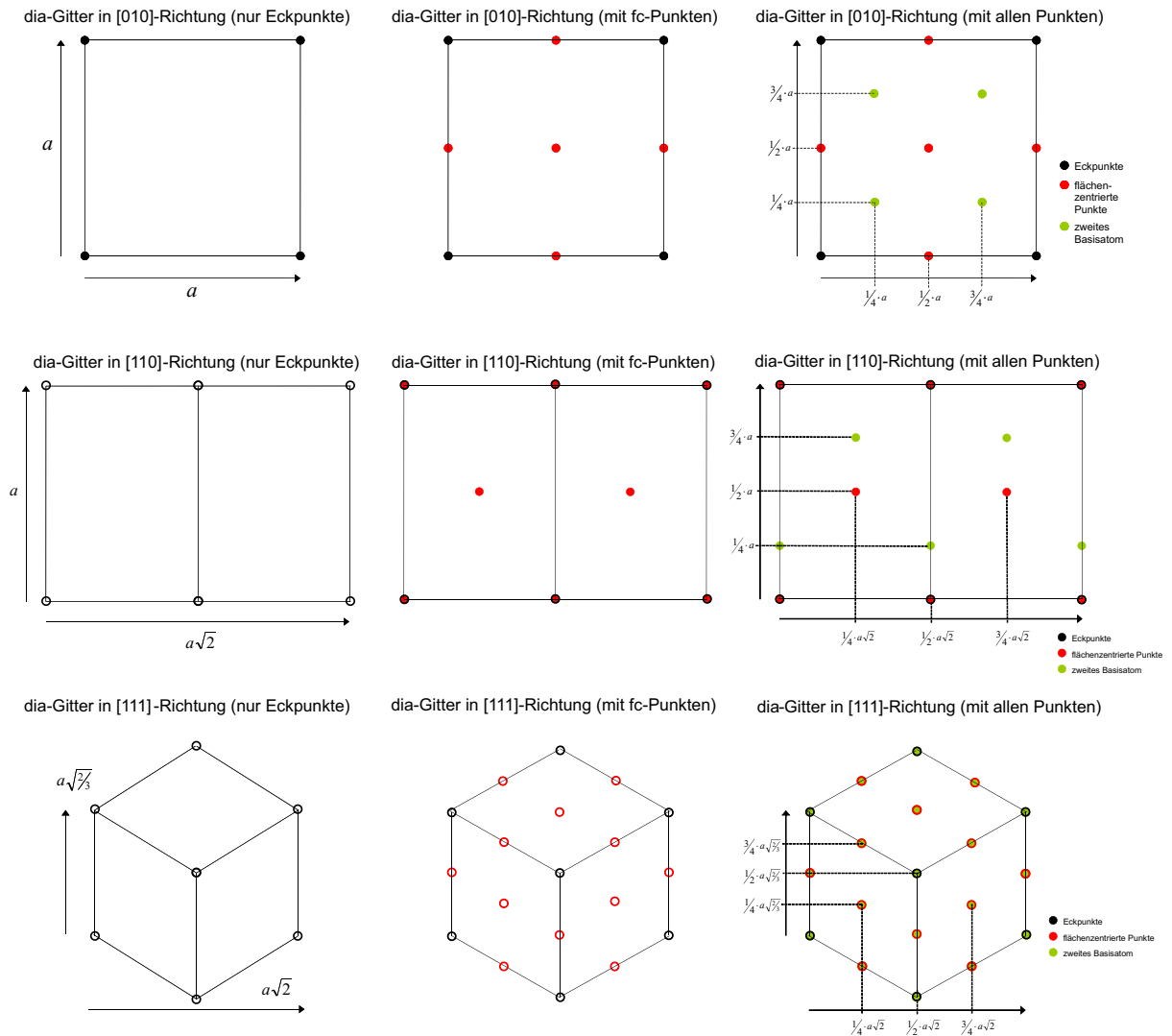


Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Lösungen zu Übung 5: Gitter und Ebenen (idealer Kristall)

Aufgabe 9: Einheitszelle von Silizium, Internationales Einheitensystem (SI)

