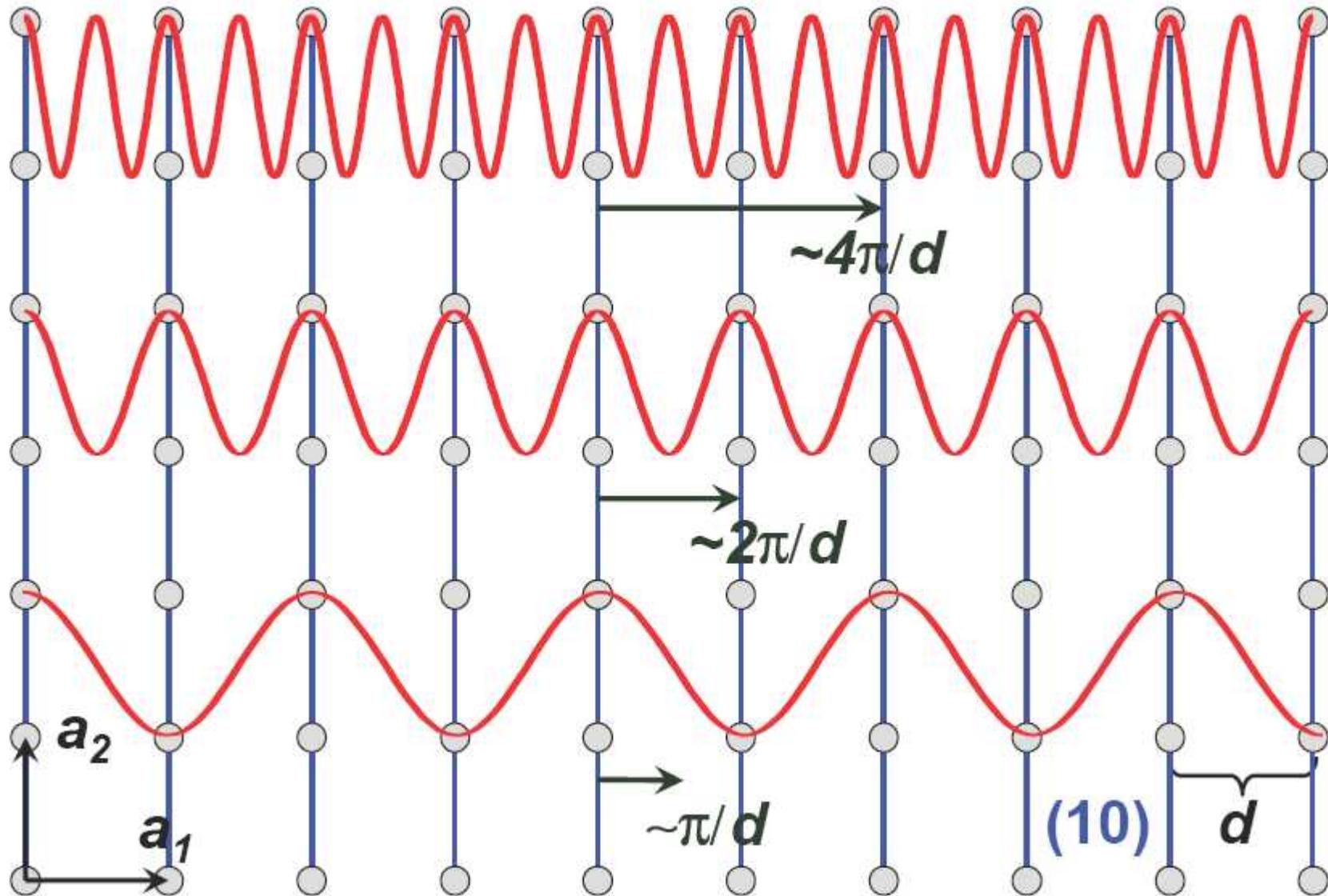


# Gitterperiodische ebene Wellen



# 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:  $2\pi$ )

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

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

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

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

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

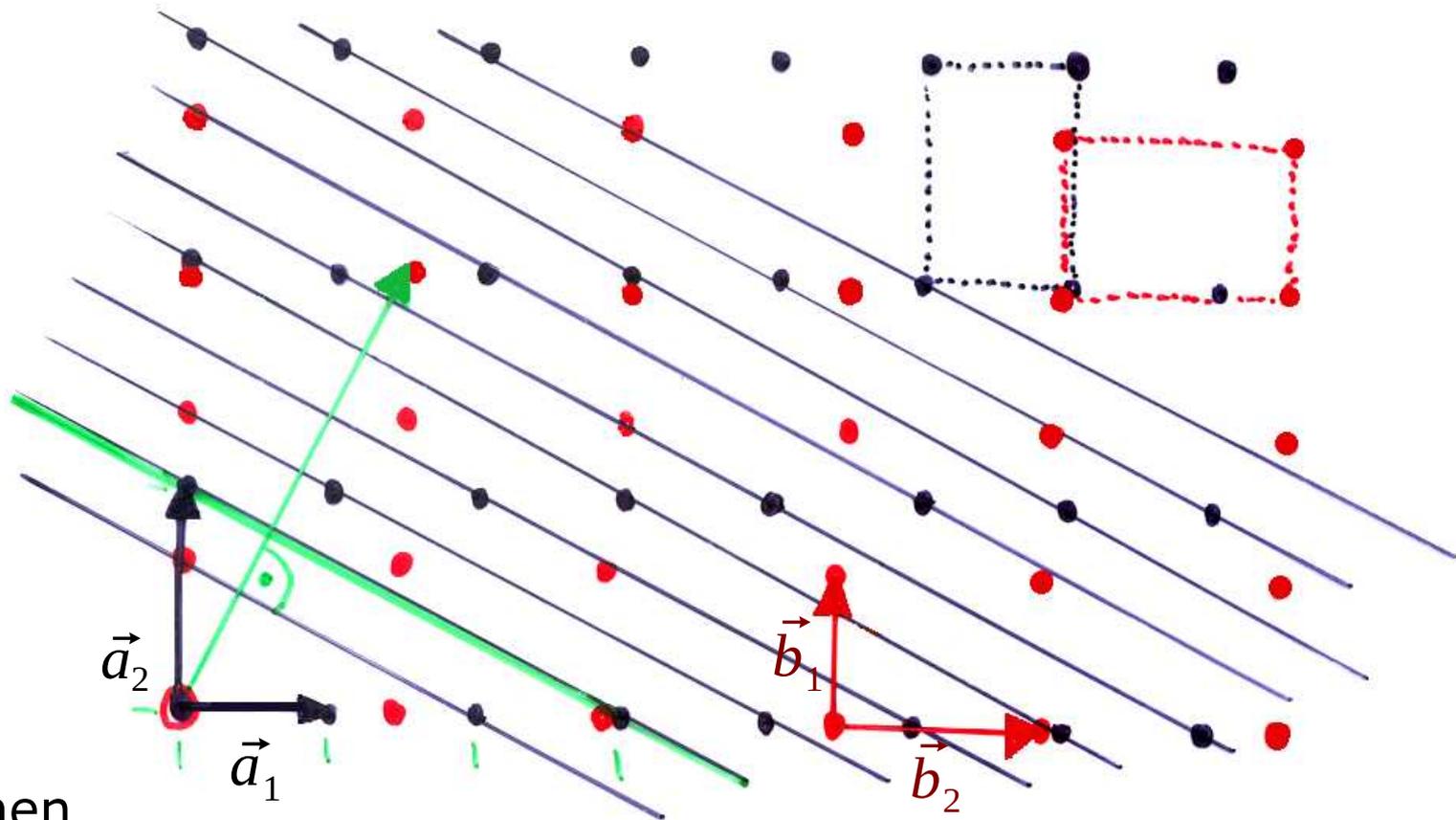
$$\Rightarrow e^{i\vec{G}\vec{T}} = 1 \quad \Rightarrow \text{o.k.}$$

