

3.2. Richtungen und Ebenen im Gitter

3.2.1 Definitionen und Anwendungen

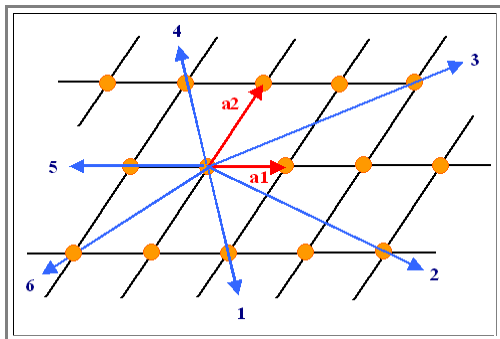
Mathematische Beschreibung von Richtungen

Wir brauchen eine Notation, die uns erlaubt, bestimmte *Richtungen* und *Ebenen* in einem beliebigen Gitter eindeutig anzusprechen, d.h. eine mathematische Formulierungen für Aussagen wie "entlang der Flächendiagonalen" oder "auf der Würfelebene".

- Man könnte mehrere Arten von Rezepten angeben, mit denen man eine Richtung (d.h. einen Vektor) oder eine Ebene in einem Gitter eindeutig indizieren kann. Es gibt aber ein besonderes System, die sogenannten **Miller Indizes**, die zwar vielleicht nicht sofort einleuchten, mit denen man aber (später) sehr bequem rechnen kann.
- Wir betrachten zunächst die *Miller Indizierung* für Richtungen:

Definition (und Rezept)
Eine <i>Richtung</i> in einem <i>Gitter</i> wird durch <i>drei ganze Zahlen</i> indiziert, indem
<ul style="list-style-type: none">Der Ursprung der EZ auf die gewünschte Richtung gelegt wird,Ein Vektor in der gewünschten Richtung in kleinstmöglichen ganzzahligen Komponenten der Basisvektoren ausgedrückt wirdAuftauchende negative Zahlen durch einen Überstrich dargestellt werden (in html nicht leicht darstellbar, wir schreiben stattdessen mit dem Minus ("-") oder Strich (" ") Zeichen) undDas erhaltene Zahlentripel uvw in <i>eckige</i> Klammern [uvw] gesetzt wird wenn es sich um eine <i>spezifische</i> Richtung handelt, und in <i>spitze</i> Klammern <uvw>, wenn die <i>Gesamtheit aller kristallographisch gleichwertigen</i> Richtungen gemeint ist.

In dem unten gezeigten zweidimensionalen Gitter erhalten die Richtungen 1 - 5 damit folgende Miller Indizierung