- a) Bei den Projektionen sind die „vorderen“ Würfelkanten mit eingezeichnet. Hohl dargestellt sind Atome, hinter denen in Projektionsrichtung noch Atome liegen, die sich auf anderen, nicht äquivalenten Gitterpositionen befinden bzw. die zu Nachbarzellen gehören:



- b) Zuerst wird berechnet, wieviele Einheitszellen in 1 cm³ Silizium enthalten sind, wobei die Unsicherheit der Gitterkonstante noch außer Betracht gelassen wird; lediglich die Anzahl gültiger Stellen (hier: 10) wird beibehalten (die Begründung dafür ergibt sich weiter unten aus der Berücksichtigung der Unsicherheit der Gitterkonstante). Dazu wird der Kubikzentimeter durch das Volumen der Einheitszelle geteilt:

$$\frac{1 \text{ cm}^3}{a_0^3} = \frac{(0,01 \text{ m})^3}{(5,431.020.511 \cdot 10^{-10} \text{ m})^3} = \frac{1 \cdot 10^{-6}}{(5,431.020.511)^3 \cdot 10^{-30}} = 6,242.458.604 \cdot 10^{21}.$$

Jede kubische Einheitszelle der Diamantstruktur enthält 8 Atome. Diesen Wert kann man direkt erhalten, indem man an den 4 Gitterpositionen des fcc-Gitters, die zu einer kubischen Einheitszelle gehören (vgl. Aufg. 8), die zweiatomige Basis der Diamantstruktur plaziert. Oder man zählt im Detail nach: Die Einheitszelle der Diamantstruktur setzt sich aus 8 Eckatomen, 6 Flächenmittenatomen („fc-Atome“) und 4 ganz im Würfel enthaltenen Atomen (jeweiliges zweites Basisatom) zusammen. Die Eckatome zählen zu je $\frac{1}{8}$ mit, die Flächenmittenatome zu je $\frac{1}{2}$, somit enthält eine Einheitszelle der Diamantstruktur genau 8 Atome: $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} + 4 \cdot 1 = 1 + 3 + 4 = 8$. Folglich enthält ein Kubikzentimeter eines Siliziumkristalls $8 \cdot 6,242.458.604 \cdot 10^{21} = 4,993.966.883 \cdot 10^{22}$ Atome.

Diese hochgenaue Angabe ist nur deshalb sinnvoll, weil die Gitterkonstante a mit einem sehr genauen Wert gegeben ist. Generell gilt, daß man derart viele Stellen nach dem Komma bei einem Ergebnis nur angeben darf, wenn sie relevant sind, d. h. wenn man sich sicher ist, daß ihr Zahlenwert außer Zweifel steht („kein Rauschen“). Nur die letzten angegebenen Stellen unterliegen einer gewissen Unsicherheit, und die muß man explizit angeben.

Die Unsicherheit der Atomanzahl pro cm^3 ergibt sich aus der Unsicherheit der Gitterkonstante; sie kann wie folgt ermittelt werden: Der Ausdruck $\frac{1 \text{ cm}^3}{a^3}$ wird als Funktion $f(a)$ aufgefaßt und durch ein Taylor-Polynom ersten Grades genähert (d. h. f wird linearisiert):

$$f(a) = \frac{1 \text{ cm}^3}{a^3}; \quad f(a_0 \pm \Delta a) \approx f(a_0) + \frac{df}{da}(a_0) \cdot (\pm \Delta a) = \frac{1 \text{ cm}^3}{a_0^3} - 3 \frac{1 \text{ cm}^3}{a_0^4} \cdot (\pm \Delta a) \\ = \frac{1 \text{ cm}^3}{a_0^3} \cdot \left(1 \mp 3 \frac{\Delta a}{a_0}\right).$$

Das bedeutet, daß $3 \frac{\Delta a}{a_0}$ den Betrag des relativen Fehlers in der Anzahl der Einheitszellen pro Kubikzentimeter angibt. Dafür erhält man:

$$3 \frac{\Delta a}{a_0} = \frac{3 \cdot 0,000.008.9 \text{ pm}}{543,102.051.1 \text{ pm}} \approx 4,916.2 \cdot 10^{-8}. \quad (1)$$

(Eine genauere Angabe ist hier nicht sinnvoll, da weitere Nachkommastellen des relativen Fehlers nur solche Nachkommastellen des Ergebnisses betreffen, die sowieso unsicher sind.)

