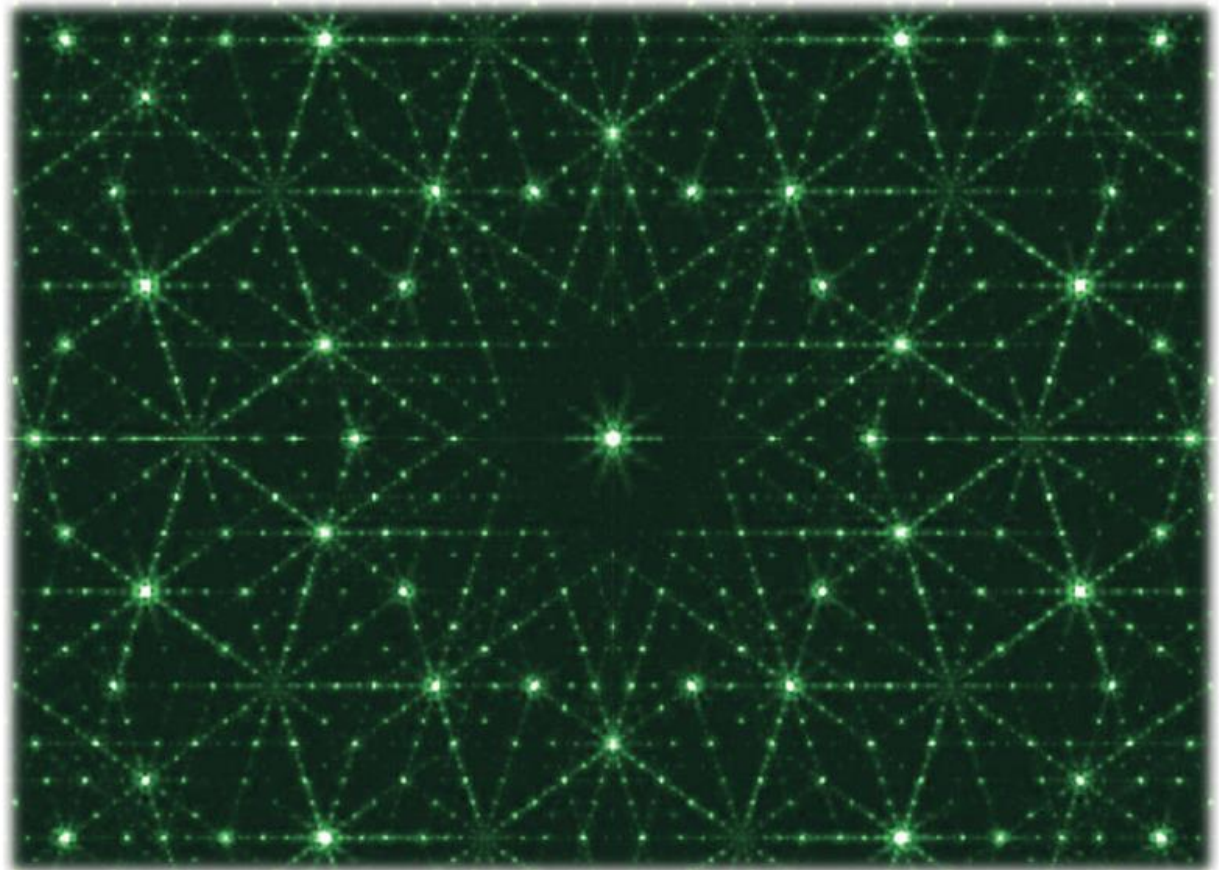


- Strukturanalyse
- Beugung eines Elektronenstrahls an polykristallinem Graphit
- Reziprokes Gitter
- Fourier Reihe



Beugungsbild eines Quasikristalls (Dirk Frettlöh, FU Berlin)

Sei  $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$  ein Bravais-Gitter. Das hierzu reziproke Gitter besteht aus allen Vektoren  $\mathbf{G}$ , für die gilt:

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1 . \quad (2.1.6)$$

Hierbei ist  $\mathbf{G}$  ein Wellenvektor aus dem reziproken Gitter, während  $\mathbf{k}$  ein beliebiger Wellenvektor ist.

Das zum Bravais-Gitter  $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$  reziproke Gitter wird durch

$$\mathbf{G} = h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3 \quad (2.1.17)$$

aufgespannt. Dabei sind die reziproken Gittervektoren durch (2.1.14) bestimmt und die Koeffizienten  $h$ ,  $k$  und  $\ell$  müssen ganzzahlig sein.

