$\vec{x}$, $\vec{y}$ und $\vec{z}$ sind orthogonale Einheitsvektoren, dann gilt

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = a\vec{y} \times a\vec{z} = a^2[\vec{y} \times \vec{z}] = a\vec{x}$$

... und für das Volumen gilt:

$$V = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = a\vec{x} \cdot a^2\vec{x} = a^3$$

Nach Gleichung 2.9 lauten dann die Basisvektoren des reziproken Gitters:

$$\frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V} = \vec{a}_1^* \qquad \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V} = \vec{a}_2^* \qquad \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V} = \vec{a}_3^*$$

Das reziproke Gitter ist ebenfalls einfach kubisch mit der Gitterkonstanten $\frac{1}{a}$. Die erste Brillouin Zone wird von Grenzflächen umschlossen, die durch Ebenen gebildet sind, die senkrecht auf den Gittervektoren ($\pm\vec{a}_1^*$, $\pm\vec{a}_2^*$ und $\pm\vec{a}_3^*$) des reziproken Gitters stehen und diese in der Mitte schneiden, also

$$\pm\frac{1}{2}\vec{a}_1^* = \pm\frac{1}{2a}\vec{x} \qquad \pm\frac{1}{2}\vec{a}_2^* = \pm\frac{1}{2a}\vec{y} \qquad \pm\frac{1}{2}\vec{a}_3^* = \pm\frac{1}{2a}\vec{z}$$

Die erste Brillouin Zone hat die Gestalt eines Würfels mit der Kantenlänge $\frac{1}{a}$ und dem Volumen $\left(\frac{1}{a}\right)^3$.

Das reziproke Gitter des kubisch raumzentrierten Gitters

Die in Abbildung 2.12 gezeigten primitiven Basisvektoren können als Funktion der Kantenlänge des kubischen Gitters dargestellt werden. Sie lauten:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(\vec{x} + \vec{y} - \vec{z}\right) \qquad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(-\vec{x} + \vec{y} + \vec{z}\right) \qquad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{x} - \vec{y} + \vec{z}\right)$$

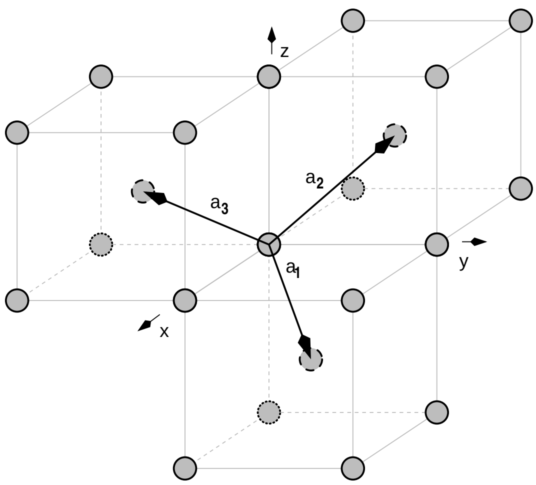


Abbildung 2.12: Primitive Translationen des kubisch raumzentrirten Gitters; diese Vektoren verbinden den Gitterpunkt am Ursprung mit dem Gitterpunkt in der Würfelmitte. Die primitive Gitterzelle erhält man aus diesen Achsen ein vollständiges Rhomboeder aufbaut.

Das Volumen der primitiven Einheitszelle ist:

$$\begin{aligned}
V &= \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \\
&= \vec{a}_1 \cdot \left(\left(-\frac{a}{2}\vec{x} + \frac{a}{2}\vec{y} + \frac{a}{2}\vec{z}\right) \times \left(\frac{a}{2}\vec{x} - \frac{a}{2}\vec{y} + \frac{a}{2}\vec{z}\right)\right) \\
&= \vec{a}_1 \cdot \left(\left(\frac{a}{2}\frac{a}{2} - \left(-\frac{a}{2}\right)\frac{a}{2}\right)\vec{x} + \left(\frac{a}{2}\frac{a}{2} - \left(-\frac{a}{2}\right)\frac{a}{2}\right)\vec{y} + \left(\left(-\frac{a}{2}\right)\frac{a}{2} - \frac{a}{2}\frac{a}{2}\right)\vec{z}\right)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \vec{a}_1 \cdot \left(\left(\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} \right) \vec{x} + \left(\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} \right) \vec{y} + \left(\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4} \right) \vec{z} \right) \\
&= \vec{a}_1 \cdot \left(\frac{a^2}{2} (\vec{x} + \vec{y}) \right) \\
&= \frac{a}{2} (\vec{x} + \vec{y} - \vec{z}) \cdot \frac{a^2}{2} (\vec{x} + \vec{y}) \\
&= \frac{a^3}{4} (1+1) = \frac{a^3}{2}
\end{aligned}
$$

