

Spezielle Kristallgitter

(i) Dichteste Kugelpackung (viele Metalle)

Ag, Au, Cu, Pt: kubisch F (fcc = face centered cubic)
 Be, Mg, Ti, Cd, Zn: hexagonal dichteste Kugelpackung

Li, Na, K, W: kubisch I (2xP) $\begin{matrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{matrix}$
 (bcc = body centered cubic)

(ii) Diamantgitter: 2x kubisch F

C, Si, Ge

(iii) Steinsalzgitter: 2x kubisch F

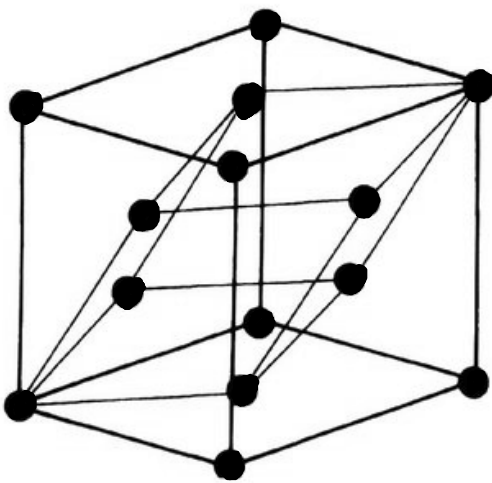
NaCl

(iv) Zinkblendegitter: 2x kubisch F (wie ii, aber beide Gitter mit verschiedenen Atomen besetzt)
 viele II-VI, III-V-Halbleiter

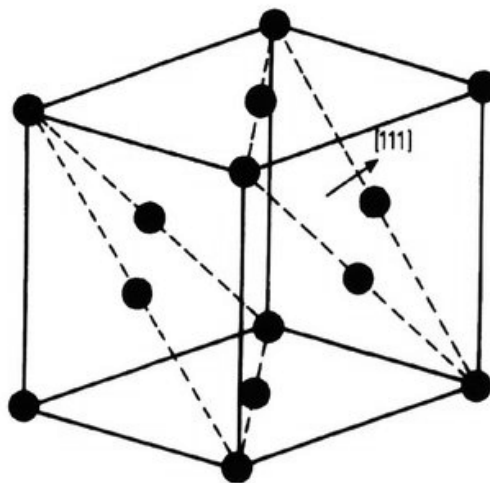
ZnS, GaAs, AlAs, GaP, GaSb, InP

(v) Wurtzitgitter: hexagonal

Cd

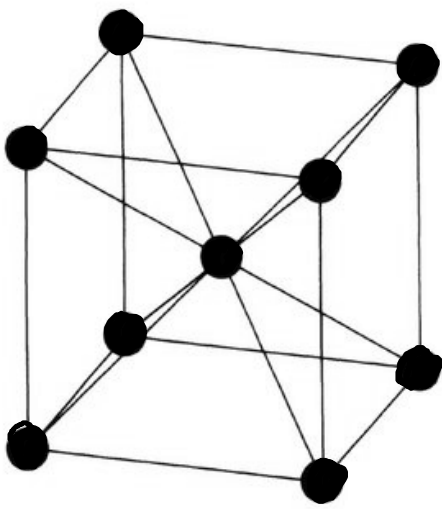


fcc = face centered cubic

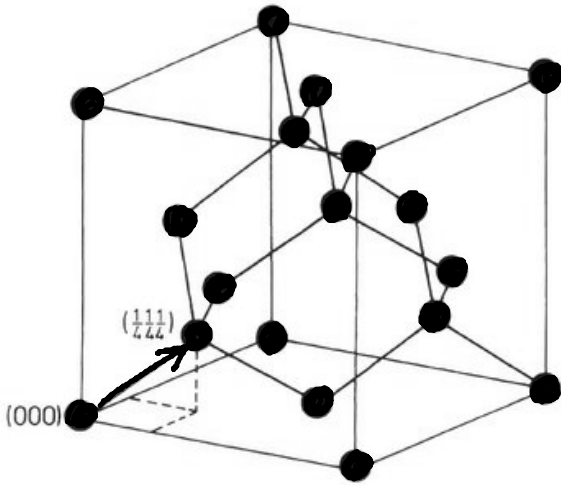


(Ag, Au, Cu, Pt)

aus:
 Ibach, Lütth



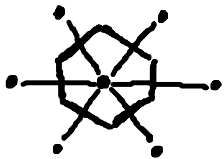
bcc = body centred cubic
(Li, Na, K, W)



2x fcc
Diamantgitter

Wigner-Seitz-Zelle

Wähle 1 Gitterpunkt, verbinde ihn mit allen Nachbarpunkten.

