- Darstellung einer gitterperiodischen Funktion $f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$ als Fourierreihe

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

- Menge aller $\vec{G}$ erfüllt: $e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1$, definiert reziprokes Gitter

- $\vec{G}$ ist ein Bravais Gitter: $\vec{G} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3$

- $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_{zelle}} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$; $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_{zelle}} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)$; $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_{zelle}} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$

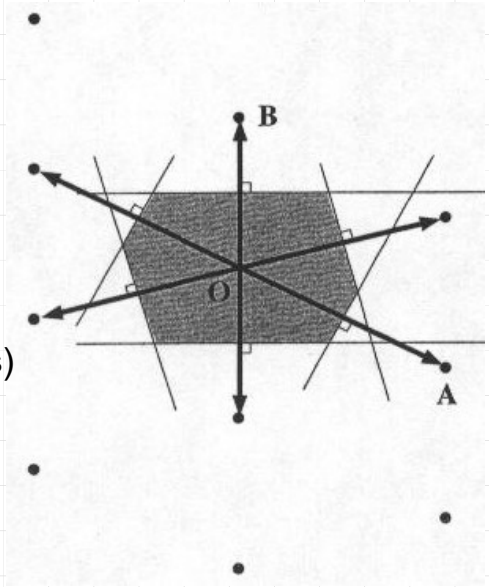
  und $\vec{a}_i \vec{b}_j = 2\pi \, \delta_{ij}$ $\quad i,j = 1,2,3$

Beispiel Das sc Gitter hat als reziprokes Gitter das sc Gitter

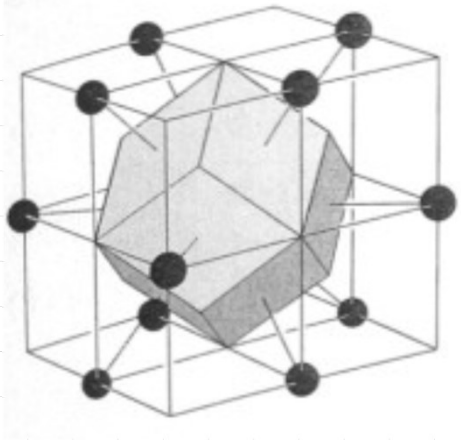
Beispiel: Das fcc Gitter hat als reziprokes Gitter das bcc Gitter (Hausaufgabe).

Beispiel: Das hexagonale Gitter mit Gitterparametern a und c hat als reziprokes Gitter das hexagonale Gitter, 30° gedreht mit Gitterparametern $\frac{2\pi}{c}$ und $\frac{4\pi}{\sqrt{3}\,a}$

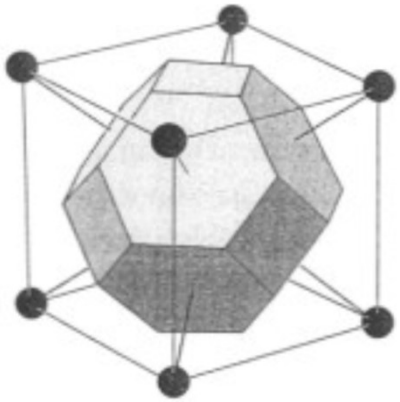
Die erste Brillouinzone (1. BZ) ist die Wigner-Seitz Zelle des reziproken Gitters



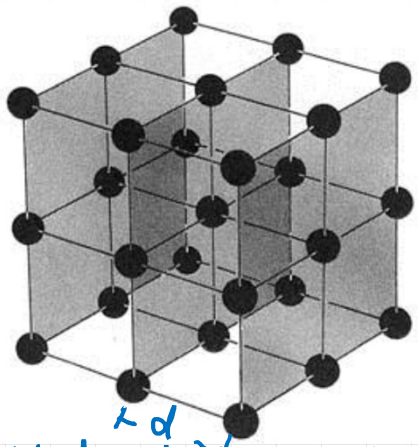
1. Brillouinzone des bcc Gitters
(Wigner-Seitz Zelle des fcc-Gitters)
rhombischer Dodekaeder

