

## CAPITOLO 2

### 2.1 RETICOLO RECIPROCO

La teoria classica dell'elettromagnetismo mostra che quando un'onda elettromagnetica (e.m.) di una data lunghezza d'onda  $\lambda$  incontra un ostacolo di dimensioni confrontabili con  $\lambda$  si verifica il fenomeno della diffrazione. Sempre la teoria classica mostra che tale fenomeno si verifica anche quando un'onda e.m. incontra un reticolo, ossia una struttura periodica, con passo confrontabile a  $\lambda$ . Ritorniamo in maniera approfondita su questo argomento in seguito, considerando la diffrazione di onde, non solo e.m. ma anche materiali, all'interno dei cristalli. Per il momento però questo riferimento ai fenomeni di diffrazione ci è utile per giustificare l'interesse ad introdurre un set di particolari vettori d'onda, che definiscono il cosiddetto reticolo reciproco di un cristallo. Infatti dal momento che un cristallo è caratterizzato da una struttura periodica definita tramite il suo reticolo di Bravais, ci dobbiamo aspettare che onde, di qualunque natura, che si propagano all'interno di un cristallo e che abbiano lunghezze d'onda, e quindi vettori d'onda, opportuni diano luogo a fenomeni di diffrazione che abbiamo interesse a comprendere.

Dunque, consideriamo un set di vettori  $\{\tau\}$  che definiscono un reticolo di Bravais ed un'onda piana<sup>1</sup>, ossia perturbazione il cui campo (di qualunque natura) dipende dalle coordinate spaziali tramite il fattore di fase  $e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$ . Ovviamente, per un vettore d'onda  $\vec{G}$  qualunque, una tale onda non avrà la stessa periodicità del reticolo, né una periodicità commensurabile con il reticolo stesso (multipla o sottomultipla). Questo accadrà solo per alcuni particolari vettori  $\vec{G}$ . Si definisce **reticolo reciproco di un dato reticolo cristallino il set di tutti i vettori  $\vec{G}$  che forniscono onde piane con la stessa periodicità o con periodicità commensurabile con quella del reticolo cristallino**

Da un punto di vista matematico, assegnato un reticolo cristallino, ossia un reticolo di Bravais  $\{\tau\}$  nello spazio ordinario, si dice che  $\{\vec{G}\}$  è il reticolo reciproco di  $\{\vec{\tau}\}$  se per ogni  $\vec{G} \in \{\vec{G}\}$  e per ogni  $\vec{\tau} \in \{\vec{\tau}\}$  vale la seguente condizione:

$$e^{i\vec{G}\cdot(\vec{r}+\vec{\tau})} = e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \Leftrightarrow e^{i\vec{G}\cdot\vec{\tau}} = 1 \Leftrightarrow \vec{G}\cdot\vec{\tau} = 2\pi j \quad (4)$$

con  $j$  numero intero. Notiamo che ogni cristallo reale è necessariamente finito. Pertanto, indicando con  $N_1, N_2, N_3$ , il numero di celle primitive che lo

---

<sup>1</sup> NOTA: Il fatto di considerare onde piane non costituisce una limitazione, dato che qualunque sia l'onda è possibile praticamente sempre (ossia sotto condizioni molto generali) decomporla nelle sue componenti di Fourier. Quindi quanto diremo in merito alle onde piane è da intendersi riferito alle componenti di Fourier di un'onda qualunque.

compongono nelle direzioni dei tre assi cristallografici definite dai vettori primitivi  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , allora  $N=N_1N_2N_3$  è il **numero totale di celle** costituenti il cristallo (con  $N_1 \gg 1$ ,  $N_2 \gg 1$ ,  $N_3 \gg 1$ ). Di conseguenza  $N$  è anche il **numero totale di vettori** del reticolo cristallino  $\{\tau\}$  ed il numero totale di vettori  $\vec{G}$  del reticolo reciproco.

Notiamo che un reticolo reciproco è definito in riferimento ad un particolare reticolo cristallino. Per questo motivo, il reticolo cristallino che determina un reticolo reciproco è detto anche **reticolo diretto**.

Notiamo inoltre che per quanto possiamo definire un set  $\{\vec{G}\}$  che soddisfa la (4) per un qualunque set di vettori di  $\{\tau\}$ , il set  $\{\vec{G}\}$  è detto reticolo reciproco solo se il set  $\{\tau\}$  è un reticolo di Bravais nello spazio ordinario.

Pertanto ogni struttura cristallina ha due reticoli associati ad essa: il reticolo cristallino (o diretto) ed il reciproco. Quando ruotiamo un cristallo ruotiamo entrambi i reticoli. I vettori del reticolo cristallino hanno le dimensioni di una lunghezza  $[L]$ , i vettori del reticolo reciproco hanno le dimensioni dell'inverso di una lunghezza  $[L^{-1}]$ . **Il reticolo cristallino è un reticolo nello spazio reale o ordinario, il reticolo reciproco è un reticolo nello spazio di Fourier.** Notiamo che  $\{\vec{G}\}$  è anch'esso un reticolo di Bravais ma nello spazio di Fourier.

Come discusso al paragrafo 4.2, Eqs. (2) e (3), i vettori  $\vec{\tau}$  possono essere espressi come combinazione lineare di tre vettori fondamentali  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  dello spazio diretto:

$$\vec{\tau} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad (5)$$

con  $n_1, n_2, n_3$  numeri interi positivi e negativi, zero incluso. Allo stesso modo, possiamo esprimere i vettori  $\vec{G}$  come combinazione lineare di tre vettori fondamentali  $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$  dello spazio reciproco:

$$\vec{G} = m_1\vec{A} + m_2\vec{B} + m_3\vec{C} \quad (6)$$

con  $m_1, m_2, m_3$  interi positivi e negativi, zero incluso. Tenendo conto della (4) dunque si ha:

$$\vec{G} \cdot \vec{\tau} = (m_1\vec{A} + m_2\vec{B} + m_3\vec{C}) \cdot (n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}) = 2\pi j \quad \forall \vec{\tau}, \forall \vec{G} \quad (7)$$