Dieser relative Fehler gilt auch für die Anzahl der Si-Atome pro Kubikzentimeter, also beträgt deren Unsicherheit $4,993.966.883 \cdot 10^{22} \cdot 4,916.2 \cdot 10^{-8} \approx 24,6 \cdot 10^{14}$ Atome pro Kubikzentimeter. Damit lautet das Endergebnis: Ein (idealer, hochreiner) Silizium-Kristall besitzt $(4,993.966.883 \pm 0,000.000.246) \cdot 10^{22}$ Atome pro Kubikzentimeter.

(Zum Hintergrund dieser Aufgabe: Diese hohe Genauigkeit wurde für die verbesserte Bestimmung der Avogadro-Konstante im Zuge der Neudefinition des Internationalen Einheitensystems benötigt. Diese Neudefinition, die wesentlich das Kilogramm und das Kelvin betraf, wurde am 20. Mai 2019 wirksam.¹)

- c) Zuerst bestimmen wir die Anzahl an Atomen der Sorte ^{28}Si , die zusammen 1 kg bilden. Dazu benötigen wir die Masse eines einzelnen Atoms:

$$m(^{28}\text{Si}) = (m_0 \pm \Delta m) \cdot (u_0 \pm \Delta u) = m_0 u_0 \pm (m_0 \Delta u + \Delta m u_0).$$

¹ Mehr dazu hier: <https://www.ptb.de/cms/forschung-entwicklung/forschung-zum-neuen-si/>

Hier wurde das Produkt der Unsicherheiten weggelassen, weil dessen Wert sehr viel kleiner als der der anderen Terme und damit irrelevant ist („Rauschen“). Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} m(^{28}\text{Si}) &= [46,456.779.475 \pm (0,000.000.014 + 0,000.000.005)] \cdot 10^{-27} \text{ kg} \\ &= (46,456.779.475 \pm 0,000.000.019) \cdot 10^{-27} \text{ kg}. \end{aligned}$$

Für „exakt“ 1 kg ^{28}Si werden somit $1 \text{ kg}/m(^{28}\text{Si}) = 1/[(46,456.779.475 \pm 0,000.000.019) \cdot 10^{-27}]$ Atome benötigt. Mit der für kleine x gültigen Näherungsformel $1/(1+x) \approx 1-x$ erhält man für diese Atomanzahl:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(46,456.779.475 \pm 0,000.000.019) \cdot 10^{-27}} &= \frac{1}{46,456.779.475 \cdot (1 \pm \frac{0,000.000.019}{46,456.779.475}) \cdot 10^{-27}} \\ &= 0,021.525.383.621 \cdot 10^{27} \cdot \frac{1}{1 \pm \frac{0,000.000.019}{46,456.779.475}} \\ &\approx 2,152.538.362.1 \cdot 10^{25} \cdot (1 \mp 4,089.8 \cdot 10^{-10}) \quad (2) \\ &= (2,152.538.362.1 \mp 0,000.000.000.9) \cdot 10^{25}. \end{aligned}$$

Der Zwischenschritt in Gleichung (2) zeigt, daß diese Angabe einen relativen Fehler von etwa $4 \cdot 10^{-10}$ hat. Die Zahl der Atome pro kg ist also hinreichend genau bekannt, um 1 kg auf 10^{-8} kg genau erhalten zu können.

Der Quotient dieser soeben berechneten Anzahl der Si-Atome pro Kilogramm und der im Aufgabenteil b) berechneten Anzahl der Si-Atome pro Kubikzentimeter liefert das Volumen eines Kilogramms reines Silizium-28:

