

12. Reziprokes Gitter, Brillouin Zone, Wellen im Kristall

12.1.1 Wiederholung 1D

- 1D Gitter mit $R_n = na$
- 2 Punkte im k -Raum (reziproken Raum) waren gleich für $k_1 = k_2 + G_m$ mit $G_m = \frac{2\pi m}{a}$, $m \in \mathbb{Z}$
- Wellenansatz $e^{ikx_n} = e^{ikna}$ $n \in \mathbb{Z}$
für $k \rightarrow k + G_m$
$$e^{i(k+G_m)x_n} = e^{i(k+G_m)na} = e^{ikna} e^{i(2\pi m/a)na} = e^{ikna}$$
$$\Rightarrow e^{i2\pi mn} = 1 \quad m, n \in \mathbb{Z}$$

(8.5) $\Rightarrow$

$$e^{iG_m x_n} = 1$$

12.1.2 Def. Reziprokes Gitter

Def: Für alle Gitterpunkt $\vec{R}$ sind die reziproken Gitterpunkte definiert durch

$$e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1 \quad (12.1)$$

Konstruktion:

- Gitterpunkte $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ $n_i \in \mathbb{Z}$ (12.2)
- $\vec{a}_i$: primitive Gittervektoren
- seien $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ die primitiven Gittervektoren des reziproken Gitters, dann folgt aus (12.1)

$$\Rightarrow \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (12.3) \quad (\delta_{ij} \text{ Kronecker delta})$$

Ansatz

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

Beweis Homework

Beweis, daß $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ primitive Vektoren sind:

$$\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3 \quad (12.4)$$

$$(Eq. 12.1) \Rightarrow e^{i\vec{G}\vec{R}} = e^{i(m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3)(n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3)} \\ \stackrel{(12.3)}{=} e^{i2\pi(n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3)} \stackrel{!}{=} 1$$

da $n_i \in \mathbb{Z}$, gilt dies nur für $m_i \in \mathbb{Z}$ **ohne Ausnahmen!**

12.1.3 Reziprokes Gitter ist Fourier-Transformation

1D: Gitterpunkte $R_n = a n$

"Dichte" von Gitterpunkten $\rho(r) = \sum_n \delta(r - a n)$

Fourier Transformation

$$\mathcal{F}[\rho(r)] = \int dr e^{ikr} \rho(r) = \sum_n \int dr e^{ikr} \delta(r - a n)$$

$$= \sum_n e^{i k a n} = \frac{2\pi}{a} \sum_m \delta(k - 2\pi m/a)$$

$\uparrow$ Poisson's Summationsformel

$$\underline{3D} \quad \mathcal{F}[\rho(\vec{r})] = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} = \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\vec{G}} \delta^3(\vec{k} - \vec{G}) \quad (12.5)$$

$$\delta^3(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0)$$

wenn $\vec{k}$ ein Punkt des reziproken Gitters ist, dann

$$e^{i\vec{k}\vec{R}} = 1 \Rightarrow \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} = N^3 \quad (\text{Anzahl der EZ})$$

ansonsten Oszillationen $\Rightarrow \sum = 0$

• Fourier Transformation einer periodischen Funktion
 $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{R})$ (Gitterperiodizität)

$$\mathcal{F}[\rho(\vec{r})] = \int d\vec{r} e^{i\vec{k}\vec{r}} \rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \int_{EZ} d\vec{x} e^{i\vec{k}(\vec{x} + \vec{R})} \rho(\vec{x} + \vec{R})$$

$$\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{R}) \downarrow \Rightarrow \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \int_{EZ} d\vec{x} e^{i\vec{k}\vec{x}} \rho(\vec{x})$$

$$\text{where } S(\vec{k}) = \int_{EZ} d\vec{x} e^{i\vec{k}\vec{x}} \rho(\vec{x})$$

$$\text{mit (12.5)} \quad \mathcal{F}[\rho(\vec{r})] = (2\pi)^3 \sum_{\vec{G}} \delta^3(\vec{k} - \vec{G}) S(\vec{k})$$

$\uparrow$ Strukturfaktor

12.1.3 Fourier - Analyse

- eine periodische Fkt kann in eine Fourier-Reihe entwickelt werden
- wenn $f(\vec{r})$ die Periodizität des Bravais-Gitters hat
$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$$
- Entwicklung dieser periodischen Funktion in eine Fourier-Reihe

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

mit Fourier-Koeffizienten

$$f_{\vec{k}} = \frac{1}{V_{Ez}} \int_{Ez} f(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r}$$

- sei z.B. $f(\vec{r})$ die Elektronendichte eines Kristalls und damit die Periodizität des Bravais-Gitters besitzt

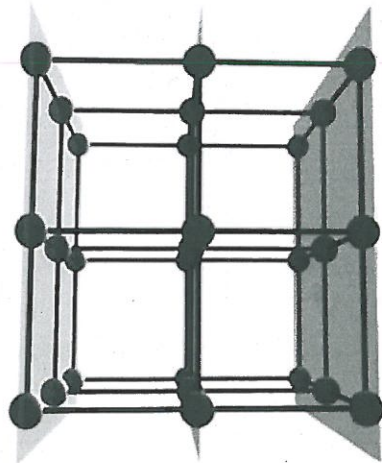
$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$$

$$\mathcal{F}: \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r} + \vec{R})} = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot e^{i\vec{k}\vec{R}}$$

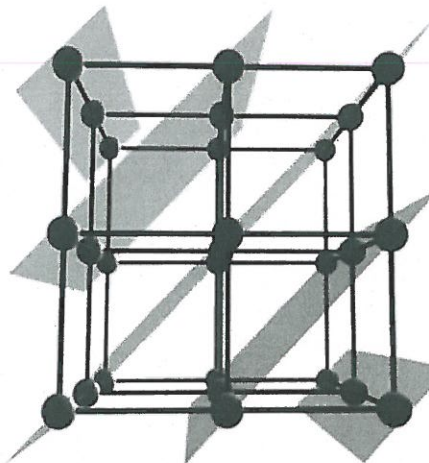
$$\Rightarrow \text{es muß gelten } e^{i\vec{k}\vec{R}} = 1$$