Si può dimostare che la condizione (7) è **soddisfatta se e solo se**:

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{a} &= 2\pi, & \vec{A} \cdot \vec{b} &= 0, & \vec{A} \cdot \vec{c} &= 0 \\ \vec{B} \cdot \vec{a} &= 0, & \vec{B} \cdot \vec{b} &= 2\pi, & \vec{B} \cdot \vec{c} &= 0 \\ \vec{C} \cdot \vec{a} &= 0, & \vec{C} \cdot \vec{b} &= 0, & \vec{C} \cdot \vec{c} &= 2\pi \end{aligned} \quad (8)$$

Quindi  $\vec{A}$  deve essere perpendicolare a  $\vec{b}$  e  $\vec{c}$ , pertanto  $\vec{A}$  deve essere proporzionale a  $\vec{b} \times \vec{c}$  e la costante di proporzionalità è determinata dalla condizione  $\vec{A} \cdot \vec{a} = 2\pi$  <sup>(2)</sup>. Similmente per  $\vec{B}$  e  $\vec{C}$ . In altri termini possiamo soddisfare le Eqs. (8) scrivendo:

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \quad \vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}, \quad \vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad (9)$$

Queste espressioni **definiscono esplicitamente i vettori fondamentali del reticolo reciproco**. Non necessariamente i vettori  $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$  così definiti sono vettori primitivi del reticolo reciproco. Questo è vero solo se  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  sono vettori primitivi del reticolo diretto. Inoltre essi sono ortogonali fra loro se lo sono  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ . Abbiamo scritto tutti i denominatori come  $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}$  poiché secondo il calcolo vettoriale è:  $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \vec{b} \cdot \vec{c} \times \vec{a} = \vec{c} \cdot \vec{a} \times \vec{b}$ .

Notiamo che il denominatore delle (9) altro non è che il **volume della unitaria**, ossia  $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \Omega_C$ . Possiamo quindi riscrivere le (9) come:

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{\Omega_C} \vec{b} \times \vec{c}, \quad \vec{B} = \frac{2\pi}{\Omega_C} \vec{c} \times \vec{a}, \quad \vec{C} = \frac{2\pi}{\Omega_C} \vec{a} \times \vec{b} \quad (9')$$

E' conveniente introdurre la seguente notazione alternativa:

$$\vec{a} \equiv \vec{\tau}_1, \quad \vec{b} \equiv \vec{\tau}_2, \quad \vec{c} \equiv \vec{\tau}_3 \quad \text{e} \quad \vec{A} \equiv \vec{h}_1, \quad \vec{B} \equiv \vec{h}_2, \quad \vec{C} \equiv \vec{h}_3 \quad (10)$$

In questo modo le (8) possono essere espresse in forma compatta:

$$\vec{\tau}_i \vec{h}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (11)$$

Assegnata la terna  $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$  possiamo generare un parallelepipedo costruito su di essi che costituirà la **cella unitaria dello spazio reciproco**. Se  $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$  sono primitivi allora la cella costruita su essi è la cella primitiva. In ogni caso, per un cristallo tridimensionale il **volume della cella unitaria** del reticolo reciproco è:

$$\Omega_{rec} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_C} \quad (12)$$

---

<sup>2</sup> Nota: se i vettori della terna  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  sono mutuamente ortogonali, allora le condizioni (8) implicano  $\vec{A} // \vec{a}, \vec{B} // \vec{b}, \vec{C} // \vec{c}$  ma questo non è vero in generale per una terna di vettori qualunque. Infatti le (8) implicano solo che  $\vec{A} \perp \pi(\vec{b}, \vec{c})$  piano individuato da  $\vec{b}$  e  $\vec{c}$  e similmente  $\vec{B} \perp \pi(\vec{a}, \vec{c})$  e  $\vec{C} \perp \pi(\vec{a}, \vec{b})$

come è immediato ricavare nel caso in cui la terna  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  sia ortogonale. Similmente a come discusso per il reticolo cristallino, anche nel caso del reticolo reciproco è possibile costruire la cella primitiva in altro modo, adottando una costruzione geometrica del tutto simile a quella corrispondente alla cella di Wigner-Seitz. In altri termini, scelta l'origine nello spazio  $\vec{G}$ , si può definire come **cella primitiva del reticolo reciproco il volume più piccolo delimitato da piani ortogonali e bisecanti i vettori  $\vec{G}$**  (vedi Fig. 5). Tale volume è espresso dalla (12) con  $\Omega_C$  volume della cella primitiva del reticolo cristallino. Questo tipo di cella primitiva del reticolo reciproco è detta **prima zona di Brillouin** ed è spesso indicata come **1° ZB**. È possibile anche definire zone di ordine successivo: per esempio la seconda zona si ottiene considerando lo spazio delimitato dalla superficie della prima zona e dai piani che bisecano perpendicolarmente i vettori del reticolo reciproco di lunghezza maggiore. Le zone successive si ottengono in modo analogo.

E' il caso ora di citare due importanti teoremi che legano i vettori  $\vec{G}$  del reticolo reciproco ai piani del reticolo cristallino.

**1° Teorema: ogni vettore del reticolo reciproco è perpendicolare ad un piano del reticolo cristallino.** In altri termini, è possibile dimostrare che il vettore del reticolo reciproco:

$$\vec{G}(hkl) \equiv h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \quad (13)$$

con  $h, k, l$  interi è perpendicolare al piano del reticolo cristallino con indici di Miller  $(h, k, l)$ . Notiamo che è proprio per questo motivo si preferisce caratterizzare un piano cristallino con gli indici di Miller  $(h, k, l)$  anziché con i numeri  $p, q, r$ , che definiscono le intercette del piano con le direzioni degli assi cristallografici, come sembrerebbe a prima vista più naturale. D'altra parte, come abbiamo già notato, piani cristallini paralleli hanno gli stessi indici di Miller, per cui  $\vec{G}(h, k, l)$  può essere associato ad una famiglia di piani paralleli.