Ohne Beweis (siehe hierzu Übungsaufgaben) wollen wir folgende Tatsachen festhalten:

1. Gleichung (2.1.17) definiert, da  $h$ ,  $k$  und  $\ell$  ganzzahlig sind, wiederum ein Bravais-Gitter. Das heißt, das reziproke Gitter eines Bravais-Gitters ist selbst ein Bravais-Gitter.
2. Das reziproke Gitter des reziproken Gitters ist das direkte Gitter.
3. Ist  $V_c = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$  das Volumen der von den primitiven Gittervektoren aufgespannten Einheitszelle im direkten Gitter, so ist  $(2\pi)^3/V_c$  das Volumen der durch  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  und  $\mathbf{b}_3$  aufgespannten Zelle im reziproken Raum.
4. Die Länge der reziproken Gittervektoren ist proportional zum Kehrwert der Länge der Gittervektoren. Dies erklärt die Nomenklatur „reziprokes“ Gitter.

Den Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  und  $\mathbf{a}_3$  bzw. den reziproken Gittervektoren  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  und  $\mathbf{b}_3$  können wir Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \begin{pmatrix} b_{1x} & b_{2x} & b_{3x} \\ b_{1y} & b_{2y} & b_{3y} \\ b_{1z} & b_{2z} & b_{3z} \end{pmatrix} \quad (2.1.18)$$

zuordnen, die die kartesischen Komponenten der Vektoren enthalten. Zwischen den Matrizen besteht der Zusammenhang

$$A^T B = 2\pi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad B = 2\pi (A^T)^{-1}, \quad (2.1.19)$$

