Das Skalarprodukt eines beliebigen Gittervektors $\vec{R}_{\vec{n}}$ mit einem beliebigen Vektors $\vec{G}_{\vec{k}} = (k_1\vec{b}_1 + k_2\vec{b}_2 + k_3\vec{b}_3)$ des reziproken Gitters ist immer ein ganzzahliges Vielfaches von 2π:

$$\vec{R}_{\vec{n}} \cdot \vec{G}_{\vec{k}} = \sum_{i=1}^{d} n_i \vec{a}_i \cdot \sum_{j=1}^{d} k_j \vec{b}_j = 2\pi \sum_{i=1}^{d} n_i k_i$$

Umgekehrt folgt aus $\vec{R}_{\vec{n}} \cdot \vec{G} = 2\pi \ell \ \forall \vec{n} \ (\ell \in \mathbb{Z})$, dass $\vec{G}$ reziproker Gittervektor sein muss.

Wichtig: Die reziproken Gittervektoren haben die Einheit $\frac{1}{\text{Länge}} \equiv$ Wellenvektor

Die (primitive) Einheitszelle des reziproken Gitters hat das Volumen $Vol(\bar{\Omega}) = \frac{(2\pi)^d}{Vol(\Omega)}$

Beweis: $Vol(\bar{\Omega}) = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)| = \left(\frac{2\pi}{Vol(\Omega)}\right)^3 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)]$

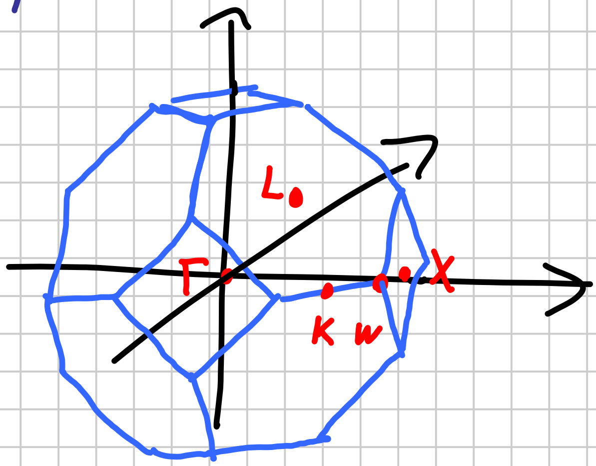
$$= \left|\frac{2\pi}{Vol(\Omega)}\right|^3 \underbrace{(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot \vec{a}_1}_{Vol(\Omega)} \cdot \Big[\underbrace{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}_{Vol(\Omega)} \Big] - \vec{a}_2 \cdot \Big[\underbrace{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}_{0} \Big] = \frac{(2\pi)^3}{Vol(\Omega)}$$

q.e.d.

Das reziproke Gitter von $\bar{\Lambda}$ ist wieder Λ (Dualität)

Wichtige Reziprozitätspaare: sc $\Longleftrightarrow$ sc, bcc $\Longleftrightarrow$ fcc

Die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters heisst **erste Brillouin-Zone.**



Beispiel: Brillouin-Zone des fcc-Gitters mit Symmetriepunkten

Γ-**Punkt**: immer Zentrum der BZ, d.h. $\Gamma = (0,0,0)$

Rechenbeispiel: Dreiecksgitter $A = a\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix}$

$$\left(|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a;\quad \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = a^2 \tfrac{1}{2} = a^2 \cos(\alpha) \Rightarrow \alpha = \operatorname{acos}(\tfrac{1}{2}) = \frac{\pi}{3} \right)$$

$\rightsquigarrow$ Basis des reziproken Gitters ist

$$B = 2\pi (A^T)^{-1} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{3}\sqrt{3} & \frac{2}{3}\sqrt{3} \end{pmatrix} \frac{2\pi}{a}$$

$$\rightarrow |\vec{b}_1| = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{2\pi}{a} = |\vec{b}_2|;\quad \frac{\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2}{|\vec{b}_1||\vec{b}_2|} = \frac{3}{4}\left(-\frac{2}{3}\right) = -\frac{1}{2} \Rightarrow \alpha = \frac{2\pi}{3}$$

Das Dreiecksgitter ist also auch selbst-dual.

