

# Spezielle Kristallgitter

(i) Dichteste Kugelpackung (viele Metalle)

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

Li, Na, K, W: kubisch I (2xP) (bcc = body centered cubic)

(ii) Diamantgitter: 2x kubisch F

C, Si, Ge

(iii) Steinsalzgitter: 2x kubisch F

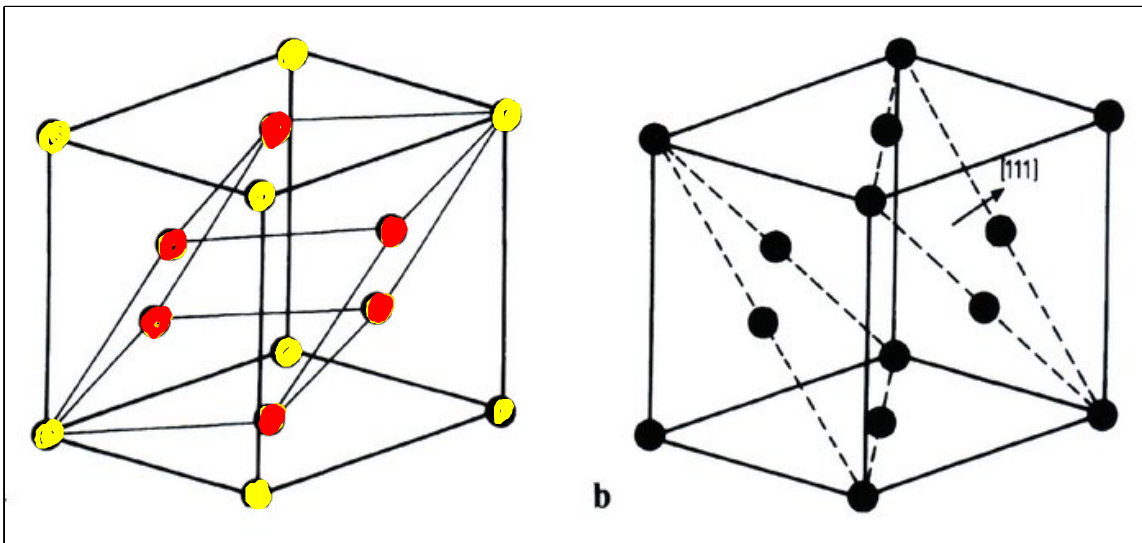
NaCl

(iv) Zinkblendgitter: 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

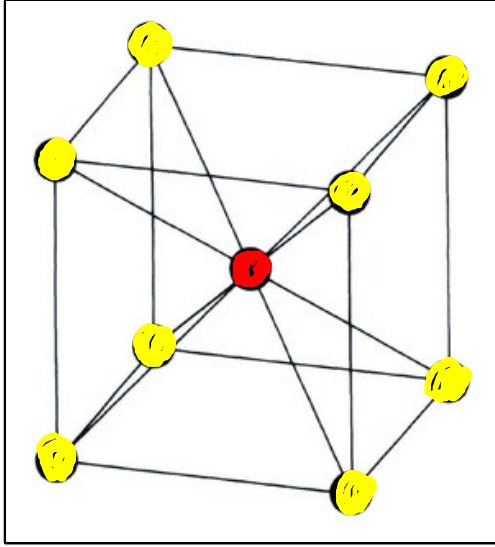
Cd



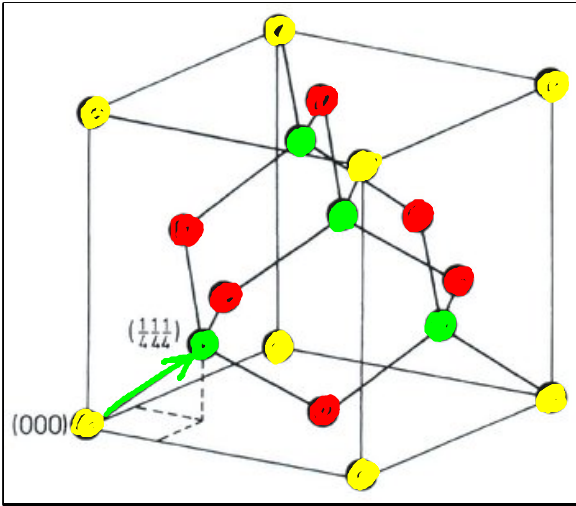
aus:  
Ibach, Lüth

fcc = face centered cubic

(Ag, Au, Cu, Pt)



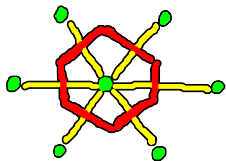
bcc = body centered cubic  
(Li, Na, K, W)



2x fcc  
Diamantgitter

### Wigner-Seitz-Zelle

Wähle 1 Gitterpunkt, verbinde ihn mit allen Nachbarn.

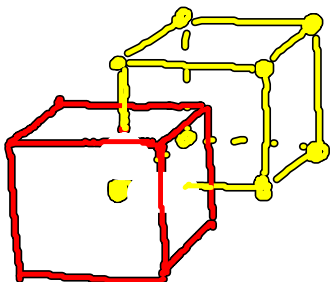


hexagonales  
2D-Punktgitter

Errichte senkrechte Ebenen in der Mitte  
der Verbindungsgeraden

→ Wigner-Seitz-Zelle

(enthält genau 1 Gitterpunkt)



primativ-kub. 3D-Punktgitter

### 1.3 Fourierreentwicklung 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

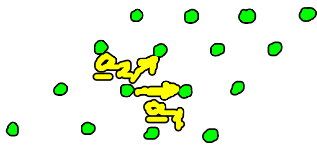
$$(h \underline{g}_1 + k \underline{g}_2 + l \underline{g}_3) (n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3) = 2\pi m$$

für bel.  $n_1, n_2, n_3$ .