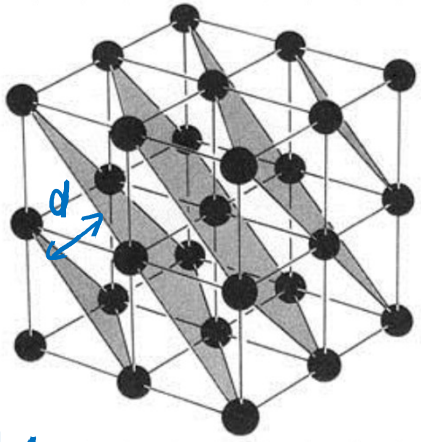


1. Brillouinzone des fcc-Gitters
(Wigner-Seitz Zelle des bcc-Gitters)
stumpfer Oktaeder



Eine <u>Netzebene</u> ist eine Ebene durch 3 Gitterpunkte eines Bravaisgitters, die nicht auf einer Linie liegen. Eine Netzebene enthält unendlich viele Gitterpunkte

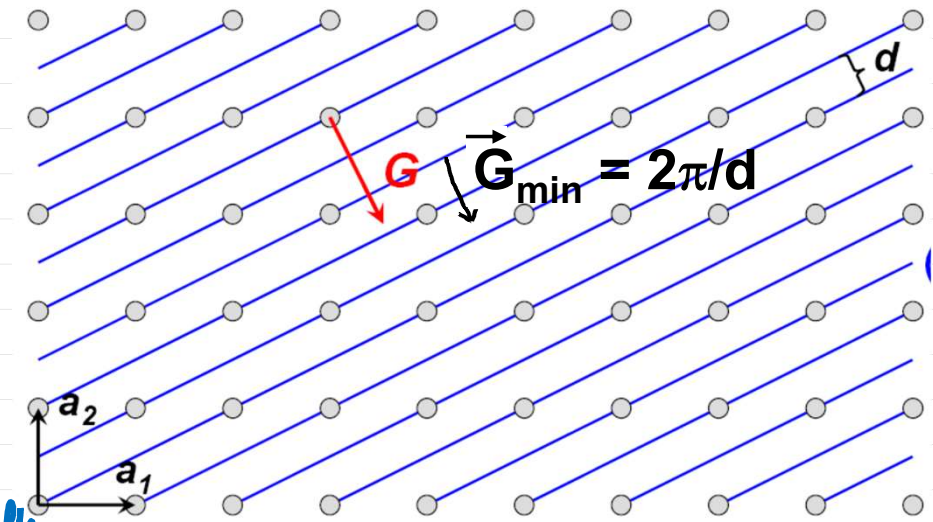




<u>Eine Netzebenenschar</u> ist eine Menge äquidistanter und paralleler Netzebenen, die alle Gitterpunkte enthalten

<u>Theorem</u>: (über die Klassifizierung von Netzebenenscharen)
Für jede Netzebenenschar mit Ebenenabstand d gibt es reziproke Gittervektoren senkrecht auf diesen Ebenen; der kürzeste hat die Länge $|\vec{G}_{min}| = \frac{2\pi}{d}$.
Umgekehrt gibt es zu jedem rez. Gittervektor $\vec{G}$ eine Netzebenenschar senkrecht zu $\vec{G}$ mit Abstand d. Der kürzeste zu $\vec{G} \parallel$ Gittervektor ist $\vec{G}_{min}$ mit $|\vec{G}_{min}| = \frac{2\pi}{d}$.

Beweis: (i) Sei $\vec{n}$ Normalenvektor auf Netzebenenschar. Dann ist $\vec{G}_{min} = \frac{2\pi}{d}\vec{n}$ ein reziproker Gittervektor, denn (1) die Ebene Welle $e^{i\vec{G}_{min}\cdot\vec{r}}$ hat die gleiche Phase in Ebenen $\perp$ zu $\vec{G}_{min}$ mit $\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{min}|} = d$. (2) Da eine Netzebene einen Ursprung enthält ist $e^{i\vec{G}_{min}\cdot\vec{R}} = 1$ für alle Punkte $\vec{R}$ des Gitters, denn die Netzebenenschar enthält alle Gitterpunkte. $\vec{G}_{min}$ ist auch der kürzeste rez. Gittervektor $\perp$ zur Netzebenenschar, denn ein kürzerer hätte eine größere Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{min}|}$. Eine solche ebene Welle kann dann aber nicht mehr auf allen Ebenen der Netzebenenschar die gleiche Phase besitzen.