- 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<sup>-1</sup>)

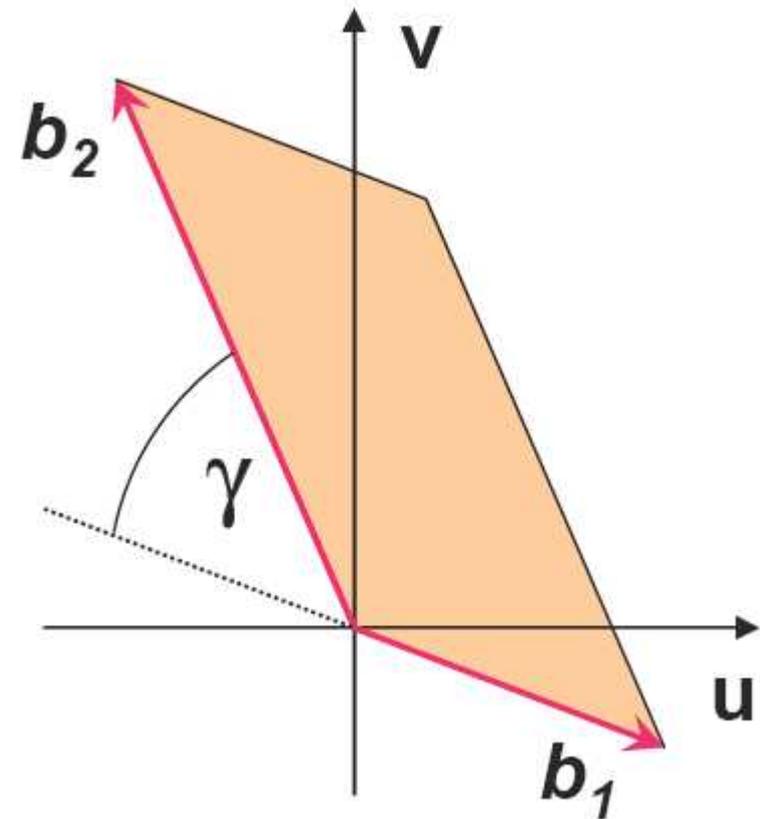
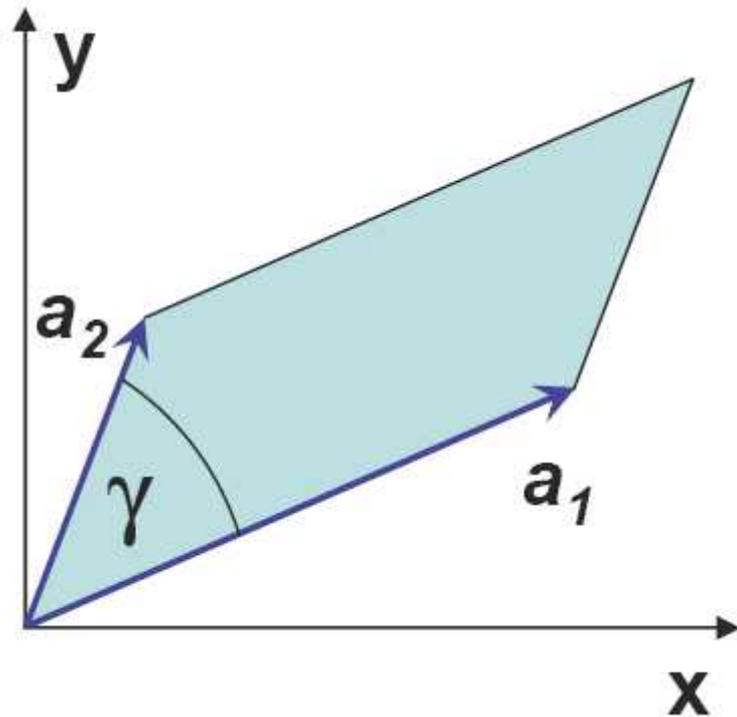
$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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