$$\begin{aligned} &\frac{(2,152.538.362.1 \mp 0,000.000.000.9) \cdot 10^{25} \frac{\text{Atome}}{\text{kg}}}{(4,993.966.883 \pm 0,000.000.246) \cdot 10^{22} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}} \\ &= \frac{2,152.538.362.1 \mp 0,000.000.000.9}{4,993.966.883 \pm 0,000.000.246} \cdot 10^3 \frac{\text{cm}^3}{\text{kg}} \\ &\approx 2,152.538.362.1 \cdot \left(1 \mp \frac{0,000.000.000.9}{2,152.538.362.1}\right) \cdot \frac{1}{4,993.966.883} \cdot \left(1 \mp \frac{0,000.000.246}{4,993.966.883}\right) \cdot 10^3 \frac{\text{cm}^3}{\text{kg}} \\ &= 431,027.760.6 \cdot (1 \mp 4,089.8 \cdot 10^{-10} \mp 4,916.2 \cdot 10^{-8}) \frac{\text{cm}^3}{\text{kg}} \\ &= 431,027.760.6 \cdot (1 \mp 4,957.1 \cdot 10^{-8}) \frac{\text{cm}^3}{\text{kg}} \quad (3) \\ &= (4,310.277.606 \pm 0,000.000.214) \cdot 10^2 \frac{\text{cm}^3}{\text{kg}}; \end{aligned}$$

auch hierbei wurde das Produkt der Unsicherheiten weggelassen.

Der relative Fehler in Gleichung (3) ist offenbar die Summe der relativen Fehler der beteiligten Werte: Zum relativen Fehler der Anzahl der Atome pro Kilogramm, siehe Gleichung (2), kommt der relative Fehler der Anzahl der Einheitszellen pro Kubikzentimeter hinzu, siehe Gleichung (1). Weil letzterer deutlich größer ist, ist die Genauigkeit des Endergebnisses durch die Bestimmung der Gitterkonstante a limitiert. (Das wiederum erklärt, warum versucht wurde, dafür einen sehr hohen experimentellen Aufwand zu betreiben.)

Nun zur Berechnung des Durchmessers: Das Kugelvolumen ist $V = \frac{4\pi}{3}r^3 = \frac{\pi}{6}d^3$, also ist der gesuchte Durchmesser $d = \sqrt[3]{6V/\pi}$. Für die Berechnung der Unsicherheit wird auch dies

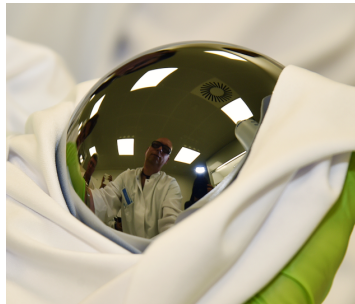
als Funktion (hier: „Durchmesser in Abhängigkeit vom Volumen“) aufgefaßt und linearisiert:

$$\begin{aligned}d(V) &= \left(\frac{6V}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}}; \quad d(V_0 \pm \Delta V) \approx d(V_0) + \frac{dd}{dV}(V_0) \cdot (\pm\Delta V) = \sqrt[3]{\frac{6V_0}{\pi}} + \frac{1}{3} \left(\frac{6V_0}{\pi}\right)^{-\frac{2}{3}} \frac{6}{\pi} \cdot (\pm\Delta V) \\ &= \sqrt[3]{\frac{6V_0}{\pi}} + \left(\frac{6V_0}{\pi}\right)^{-\frac{2}{3}} \frac{6V_0}{\pi} \cdot \left(\pm \frac{1}{3} \frac{\Delta V}{V_0}\right) = \sqrt[3]{\frac{6V_0}{\pi}} \cdot \left(1 \pm \frac{1}{3} \frac{\Delta V}{V_0}\right).\end{aligned}$$

Damit ergibt sich für den Durchmesser der „Kilogramm-Kugel“:

$$\begin{aligned}d &= \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} \cdot 431,027.760.6 \cdot (1 \pm \frac{1}{3} \cdot 4,957.1 \cdot 10^{-8})} \text{ cm} \\ &= 9,372.070.350 \cdot (1 \pm 1,652.4 \cdot 10^{-8}) \text{ cm} \\ &= (93,720.703.50 \pm 0,000.001.55) \text{ mm} = (93.720.703,50 \pm 1,55) \text{ nm}.\end{aligned}$$