$\Rightarrow$ da $\vec{R}$ ein Vektor des Gitters ist, muß $\vec{k} = \vec{G}$ gelten

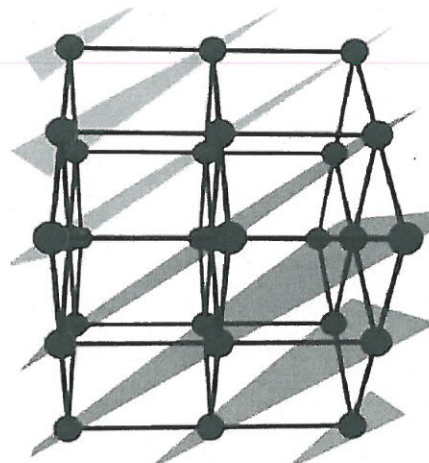
$\Rightarrow$ erlaubte Wellenvektoren sind nur reziproke Gittervektoren



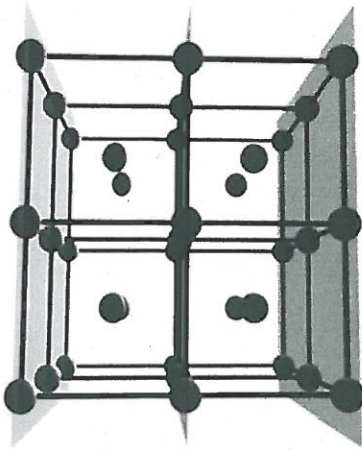
(010) family of lattice planes



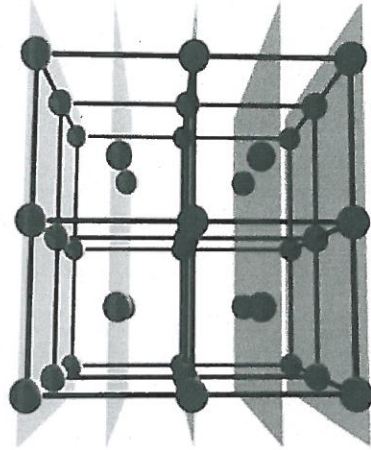
(110) family of lattice planes



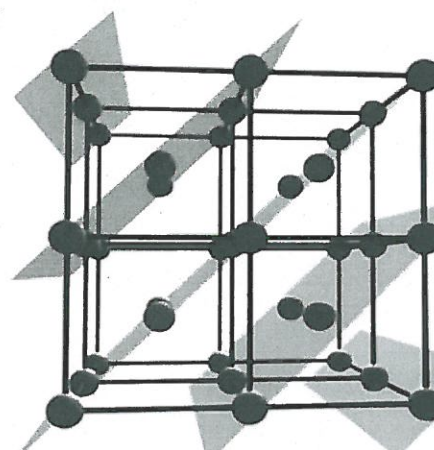
(111) family of lattice planes



(010) family of planes
(not all lattice points included)



(020) family of lattice planes



(110) family of lattice planes

bcc

realer Raum

Gitterpunkte

$$\vec{R}_{[uvw]} = u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3$$

$\vec{a}_i$: fundamentale Gittervektoren

↔ primitiv

↔ konventionell, nicht primitiv

Schar von Gitterebenen (Netzebenen)
(hkl)

Abstand zwischen Ebenen

$$d = \frac{2l_c}{|\vec{G}_{hkl}|}$$

Wigner-Seitz-Zelle

↔ 1. Brillouin Zone

SC ↔ SC
fcc ↔ fcc
bcc ↔ bcc

Bragg-Bedingung

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

↔ Laue-Bedingung $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$

reziproker Raum

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

reziproker Raum

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

$$\vec{G}_{(hkl)} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

↔ $\vec{b}_i$

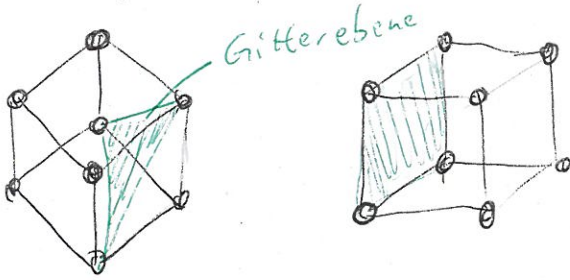
↔ primitiv

↔ Auswahlregeln für (hkl)

↔ $\vec{G}_{(hkl)} \perp$ zur Ebene

12.1.4 Reziproke Gitterpunkte $\Leftrightarrow$ Familie von Gitterebenen ^{Schar}

Def.: Gitterebenen ^(Kristallebenen) sind durch drei nicht-kollineare Gitterpunkte definiert



Alle parallelen Gitterebenen definieren eine Familie, ^{Schar} die alle Gitterpunkte des Kristalls beinhalten

Behauptung: Die Familie von Gitterebenen ^{Schar} gehören zu den reziproken Gittervektoren die senkrecht zu diesen Ebenen stehen.