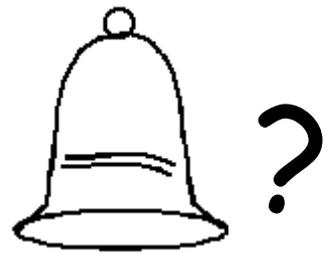
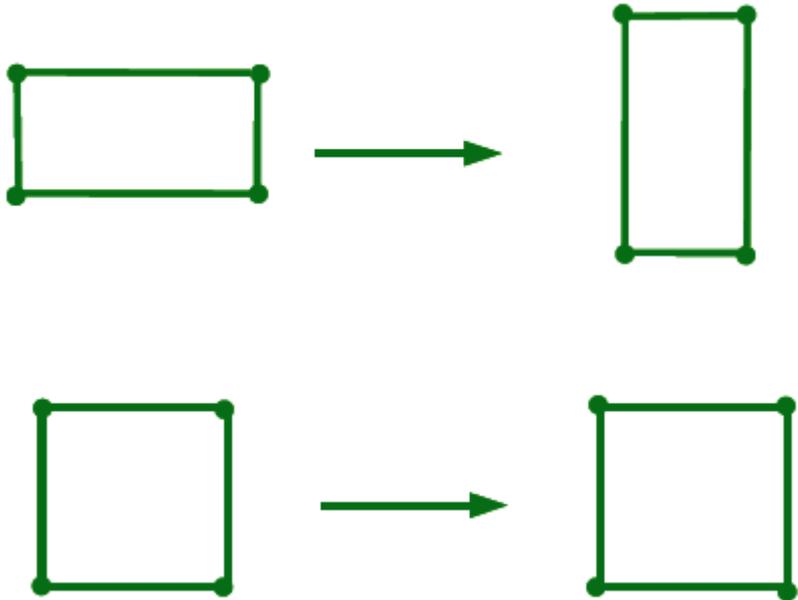
(1 3) Ebenen

# Primitive vectors of DL and REL in 2D



© WSI München

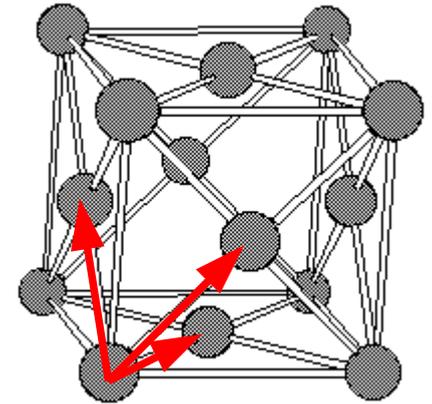
- symmetry of DL maintained
- primitive vectors orthogonal to those of DL
- reciprocal dimensions



# REL: Wichtige Beispiele

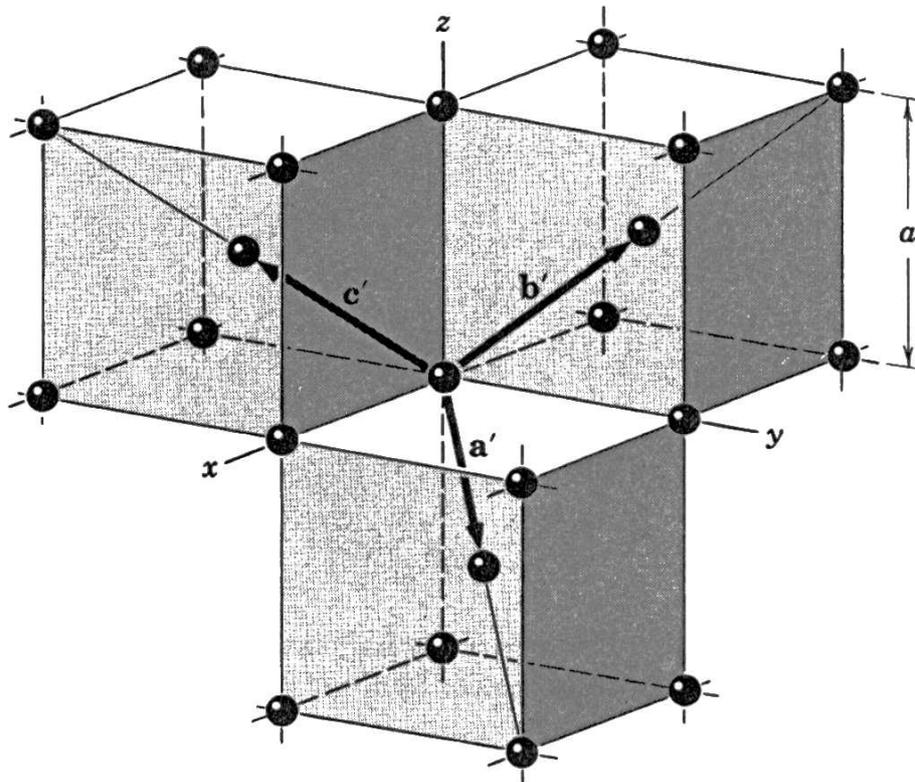
sc:  $a_1 = a \hat{x}, \quad a_2 = a \hat{y}, \quad a_3 = a \hat{z}$   
 $b_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x}, \quad b_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}, \quad b_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{z}$

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



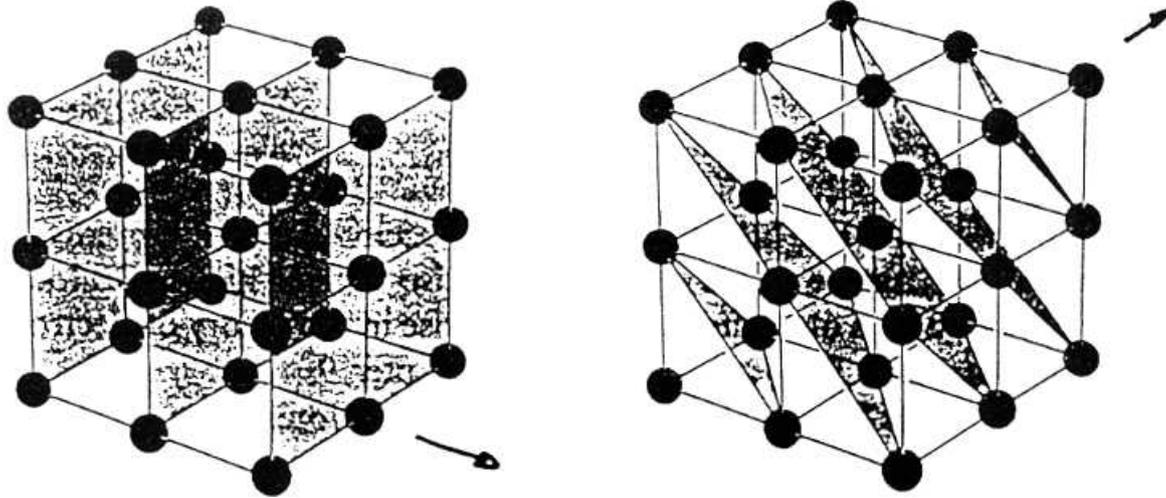
fcc:  $a_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \quad a_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}), \quad a_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}),$   
 $b_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x}), \quad b_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y}), \quad b_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$

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



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.