**2° Teorema: la separazione minima  $d(h, k, l)$  fra piani del reticolo cristallino con indice di Miller  $h, k, l$  è uguale a  $2\pi / |\vec{G}_0(hkl)|$ , dove  $\vec{G}_0(hkl)$  è il vettore di modulo minimo nella direzione perpendicolare alla famiglia di piani** (quindi gli indici di  $\vec{G}_0(hkl)$  non hanno sottomultipli interi). Questa distanza minima  $2\pi / |\vec{G}_0(hkl)|$  corrisponde ovviamente alla distanza fra piani immediatamente adiacenti. Notiamo che tutti i vettori  $\vec{G}$  associati ad una famiglia di piani sono esprimibili come  $\vec{G}_n(h, k, l) = n\vec{G}_0(h, k, l)$ .

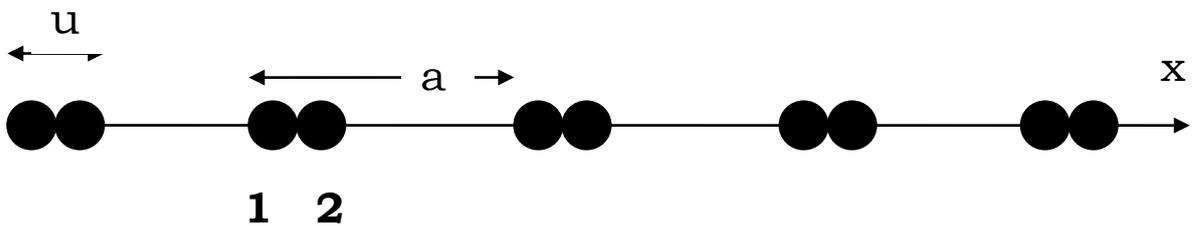
In conseguenza di questi due teoremi possiamo:

**a) associare la famiglia di vettori**  $\vec{G}_n(h,k,l) = n\vec{G}_0(h,k,l)$ , tutti con la stessa direzione e modulo multiplo intero di quello minimo, alla famiglia di piani cristallini con indici di Miller  $(h,k,l)$  ortogonali ai vettori  $\vec{G}$  ;

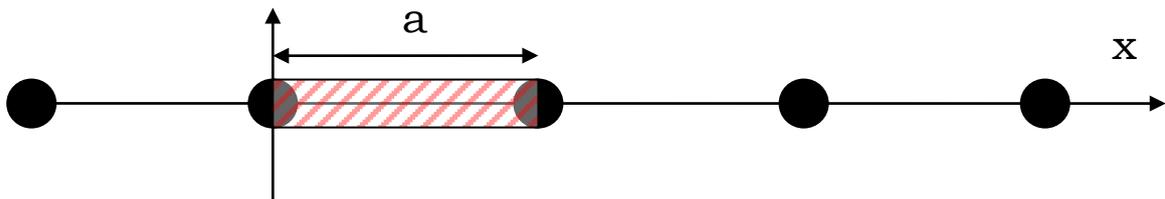
**b) associare il vettore di modulo minimo**  $\vec{G}_0(h,k,l)$  alla minima distanza,  $2\pi / |\vec{G}_0(hkl)|$ , fra piani della famiglia e quindi ad una coppia di piani adiacenti  $\in$  alla famiglia.

## 2.2 ESEMPI: RETICOLO RECIPROCO 1D e 2D

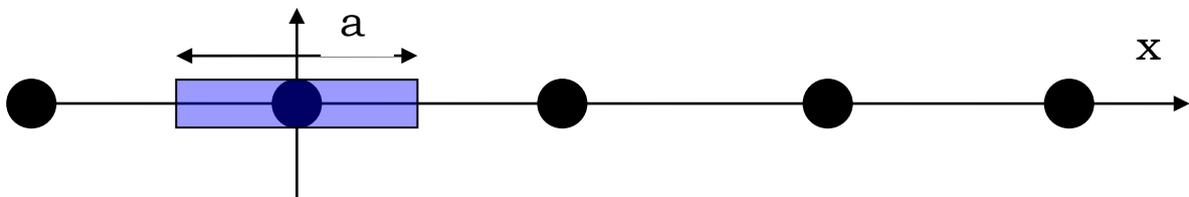
A titolo di esempio consideriamo il cristallo **unidimensionale e biatomico** schematizzato in figura:



Il corrispondente reticolo cristallino è schematizzato di seguito:

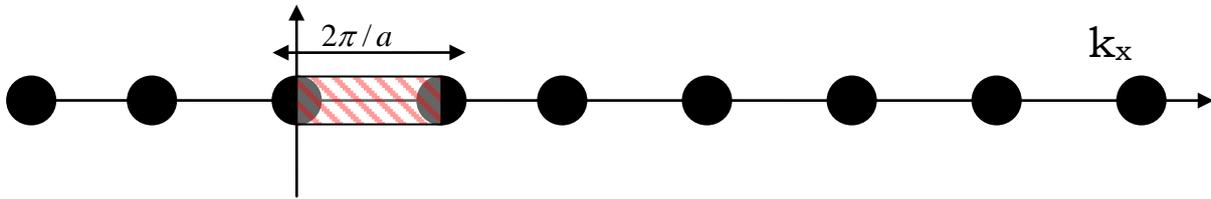


Il vettore primitivo è  $\vec{a} = a\hat{x}$ , i vettori del reticolo cristallino sono  $\vec{\tau} = n\vec{a}$  con  $n$  intero mentre una possibile cella primitiva è indicata dalla barretta rossa. La posizione degli atomi della base all'interno della cella dipende dalla scelta dell'origine (in questo caso assunta sulla posizione dell'atomo 1). Un'altra possibile cella primitiva, corrispondente alla scelta di Wigner-Seitz, è indicata

