Das reziproke Gitter

Für viele Untersuchungen in der Festkörperphysik ist es zweckmäßig, anstelle des eigentlichen (direkten, Orts-) Gitters das reziproke (Fourier-) Gitter zu nutzen.

1. Beugung: Das Beugungsbild ist eine Abbildung des reziproken Gitters.
2. Vektoren im reziproken Raum besitzen die Dimension m^{-1}. D.h., Punkten im reziproken Raum kann ein bestimmter Wellenvektor bzw. Impuls zugeordnet werden. Damit lassen sich die Dispersionsrelationen $E(k)$ aller Festkörperanregungen zweckmäßig im rez. Raum darstellen. Aufgrund der Translationssymmetrie kann die Darstellung auf die 1. Brillouinzone beschränkt werden.

Definition in 3D

$$\vec{a_1^*} = 2\pi \frac{\vec{a_2} \times \vec{a_3}}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a_2} \times \vec{a_3})}, \qquad \vec{a_2^*} = 2\pi \frac{\vec{a_3} \times \vec{a_1}}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a_2} \times \vec{a_3})}, \qquad \vec{a_3^*} = 2\pi \frac{\vec{a_1} \times \vec{a_2}}{\vec{a_1} \cdot (\vec{a_2} \times \vec{a_3})},$$

$\Rightarrow$ Die primitive Translation $\vec{a_1^*}$ steht $\perp$ auf $\vec{a_2}$ und $\vec{a_3}$. Bei einem orthogonalem Gitter ist dies die Richtung von $\vec{a_1}$.
Eine gleichwertige Definition des reziproken Gitters lautet:

$$\vec{a_i} \cdot \vec{a_j^*} = 2\pi\delta_{ij}.$$

Punkte im rez. Gitter sind durch die Menge der Vektoren

$$\vec{G} = v_1\vec{a_1^*} + v_2\vec{a_2^*} + v_3\vec{a_3^*}$$

festgelegt. $\vec{G}$ ist der reziproke Gittervektor, v_i sind ganze Zahlen.

Definition in 2D I

Wir starten mit der Definition

$$\vec{a}_1^* = 2\pi \frac{\vec{a_2} \times \vec{n}}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|}, \qquad \vec{a}_2^* = 2\pi \frac{\vec{n} \times \vec{a_1}}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|}.$$

$\vec{n}$ =Einheitsvektor $\perp$ OF $= \frac{\vec{a_1} \times \vec{a_2}}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|} = \frac{\vec{a_1} \times \vec{a_2}}{\vec{a_1}\ \vec{a_2}\ \sin\varphi}$, $\varphi = \angle(\vec{a_1}, \vec{a_2})$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}
\vec{a}_1^* = 2\pi \frac{\vec{a_2} \times (\vec{a_1} \times \vec{a_2})}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|^2} \quad &= \quad \frac{\vec{a_1}\vec{a_2}^2 - \vec{a_2}(\vec{a_1} \cdot \vec{a_2})}{\vec{a_1}^2 \vec{a_2}^2 \sin^2\varphi} \\
&= \quad \frac{\vec{a_1}\vec{a_2}^2 - \vec{a_2}(\vec{a_1} \cdot \vec{a_2})}{\vec{a_1}^2 \vec{a_2}^2 (1 - \cos^2\varphi)} = \frac{\vec{a_1}\vec{a_2}^2 - \vec{a_2}(\vec{a_1} \cdot \vec{a_2})}{\vec{a_1}^2 \vec{a_2}^2 - (\vec{a_1} \cdot \vec{a_2})^2} \\
\text{bzw.} \quad &= \quad \frac{2\pi}{a_1 \sin^2\varphi} \left(\frac{\vec{a_1}}{a_1} - \frac{\vec{a_2}}{a_2} \cos\varphi \right)
\end{aligned}$$

Definition in 2D II

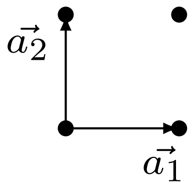
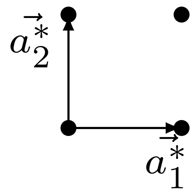
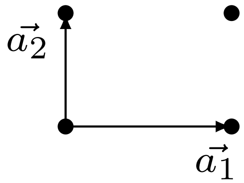
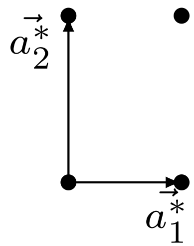
Alternativ gilt wie in 3D die allgemeine Definition