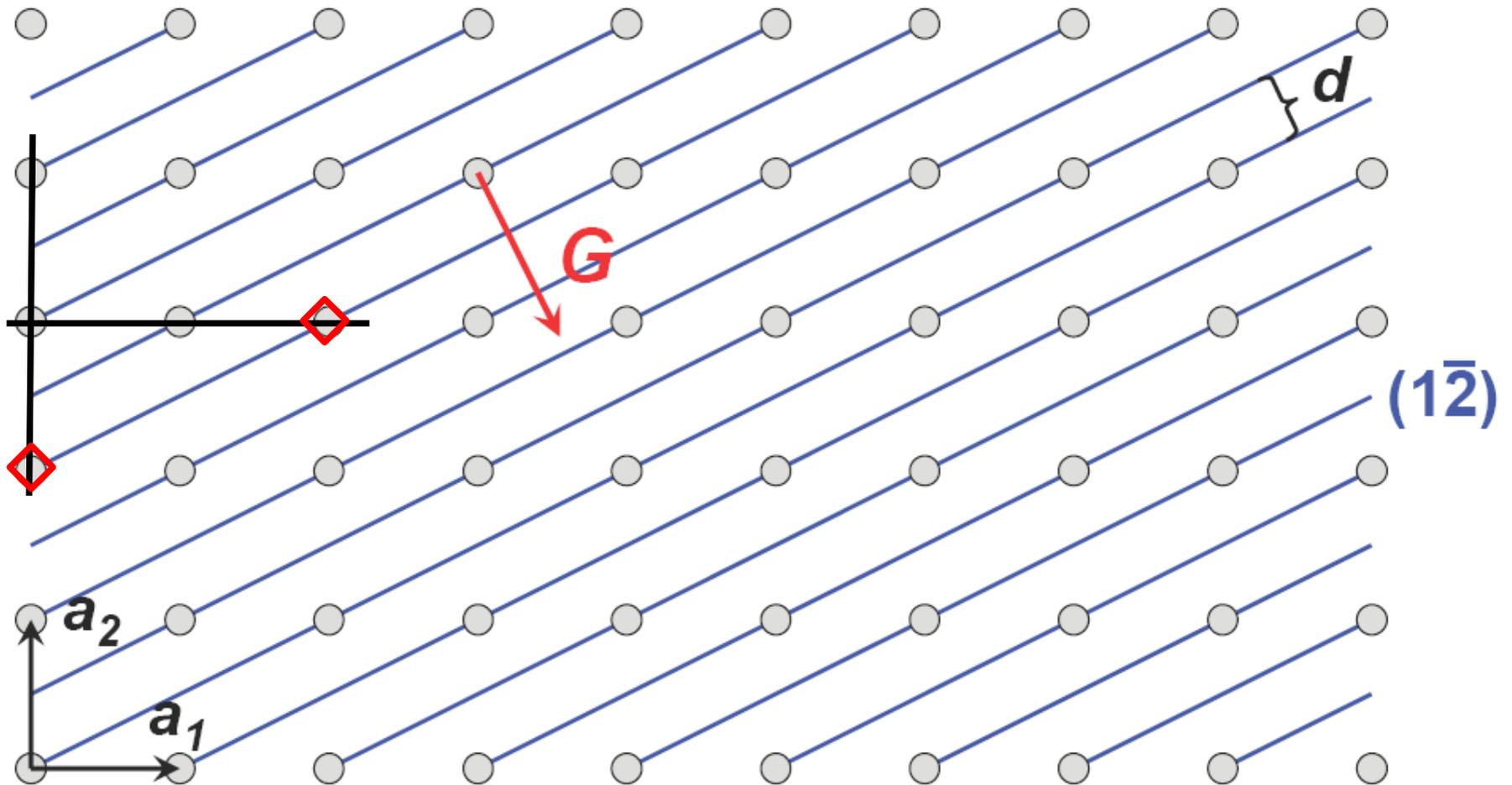
Also ist  $\mathbf{G}$  ein Vektor des REL.

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.

