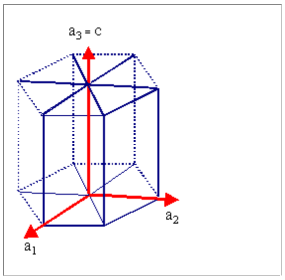
Vierer-Indizierung im hexagonalem Gitter

Advanced

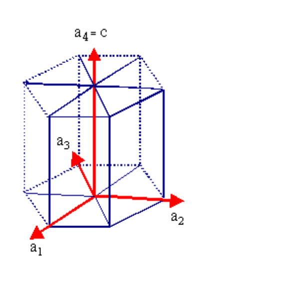
Viererindizierung von Richtungen

- Zunächst definiert man einen *zusätzlichen* Basisvektor, um der Symmetrie der hexagonalen Basisebene besser gerecht werden zu können.

Statt dieser **EZ** mit drei Basisvektoren



nimmt man eine **EZ** mit vier Basisvektoren.



- Natürlich kann man nun die Indizes nicht mehr ganz unabhängig wählen.
  - Hat man im *Dreier*-System eine Richtung mit **<UVW>** bestimmt, wird im *Vierer*-System dieselbe Richtung jetzt mit **<uvtw>** beschrieben.
  - Die *neuen* "Vierer"-Indizes können aus den alten "Dreier"-Indizes wie folgt berechnet werden:

$$u = 1/3\,(2U - V)$$

$$v = 1/3\,(2V - U)$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = W$$

  - Achtung! Bei **t** stehen absichtlich "kleine" Buchstaben. Diese Formeln kann sich jeder selbst ableiten! Aber aufpassen! Im "Askeland" hat sich z.B. bei diesen Formeln ein Fehler eingeschlichen.
- Kristallographisch gleichwertige Richtungen haben mit der Viererindizierung dieselbe generelle Indizierung, wie in einer Übungsaufgabe gezeigt wird.

Viererindizierung von Ebenen

- Die Indizierung von *Ebenen* im Vierersystem ist sehr einfach:
  - Die *Dreier*-Indizierung **(hkl)** einer Ebene geht über in die *Vierer*-Indizierung **(hkil)**; d.h. die drei alten Indizes ändern sich *nicht* und der neue Index **i** berechnet sich simpel aus der Bedingung

$$h + k + i = 0$$

- Symmetrien sind im Vierersystem klar erkennbar:
  - Alle *Richtungen* mit gleichen Viererindizes sind kristallographisch äquivalent.
  - Alle *Ebenen* mit gleichen Viererindizes sind kristallographisch äquivalent.
- Zu beachten ist aber, daß der Vektor **<uvtw>** im allgemeinen *nicht* senkrecht auf der Ebene **(uvtw)** steht.

Pseudoreziprokes Gitter im Vierersystem

- Für später (Einführung in die Materialwissenschaft II) gehen wir gleich noch einen Schritt weiter und betrachten auch das sogenannte **reziproke Gitter**
  - *Hier* muß man dazu nur wissen, dass das reziproke Gitter aus dem realen Gitter abgeleitet wird, indem man Vektoren mit Komponenten **h, k, l** definiert, die senkrecht auf den Ebenen **{hkl}** des realen Gitters stehen und eine Länge haben, die proportional zum Abstand dieser Ebenen sind - und dass das reziproke Gitter für viele Zwecke wichtiger werden wird als das reale Gitter.
- Ein reziprokes Gitter mit *vier* Komponenten der Basis- und Translationsvektoren ist aber, wenn man genau hinschaut, grundsätzlich nicht definierbar; man bekommt unlösbare Probleme sobald man die formale Definition bemüht.
  - Wir betrachten also zunächst das reziproke Gitter zu den *drei* Basisvektoren $\underline{a_1}$, $\underline{a_2}$ und $\underline{c}$ des hexagonalen Gitters.
  - Diese Basisvektoren des reziproken Gitters seien $\underline{g_1}$, $\underline{g_2}$ und $\underline{g_3}$. Sie ergeben sich für das hexagonale Gitter zu