Der relative Fehler des Durchmessers und des Volumens liegen in der Größenordnung von 10^{-8} und entsprechen damit in etwa der „Zielvorgabe“ des Aufgabenblatts. Allerdings entspricht der absolute Fehler des Durchmessers von $\pm 1,55$ Nanometern nur etwa ± 3 Gitterkonstanten von Silizium. Eine solche Fertigungstoleranz ist aber nicht möglich; die rundesten Silizium-Kugeln, die bislang hergestellt wurden (siehe die folgende Abbildung), weisen Abweichungen von der Kugelform im Bereich „weniger 10 nm“ auf.²



(Quelle:
[https://www.ptb.de/cms/forschung-entwicklung/forschung-zum-neuen-si/ptb-experimente/kilogramm-und-mol-atome-zaehlen/fachnachrichten-zur-masse.html?tx_news_pi1\[news\]=7418](https://www.ptb.de/cms/forschung-entwicklung/forschung-zum-neuen-si/ptb-experimente/kilogramm-und-mol-atome-zaehlen/fachnachrichten-zur-masse.html?tx_news_pi1[news]=7418))

Ursprünglich war beabsichtigt, daß sie der neue Kilogramm-Prototyp werden könnten, denn das Urkilogramm in Paris „schrumpfte“. Das Kilogramm ist aber seit dem 20. Mai 2019 *nicht mehr anhand irgend eines Stücks Materie*, sondern anhand von Naturkonstanten definiert, und zwar mittels des Planckschen Wirkungsquantums: Dessen Einheit ist $1 \text{ J} \cdot \text{s} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}$, und mit den bereits anhand anderer Naturkonstanten definierten Maßeinheiten für Meter und Sekunde folgt aus h das Kilogramm.³

Aufgabe 10: Miller-Indizes in zwei Dimensionen

- a) Im Zweidimensionalen gibt es insgesamt fünf aufgrund ihrer Symmetrie unterschiedliche Gittertypen: das quadratische, das rechtwinklige, das zentriert-rechtwinklige, das hexagonale

² https://www.ptb.de/cms/fileadmin/internet/forschung_entwicklung/das_si/Steckbrief_Si-Kugel_PTB.pdf

³ https://de.wikipedia.org/wiki/Internationales_Einheitensystem#Seit_2019:_Definition_über_physikalische_Konstanten

und das schräge (bzw. schiefe) Gitter. In unserem Beispiel handelt sich um das rechtwinklige Gitter im Zweidimensionalen.

- b) Die Angaben hier sind Beispiele; jedes Paar von Vektoren, deren ganzzahlige Linearkombinationen auf das gegebene Gitter führen, sind als Gittervektoren geeignet.

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0,5 \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0,5 \end{pmatrix}; \quad \vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0,5 \end{pmatrix}.$$