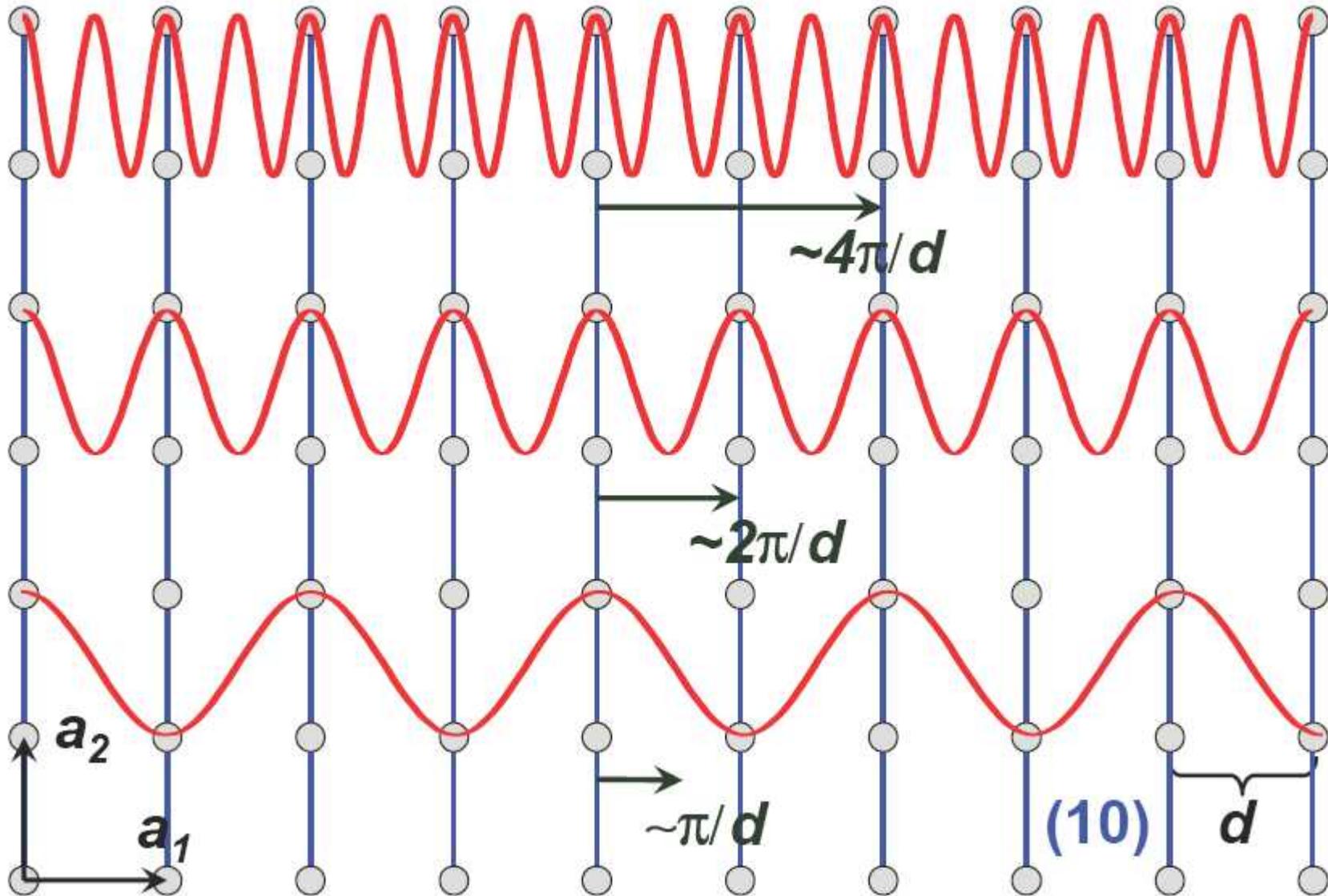
d. h.  $(hkl)$  senkrecht zu  $\mathbf{G}_{hkl} = h \mathbf{g}_1 + k \mathbf{g}_2 + l \mathbf{g}_3$

(Bew.: Hesse'sche Normalform)