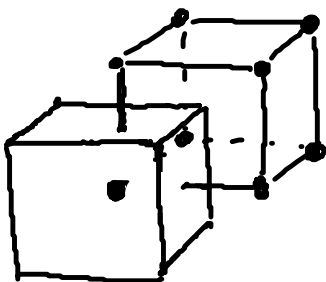


hexagonales
2D-Punktgitter

Errichte senkrechte Ebenen in der Mitte
der Verbindungsgeraden

→ Wigner-Seitz-Zelle

(enthält genau 1 Gitterpunkt)



primitiv-kub. 3D-Punktgitter

1.3 Fourierreiheentwicklung und reziprokes Gitter

Sei $f(\underline{r}) = f(\underline{r} + \underline{R})$ eine gitterperiod. Fkt.

Entwicklung in eine Fourier-Reihe:

$$f(\underline{r}) = \sum_{\underline{G}} F(\underline{G}) e^{i\underline{G}\underline{r}}$$

Aus der Translationsinvarianz bzgl. aller Gittervektoren

$$\underline{R} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

folgt

$$f(\underline{r} + \underline{R}) = \sum_{\underline{G}} F(\underline{G}) e^{i\underline{G}\underline{r}} e^{i\underline{G}\underline{R}} \stackrel{!}{=} \sum_{\underline{G}} F(\underline{G}) e^{i\underline{G}\underline{r}}$$

also

$$\underline{G}\underline{R} = 2\pi m, \quad m \in \mathbb{Z} \quad \text{für alle } n_1, n_2, n_3.$$

Zerlegung von

$$\underline{G} = h \underline{g}_1 + k \underline{g}_2 + l \underline{g}_3 \quad h, k, l \in \mathbb{Z}$$

nach noch nicht festgelegten Basisvektoren $\underline{g}_1, \underline{g}_2, \underline{g}_3$ liefert

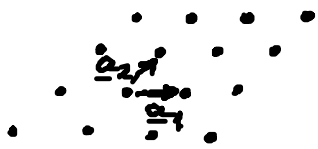
$$(h \underline{g}_1 + k \underline{g}_2 + l \underline{g}_3) (n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3) = 2\pi m$$

für bel. n_1, n_2, n_3 .

$$\Rightarrow \boxed{\underline{g}_i \cdot \underline{a}_j = 2\pi \delta_{ij}} \quad i, j = 1, 2, 3$$

Die damit definierte Basis $\underline{g}_1, \underline{g}_2, \underline{g}_3$ spannt das reziproke Gitter (im \underline{k} -Raum, [cm^{-1}]) auf

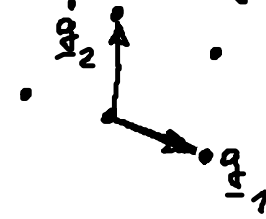
Beispiel: 2D Gitter



$$\underline{a}_1 \perp \underline{a}_2$$

$$\underline{a}_2 \perp \underline{a}_1$$

reziprokes Gitter



$$|\underline{g}_1| = \frac{2\pi}{|\underline{a}_1| \cos \angle(\underline{g}_1, \underline{a}_1)}$$

allgemein

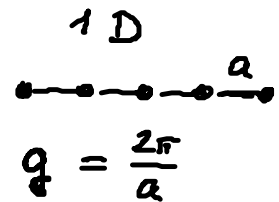
$$\underline{g}_i \perp \underline{a}_j, \underline{a}_k \quad (ijk = 1, 2, 3 \text{ und zyklisch})$$

$$\Rightarrow \underline{g}_i = c \underline{a}_j \times \underline{a}_k$$

$$\underline{a}_i \cdot \underline{g}_i = c \underline{a}_i \cdot (\underline{a}_j \times \underline{a}_k) = 2\pi$$

Ω = Volumen der Elementarzelle

$$\Rightarrow \underline{g}_i = 2\pi \frac{\underline{a}_j \times \underline{a}_k}{\underline{a}_i \cdot (\underline{a}_j \times \underline{a}_k)}$$



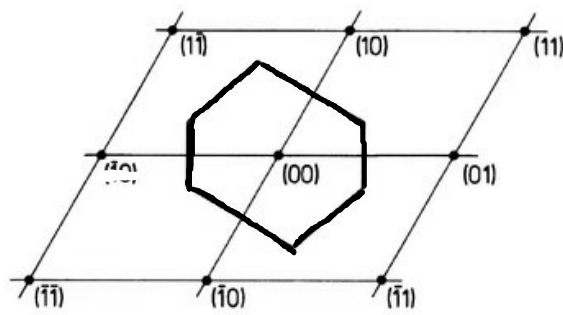
Umkehrung:

$$\underline{a}_i = 2\pi \frac{\underline{g}_j \times \underline{g}_k}{\underline{g}_i \cdot (\underline{g}_j \times \underline{g}_k)}$$