wobei  $A^T$  die transponierte Matrix von  $A$  ist.<sup>5</sup>

$$A = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

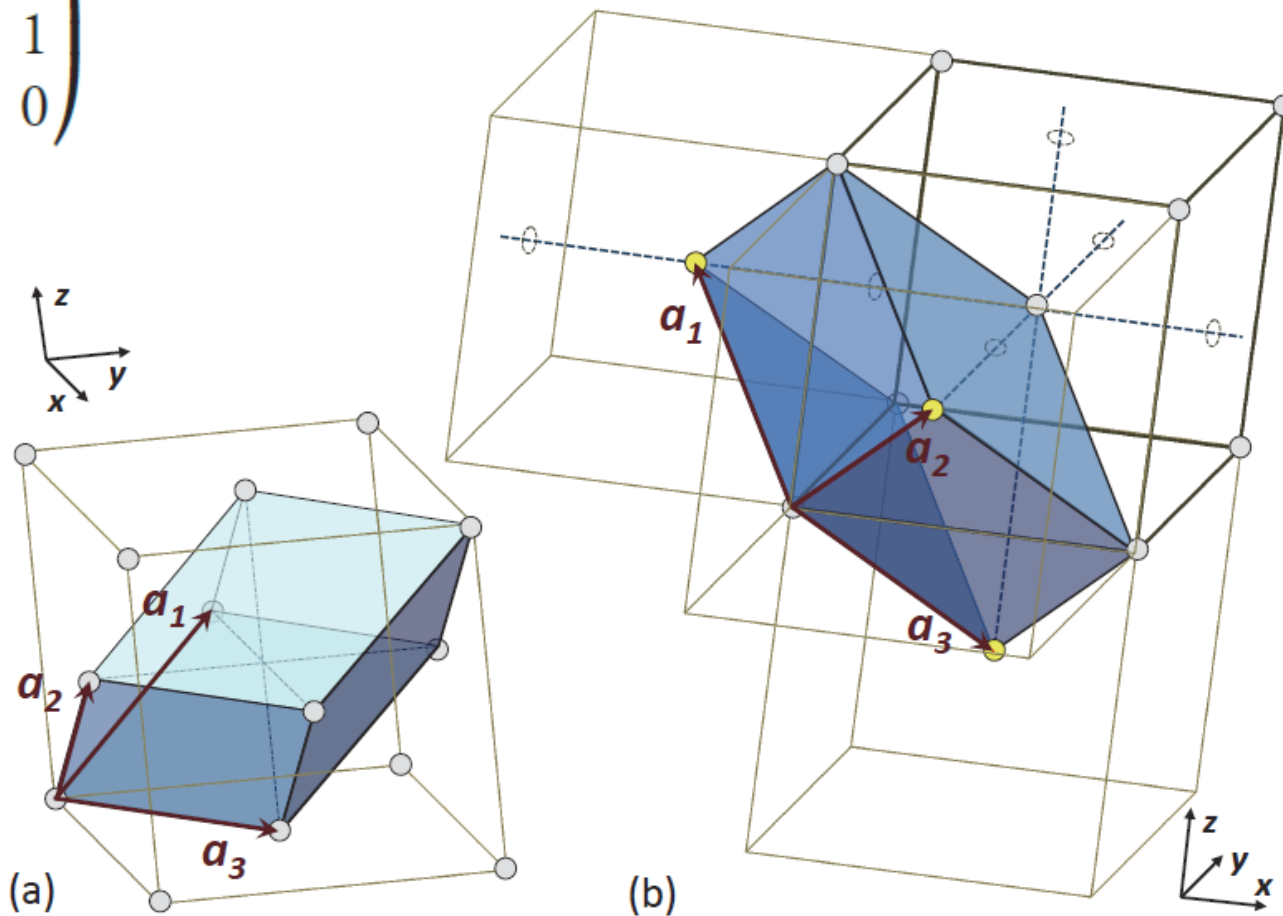


Abb. 2.2: Primitive Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  und  $\mathbf{a}_3$  des kubisch flächenzentrierten (a) und des kubisch raumzentrierten Gitters (b). Eingezeichnet ist ebenfalls die konventionelle Zelle und das zugrundeliegende kartesische Koordinatensystem. In (b) sind zur Veranschaulichung die drei benachbarten Einheitszellen gezeichnet. Die primitiven Gittervektoren enden auf den gelb markierten Atomen im Zentrum der benachbarten Zellen.

$$A = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

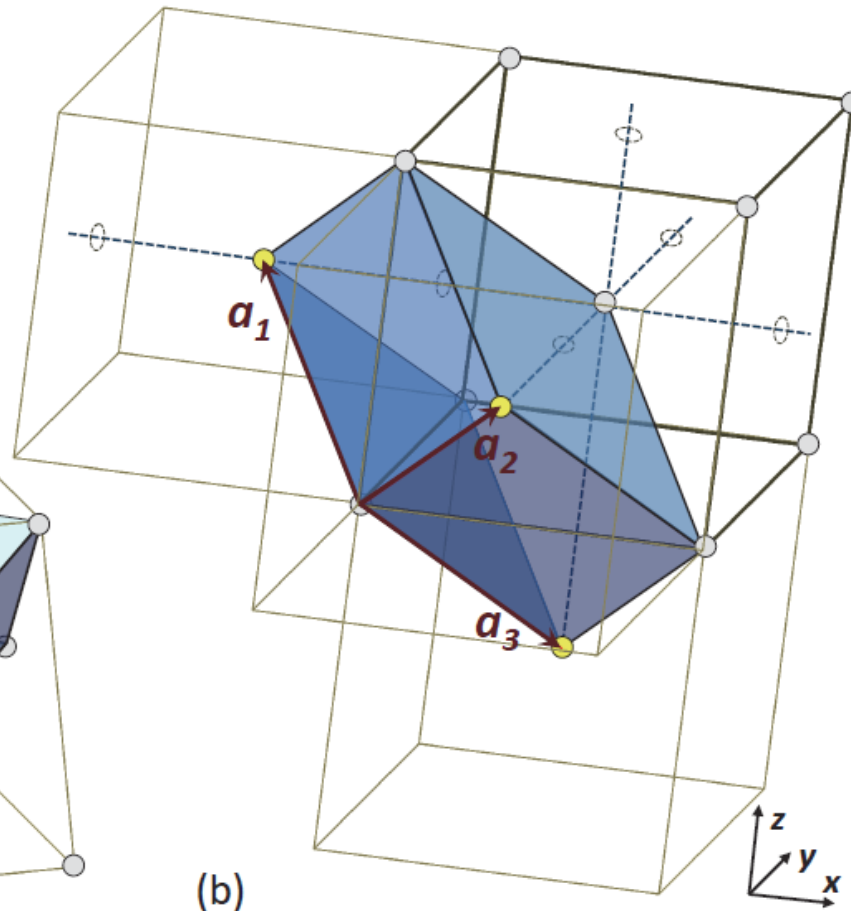
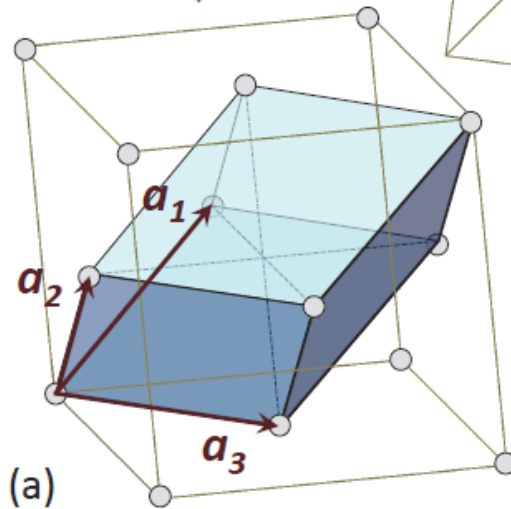


Abb. 2.2: Primitive Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  und  $\mathbf{a}_3$  des kubisch flächenzentrierten (a) und des kubisch raumzentrierten Gitters (b). Eingezeichnet ist ebenfalls die konventionelle Zelle und das zugrundeliegende kartesische Koordinatensystem. In (b) sind zur Veranschaulichung die drei benachbarten Einheitszellen gezeichnet. Die primitiven Gittervektoren enden auf den gelb markierten Atomen im Zentrum der benachbarten Zellen.