Richtung 1 $[1, -1] = [1 \ 1']$

Richtung 2 $[1, -1/3] = [3 \ 1']$

Richtung 4 $[-1, 1] = [1' \ 1]$

Richtung 5 $[1, 0]$

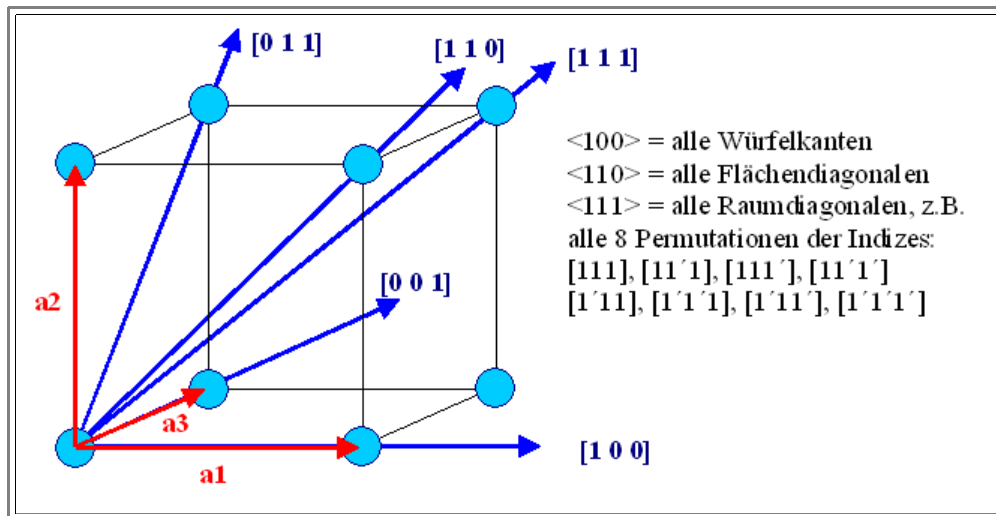
Richtung 6 $[-1, -1] = [1' \ 1']$

- Ausgesprochen wird z.B. die **<110>**-Richtung nicht als "einhundertzehn Richtung", sondern als "*eins, eins, null Richtung*" oder noch genauer als: "*eins, eins, null Richtungstyp*".

Man kann das Zahlentripel **<uvw>** in einer der spezifischen Ausprägungen z.B. **[uvw]** natürlich auch als Vektor auffassen, der in die gewünschte Richtung zeigt. Wir haben dann einen simplen Translationsvektor des Gitters, dessen Betrag allerdings keine relevante Information enthält (die haben wir durch das Kürzen auf kleinstmögliche Zahlen "beseitigt"). Bei Ebenen wird das aber anders sein.

Damit ist die Systematik bei spezifischen **Richtungen** klar. Wir müssen nur noch die Bedeutung der "Gesamtheit aller kristallographisch gleichwertigen Richtungen" klären, d.h. wann wir $\langle \dots \rangle$ Klammern verwenden

- Wir schauen uns das in einem dreidimensionalen kubischen Gitter an und lernen dabei gleich die Indizierung der wichtigsten Richtungen (die man "auswendig" kennen muß) im kubischen Gitter kennen
- Anschließend eine kleine Übungsaufgabe



Übung 3.2 -1
Richtungen im Gitter

Was kristallographisch gleichwertig ist, hängt vom Gittertyp ab!

- Im kubischen Gitter sind alle möglichen Permutationen (inkl. Negation) der Indizes immer gleichwertig; aber schon im hexagonalen Gitter gilt das nicht mehr.
- Andererseits sind gerade im **hexagonalen Gitter** Richtungen kristallographisch gleichwertig, die verschiedene Miller-Indizes haben. Die in der Basisebene liegenden Richtungen, die zu den Ecken des gleichseitigen Sechsecks zeigen, das die Basisebene definiert, haben Indizes wie z.B. $[110]$, $[100]$, $[010]$, d.h. die Miller Indizes sind **nicht** Permutationen einer allgemeinen Richtung wie z.B. $\langle 100 \rangle$. Für Ebenen (siehe unten) ist es ähnlich.
- Wer das nicht versteht, hat die [Übungsaufgabe](#) nicht gemacht! Das sollte man her unbedingt tun, und sei es nur, dass man sich Aufgabe und Lösung anschaut.

Man hat deshalb für das hexagonale Gitter (das in der Praxis sehr wichtig ist), eine eigene Abart der Miller-Indizes erfunden, die auch in diesem Fall die vorhandenen Symmetrien direkt aufzeigt: Man nimmt einfach zu den Basisvektoren a_1 , a_2 und c noch einen weiteren (an sich unnötigen) "Basisvektor" dazu, der als $a_3 = -(a_1 + a_2)$ definiert wird (damit ist a_3 mathematisch gesehen natürlich **kein** Basisvektor, da nicht linear unabhängig!), und indiziert dann mit **4** Indizes.

- Aus den oben aufgezählten Richtungen wird dann $[1,1,2',0]$, $[2,1',1',0]$, $[1',2,1',0]$; die Symmetrie in den Indizes wird sichtbar.
- Wir wollen uns damit aber nicht weiter befassen (außer, dass wir noch eine Übung machen); alles Wissenswerte zur **Vierer-Indizierung** bei hexagonalen Gittern findet sich im [Link](#)

Übung 3.2 -4
Richtungen im hexagonalem Gitter

Mathematische Beschreibung von Ebenen im Gitter

Wir brauchen jetzt eine Notation, die uns erlaubt bestimmte **Ebenen** in einem beliebigen Gitter eindeutig anzusprechen, zum Beispiel die "Würfelseite" bei einem kubischen Gitter, oder die "Basisebene" bei einem hexagonalen Gitter.