$$\underline{g_1} = \frac{2 \cdot (2\underline{a_1} + \underline{a_2})}{3a^2}$$

$$\underline{g_2} = \frac{2 \cdot (\underline{a_1} + 2\underline{a_2})}{3a^2}$$

$$\underline{g_3} = \frac{\underline{c}}{c^2}$$

- Ein so definierter reziproker Gittervektor steht *per definitionem* senkrecht auf der Ebene mit den gleichen Dreier-Indizes.
  - Will man auch im reziproken Gitter die Vierer-Indizierung übernehmen, muß ein **pseudoreziprokes Gitter** so eingeführt werden, daß in ihm ein pseudoreziproker Gittervektor mit der Indizierung **(hkil)** senkrecht auf der Ebene **(hkil)** des Raumgitters steht.
  - Da nun die Ebene **(hkl)** dieselbe ist wie die Ebene **(hkil)**, besteht die Aufgabe darin, den Vektor $\underline{G} = h\underline{g_1} + k\underline{g_2} + l\underline{g_3}$ auszudrücken als

$$\underline{g} = h\underline{g}'_1 + k\underline{g}'_2 + i\underline{g}'_p + l\underline{g}'_3$$

  - Wobei die gestrichenen Vektoren die Basisvektoren des *pseudo*reziproken Gitters sind. Der Basisvektor $\underline{g}'_p$ ist der vierte und eigentlich überflüssige Vektor.
  - Gleichzeitig gilt immer die Nebenbedingung **h + k + i = 0**.
- Damit ist das pseudoreziproke Gitter definiert, es gilt

$$\underline{g}'_1 = \frac{2}{3a^2} \cdot \underline{a_1}$$

$$\underline{g}'_2 = \frac{2}{3a^2} \cdot \underline{a_2}$$

$$\underline{g_p}' = \frac{2}{3a^2} \cdot \underline{a_3} = -(\underline{a_1} + \underline{a_2})$$

$$\underline{g_3}' = \frac{1}{c^2} \cdot \underline{c}$$

- Das *pseudo*reziproke Gitter ist also mit dem realen Gitter bis auf die Länge der Basisvektoren identisch.
  - Der große Vorteil des pseudoreziproken Gitter ist, daß sich in ihm Produkte von Vektoren des realen und des reziproken Gitters besonders einfach ausrechnen lassen (eine Aufgabe, die häufig vorkommt).
  - Ist ein Translationsvektor des realen Gitters in der Viererindizierung gegeben durch **r = <uvtw>** und ein Vektor des pseudoreziproken Gitters durch **g = (hkil)**, dann gilt für das Skalarprodukt

$$\underline{\mathbf{r}} \cdot \underline{\mathbf{g}} = \mathbf{hu + kv + it + lw}$$

  - d.h. man kann rechnen wie in einem cartesischen System.
- Produkte zwischen Vierervektoren derselben Sorte sind etwas komplizierter, es gilt: Für

$$\underline{\mathbf{r}}_1 = \langle u_1\, v_1 t_1\, w_1 \rangle$$

$$\underline{\mathbf{r}}_2 = \langle u_2\, v_2\, t_2\, w_2 \rangle$$

  - ist das Skalarprodukt (mit der Abkürzung $\lambda = (2/3)(c/a)^2$):

$$\underline{\mathbf{r}}_1 \cdot \underline{\mathbf{r}}_2 = \frac{3a^2}{2} \cdot (u_1 \cdot u_2 + v_1 \cdot v_2 + t_1 \cdot t_2 + \lambda^2 \cdot w_1 \cdot w_2)$$

- Ähnlich im pseudoreziproken Gitter. Für

$$\underline{\mathbf{g}}_1 = (h_1\, k_1\, i_1\, l_1)$$

$$\underline{\mathbf{g}}_2 = (h_2\, k_2\, i_2\, l_2)$$

  - ist das Skalarprodukt

$$\underline{\mathbf{g}}_1 \cdot \underline{\mathbf{g}}_2 = \frac{3a^2}{2} \cdot (h_1 \cdot h_2 + k_1 \cdot k_2 + i_1 \cdot i_2 + \lambda^{-2} \cdot l_1 \cdot l_2)$$