0.1 Charakterisierung von Kristallgittern

Vor der Beschreibung der Oberflächen von Kristallen wenden wir uns dem darunter liegenden Gitter zu, das die Basis für die Oberfläche darstellt. Die charakteristischen Größen sind auch für die Oberflächen wichtig. Die Untersuchung der Kristallgitter findet vor Allem durch Beugungsexperimente statt, da diese die periodische Struktur am besten Ausnutzen und so zu höherer Genauigkeit kommen, als direkte Abbildung der Oberflächen.
Fundamental für die Beschreibung der Phänomene der Festkörperphysik ist der reziproke oder $\mathbf{k}$-Raum. Er ist aus den $\mathbf{k}$-Vektoren ebener Wellen, die mit $\mathbf{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ beschrieben werden, aufgebaut. Sind nun die Gittervektoren eines Kristalles im Ortsraum mit $\mathbf{a}_1,\ \mathbf{a}_2,\ \mathbf{a}_3$ gekennzeichnet, so gilt für die reziproken Gittervektoren $\mathbf{g}_1,\ \mathbf{g}_2,\ \mathbf{g}_3$:

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1\cdot(\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3)} \qquad \text{und zyklisch} \tag{0.1}$$

$$\mathbf{g_i}\cdot\mathbf{a_j} = 2\pi\delta_{ij} \tag{0.2}$$

Die periodische Struktur des Kristalles bleibt also im reziproken Raum erhalten. Ein beliebiger Vektor $\mathbf{G}$ des reziproken Gitters lässt sich als ganzzahlige Linearkombination der Basisvektoren darstellen.

$$\mathbf{G} = h\mathbf{g_1} + k\mathbf{g_2} + l\mathbf{g_3} \tag{0.3}$$

Für einen Vektor $\mathbf{r}$, der auf dem Gitter im Ortsraum liegt, gilt dann also:

$$\mathbf{r} = n_1\mathbf{a_1} + n_2\mathbf{a_2} + n_3\mathbf{a_3} \tag{0.4}$$

$$\mathbf{G}\cdot\mathbf{r} = 2\pi m \tag{0.5}$$

$$n_1, n_2, n_3, m \in \mathbb{N} \tag{0.6}$$

Schließlich lässt sich jede Funktion, die im Ortsraum periodisch ist, als Fourierreihe im reziproken Raum darstellen:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} F_{\mathbf{G}}\mathbf{e}^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \tag{0.7}$$

Bei der Bezeichnung der Netzebenen werden die sogenannten Millerschen Indizes benutzt. Spannt man mit drei nicht auf einer Geraden liegenden Gitterpunkten eine Ebene, so ist diese durch drei ganze Zahlen m, n, o gekennzeichnet. Aus diesen erhält man ein teilerfremdes Triplet (h, k, l), indem man die reziproken Werte $h' = 1/m, k' = 1/n, l' = 1/o$ mit einer ganzen Zahl p multipliziert. Der reziproke Gittervektor $\mathbf{G}$ steht nun senkrecht auf dem mit (h, k, l) beschriebenen Gitter. **?**