- Man könnte sich zunächst denken, daß man dafür das Zahlentripel nehmen könnte (evtl. auf kleinste ganze Zahlen reduziert), das sich aus den Schnittpunkten einer Ebene mit den Basisvektoren des Gitters ergibt - wie bei den Richtungen
- Könnte man auch, aber es gibt nicht immer einen Schnittpunkt. Die Würfelseite eines kubischen Gitters schneidet immer nur einen der Basisvektoren; zu den anderen liegt sie parallel (bzw. enthält sie).

Deshalb, aber auch aufgrund anderer Vorzüge die wir noch kennenlernen werden, wählt man eine zunächst etwas umständlich erscheinende Definition:

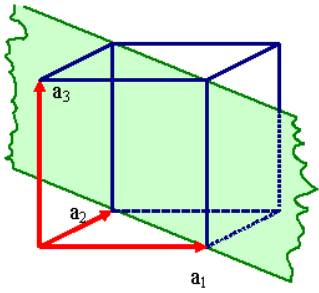
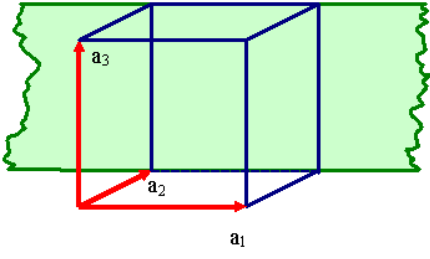
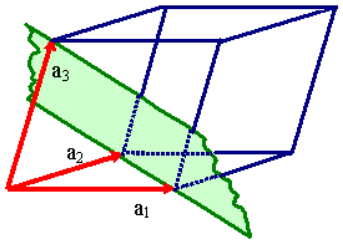
Definition (und Rezept)

Eine *Ebene* in einem *Gitter* wird durch *drei ganze Zahlen* indiziert, indem man

- Den Ursprung der **EZ** *nicht* in die zu indizierende Ebene legt, sondern in eine *Nachbarebene*.
- Die *Schnittpunkte* der Ebene mit den Basisvektoren bestimmt (wenn kein Schnittpunkt vorhanden ist, entspricht das " ∞ ").
- Das erhaltene Zahlentripel *reziprok* darstellt, und die resultierenden Brüche durch Erweitern ganzzahlig macht; aus ∞ wird dadurch **0**. *Nicht erlaubt* ist Kürzen, falls die reziproken Zahlen keine Brüche sind (Aus den Schnittpunkten $1/2, 1/2, 1/2$ erhält man **2, 2, 2** und nicht **1, 1, 1**).
- Auftauchende *negative* Zahlen durch einen Überstrich darstellt (in html nicht darstellbar, wir schreiben stattdessen mit '-' Zeichen)
- Das Zahlentripel **hkl** in *runde* Klammern (**hkl**) setzt, falls es sich um eine *spezifische* Ebene handelt, und in *geschweifte* Klammern **{hkl}**, falls die Gesamtheit *aller kristallographisch gleichwertigen Ebenen* mit denselben Indizes gemeint ist.

Dazu drei Beispiele, die absichtlich etwas unklar gezeichnet sind, um nicht sofort falsche Assoziationen hervorzurufen.

- Insbesondere ist es wichtig sich klarzumachen, daß *mathematische* Ebenen in einem mathematischen Gitter ∞ ausgedehnt sind. Die Begrenzungslinien sind also immer nur zeichentechnisch bedingt.