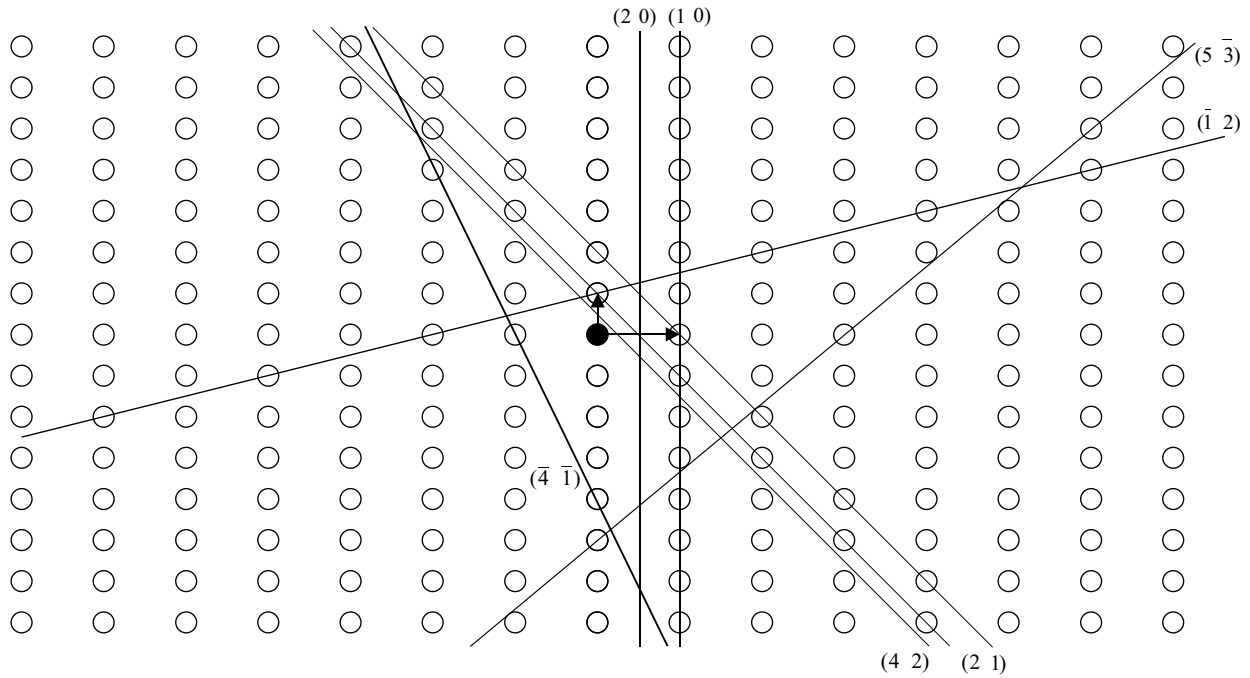
- c) In einem idealen Kristallgitter kann der Ursprung des Koordinatensystems frei gewählt werden; die Indizierung von Gitterebenen durch Miller-Indizes hängt nicht von der Wahl des Ursprungs ab. Die Miller-Indizes bezeichnen nicht nur eine einzelne Gitterebene, sondern die Gesamtheit *aller* parallel zueinander liegenden, von der Symmetrie her ununterscheidbaren Ebenen (= Ebenenschar).

Um einen Repräsentanten der durch ihre Miller-Indizes gegebenen „Gitterebenen im Zweidimensionalen“ in das durch \vec{a} und \vec{b} aufgespannte Gitter einzeichnen zu können, werden die zugehörigen Achsenschnittpunkte bestimmt. Hierfür genügt es im Prinzip, die Kehrwerte der Miller-Indizes zu bilden; die resultierenden Zahlen geben die Achsenschnittpunkte als Anteile der Basisvektoren des Gitters an. (Ist einer der Miller-Indizes null, so ist der Kehrwert unendlich; in diesem Fall gibt es keinen Schnittpunkt mit der betreffenden Achse.) Auf diese Weise erhält man die jeweils am nächsten zum gewählten Ursprung gelegene Ebene.

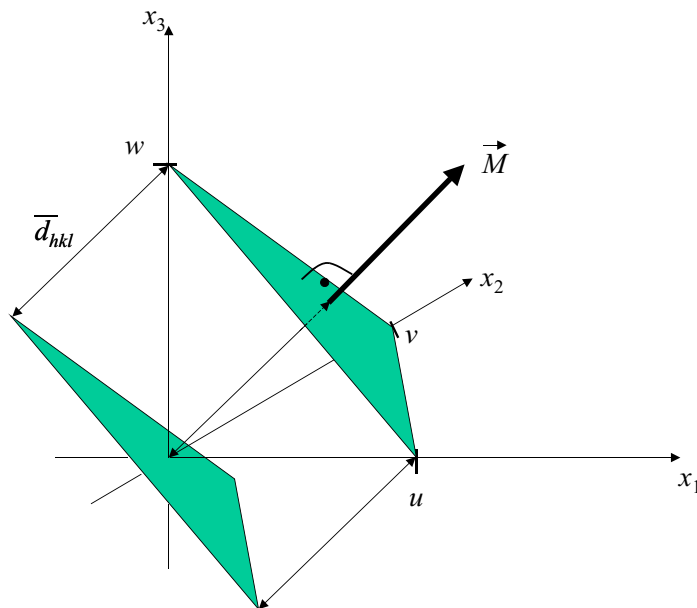
Allerdings ist das Einzeichnen einer solchen Ebene mit Miller-Indizes größerer Werte (machten schon bei Werten größer als 2) sehr unpraktisch. Man kann sich dann wie folgt behelfen: Das Konzept der Miller-Indizes erlaubt es, ganz einfach eine parallele, weiter vom Ursprung entfernt liegende Ebene zu finden, deren beide Achsenschnittpunkte auf Gitterpunkten liegen. Dazu werden die erhaltenen Brüche durch geeignete Faktoren, die jeweils auf beide Koordinaten angewendet werden, wieder ganzzahlig gemacht. Die resultierenden Zahlen geben die gesuchten Achsenschnittpunkte als Vielfache der Basisvektoren des Gitters an.