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

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

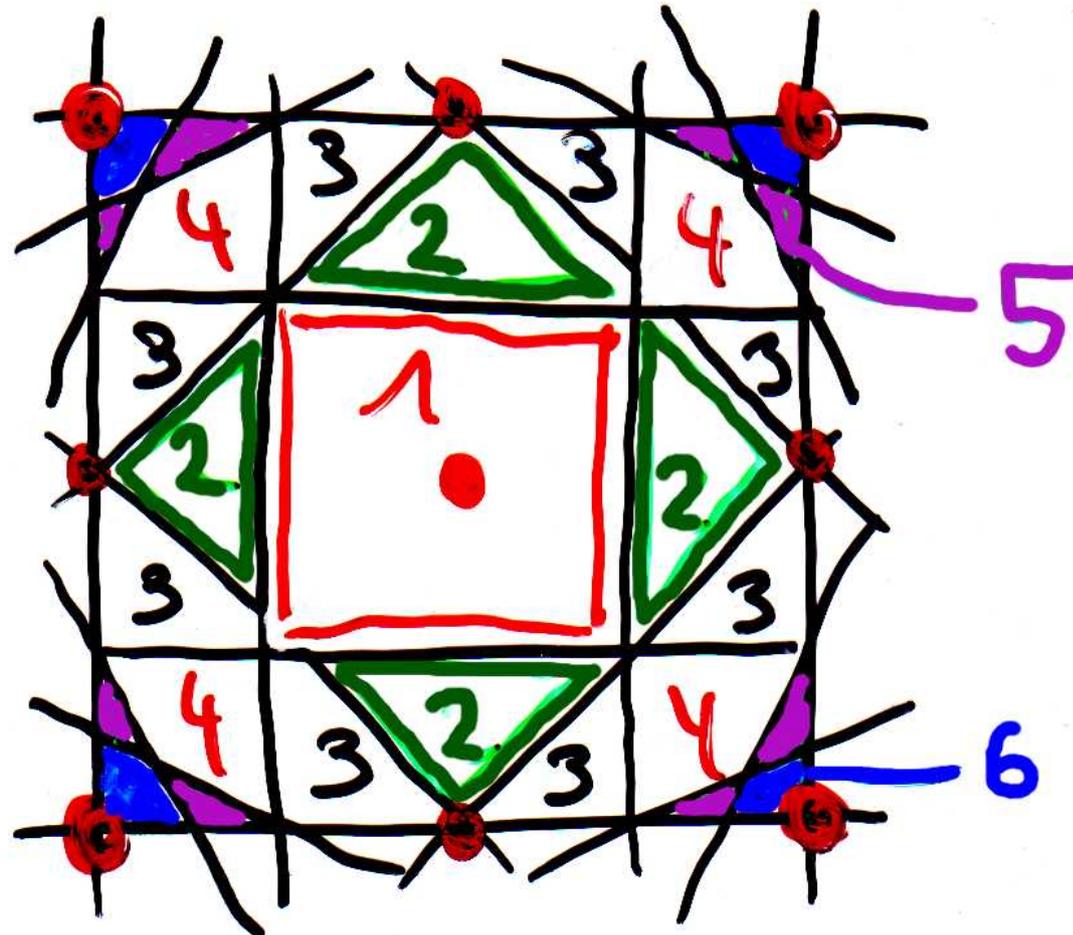
# Abtasten einer Welle durch ein Gitter



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

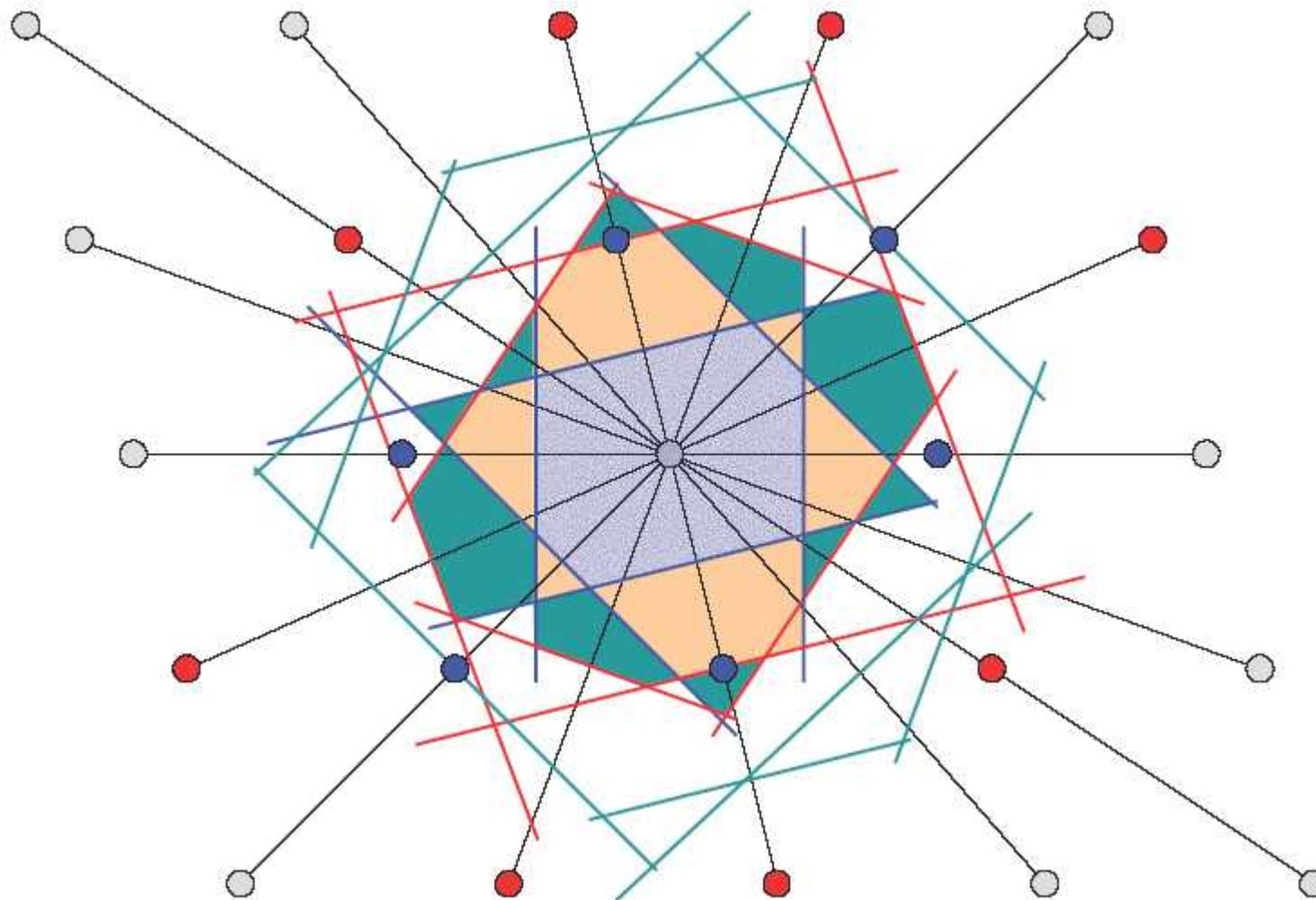