In diesem Fall hat man 2 Atome im Kubus.
Die Basisvektoren des reziproken Gitters berechnen sich wieder nach Gleichung 2.9 zu:

$$
\begin{aligned}
\vec{a}_1^* &= \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V} \text{ etc.} \\
&= \frac{2a^2}{a^3 \cdot 2} (\vec{x} + \vec{y})
\end{aligned}
$$

und damit gilt für alle drei:

$$
\vec{a}_1^* = \frac{1}{a} (\vec{x} + \vec{y}) \qquad \vec{a}_2^* = \frac{1}{a} (\vec{y} + \vec{z}) \qquad \vec{a}_3^* = \frac{1}{a} (\vec{z} + \vec{x}) \tag{2.15}
$$

Die in Gleichung 2.15 angegebenen Basisvektoren entsprechen den primitiven Basisvektoren des kubisch flächenzentrierten Gitters. Damit ist das reziproke Gitter des kubisch raumzentrierten Gitters ein kubisch flächenzentriertes Gitter.

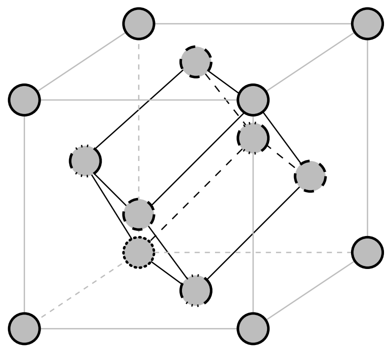


Abbildung 2.13: Das reziproke Gitter des kubisch raumzentrierten Gitters ein kubisch flächenzentriertes Gitter.

Die primitive Zelle des reziproken Gitters des kubisch raumzentrierten Gitters ist ein von $\vec{a}_1^*$, $\vec{a}_2^*$ und $\vec{a}_3^*$ aufgespanntes Parallelepiped. Das Volumen der primitiven Zelle beträgt:

$$
V = \vec{a}_1^* \cdot (\vec{a}_2^* \times \vec{a}_3^*) = 2 \left(\frac{1}{a} \right)^3
$$

Die erste Brillouin Zone wird von Grenzflächen umschlossen, die durch Ebenen gebildet sind, die senkrecht auf den Gittervektoren ($\pm\vec{a}_1^*$, $\pm\vec{a}_2^*$ und $\pm\vec{a}_3^*$) des reziproken Gitters stehen und diese in der Mitte schneiden, also

$$
\pm \frac{1}{2} \vec{a}_1^* = \frac{1}{2a} (\pm\vec{x} \pm \vec{y}) \qquad \pm \frac{1}{2} \vec{a}_2^* = \frac{1}{2a} (\pm\vec{y} \pm \vec{z}) \qquad \pm \frac{1}{2} \vec{a}_3^* = \frac{1}{2a} (\pm\vec{z} \pm \vec{x})
$$

Die erste Brillouin Zone hat die Gestalt eines rhombischen Dodekaeders, eines regelmäßigen 12-flächigen Körpers.

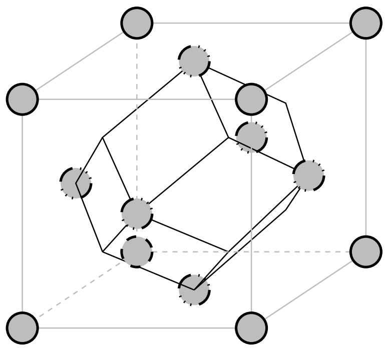


Abbildung 2.14: Brillouin-Zone des kubisch raumzentrierten Gitters. Die Einheitszellen sind im reziproken Raum, das reziproke Gitter ist kubisch flächenzentriert.

Das reziproke Gitter des kubisch flächenzentrierten Gitters

Im kubisch flächenzentrierten Gitter sind folgende primitive Basisvektoren vohanden wie sie in Abbildung refprimitivzellfccvec eingezeichnet sind:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{x}+\vec{y}) \qquad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{y}+\vec{z}) \qquad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{z}+\vec{x})$$

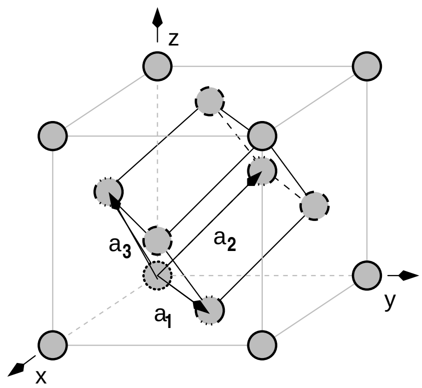


Abbildung 2.15: Die primitive Zelle des kubisch flächenzentrirten Gitters ist ein Rhomboeder. Die primitiven Translationen $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und $\vec{a}_3$ verbinden den Gitterpunkt am Ursprung mit den Gitterpunkten in den Flächenmittelpunkten.