Miller-I.	→	Kehrwerte	$\xrightarrow{\cdot N}$	ganzzahlig	→	Achsenschnittpunkte
(2 1)	→	$\frac{1}{2}; 1$	$\xrightarrow{\cdot 2}$	1; 2	→	$\frac{1}{2}\vec{a}$ und \vec{b} bzw. \vec{a} und $2\vec{b}$
($\bar{1}$ 2)	→	$-1; \frac{1}{2}$	$\xrightarrow{\cdot 2}$	-2; 1	→	$-\vec{a}$ und $\frac{1}{2}\vec{b}$ bzw. $-2\vec{a}$ und \vec{b}
(5 $\bar{3}$)	→	$\frac{1}{5}; -\frac{1}{3}$	$\xrightarrow{\cdot 15}$	3; -5	→	$\frac{1}{5}\vec{a}$ und $-\frac{1}{3}\vec{b}$ bzw. $3\vec{a}$ und $-5\vec{b}$
($\bar{4}$ $\bar{1}$)	→	$-\frac{1}{4}; -1$	$\xrightarrow{\cdot 4}$	-1; -4	→	$-\frac{1}{4}\vec{a}$ und $-\vec{b}$ bzw. $-\vec{a}$ und $-4\vec{b}$
(1 0)	→	1; ∞	$\xrightarrow{\cdot 1}$	1; ∞	→	nur \vec{a}
(2 0)	→	$\frac{1}{2}; \infty$			→	$\frac{1}{2}\vec{a}$
(4 2)	→	$\frac{1}{4}; \frac{1}{2}$			→	$\frac{1}{4}\vec{a}$ und $\frac{1}{2}\vec{b}$

Wichtig: Sind die gegebenen Miller-Indizes ein ganzzahliges Vielfaches anderer Miller-Indizes, so bezeichnen sie eine Ebenenschar, die dichter liegt, als es den Gitterpunkten entspricht. Das bedeutet, daß es bei einer solchen Ebenenschar zusätzliche Zwischengitterebenen gibt (die sich also nicht an den Gitterpunkten befinden). Bei diesen entfällt der Schritt des Ganzzahligmachens (siehe Vorlesung). Hier betrifft dies die Fälle (2 0) und (4 2); es sind Ebenenscharen mit doppelter Dichte der (1 0)- bzw. (2 1)-Ebenen. Als Repräsentant ist hier jeweils eine der Zwischenebenen eingezeichnet. Der Klarheit halber sind ferner zwei benachbarte (2 1)-Ebenen eingezeichnet.



Aufgabe 11: Ebenenabstand



a) Die obige Abbildung zeigt zwei der äquivalenten Ebenen $(h k l)$, eine davon verläuft durch den Ursprung, die andere in einem gewissen Abstand \bar{d}_{hkl} vom Ursprung. Die Stellen u, v, w in der Abbildung sind die Schnittpunkte letzterer Ebene mit den Koordinatenachsen, angegeben als ganzzahlige Vielfache der jeweiligen Basisvektoren des Gitters (siehe Vorlesung); in einem kubischen Gitter haben alle drei Basisvektoren die gleiche Länge a (Gitterkonstante). Aus der Konstruktionsvorschrift für Miller-Indizes ergibt sich der folgende Zusammenhang (vgl. auch Aufg. 10):