Reziproke Gittervektoren und Gitterebenen

Durch jeden reziproken Gittervektor $\vec{G} \neq \vec{0}$ wird eine Schar von Ebenen des direkten Gitters festgelegt:

$$E_{\vec{G},p} = \{ \vec{R} \mid \vec{R} \cdot \vec{G} = 2\pi p \}$$

Innerhalb der Schar selektiert $p \in \mathbb{Z}$ die Ebene.

Klar: Falls $\vec{R}_1, \vec{R}_2 \in E_{\vec{G},p}$, dann gilt

$$(\vec{R}_1 - \vec{R}_2)\,\vec{G} = 0$$

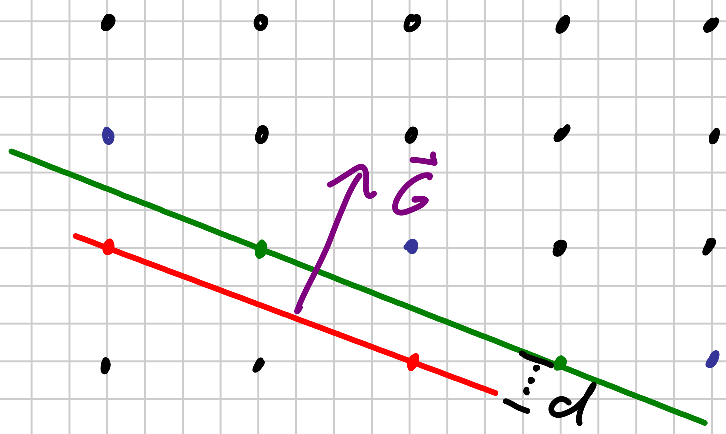
Speziell ist $E_{\vec{G},0}$ ein Gitter mit

$$\dim(E_{\vec{G},0}) = \dim(\Lambda) - 1$$

$\rightsquigarrow$ in $d=3$ sind alle $E_{\vec{G},p}$ Ebenen

Für den kürzesten Gittervektor in einer Richtung gilt: $\vec{G} = \frac{2\pi}{d}\hat{n}$, wenn $\hat{n}$ der Normalenvektor an eine der Ebenen ist und d der Abstand zwischen den Ebenen. Umgekehrt lässt sich jede Ebene(nschar) durch einen solchen rez. Gittervektor $\vec{G}_{\vec{k}} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3$ beschreiben. Dessen Koeffizienten h, k, ℓ heissen Millersche Indices.

Beispiel:



1.3 Periodische Funktionen

Viele für einen Festkörper bzw. Kristall relevante Größen (z.B. die Dichte in BO-Näherung) haben die Periodizität des Gitters: $f(\vec{r}) = f(\vec{r}+\vec{R}) \; \forall \vec{R} \in \Lambda$

Genau dann lassen sie sich als Fourier-Reihe (nicht F-Integral) darstellen:

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

mit diskreten Fourierkoeffizienten

$$f_{\vec{G}} = \frac{1}{V_\Omega} \int_\Omega d^3r \, f(\vec{r}) \, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

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

$$f(\vec{r}+\vec{R}) = f(\vec{r}) \iff \vec{G}\cdot\vec{R} = 2\pi l$$

Die Fourier-Reihe läuft also gerade über die reziproken Gittervektoren.

Orthonormalitätsrelationen:

(i) $$\frac{1}{V(\Omega)} \int_\Omega d^3r \, e^{i(\vec{G}-\vec{G}')\vec{r}} = \delta_{\vec{G}\vec{G}'}$$

(ii) $\sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}} = V(\Omega) \underbrace{\sum_{\vec{R}} \delta(\vec{r}-\vec{R})}_{\text{Gitterperiodische Delta-Funktion}}$ (Satz von Dirichlet)

Beweis von (i): mit $\vec{r} = \sum_{i=1}^{d} \varphi_i \vec{a}_i\,;\quad \vec{G} = \sum_j h_j \vec{b}_j$

gilt: $\frac{1}{V(\Omega)} \int_\Omega d^3r\, e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} = \prod_{i=1}^{d} \int_0^1 d\varphi_i\, e^{i2\pi \varphi_i h_i} = \begin{cases} 1 & \text{falls } h_i = 0 \;\forall i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

Natürlich lassen sich Ω und $\bar{\Omega}$ auch vertauschen.