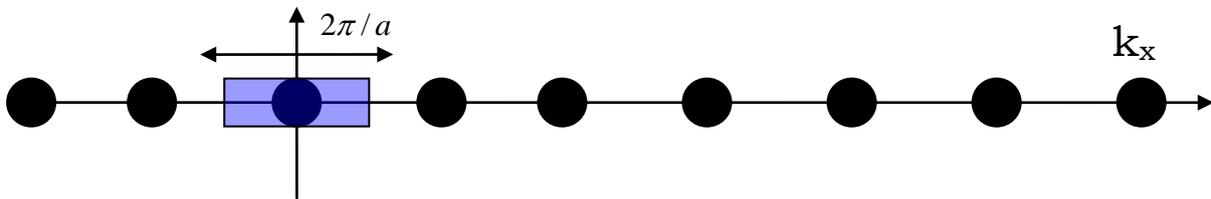


dalla barretta azzurra, in questo caso gli estremi della cella sono  $x = \pm a/2$ . Passiamo ora al reticolo reciproco. Il vettore primitivo di questo reticolo è definito dalla condizione (8):  $\vec{A} \cdot \vec{a} = 2\pi$ , essendo  $\vec{A} // \hat{x}$  si ha:  $\vec{A} = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$ .

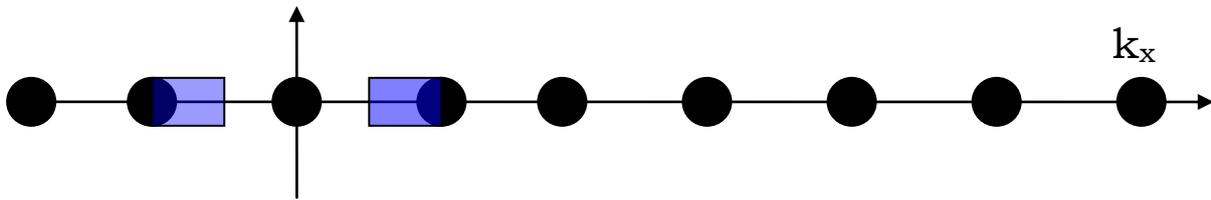
Quindi i vettori del reticolo reciproco sono:  $\vec{G} = m\vec{A}$  con  $m$  intero ed una possibile cella primitiva del reticolo reciproco è mostrata in figura:



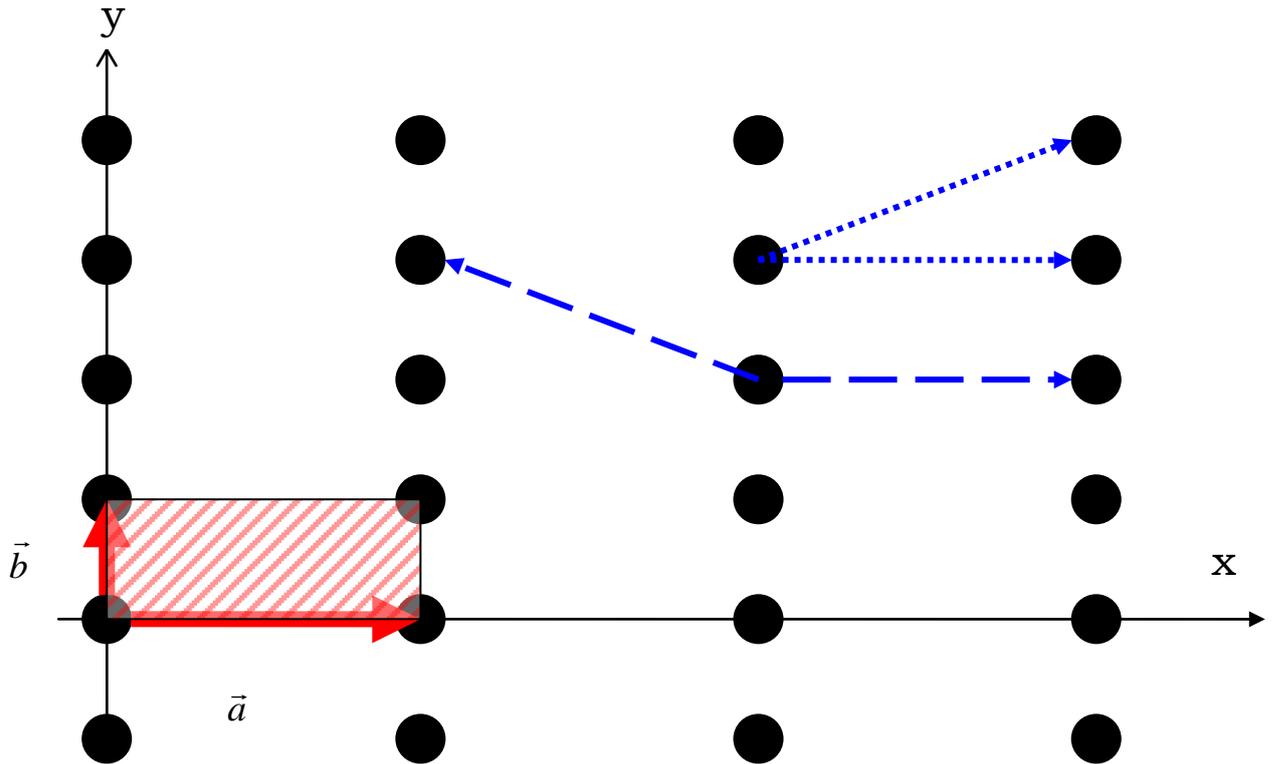
Un'altra possibile scelta di cella primitiva, corrispondente alla prima zona di Brillouin è invece schematizzata di seguito (gli estremi della zona sono:  $\pm \pi/a$ )