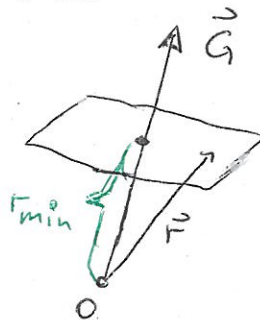
Der minimal Abstand zwischen den Ebenen ist

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{\min}|} \quad \text{mit } \vec{G}_{\min}: \text{kürzester reziproker Gittervektor der } \perp \text{ zur Ebene steht}$$

Beweis: eine Ebene ist definiert durch

$$\vec{G} \cdot \vec{r} = \text{konstant}$$

$$r_{\min} = \frac{\text{Konst.}}{|\vec{G}|}$$



Eine Menge von parallelen Ebenen ist def. durch

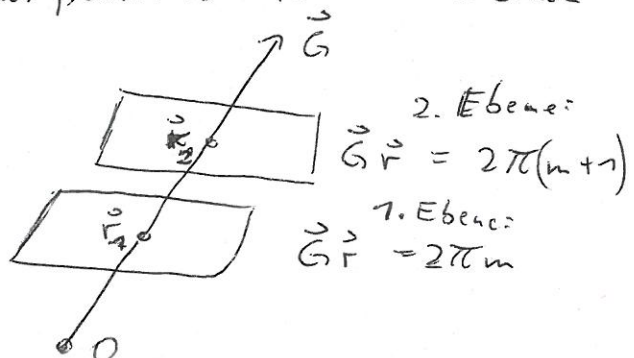
$$\vec{G} \cdot \vec{r} = 2\pi m \quad m \in \mathbb{Z} \quad (12.7)$$

mit Eq. 12.1 $\Rightarrow$ jeder Gitterpunkt ist in diesen Ebenen

$$e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = 1$$

kürzester Abstand von O

$$|\vec{r}_1| = \frac{2\pi m}{|\vec{G}|}, \quad |\vec{r}_2| = \frac{2\pi(m+1)}{|\vec{G}|}$$



kürzester Abstand zwischen Ebenen

$$d = |\vec{r}_2| - |\vec{r}_1| = \frac{2\pi(m+n)}{|\vec{G}|} - \frac{2\pi n}{|\vec{G}|} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|} \quad (12.8)$$

nur für den kleinsten $\vec{G} = \vec{G}_{\min}$ sind alle Ebenen mit Gitterpunkten $\vec{R}$

12.1.5 Gitterebene und Millersche Indizierung

Schritte zur Def. von Millersche Indizes

1) Wahl der Gittervektoren $\vec{a}_i$ (primitiv oder nicht)

2) Konstruktion der reziproken Gittervektoren mit

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (\text{siehe 12.3})$$

3) Reziproker Raumvektor

$$\vec{G}_{(h,k,l)} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (12.9)$$

Millersche Indizes
(runde Klammer)

in realem Raum hätten wir
[uvw] ← eckige Klammer

Schreibweisen:

$$(1, -1, 1) \rightarrow (1\bar{1}1)$$

• wenn $\vec{a}_i$ primitiv $\Rightarrow$ dann $\vec{b}_i$ primitiv $\Rightarrow$ jeder ganzzahlige (hkl) Millersche Indizes beschreibt einen reziproken Vektor

• wichtig: für kubische, fcc, bcc Gitter sind die

die konventionellen Gittervektoren $\vec{a}_1 = a\vec{e}_x$ $\vec{a}_2 = a\vec{e}_y$

$$\Rightarrow \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_x, \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_y, \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_z \quad a_3 = a\vec{e}_z$$

für kubische Gitter sind diese primitiv

für fcc und bcc sind diese nicht primitiv $\Rightarrow$ nicht alle

Millerschen Indizes (hkl) sind reziproke Vektoren

$\Rightarrow$ Auswahlregeln

Illustration mit Bild: $(010) \Rightarrow$ kubisch okay
fcc nicht alle Gitterpunkte erfasst
 $\Rightarrow (020)$

mit (12.8) für orthogonale $\vec{b}_i$

$$d(hkl) = \frac{2\pi}{|\vec{G}|} = \frac{2\pi}{\sqrt{h^2|\vec{b}_1|^2 + k^2|\vec{b}_2|^2 + l^2|\vec{b}_3|^2}} \quad (12.10)$$

mit $|\vec{b}_i| = \frac{2\pi}{|a_i|}$ a_i : Gitterkonstante in den 3 $\perp$ Richtungen

$$\Rightarrow \frac{1}{|d(hkl)|^2} = \frac{h^2}{a_1^2} + \frac{k^2}{a_2^2} + \frac{l^2}{a_3^2} \quad (12.11)$$

für kubische Gitter

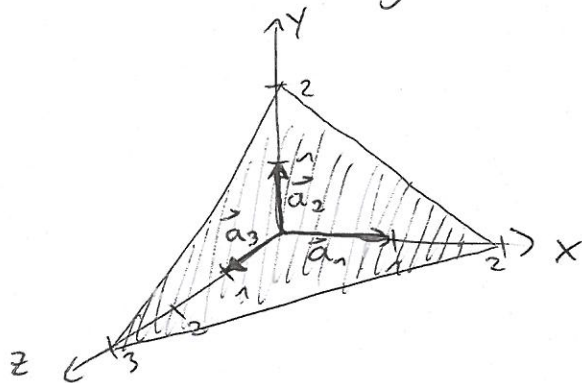
$$d_{\text{cubic}}(hkl) = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (12.12)$$

○ Durchstoßpunkt methode

Die Kristall "ebenen" werden eindeutig festgelegt durch die drei Durchstoßpunkte der Gitterachsen in Einheiten der fundamentalen Gittervektoren. Aus diesen drei Durchstoßpunkten definiert man die Millerschen Indizes.

Man nimmt den Kehrwert und sucht daraus die kleinsten ganzen Zahlen im gleichen Verhältnis

Beispiel:

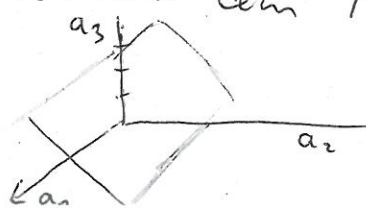
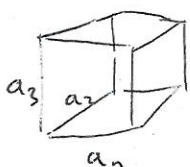