Mit $\psi_{\vec{G}}(\vec{r}) = \frac{1}{Vol(\Omega)} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}\,;\quad \chi_{\vec{R}}(\vec{k}) = \frac{1}{Vol(\bar{\Omega})} e^{i\vec{R}\cdot\vec{k}}$

lässt sich schreiben:

$$(\psi_{\vec{G}'}, \psi_{\vec{G}}) \equiv \int_\Omega d^dx\, \psi^*_{\vec{G}'} \psi_{\vec{G}} = \delta_{\vec{G},\vec{G}'}$$

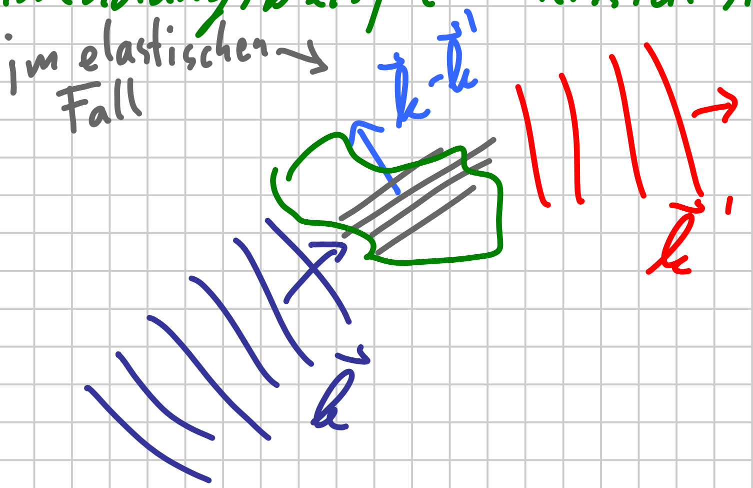
$$\langle \chi_{\vec{R}'}, \chi_{\vec{R}} \rangle \equiv \int_{\bar{\Omega}} d^dk\, \chi^*_{\vec{R}'} \chi_{\vec{R}} = \delta_{\vec{R},\vec{R}'}$$

$$\sum_{\vec{G}} \psi_{\vec{G}}(\vec{r})\, \psi^*_{\vec{G}}(\vec{r}\,') = \delta_\Omega(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

$$\sum_{\vec{R}} \chi_{\vec{R}}(\vec{k})\, \chi^*_{\vec{R}}(\vec{k}\,') = \delta_{\bar{\Omega}}(\vec{k}-\vec{k}\,')$$

Vollständige orthonormale Funktionensysteme

Anwendungsbeispiel: Kritallstrukturanalyse



Die Übergangsraten für $\vec{k} \to \vec{k}'$ enthalten immer (z. B. in Bornscher Näherung) Matrixelemente

$$\langle \vec{k}' | V(\vec{r}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r \, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$= \frac{1}{V} \int d^3r \, e^{i(\vec{k}+\vec{G}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} \, \delta_{\vec{k}'-\vec{k},\vec{G}}$$

Es gilt also die Auswahlregel $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$

Für elastische Streuung von Photonen gilt noch $|\vec{k}'|^2 = |\vec{k}|^2$

$$\rightsquigarrow \; 2\vec{k}\cdot\vec{G} + |\vec{G}|^2 = 0$$

Mit $|\vec{G}| = \frac{2\pi n}{d}$ und $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$ folgt die

$$2 \, \frac{4\pi^2 n}{d\lambda} \cos(\angle(\vec{k},\vec{G})) + \frac{4\pi^2 n^2}{d^2} = 0$$

Bragg Reflexionsbedingung: $2d \sin\theta = n\lambda$