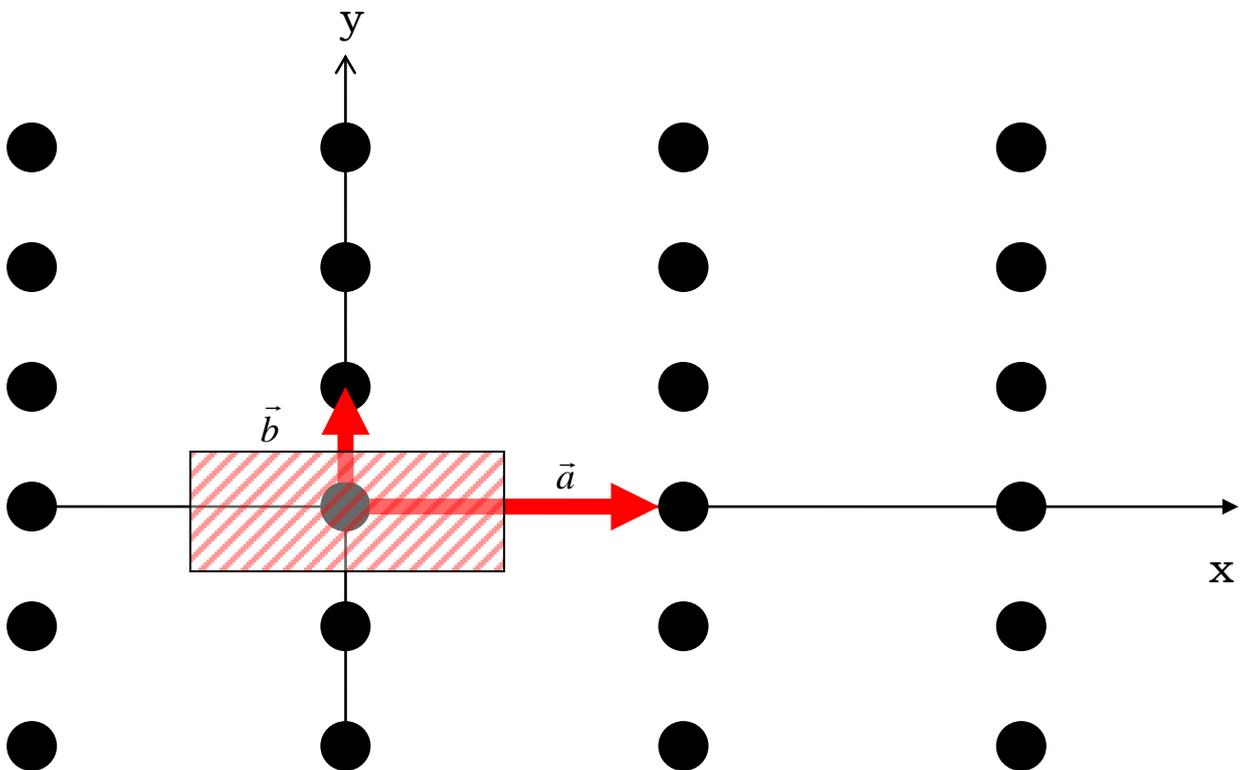
Mentre la seguente figura evidenzia la seconda zona di Brillouin.



Consideriamo ora un **crystallo bidimensionale e monoatomico con reticolo di Bravais rettangolare**, come quello mostrato nella figura alla pagina seguente. La figura mostra anche più scelte possibili di vettori primitivi. Scegliamo la coppia evidenziata dalla linea continua rossa:  $\vec{a} = a \hat{x}$  e  $\vec{b} = b \hat{y}$  con  $a > b$ . L'area tratteggiata indica la cella primitiva costruita sulla coppia di vettori  $\vec{a}, \vec{b}$ .



Mentre la figura seguente mostra la cella primitiva corrispondente alla scelta di Wigner-Seitz:



Costruiamo ora il reticolo reciproco del reticolo cristallino rettangolare sopra illustrato. Per far questo partiamo dalla relazione (11),  $\vec{\tau}_i \vec{h}_j = 2\pi\delta_{ij}$ , da cui otteniamo:

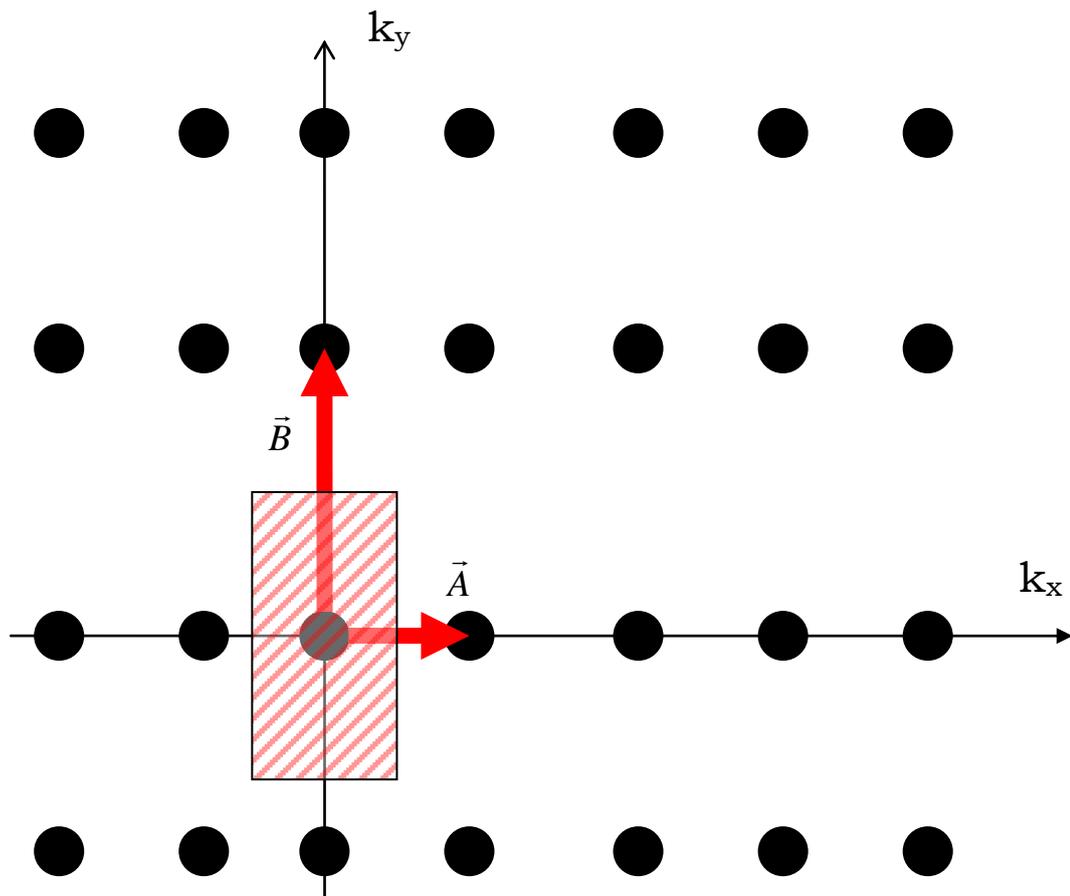
$$\vec{a} \cdot \vec{A} = 2\pi \quad \text{e} \quad \vec{b} \cdot \vec{A} = 0 \Rightarrow \vec{A} \perp \vec{b} // \hat{y} \Rightarrow \vec{A} // \hat{x}$$