(ii) umgekehrte Richtung ähnlich. Siehe z. B. Ashcroft / Mermin.

Def: Die Millerschen Indizes sind die Komponenten des kürzesten reziproken Gittervektors auf einer Netzebenenschar.

Eine Ebene mit Millerschen Indizes (hkl) steht also senkrecht auf $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$

Die Millerschen Indizes sind ganze Zahlen ohne gemeinsamen Teiler

Die Millerschen Indizes im kristallophischen Sinn beziehen sich auf $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ die reziprok zu den Kristallachsen $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ (konventionelle Einheitszelle) sind.
Nicht primitive Gitter werden dabei als primitive Gitter mit Basis behandelt.

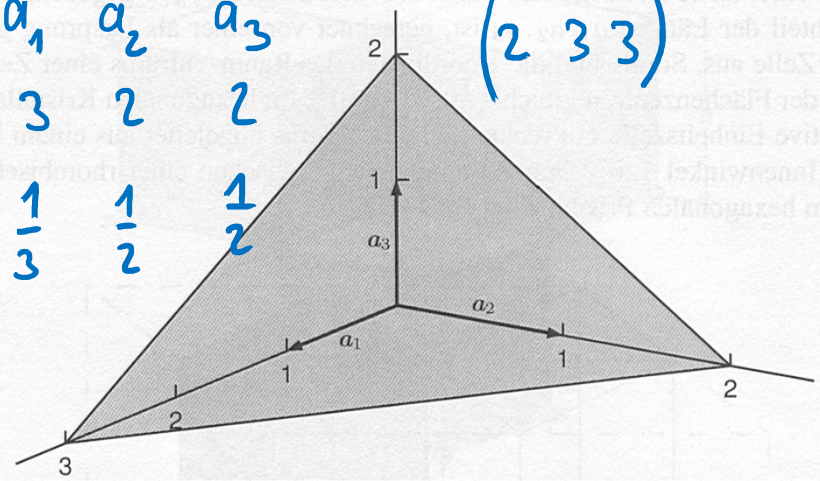
Eine äquivalente Definition der Millerschen Indizes im direkten Gitter:

1.) Bestimme Achsenabschnitte einer Netzebene mit den Kristallachsen in Einheiten von $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

2.) Bilde Kehrwerte dieser Zahlen und erweitere Brüche auf kleinste ganze Zahlen

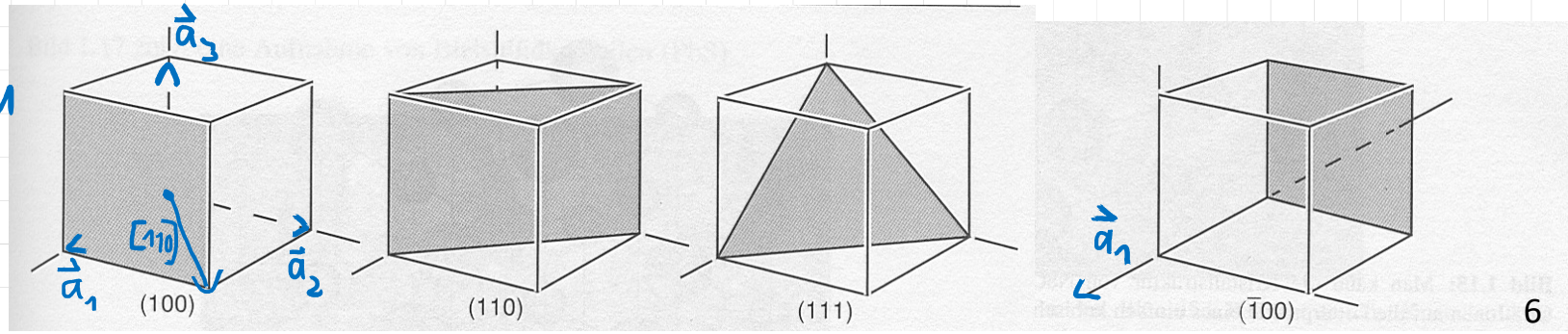
$\vec{a}_1$	$\vec{a}_2$	$\vec{a}_3$
3	2	2
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