# Brillouinzone

1. BZ: Menge der  $k$ -Punkte, die von  $k=0$  ( $\Gamma$ -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

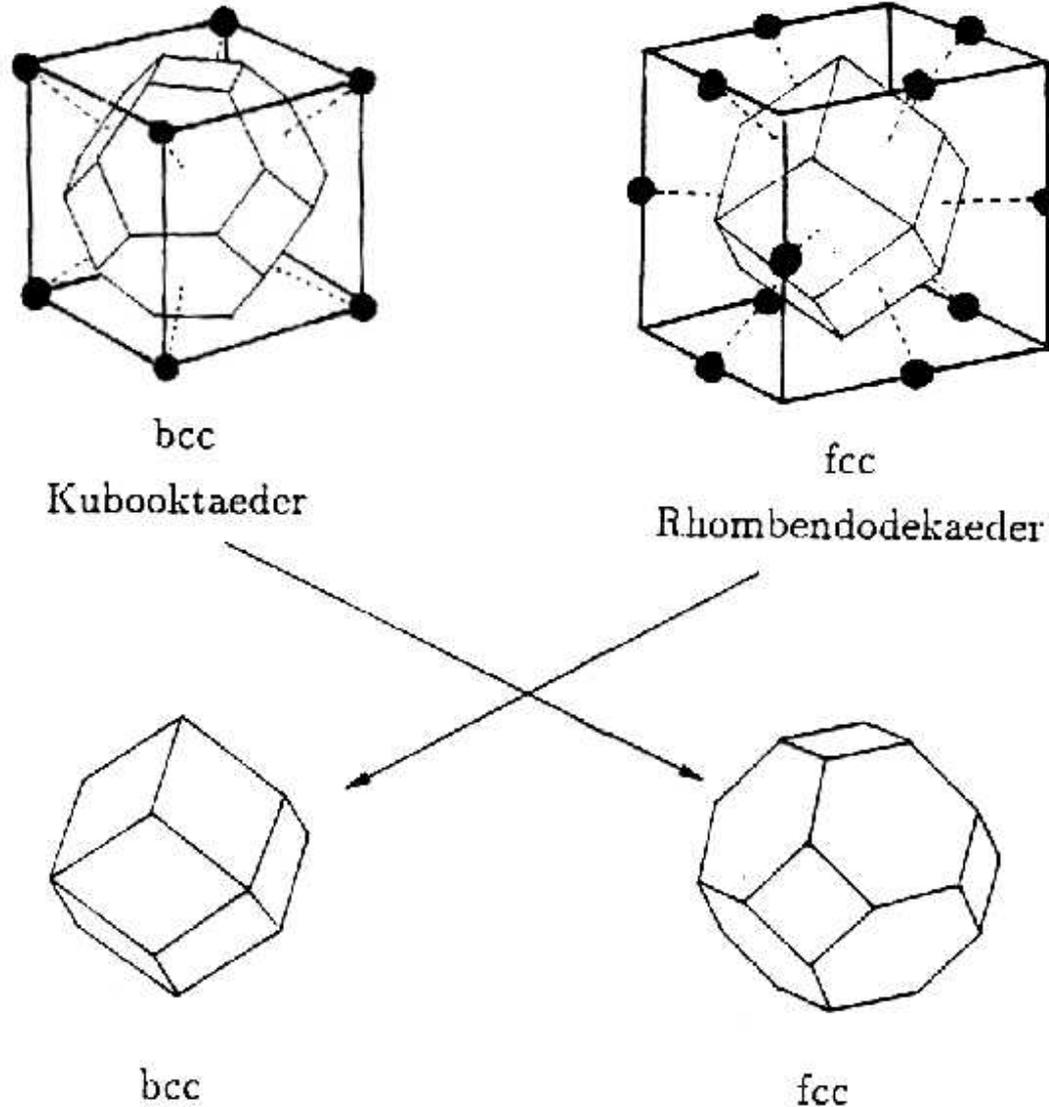


n.b.: Nur Zonen 1, 2, 3 liegen vollständig im dargestellten Bereich.

# Konstruktion der 1. Brillouin-Zone

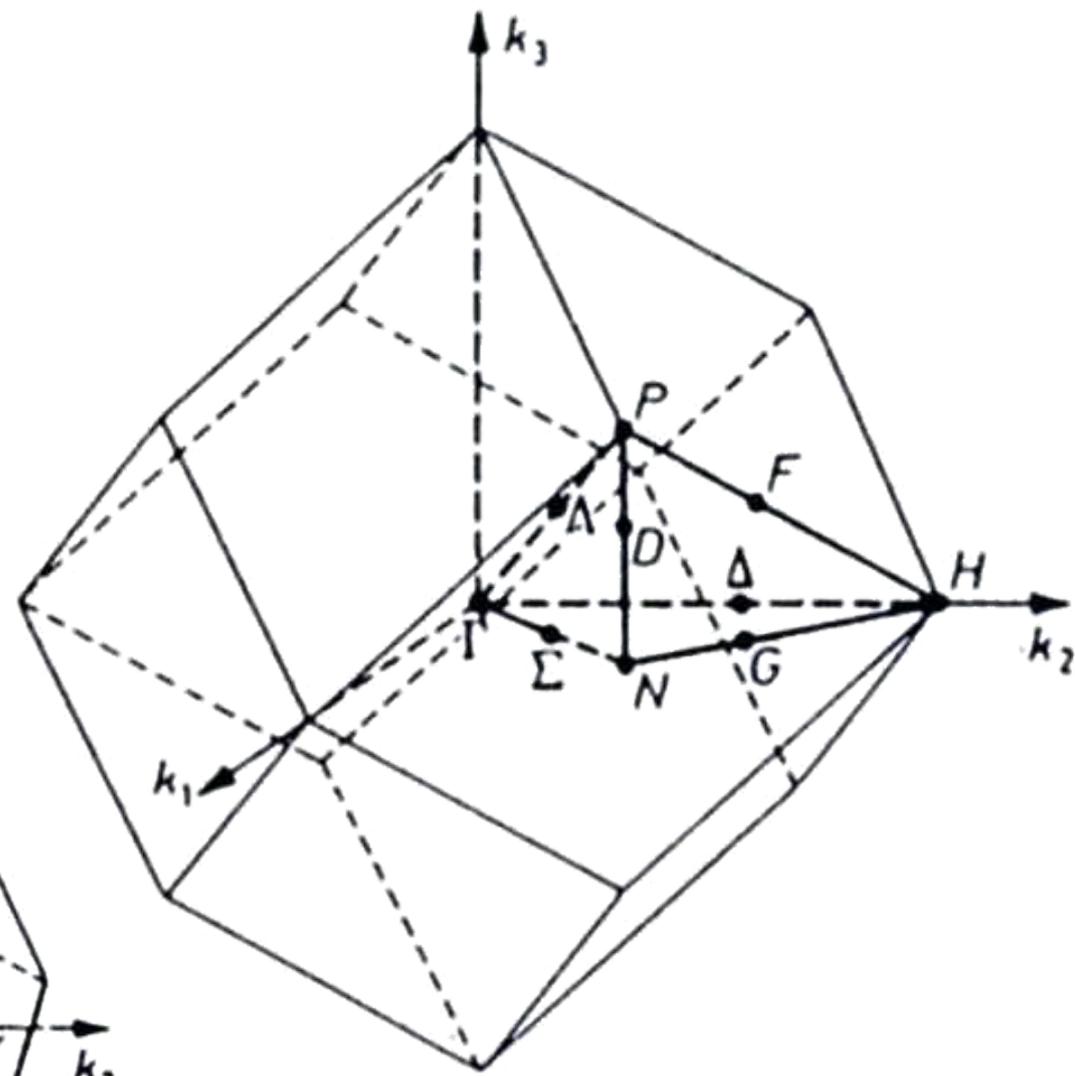
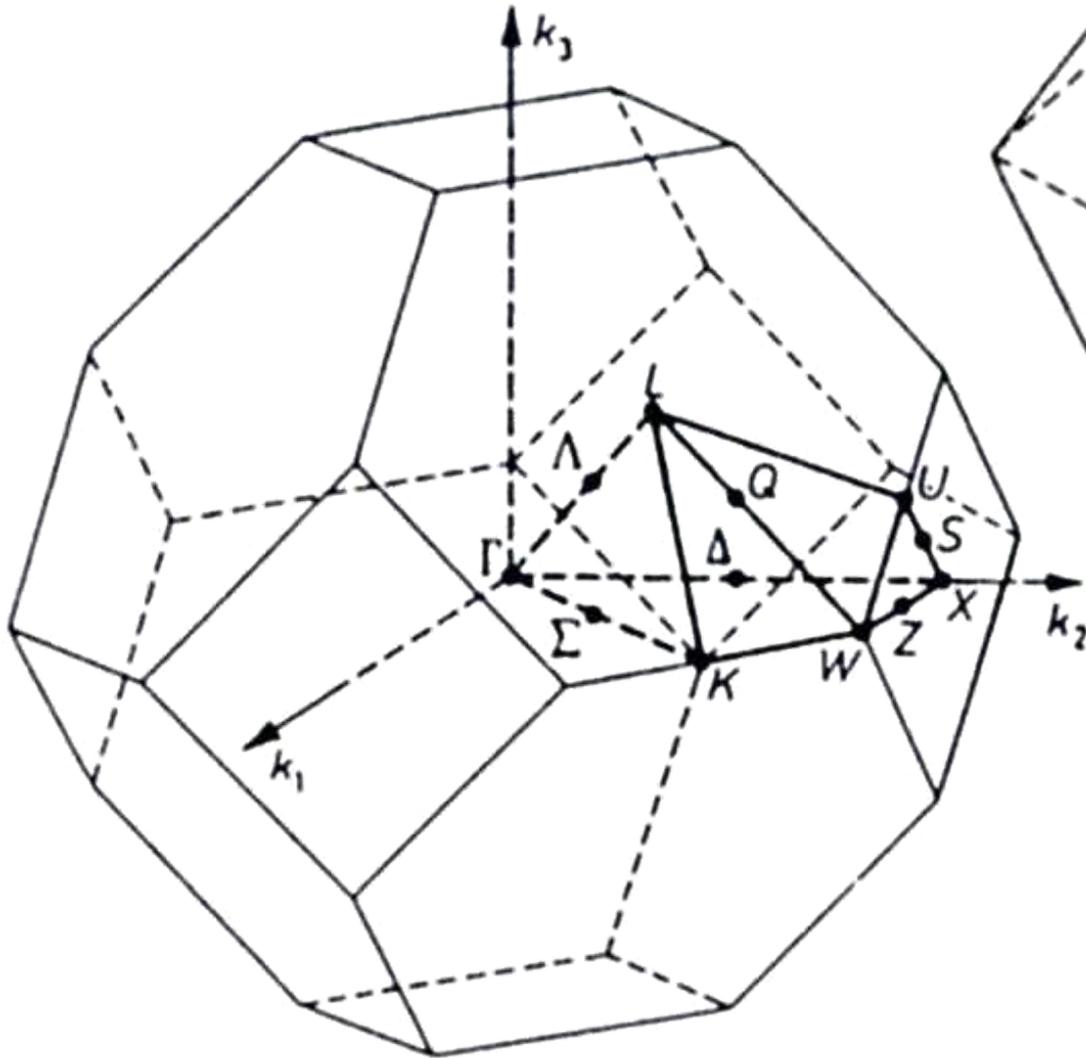