	<p>Kubisches Gitter Schnittpunkte bei 1, 1, ∞ <i>Indizes (110)</i></p>
	<p>Kubisches Gitter Schnittpunkte bei $\infty, 1, \infty$ <i>Indizes (010)</i></p>
	<p>Triklines Gitter Schnittpunkte bei 1, 1, 1 <i>Indizes (111)</i></p>

Wichtig ist: *Alle* Ebenen die man in gleicher Weise in eine **EZ** einzeichnet, haben die gleiche Indizierung.

- Das Kürzel **(112)** bezeichnet also nicht *eine* Ebene, sondern einen Satz von ∞ viele parallel laufende Ebenen; **{112}** entsprechend mehrere Sätze ∞ vieler, ∞ ausgedehnter, parallel laufender Ebenen.
- Das Kürzel **(hkl)** kann man aber auch als die Komponenten eines Vektors auffassen, der dann per Definitionem senkrecht auf der Ebene steht, die er charakterisiert. Der Betrag dieses Vektors - nennen wir ihn mal **reziproken Gittervektor** - hat denn eine wichtige Bedeutung; wie wir [weiter unten](#) noch lernen werden.

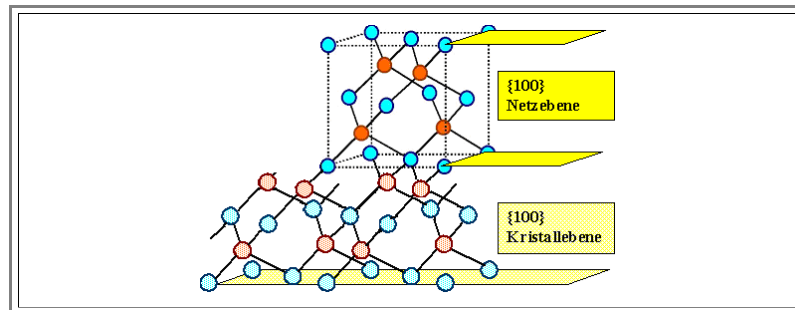
Eigentlich ist damit alles gesagt; vielleicht ist noch der Hinweis hilfreich, daß man bei *hexagonalen* Gittern natürlich auch bei den Ebenen eine *Vierer-Indizierung* wie bei den Richtungen einführt.

Erfahrungsgemäß wird der Anfänger (und nicht selten auch der Experte) beim Arbeiten mit den Miller Indizes von Ebenen aber Probleme haben und Fehler machen. Deshalb hier noch einige Bemerkungen.

Eine gewisse Konfusion kann entstehen, weil es in der Kristallographie eigentlich **zwei** Konzepte von Ebenen gibt:

- Die **mathematische** Definition von oben, bezogen auf **mathematische** Ebenen im **mathematischen** Gitter.
- Die **gegenständliche** Definition, in der **Kristalle** als Stapelfolgen von **einer Ebene zugeordneten Atomen oder Atomgruppen** betrachtet werden.

Man redet im ersteren Falle auch von **Netzebenen**, im letzteren Fall von **Kristallebenen**. Die **{111}** - **Kristallebene** in einem Diamantgitter enthält dann **beide** Atome der Basis; mindestens eines davon liegt dabei **nicht** auf der Netzebene. Das ist ein wichtiger Unterschied, den man sich klarmachen sollte; hier ein Bild dazu für die Diamantstruktur.



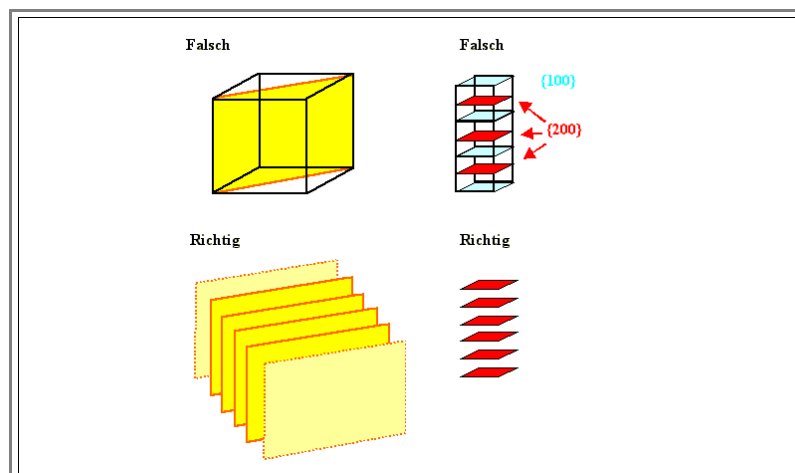
Die gelb gezeichnete **{100}** Kristallebene enthält den ganzen Satz von Atomen, die schattiert gezeichnet sind. Aufeinanderstapeln solcher Kristallebenen produziert den Kristall.