$(2\ 3\ 3)$

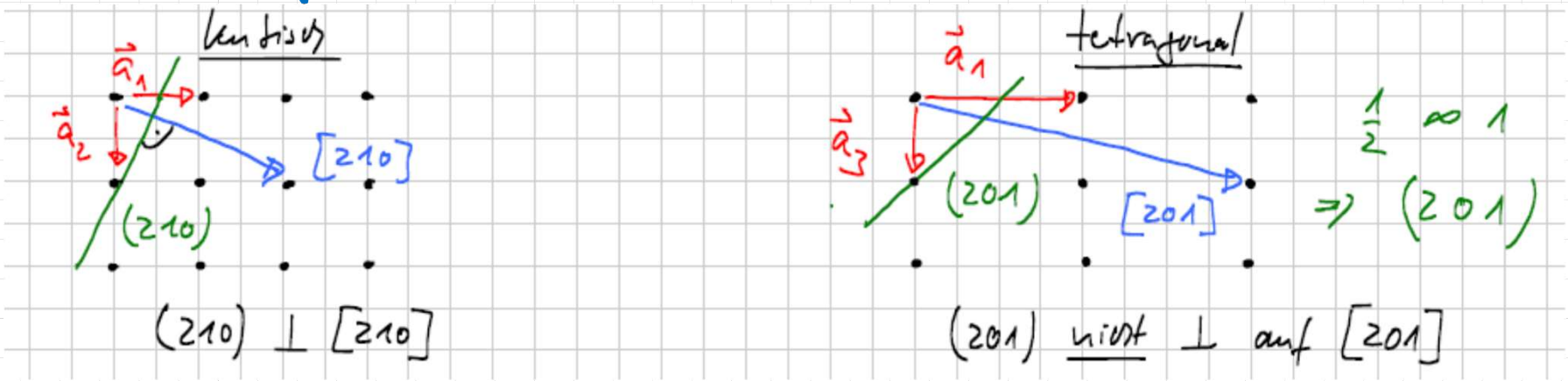


Das Ergebnis (hkl) sind die Millerschen Indizes der Ebene. [Beide Def. äquivalent: Hausaufgabe]

- Einen negativen Achsenabschnitt macht man durch einen $^-$ kenntlich, z. B $(\bar{1}00)$
- Ein Achsenabschnitt im Unendlichen wird durch 0 indiziert $\left(\frac{1}{\infty} = 0\right)$
- Eine einzelne Ebene hat runde Klammern (100)
- Meint man alle äquivalenten Ebenen z. B (010), (100) $(\bar{1}00)$ etc. dann $\{100\}$



- Richtungen im Kristall werden durch die kleinsten ganzen Zahlen $[u_1\ u_2\ u_3]$ angegeben, die dasselbe Verhältnis wie die Komponenten des Richtungsvektors $\vec{R} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$ haben.
- Ein Satz äquivalenter Richtungen (z. B $[110], [011], [101]\ [1\bar{1}0], [\bar{1}01]$ etc.) setzt man in spitze Klammern, z. B $\langle 110 \rangle$
- Im kubischen Gitter stehen (hkl) und $[hkl]$ $\perp$ aufeinander, in anderen Kristallsystemen gilt das nicht.



Zusammengefasst:

Ebene (hkl)	$[u_1, u_2, u_3]$ Richtung
äquivalente Ebenen $\{hkl\}$	$\langle u_1, u_2, u_3 \rangle$ äquivalente Richtungen

direktes Gitter	reziprokes Gitter
Ortsraum $[\vec{R}] = m$	Wellenvektorraum $[\vec{G}] = \frac{1}{m}$
$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$	$\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$
(hkl)	$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$
$d = \frac{2\pi}{\lvert\vec{G}_{min}\rvert}$	$\vec{G}_{min}$