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

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

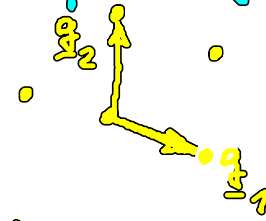
Beispiel: 2D Gitter



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

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

reziprokes Gitter



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

allgemein

$$\underline{g}_i \perp \underline{a}_j, \underline{a}_k$$

(ijk = 1, 2, 3 und zyklisch)

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

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

$\Omega$  = Volumen der Elementarzelle

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

1D  

$$g = \frac{2\pi}{a}$$

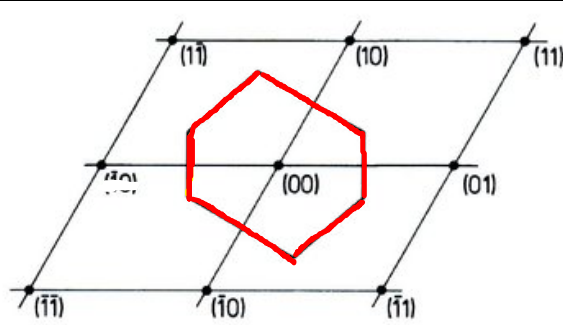
Umkehrung:

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

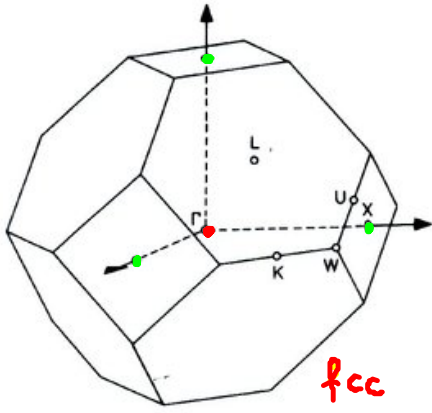
$\underline{g}_1, \underline{g}_2, \underline{g}_3 \rightarrow$  Elementarzelle des reziproken Gitters

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

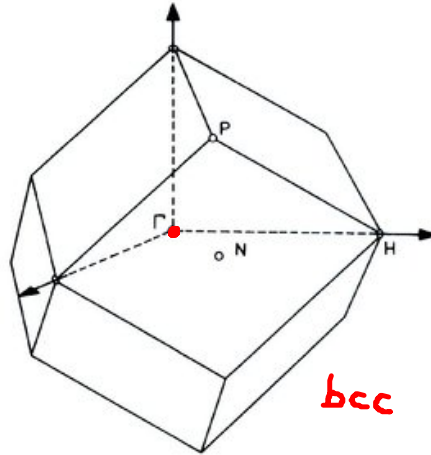
aus Ibach-Litt



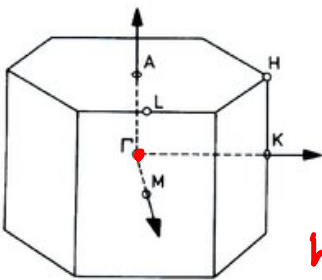
1. Brillouin-Zone  
für ebenes Parallelogramm  
gitter



fcc



bcc



hexagonal

Brillouin-Zonen

für fcc und bcc  
und hexagonale Gitter

Hoch symm. Pkte:  $\Gamma$ , X, ...

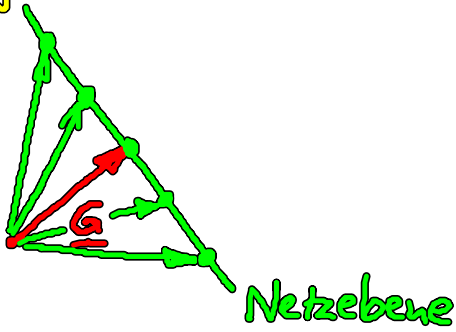
NB : Brillouin-Zone des fcc-Gitters  
= Wigner-Seitz-Zelle des bcc-Gitters

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.  $\underline{G} \in \mathbb{R}^3$  erfüllen,  
 liegen in einer Netzebene  $\perp \underline{G}$ .



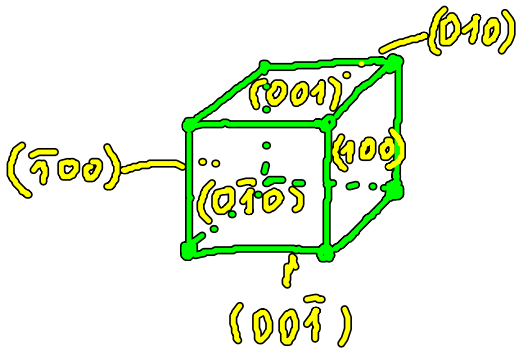
$h, k, l$  legt den reziproken Gittervektor  
 $\underline{G}$  fest  $\hat{=} \underline{\text{Netzebene des Ortsgitters}}$

$h, k, l$  nur bis auf gemeinsame Faktoren  
 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)