$$\frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3} = h : k : l$$

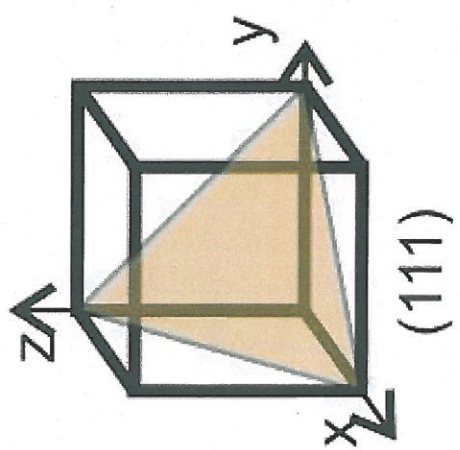
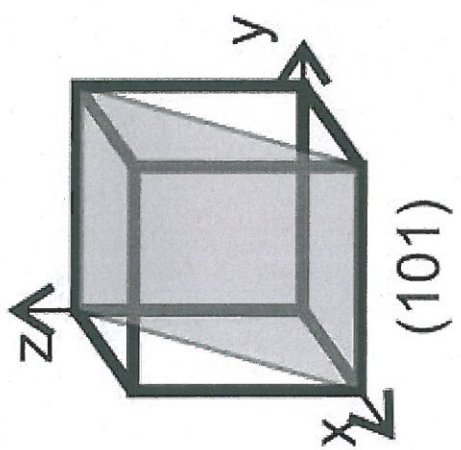
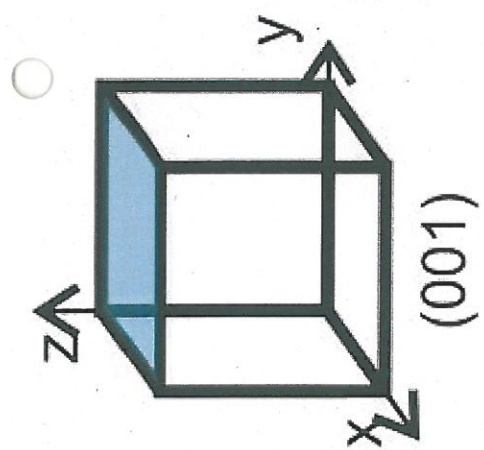
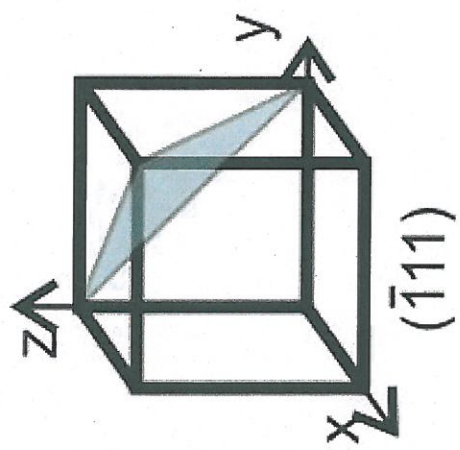
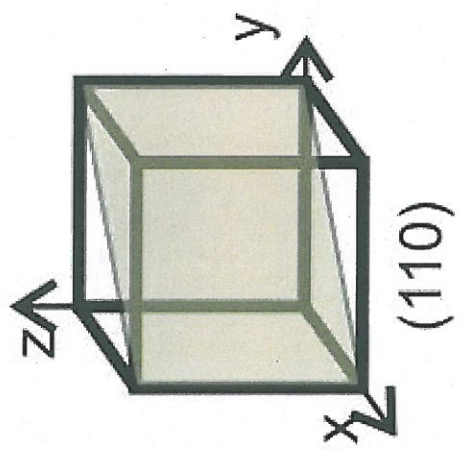
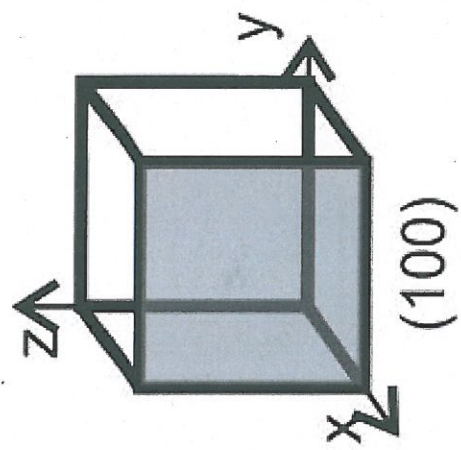
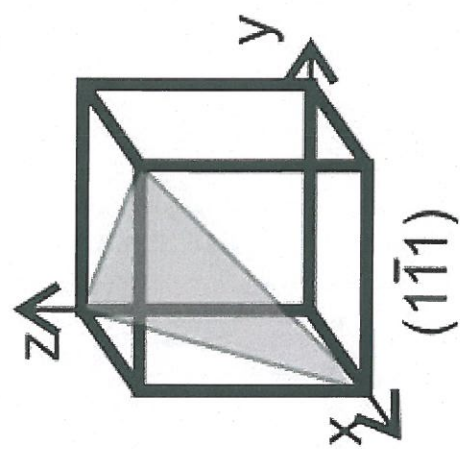
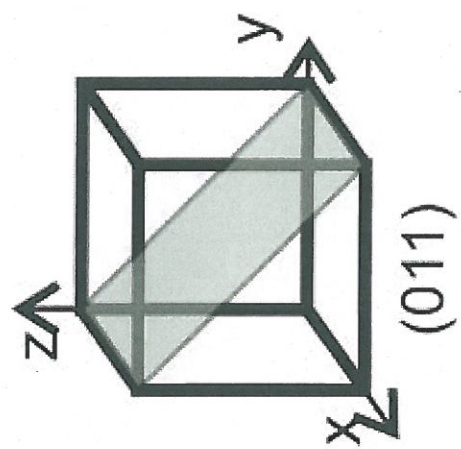
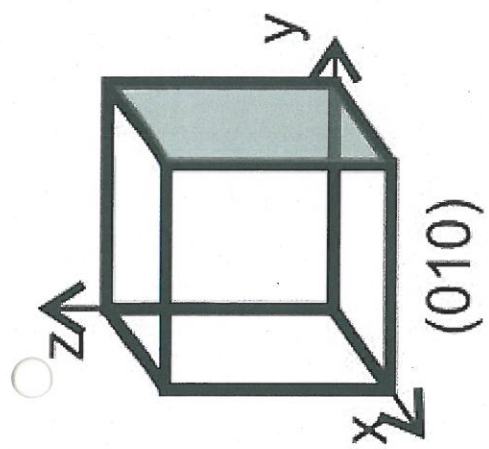
$$x=2, y=2, z=3 \Rightarrow \frac{1}{2} : \frac{1}{2} : \frac{1}{3} = 3 : 3 : 2$$

$$\Rightarrow (hkl) = (332)$$

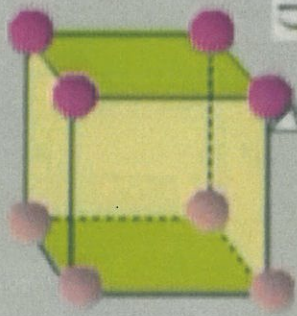
Wenn eine Ebene parallel zu einer fundamentalen Gitterachse ist, so setzt man dem Millerschen Index auf Null



