Zum reziproken Gitter

Mit den Gittervektoren

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \tag{1}$$

muss für die reziproken Gittervektoren $\mathbf{G}$

$$\mathbf{R}\cdot\mathbf{G} = 2\pi p = n_1\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{G} + n_2\mathbf{a}_2\cdot\mathbf{G} + n_3\mathbf{a}_3\cdot\mathbf{G} \tag{2}$$

mit ganzem p gelten. Da n_1, n_2, n_3 beliebige ganze Zahlen sind, muss

$$\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{G} = 2\pi h_1, \quad \mathbf{a}_2\cdot\mathbf{G} = 2\pi h_2, \quad \mathbf{a}_3\cdot\mathbf{G} = 2\pi h_3 \tag{3}$$

mit ganzen h_i erfüllt sein.

Offensichtlich hängen die $\mathbf{G}$ linear von den h_i ab,

$$\mathbf{G} = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3. \tag{4}$$

Dann folgen die Bestimmungsgleichungen

$$\sum_j \mathbf{a}_i\cdot h_j\mathbf{b}_j = 2\pi h_i = 2\pi\sum_j h_j\delta_{ij}, \tag{5}$$

also

$$\mathbf{a}_i\cdot\mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}. \tag{6}$$

Zu den Millerschen Indices

Es sei $\mathbf{r} = s_1\mathbf{a}_1 + s_2\mathbf{a}_2 + s_3\mathbf{a}_3$. Eine Gitterebene sei durch die Achsenabschnitte $\tilde{s}_i$ gegeben, das heißt sie gehe durch die drei Punkte $(\tilde{s}_1, 0, 0)$, $(0, \tilde{s}_2, 0)$ und $(0, 0, \tilde{s}_3)$.

Ebenen-Gleichung:

$$\frac{s_1}{\tilde{s}_1} + \frac{s_2}{\tilde{s}_2} + \frac{s_3}{\tilde{s}_3} = 1 \tag{7}$$

oder mit $h' = 1/\tilde{s}_1$, etc.

$$h's_1 + k's_2 + l's_3 = 1 \tag{8}$$

oder mit p erweitert, so dass h, k, l ganz sind, aber keinen gemeinsamen Teiler > 1 haben

$$hs_1 + ks_2 + ls_3 = p. \tag{9}$$

Zusammenhang zwischen Gitterebenen und reziproken Gittervektoren

Ebene durch die Punkte $\mathbf{u} = \tilde{s}_1\mathbf{a}_1$, $\mathbf{v} = \tilde{s}_2\mathbf{a}_2$, $\mathbf{w} = \tilde{s}_3\mathbf{a}_3$. Dann ist

$$\begin{aligned}(\mathbf{u}-\mathbf{v})\times(\mathbf{w}-\mathbf{v}) &= (\mathbf{u}\times\mathbf{w}) - (\mathbf{v}\times\mathbf{w}) \\ &\quad -(\mathbf{u}\times\mathbf{v}) \\ &= \tilde{s}_1\tilde{s}_3(\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_3) - \tilde{s}_2\tilde{s}_3(\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3) \\ &\quad -\tilde{s}_1\tilde{s}_2(\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2).\end{aligned} \tag{10}$$

Daraus folgt

$$-\frac{2\pi}{V_\mathrm{Z}}h'k'l'(\mathbf{u}-\mathbf{v})\times(\mathbf{w}-\mathbf{v}) \tag{11}$$

$$= h'\mathbf{b}_1 + k'\mathbf{b}_2 + l'\mathbf{b}_3 = \frac{1}{p}\mathbf{G}_{hkl}. \tag{12}$$

Daraus folgt, dass $\mathbf{G}_{hkl}$ senkrecht auf der (hkl)-Ebene steht.

Wir zeigen noch, dass der Abstand der Gitterebenen direkt mit $\mathbf{G}$ verknüpft ist. Dazu betrachten wir das Volumen der von den drei Vektoren $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ und $\mathbf{w}$ aufgespannten Pyramide

$$V_\mathrm{Pyr} = \frac{1}{6}(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\cdot\mathbf{w} = \frac{\tilde{s}_1\tilde{s}_2\tilde{s}_3}{6}V_\mathrm{Z}. \tag{13}$$

Man kann das Volumen aber auch ausdrücken durch die Fläche des von den Enden der Vektoren **u**, **v** und **w** aufgespannten Dreiecks und der Höhe bis zum Ursprung. Diese Höhe ist gerade p mal der Abstand der Gitterebenen d,

$$\begin{aligned} V_{\mathrm{Pyr}} &= \frac{1}{6}|(\mathbf{u}-\mathbf{v})\times(\mathbf{w}-\mathbf{v})|\,p\,d_{hkl} \\ &= \frac{V_{\mathrm{Z}}}{6\cdot 2\pi p}\tilde{s}_1\tilde{s}_2\tilde{s}_3\mathbf{G}_{hkl}\,p\,d_{hkl}\,. \end{aligned} \tag{14}$$

Durch Vergleich von (13) und (14) folgt

$$d_{hkl}|\mathbf{G}_{hkl}| = 2\pi. \tag{15}$$

Der Abstand der Gitterebenen multipliziert mit dem Betrag des reziproken Gittervektors ist also stets 2π.