Das Volumen beträgt:

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \vec{a}_3) = \frac{a^3}{4}$$

Die Basisvektoren des reziproken Gitters berechnen sich wieder nach Gleichung 2.9 zu:

$$\begin{aligned} \vec{a}_1^* &= \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V} \text{ etc.} \\ &= \frac{1}{a}\left(\vec{x}+\vec{y}-\vec{z}\right) \end{aligned}$$

und damit gilt für alle drei:

$$\vec{a}_1^* = \frac{1}{a}\left(\vec{x}+\vec{y}-\vec{z}\right) \qquad \vec{a}_2^* = \frac{1}{a}\left(-\vec{x}+\vec{y}+\vec{z}\right) \qquad \vec{a}_3^* = \frac{1}{a}\left(\vec{x}-\vec{y}+\vec{z}\right)$$

Das reziproke Gitter des kubisch flächenzentrierten Gitters ist ein klubisch raumzentriertes Gitter.

Die Brillouin Zone wird wiederum durch die Ebenen gekennzeichnet, die diese Vektoren in ihrer Mitte schneiden, also bei:

$$\frac{1}{2a}\left(\pm\vec{x}\pm\vec{y}\pm\vec{z}\right)$$

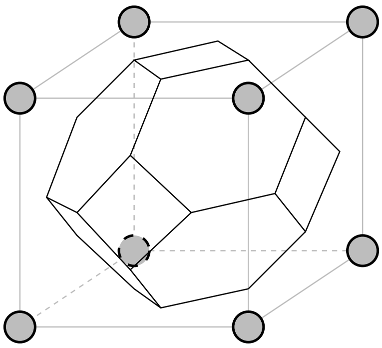
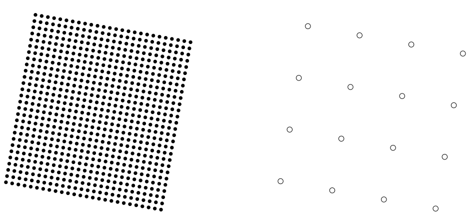


Abbildung 2.16: Brillouin-Zone des kubisch flächenzentrierten Gitters. Die Einheitszellen sind im reziproken Raum, das reziproke Gitter ist kubisch raumzentriert.

Die Bedeutung der ersten Brillouin Zone
Nur Wellen, deren Wellenvektor (vom Ursprung aus aufgetragen) auf der Oberfläche der Brillouin Zone enden werden durch den Kristall gebeugt. Dies ist wichtig fuer Kristallstrukturanalysen durch Röntgen- oder Neutronenbeugung. Das Selbe gilt fuer Elektronenbeugung, woraus die Bandstruktur ermittelt wird. Die Bandstruktur wird im Übrigen stets innehalb der Brillouin Zone aufgetragen, und zwar entlang eines speziellen Weges. Letzendlich werden auch Gitterschwingungen anhand der Brillouin Zone beschrieben.

2.7 Röntgen Diffraktion

An dieser Stelle soll weniger auf die Methoden eingegangen werden, als das ihre prinzipielle Funktionsweise erläutert werden. Prinzipiell muß die Beugungs-Bedingung erfüllt sein, damit ein Beugungsbild entstehen kann.
Die **Laue Methode** arbeitet mit weißem Röntgenlicht. Es werden Einkristalle untersucht. Abhängig von der Orientierung des Kristalls zum Primärstrahl entsteht ein Beugungsbild für alle möglichen Scharen von Netzebenen. Dies ist möglich, da in weißem Röntgenlicht jede beliebige Wellenlänge enthalten ist und hierdurch jeder beliebige Netzebenenabstand die Röntgenstrahlen mit der passenden Wellenlänge zur Interferrenz bringen kann.



Hier gezeigt ist ein Kristall, der leicht gedreht ist. Sein Abbild, das reziproke Gitter ist in die selbe Richtung gedreht, wie der Kristall im Ortsraum.
Kommen nun mehrere Kristalle in den Strahl, so überlagern sich die reziproken Gitter im Ursprung. Da jedes Abbild der Rotation des dazugehörigen Kristalls folgt, erscheinen die verschiedenen reziproken Gitter um ihren Ursprung gegeneinander verdreht. Werden beliebig viele Kristalle in den Strahl gebracht verschmieren die Punkte der reziproken Gitter zu Kreisbahnen.