im kubischen System

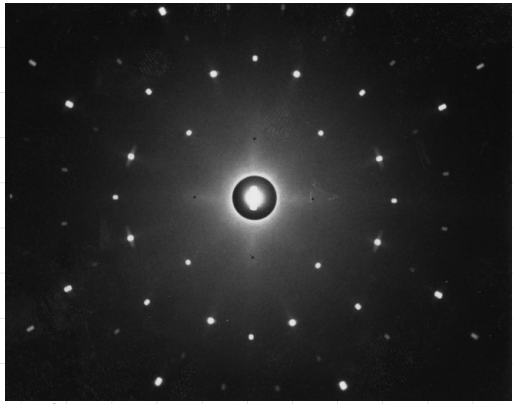
$$d = \frac{2\pi}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

3.2 Die Beugungsbedingungen

Röntgenlicht → Kristall ⇒ scharfe Reflexe

⇒ Kristall wirkt als Beugungsgitter

Laue + Knipping 1912
Braggs 1913



Si, [001]-Richtung

Annahmen für Folgendes

1. $\lambda \approx a$
2. elastische Wechselwirkung $\Delta E = 0$

• Braggsche Erklärung:

Ein scharfer Reflex entsteht, wenn

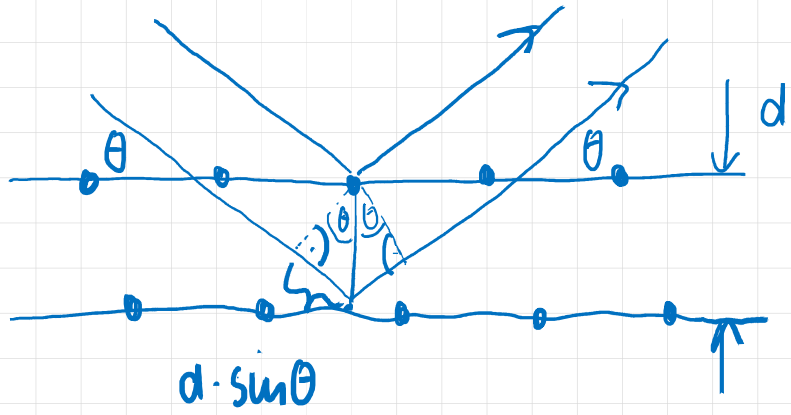
1.) die Strahlung jeweils an einen kleinen Bruchteil an Netzebenen einer Schar mit Ebenenabstand d reflektiert wird.

2.) reflektierte Strahlung verschiedener Ebenen interferiert konstruktiv.

Die Braggsche Beugungsbedingung lautet also

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

Beugungsordnung $n \in \mathbb{N}$



Für polychromatisches treten i. A. viele Reflexe und höhere Beugungsordnungen auf

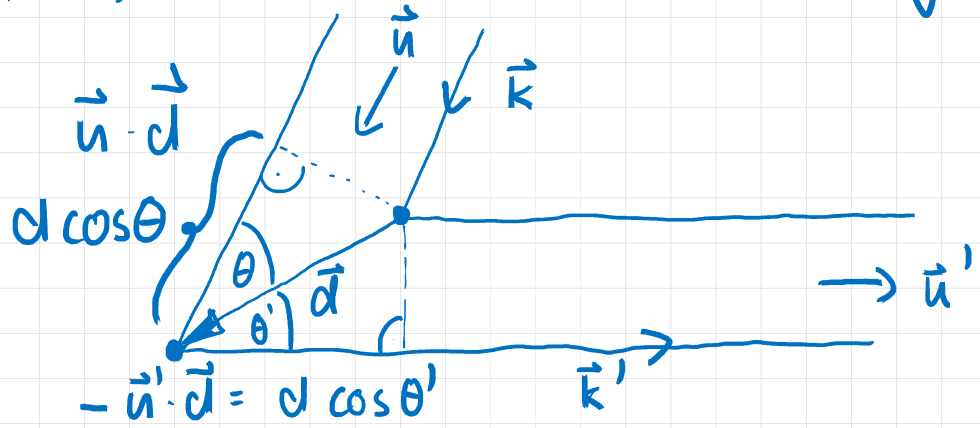
• Laues Erklärung:

Interferenz von streuenden Atomgruppen (Basis) die an die Gitterpunkte angeheftet.