$$\vec{b} \cdot \vec{B} = 2\pi \quad \text{e} \quad \vec{a} \cdot \vec{B} = 0 \Rightarrow \vec{B} \perp \vec{a} // \hat{x} \Rightarrow \vec{B} // \hat{y}$$

Pertanto:

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a} \hat{x} \quad \text{e} \quad \vec{B} = \frac{2\pi}{b} \hat{y}$$

Quindi il reticolo reciproco del reticolo cristallino rettangolare è anch'esso un reticolo rettangolare (nello spazio dei vettori  $\vec{G}$ ). Tale reticolo è schematizzato di seguito da notare che essendo  $a > b$  sarà  $2\pi/a < 2\pi/b$ .



### **2.3 ESEMPI: RETICOLO RECIPROCO DI CRISTALLI CUBICI**

Consideriamo ora un cristallo monoatomico con **reticolo cristallino cubico semplice (sc)**. Scegliendo  $\hat{x}\hat{y}\hat{z}$  lungo la direzione degli assi cristallografici, i vettori primitivi del reticolo cristallino sono (notiamo che  $|\vec{a}|=|\vec{b}|=|\vec{c}|=a$ ):  $\vec{a}=a\hat{x}$  ,  $\vec{b}=a\hat{y}$  ,  $\vec{c}=a\hat{z}$

Il volume della cella primitiva è:  $\Omega_c = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = a^3$  Inoltre, in base alle (9) i vettori primitivi del reticolo reciproco sono:

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a} \hat{x} , \quad \vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a} \hat{y} , \quad \vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a} \hat{z}$$

Dunque il **reticolo reciproco di un reticolo cristallino cubico semplice di passo  $a$  è anch'esso cubico semplice. Il passo è ovviamente diverso e vale  $2\pi/a$** . I bordi della prima zona di Brillouin sono delimitati dai piani perpendicolari ai vettori  $\pm \vec{A}$ ,  $\pm \vec{B}$ ,  $\pm \vec{C}$  e passanti per i loro punti medi, ossia per:

$$\mp \frac{1}{2} \vec{A} = \pm \frac{\pi}{a} \hat{x} , \quad \mp \frac{1}{2} \vec{B} = \pm \frac{\pi}{a} \hat{y} , \quad \mp \frac{1}{2} \vec{C} = \pm \frac{\pi}{a} \hat{z}$$

Quindi la 1° ZB è un cubo di lato  $2\pi/a$  e volume  $(2\pi/a)^3 = (2\pi)^3/\Omega_C$

**I reticoli reciproci di reticoli cristallini cubico a corpo centrato e cubico a facce centrate** sono discussi di seguito.

**Per ulteriori approfondimenti sugli argomenti dei Cap. 1 e 2 si consigliano i seguenti libri di testo:**

F. Bassani e U. Grassano, *Fisica dello Stato Solido*, Bollati Boringhieri, Torino (2000).

N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt-Saunders Int. Ed., Philadelphia (1981) o altre edizioni.

C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley & Sons, New York (1976) o edizioni successive, oppure sempre dello stesso autore *Introduzione alla Fisica dello Stato Solido*, a cura di E. Bonetti, C. E. Bottani e F. Ciccacci, Casa Editrice Ambrosiana, Milano, 2012.

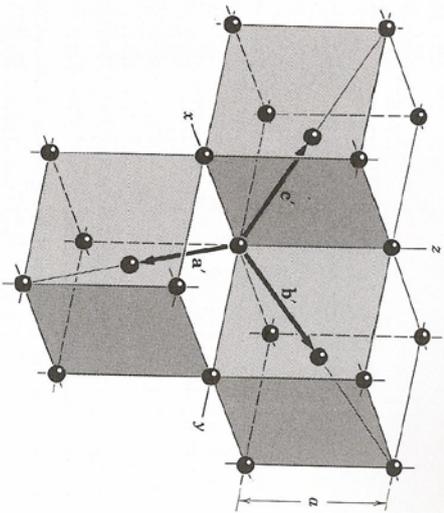


Figure 20 Primitive basis vectors of the body-centered cubic lattice.

**Reciprocal Lattice to bcc Lattice.** The primitive translation vectors of the bcc lattice shown in Fig. 20 are

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) ; \quad \mathbf{b}' = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) ; \quad \mathbf{c}' = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) , \quad (28)$$

where  $a$  is the side of the conventional cube and  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ ,  $\hat{z}$  are orthogonal unit vectors parallel to the cube edges. The volume of the primitive cell is

$$V = |\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b}' \times \mathbf{c}'| = \frac{1}{8}a^3 . \quad (29)$$

The primitive translations  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$  of the reciprocal lattice are defined by (12). We have, using (28),

$$\mathbf{A} = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y}) ; \quad \mathbf{B} = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} + \hat{z}) ; \quad \mathbf{C} = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{z}) . \quad (30)$$

Note by comparison with Fig. 1.15 that these are just the primitive vectors of an fcc lattice; thus an fcc lattice is the reciprocal lattice of the bcc lattice.