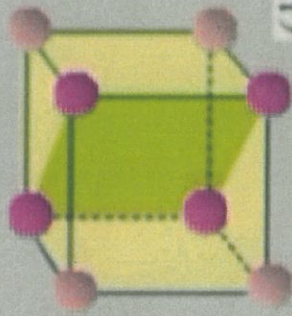
$$(h:k:l) = \left(\frac{1}{\infty} : \frac{1}{2} : \frac{1}{3} \right) = (032)$$



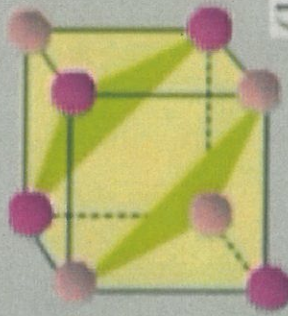
sc



(100)

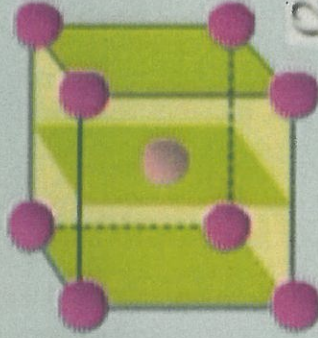


(110)

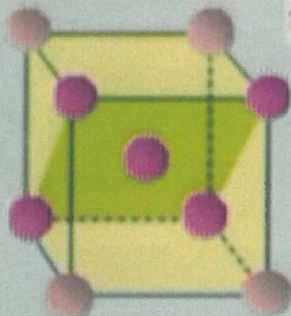


(111)

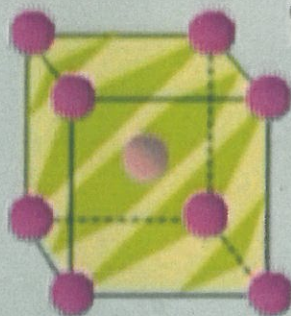
bcc



(200)

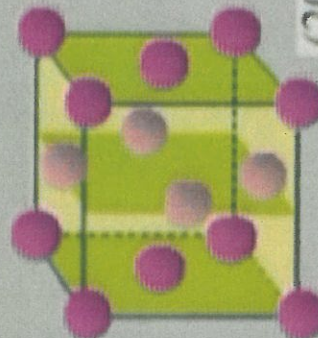


(110)

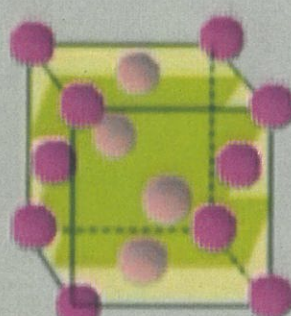


(222)

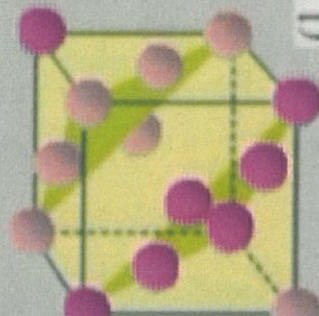
fcc



(200)



(220)



(111)

Bravais-Gesetz

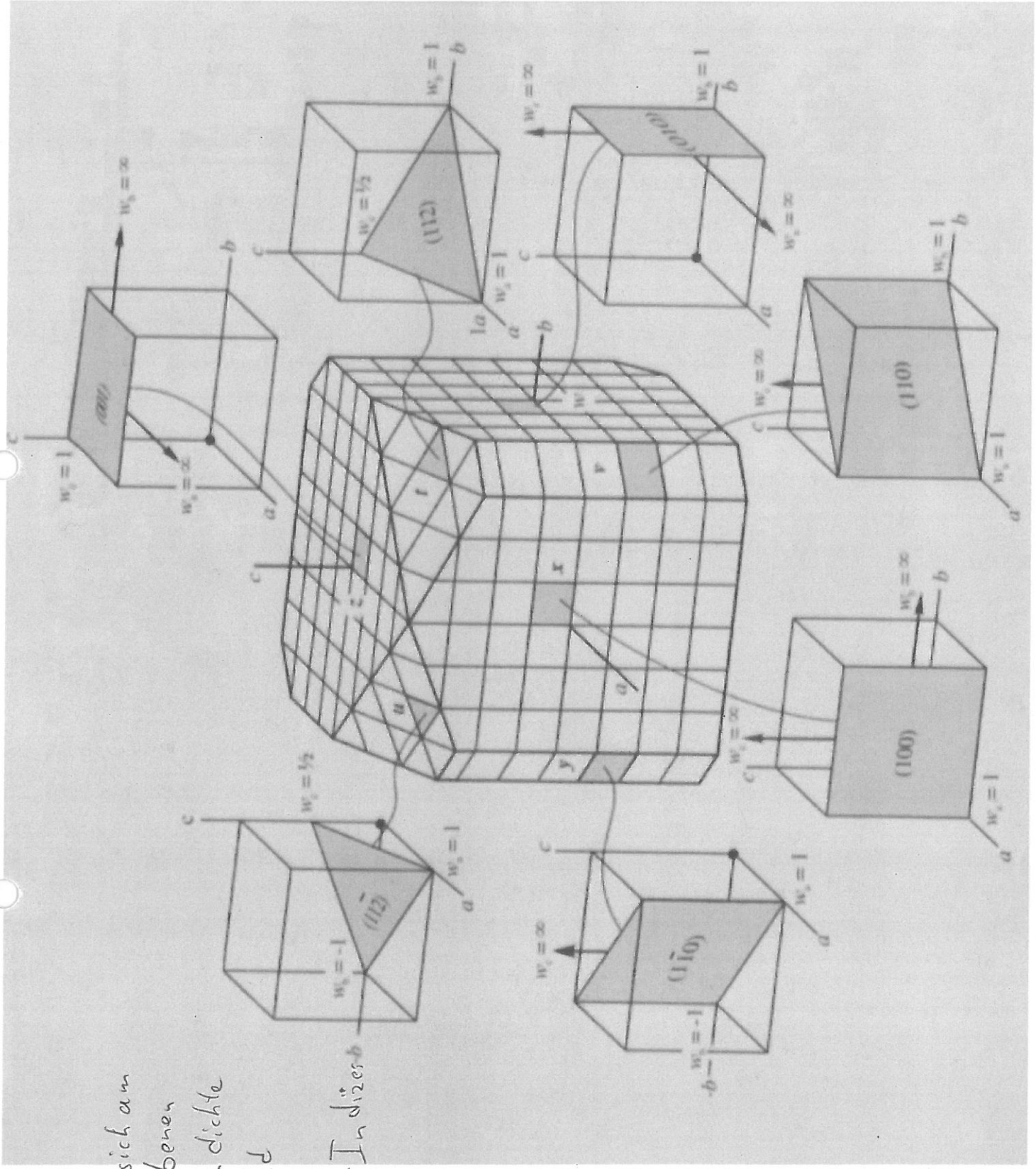
Kristalle spalten sich am einfachsten für Ebenen