Jedes Atom strahlt einfallende Strahlung isotrop ab. Betrachte 2 Punktstrahler

Gangunterschied

$$d\cos\theta + d\cos\theta' = \vec{d}\,(\vec{n} - \vec{n}')$$



Konstruktive Interferenz für $\vec{d}\cdot(\vec{n}-\vec{n}') = m\cdot\lambda \quad \Big| \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \qquad m \in \mathbb{N}$

$$\Leftrightarrow \quad \vec{d}\cdot(\vec{k}-\vec{k}') = 2\pi\cdot m$$

Damit Laue-Reflex: konstruktive Interferenz aller Punktstrahler an Gitterpunkten, d.h. für alle $\vec{R}$ ist

$$\vec{R}\cdot(\vec{k}-\vec{k}') = 2\pi m$$

$$e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}} = 1$$

Vergleich mit der Definition des reziproken Gitters zeigt, dass Reflex für

$$\boxed{\vec{G} = (\vec{k}-\vec{k}')}$$

genauso gut: $\vec{G} = \vec{k}' - \vec{k}$

- Veranschaulichung der Laue Bedingung

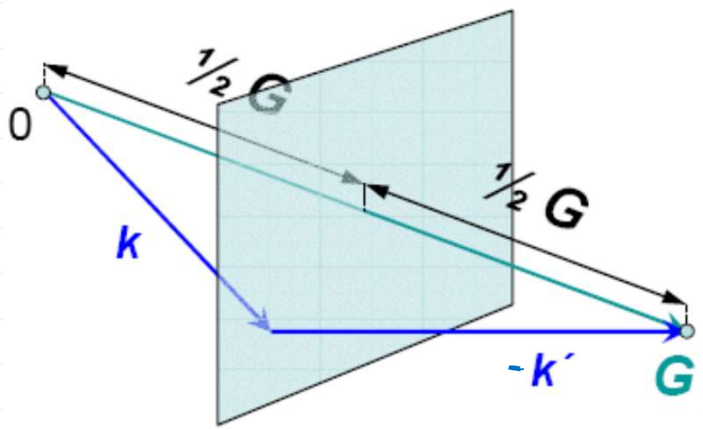
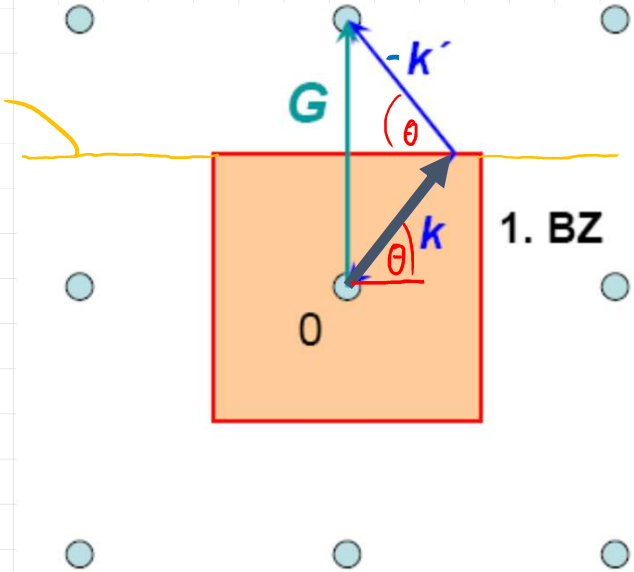
$$\vec{G} = \vec{k} - \vec{k}' \quad \Leftrightarrow$$

$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{G} \quad \Leftrightarrow \quad \text{quadrieren}$$

$$\vec{k}'^2 = \vec{k}^2 - 2\vec{k}\cdot\vec{G} + \vec{G}^2 \quad \Leftrightarrow \qquad \vec{k}^2 = \vec{k}'^2$$

$$2\vec{k}\vec{G} = \vec{G}^2 \quad \Leftrightarrow \qquad \vec{G}_e = \frac{\vec{G}}{|\vec{G}|}$$

$$\boxed{\vec{k}\cdot\vec{G}_e = \frac{G}{2}}$$



Braggebene