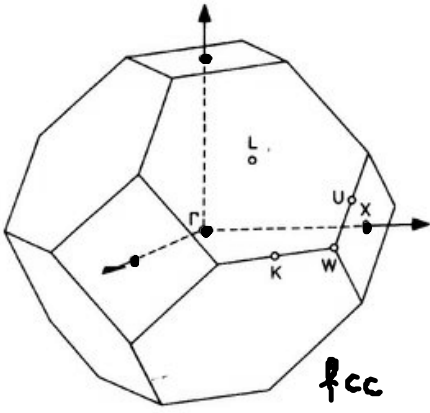
$\underline{g}_1, \underline{g}_2, \underline{g}_3 \rightarrow$ Elementarzelle des reziproken Gitters

Die Wigner-Seitz-Zellen des reziproken Gitters heißen Brillouin-Zonen.

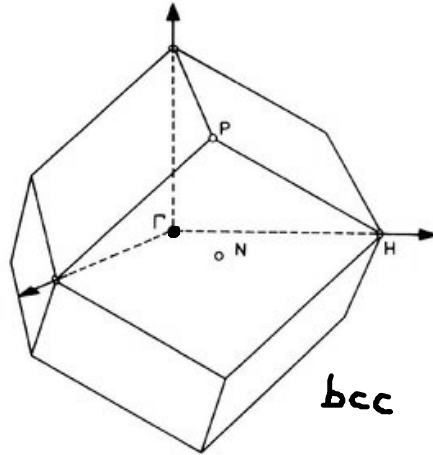
aus Jbach-Liith



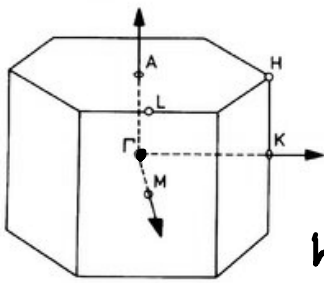
1. Brillouin-Zone
für ebenes Parallelogramm
gitter



fcc



bcc



hexagonal

Brillouin-Zonen

für fcc und bcc
und hexagonale Gitter

Hochsymm. Pkte: Γ , X, ...

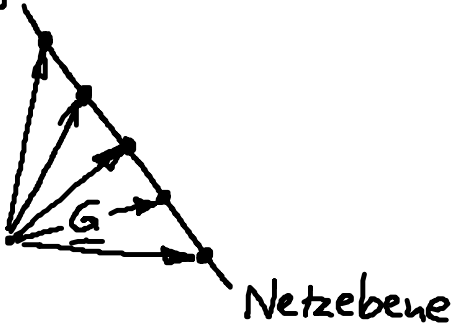
NB : Brillouin-Zone des fcc-Gitters
= Wigner-Seitz-Zelle des bcc-Gitters

und umgekehrt!

Miller'sche Indizes :

$$\text{Aus } \underline{G} \cdot \underline{R} = 2\pi (n_1 h + n_2 k + n_3 l) = 2\pi m \quad (*)$$

folgt :
 Alle \underline{R} , die für ein geg. $\underline{G} \text{ (*)}$ erfüllen,
 liegen in einer Netzebene $\perp \underline{G}$.



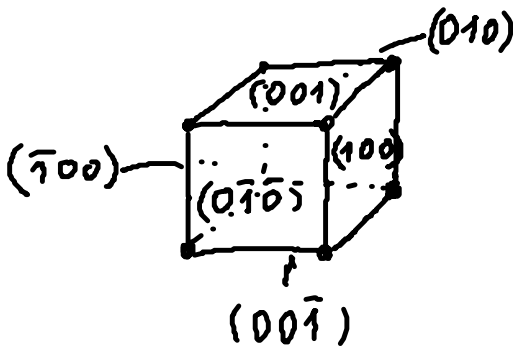
h, k, l legt den reziproken Gittervektor
 \underline{G} fest $\hat{=} \underline{\text{Netzebene des Ortsgitters}}$

h, k, l nur bis auf gemeinsamen Faktor
 definiert

\rightarrow kleinstmögliche Werte (h, k, l)
 = Miller'sche Indizes

Schreibweise : $\bar{h} = -h$

Beispiel : Netzebenen eines kub. Kristalls



kristallograph. Richtung : z.B. $\langle 100 \rangle$
 (\perp facet)