If  $h$ ,  $k$ ,  $l$  are integers, the general reciprocal lattice vector is

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C} = \frac{2\pi}{a} [(h+l)\hat{x} + (h+k)\hat{y} + (k+l)\hat{z}] . \quad (31)$$

The shortest  $\mathbf{G}$ 's are the following 12 vectors, where all choices of sign are independent:

$$\frac{2\pi}{a} (\pm\hat{x} \pm \hat{y}) ; \quad \frac{2\pi}{a} (\pm\hat{y} \pm \hat{z}) ; \quad \frac{2\pi}{a} (\pm\hat{x} \pm \hat{z}) . \quad (32)$$

The primitive cell of the reciprocal lattice is the parallelepiped described by the  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ , and  $\mathbf{C}$  defined by (30). The volume of the primitive cell of the reciprocal lattice is  $|\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{C}| = 2(2\pi/a)^3$ . The parallelepiped contains one reciprocal lattice point, because each of the eight corner points is shared among eight parallelepipeds: each parallelepiped contains one-eighth of each of eight corner points. It is customary in solid state physics to take the primitive cell of the reciprocal lattice as the first Brillouin zone; each such cell contains one lattice point at the center of the cell. This zone is bounded by the planes normal to the 12 vectors of Eq. (32) at their midpoints. The zone is a regular 12-faced solid, a rhombic dodecahedron, as shown in Fig. 21. The vectors from the origin to the center of each face are

$$\frac{\pi}{a} (\pm x \pm y) ; \quad \frac{\pi}{a} (\pm y \pm z) ; \quad \frac{\pi}{a} (\pm x \pm z) . \quad (33)$$

All choices of sign are independent, giving 12 vectors.

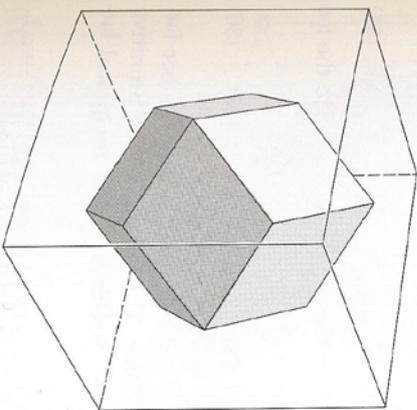


Figure 21 First Brillouin zone of the body-centered cubic lattice. The figure is a regular rhombic dodecahedron.

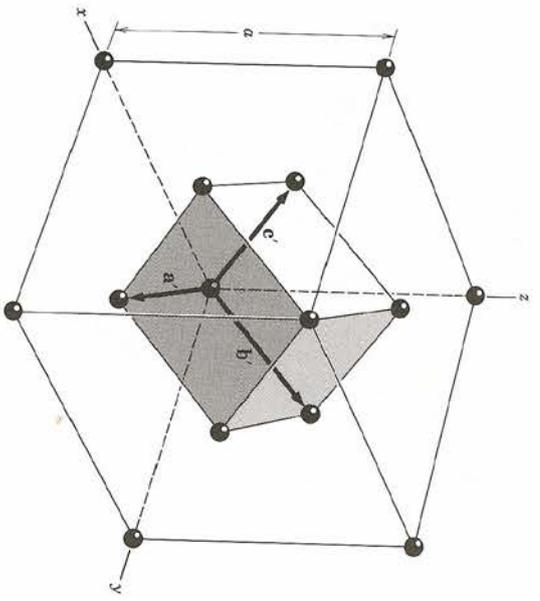


Figure 22 Primitive basis vectors of the face-centered cubic lattice.

*Reciprocal Lattice to fcc Lattice.* The primitive translation vectors of the fcc lattice shown in Fig. 22 are:

$$\mathbf{a}' = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y}) ; \quad \mathbf{b}' = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z}) ; \quad \mathbf{c}' = \frac{1}{2}a(\hat{z} + \hat{x}) . \quad (34)$$

The volume of the primitive cell is

$$V = |\mathbf{a}' \cdot \mathbf{b}' \times \mathbf{c}'| = \frac{1}{4}a^3 . \quad (35)$$

The primitive translation vectors  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$  of the reciprocal lattice to the fcc lattice are

$$\mathbf{A} = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) ; \quad \mathbf{B} = \frac{2\pi}{a} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) ; \quad \mathbf{C} = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) . \quad (36)$$

These are primitive translation vectors of a bcc lattice, so that the bcc lattice is the reciprocal lattice of the fcc lattice. The volume of the primitive cell in the reciprocal lattice is  $|\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{C}| = 4(2\pi/a)^3$ . The reciprocal lattice vectors are

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{a} [(h - k + l)\hat{x} + (h + k - l)\hat{y} + (-h + k + l)\hat{z}] , \quad (37)$$

where  $h, k, l$  are integers. The shortest  $\mathbf{G}$ 's are the eight vectors:

$$\frac{2\pi}{a} (\pm\hat{x} \pm \hat{y} \pm \hat{z}) . \quad (38)$$

The boundaries of a primitive cell in the reciprocal lattice are determined for the most part by the eight planes normal to these vectors at their midpoints. But the corners of the octahedron thus formed are cut by the planes that are the perpendicular bisectors of six other reciprocal lattice vectors:

$$\frac{2\pi}{a} (\pm 2\hat{x}) ; \quad \frac{2\pi}{a} (\pm 2\hat{y}) ; \quad \frac{2\pi}{a} (\pm 2\hat{z}) . \quad (39)$$

Note that  $(2\pi/a)(2\hat{x})$  is a reciprocal lattice vector because it is equal to  $\mathbf{A} + \mathbf{C}$ . The first Brillouin zone is the smallest bounded volume about the origin, the truncated octahedron shown in Fig. 23. The six planes bound a cube of edge  $4\pi/a$  and of volume  $(4\pi/a)^3$ .