# Wigner-Seitz-Zelle im Ortsgitter

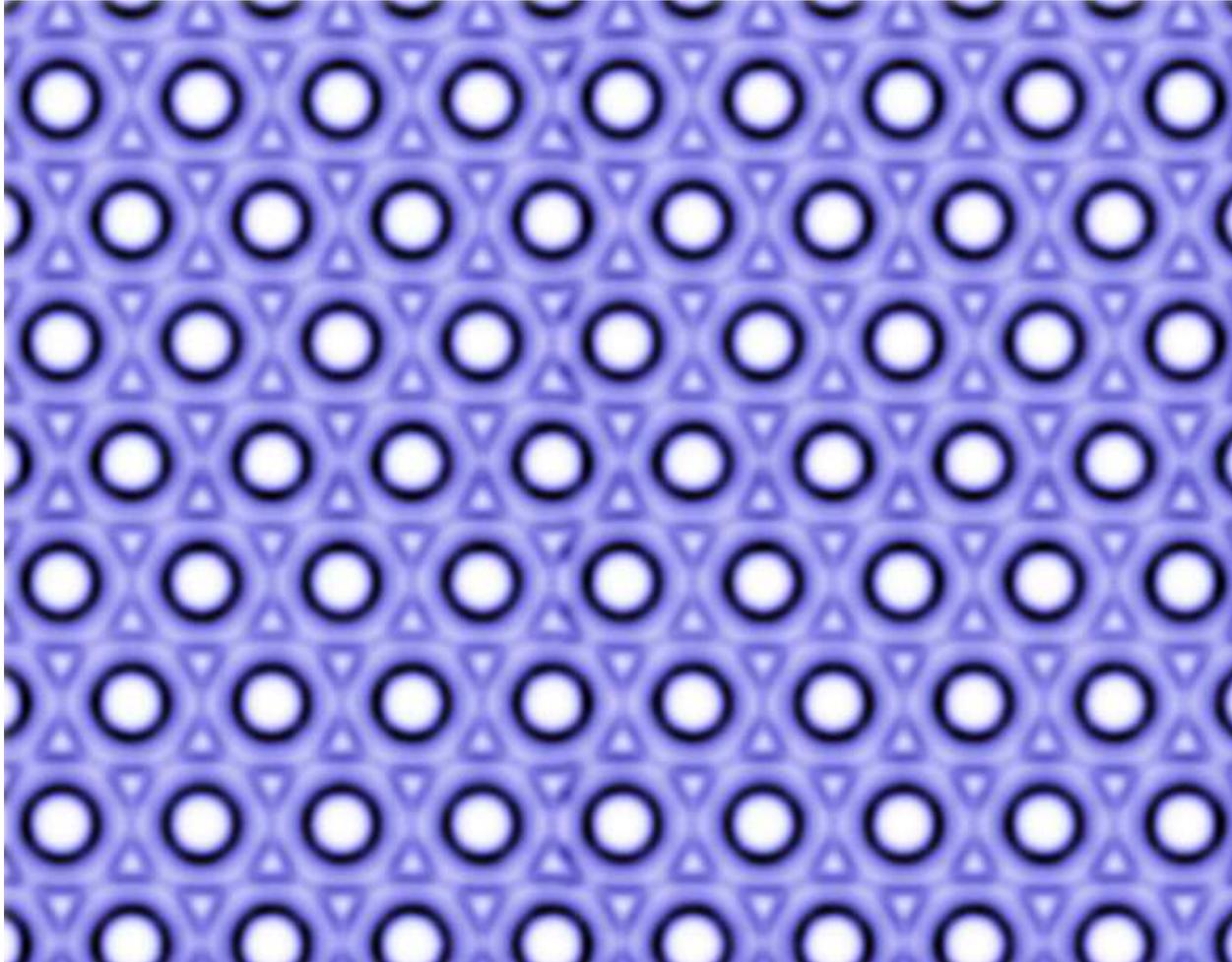


1. Brillouinzone = Wigner-Seitz-Zelle im reziproken Gitter

# 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.*