mit höchster Atomdichte

- da größter Abstand

zwischen Ebenen

- kleinsten Miller-Indizes



• für alle symmetrisch äquivalenten Ebenen schreibt man

$$\{hkl\}$$

z.B. $\{100\} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$

• Multiplizität: $\text{Mult}\{100\} = 6$

$$\text{Mult}\{123\} = 48 = \underbrace{3!}_{\text{mögliche Positionen}} \cdot \overset{\substack{\text{negativ oder positiv} \\ \downarrow \downarrow \downarrow}}{2} \cdot 2 \cdot 2$$

• Miller und Bravais studierten wie Kristall sich ~~kl~~ spalten (cleave) lassen

Bravais-Gesetz: Kristalle spalten sich am einfachsten für Ebenen mit höchster Atomdichte
 $\Rightarrow$ haben den größten Abstand zwischen Ebenen

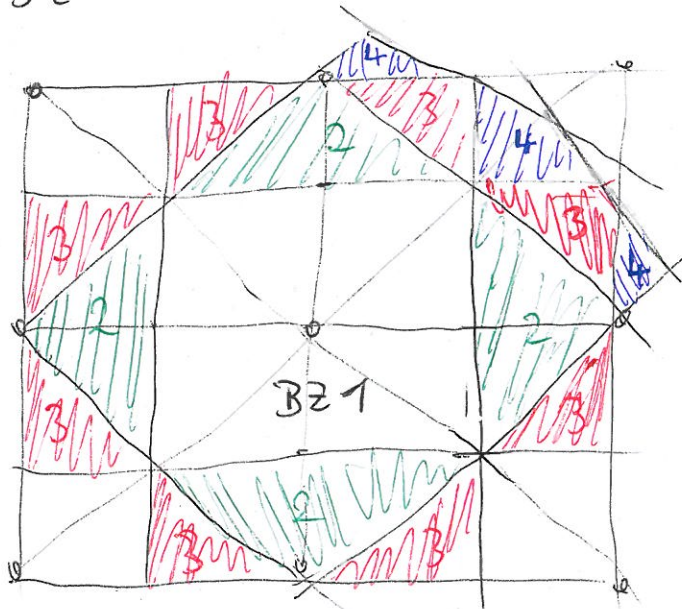
$\Rightarrow$ kleinsten Miller-Indizes

12.2 Brillouin Zone in 3D (analog zur Wigner-Seitz-Zelle)

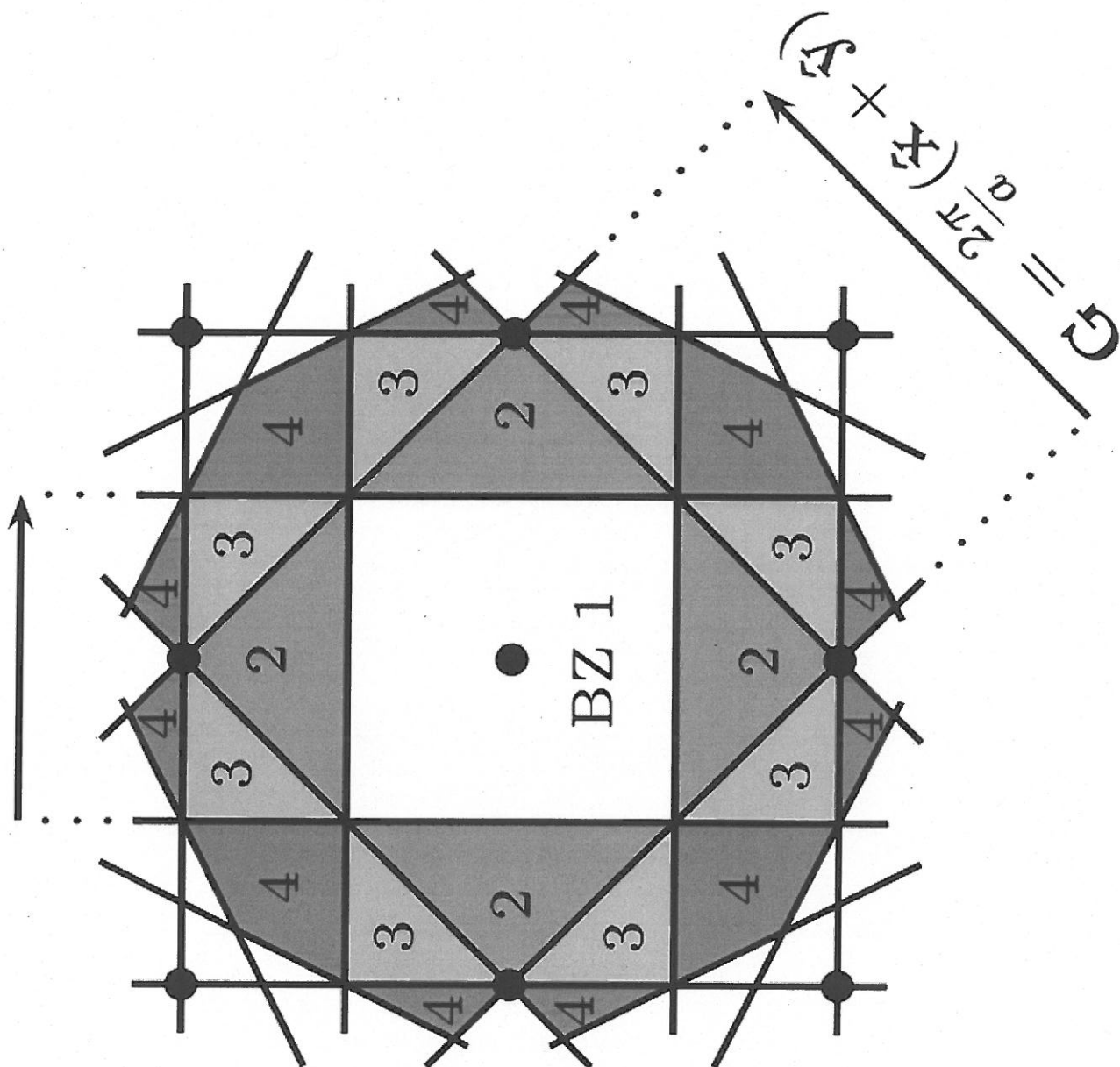
- BZ war wichtig um die Dispersionsrelation von Wellen zu beschreiben

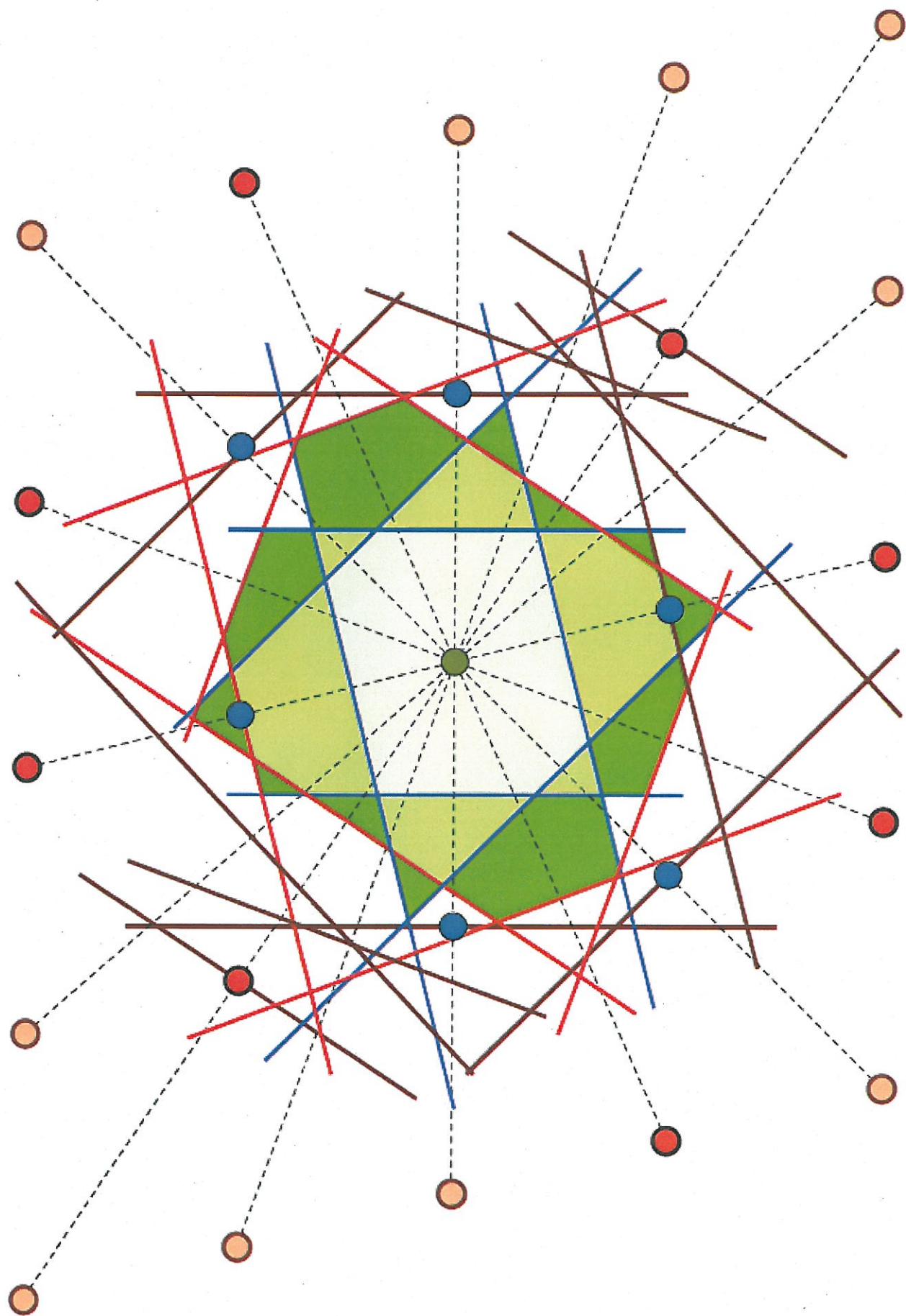
- Welle bleibt unverändert für $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{G}$