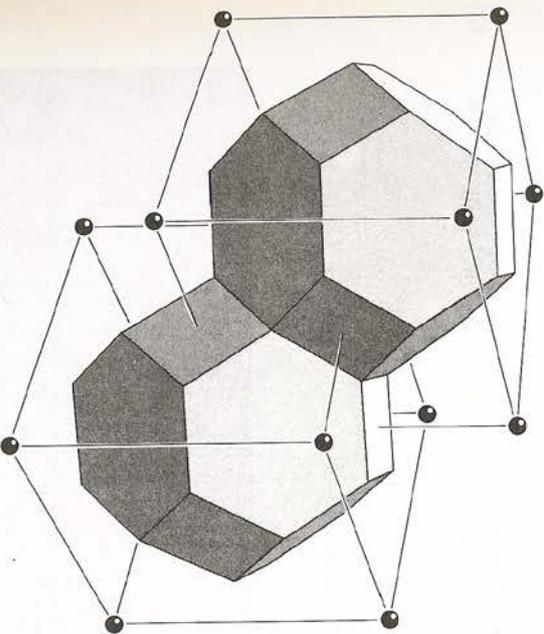


Figure 23 Brillouin zones of the face-centered cubic lattice. The cells are in reciprocal space, and the reciprocal lattice is body centered.

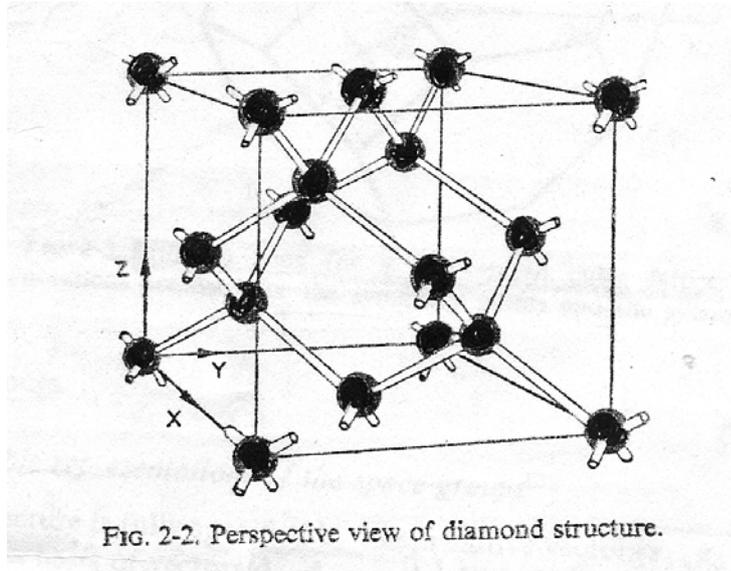


FIG. 2-2. Perspective view of diamond structure.

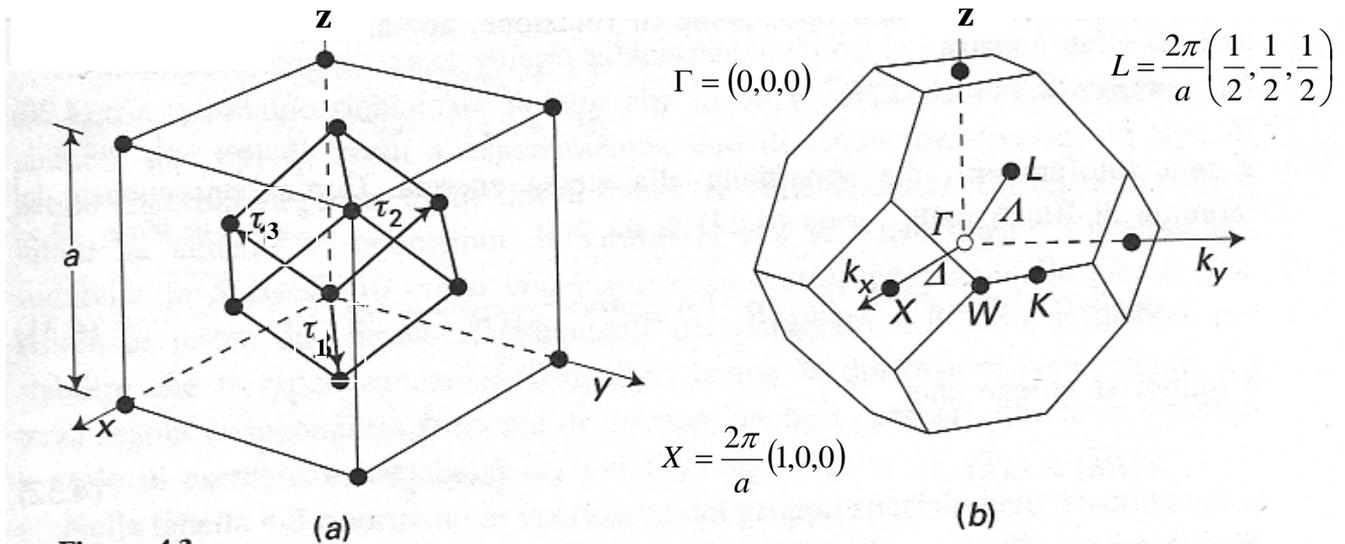


Figura 4.3 Reticolo diretto (a), e prima zona di Brillouin (b) di un reticolo cubico a facce centrate (CF).

$$\bar{\tau}_1 = \frac{a}{2}(1,1,0)$$

$$\bar{h}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,1,\bar{1})$$

$$\bar{\tau}_2 = \frac{a}{2}(0,1,1)$$

$$\bar{h}_2 = \frac{2\pi}{a}(\bar{1},1,1)$$

$$\bar{\tau}_3 = \frac{a}{2}(1,0,1)$$

$$\bar{h}_3 = \frac{2\pi}{a}(1,\bar{1},1)$$

Le lettere  $\Gamma, L, X, W, K$  in figura 4.3 (b) indicano punti della 1° zona di Brillouin caratterizzati da alta simmetria. Similmente, le lettere  $L$  e  $\Delta$  indicano direzioni di simmetria elevata.