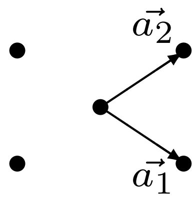
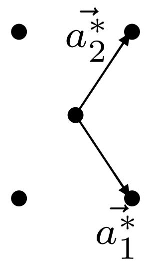
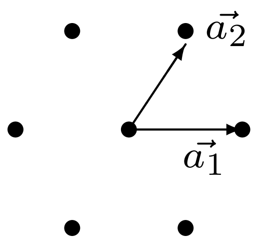
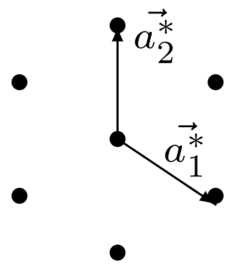
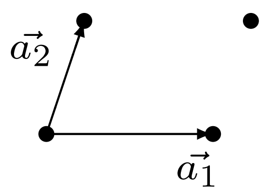
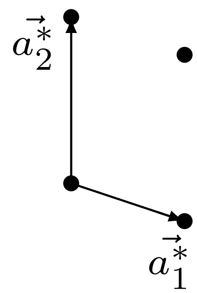
$$\vec{a_i} \cdot \vec{a_j^*} = 2\pi\delta_{ij}.$$

Z.B. ergibt sich

$$\begin{aligned}
\vec{a_1} \cdot \vec{a_1^*} &= 2\pi\frac{\vec{a_1} \cdot (\vec{a_2} \times \vec{n})}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|} = 2\pi\frac{\vec{a_1} \cdot (\vec{a_2} \times (\vec{a_1} \times \vec{a_2}))}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|^2} = 2\pi\frac{\vec{a_1} \cdot (\vec{a_1}\vec{a_2}^2 - \vec{a_2}(\vec{a_1} \cdot \vec{a_2}))}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|^2} \\
&= 2\pi\frac{\vec{a_1}^2\vec{a_2}^2 - (\vec{a_1} \cdot \vec{a_2})^2}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|^2} = 2\pi\frac{\vec{a_1}^2\vec{a_2}^2(1 - \sin^2\varphi)}{\vec{a_1}^2\vec{a_2}^2\cos^2\varphi} = 2\pi \\
\vec{a_1} \cdot \vec{a_2^*} &= 2\pi\frac{\vec{a_1} \cdot (\vec{n} \times \vec{a_1})}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|} = 2\pi\frac{\vec{a_1} \cdot ((\vec{a_1} \times \vec{a_2}) \times \vec{a_1})}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|^2} = 2\pi\frac{\vec{a_1}^2(\vec{a_2} \cdot \vec{a_1}) - (\vec{a_2} \cdot \vec{a_1})\vec{a_1}^2}{|\vec{a_1} \times \vec{a_2}|^2} = 0
\end{aligned}$$

Beispiele - Die 5 OF-Bravais-Gitter

	Realraum-EZ		EZ im rez. Raum	
quadratisch		$\lvert\vec{a_1}\rvert = \lvert\vec{a_2}\rvert$		$\lvert\vec{a_1^*}\rvert = \frac{2\pi}{\lvert\vec{a_1}\rvert} = \lvert\vec{a_2^*}\rvert$
rechtwinklig				$\lvert\vec{a_1^*}\rvert = \frac{2\pi}{\lvert\vec{a_1}\rvert}; \vec{a_1^*} \parallel \vec{a_1}$ $\lvert\vec{a_2^*}\rvert = \frac{2\pi}{\lvert\vec{a_2}\rvert}; \vec{a_2^*} \parallel \vec{a_2}$

rechtwinklig, zentriert			$\lvert\vec{a_1^*}\rvert = \frac{2\pi}{\lvert\vec{a_1}\rvert\sin\varphi}; \vec{a_1^*} \perp \vec{a_2}$ $\lvert\vec{a_2^*}\rvert = \frac{2\pi}{\lvert\vec{a_2}\rvert\sin\varphi}; \vec{a_2^*} \perp \vec{a_1}$
hexagonal			$\lvert\vec{a_1^*}\rvert = \frac{4\pi}{\lvert\vec{a_1}\rvert}; \vec{a_1^*} \perp \vec{a_2}$ $\lvert\vec{a_2^*}\rvert = \frac{4\pi}{\lvert\vec{a_2}\rvert}; \vec{a_2^*} \perp \vec{a_1}$
schiefwinklig			$\lvert\vec{a_1^*}\rvert = \frac{2\pi}{\lvert\vec{a_1}\rvert\sin\varphi}; \vec{a_1^*} \perp \vec{a_2}$ $\lvert\vec{a_2^*}\rvert = \frac{2\pi}{\lvert\vec{a_2}\rvert\sin\varphi}; \vec{a_2^*} \perp \vec{a_1}$