$$h = N/u, \quad k = N/v, \quad l = N/w. \quad (4)$$

Dabei ist N die ganze Zahl, die für den Kehrwert der Koordinaten die entsprechenden ganzzahligen Miller-Indizes liefert. Daß der aus den Miller-Indizes gebildete Vektor $\vec{M} = \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}$ senkrecht auf der Ebene $(h \ k \ l)$ steht, kann mittels des Skalarproduktes überprüft werden. Hierfür benötigt man zwei Vektoren, die die Ebene $(h \ k \ l)$ aufspannen. Wie man leicht sieht, liegen die zwei Vektoren $\vec{v}_1 = u \vec{a}_1 - v \vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} u \\ -v \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\vec{v}_2 = u \vec{a}_1 - w \vec{a}_3 = a \begin{pmatrix} u \\ 0 \\ -w \end{pmatrix}$ in dieser Ebene.⁴ Das Skalarprodukt von \vec{M} mit \vec{v}_1 und \vec{v}_2 kann mit Gl. (4) berechnet werden:

$$\begin{aligned} \vec{M} \cdot \vec{v}_1 &= h \cdot au + k \cdot a(-v) = \frac{N}{u} \cdot au + \frac{N}{v} \cdot a(-v) = Na - Na = 0, \\ \vec{M} \cdot \vec{v}_2 &= h \cdot au + l \cdot a(-w) = \frac{N}{u} \cdot au + \frac{N}{w} \cdot a(-w) = Na - Na = 0. \end{aligned}$$

Da das Skalarprodukt der beiden in der Ebene liegenden Vektoren \vec{v}_1 und \vec{v}_2 mit \vec{M} null ergibt, steht der aus den Miller-Indizes gebildete Vektor \vec{M} senkrecht auf der Ebene $(h \ k \ l)$.

- b) Da \vec{M} senkrecht auf der Ebene steht, ist der normierte Normalenvektor $\vec{M}/|\vec{M}|$ ein Kandidat für den in der Hesseschen Normalform (HNF) benötigten normierten Normalenvektor \vec{n}_0 . Die Richtung des HNF-Normalenvektors ist so zu wählen, daß das Skalarprodukt mit einem Ortsvektor \vec{r} der Ebene einen positiven Wert ergibt. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird hier der Schnittpunkt mit der x -Achse gewählt:

$$\frac{\vec{M}}{|\vec{M}|} \cdot \begin{pmatrix} au \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{Nau}{u|\vec{M}|} = \frac{Na}{|\vec{M}|} = \bar{d}_{hkl}.$$

Da dieser Ausdruck positiv ist, ist in der Tat $\vec{n}_0 = \vec{M}/|\vec{M}|$, und der soeben erhaltene Wert für $\vec{n}_0 \cdot \vec{r}$ ist der Abstand \bar{d}_{hkl} der Ebene $(h \ k \ l)$ zum Ursprung (daß das so ist, ist eine generelle Eigenschaft der HNF).

Für ganzzahlige u, v, w (wie sie hier betrachtet werden) ist die zugehörige Ebene $(h \ k \ l)$ im allgemeinen Fall nicht die, die dem Ursprung am nächsten liegt. Wie man sich anhand von Beispielen leicht klar macht, ist N die Anzahl äquivalenter Ebenen, die sich innerhalb der Entfernung $Na/|\vec{M}|$ von der Ebene im Ursprung befinden (vgl. auch Aufg. 10). Damit ergibt sich der Abstand zweier direkt benachbarter Ebenen $(h \ k \ l)$ zu:

$$d_{hkl} = \frac{\bar{d}_{hkl}}{N} = \frac{a}{|\vec{M}|} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}.$$

[Konkretes Beispiel: Wir betrachten die (111) -Ebenen. Unsere Abstandsformel liefert $d_{111} = a/\sqrt{3}$. Anschaulich gesehen, liegen diese Ebenen orthogonal zur Raumdiagonalen, und innerhalb eines Würfels wird die Raumdiagonale durch diese Ebenen gedrittelt (siehe die Stapelfolge ABCABC... des fcc-Gitters). Nach Pythagoras hat die Raumdiagonale eine Länge von $\sqrt{3}a$, also haben die Ebenen den Abstand $\sqrt{3}a/3 = a/\sqrt{3}$ – in Übereinstimmung mit dem Ergebnis der Abstandsformel.]

⁴ Weil sich die Komponentendarstellung der Vektoren auf die kartesischen Einheitsvektoren des Koordinatensystems bezieht und nicht auf die Basisvektoren des Gitters, taucht die Gitterkonstante a hier explizit als Vorfaktor auf.