Def: Starte bei reziproken Gitterpunkt $\vec{G} = \vec{0}$
 Alle $\vec{k}$ -Werte die näher zu $\vec{0}$ sind als zu einem anderen reziproken Gitterpunkt, sind in der ersten BZ

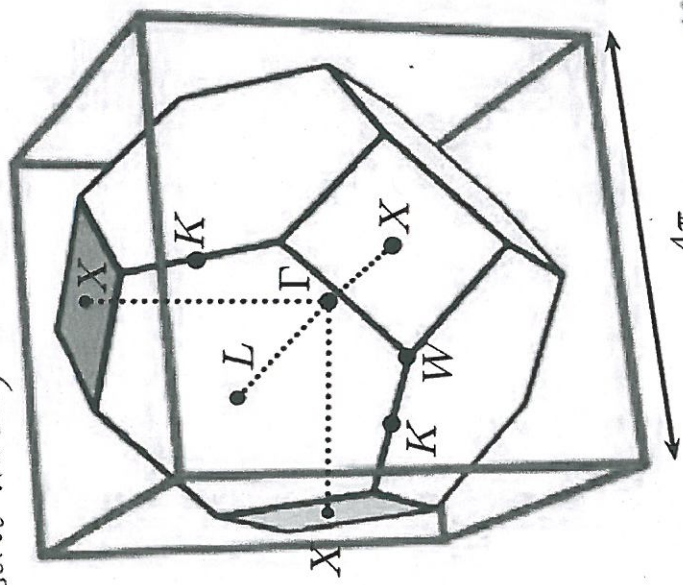


$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{a} \hat{\mathbf{x}}$$

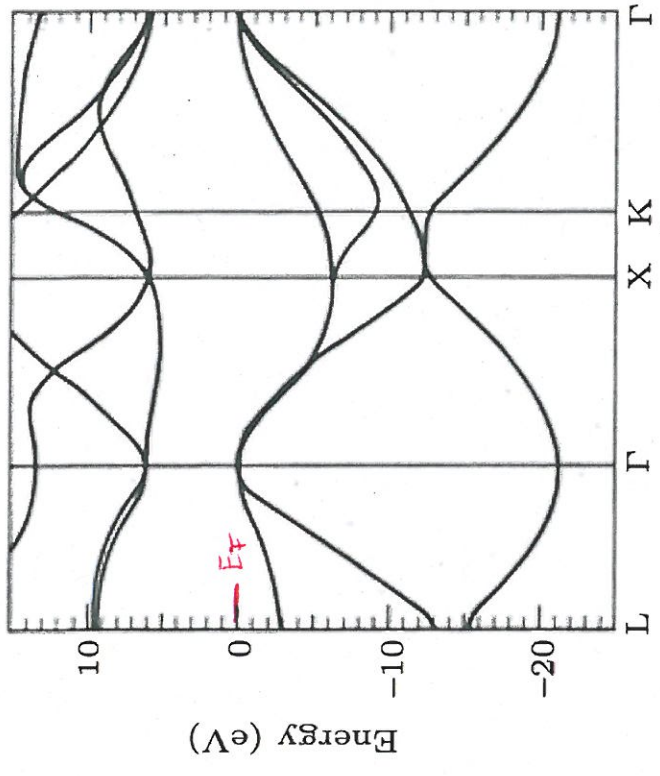




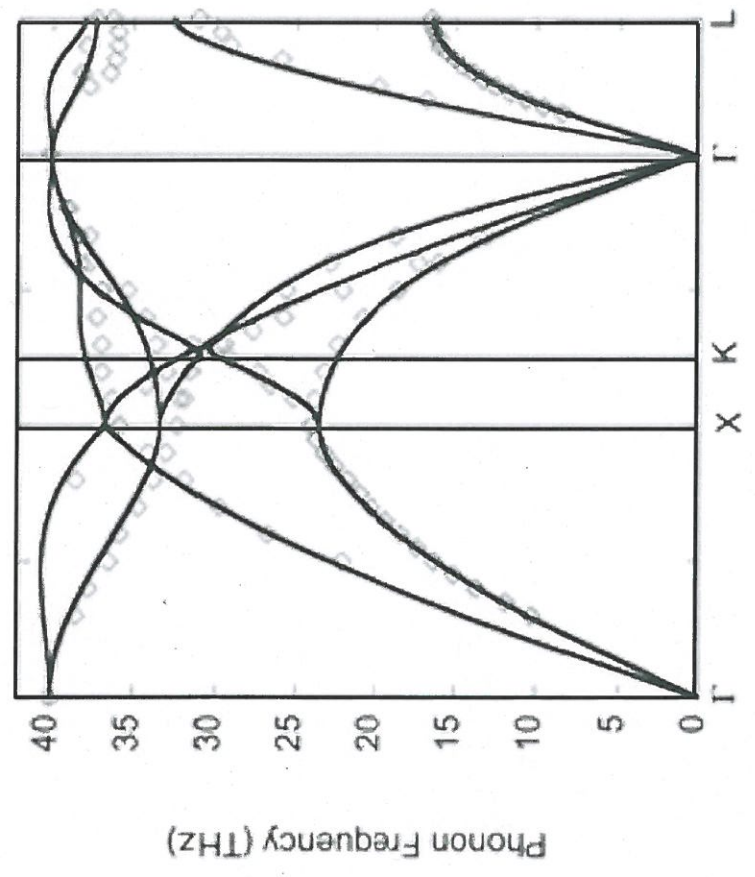
Brillouin Zone von fcc
(Wigner-Seitz von bcc)



$\frac{4\pi}{a}$
konventionelle
Einheitszelle



Wavevector $\vec{k}$
Elektronisches Spektrum
von Diamant



Phonon Spektrum von Diamant