Ähnlich ist es, wenn man eine mathematisch definierte Ebene in einen **Kristall**, und nicht in ein **Gitter** einzeichnen will. Im **Si**-Kristall kann man beispielsweise eine **{100}** Ebene auf **zwei** Weisen durch **Atome** legen (oben z.B. durch die blauen oder roten Atome); sie erscheint damit als nicht eindeutig definiert.

Hat man obige Punkte nicht ganz sauber verstanden, wird man leicht falsche Zahlen generieren, wenn man z.B. die Zahl von Atomen pro **cm²** auf einer Ebenen ausrechnet, denn jetzt muß man die Ebene im **Gitter** mit dem Kristall, d.h. auch mit der Basis kombinieren.

Triviale, aber immer wieder gerne gemachte Fehler sind:

1. Als allgemeine Ebene nur **eine** Ebene zu sehen und nicht die Gesamtheit aller äquivalenten Ebenen - die **Ebenenschar**
2. Zu glauben, daß z.B. die **{200}** Ebenen nur die Ebenen sind, die **zwischen** den **{100}** Ebenen stecken. Hier kommt **obige** Bemerkung zum Tragen, daß **nicht gekürzt werden darf**. Die **{200}**-Ebenen sind etwas anderes als die **{100}**-Ebenen! Das ist hier illustriert:



3. Man hat immer die Tendenz, Beziehungen, Regeln und Vorstellungen, die von **kubischen** Gittern geprägt worden sind, kritiklos auf **nicht**kubische Systeme zu übertragen. Das kann sehr falsch werden! Zum Beispiel sind in **nicht**kubischen Kristallen nicht alle Ebenen zu den möglichen Indizespermutationen kristallographisch gleichwertig. Für Richtungen im hexagonalem Gitter haben wir das schon gesehen ([siehe das hexagonale Gitter von oben](#)); für Ebenen ist es nicht anders.

4. Nochmals: Vorsicht ist auch geboten, selbst bei kubischen Kristallen, wenn man nicht die **mathematische** Netzebene, sondern die **mit Atomen belegte** Kristallebene betrachtet. Wenn man die **(111)** Ebene oder die **(1'1'1')** Ebene in z.B. **GaAs** oder **SiC** betrachtet, sieht man einen großen Unterschied: Auf der einen Ebene sitzen **Ga**- oder **Si**- Atome, auf der anderen **As**- bzw. **C**-Atome. Dies sieht nicht nur anders aus, sondern führt oft zu dramatischen Unterschieden der Eigenschaften. Bei der Züchtung von **SiC** Kristallen erhält man völlig verschiedene Strukturen, wenn man einen Kristall auf der **(111)**- oder **(1'1'1')**-Ebene eines Keimlings wachsen läßt (vereinfacht gesagt wird das **SiC** in einem Fall kubisch, im anderen hexagonal - bei immer kubischem Keimling!).

Offensichtlich muß hier geübt werden!

Übung 3.2-2

Ebenen im Gitter und im Kristall

Rechnen mit Miller Indizes

Wir können bereits einige Vorteile (aber noch längst nicht alle) der auf den ersten Blick etwas seltsamen Miller Indizes ableiten und verwenden. Im folgenden sind sie für *kubische Gitter* nur *postuliert und aufgelistet*; die Ableitungen und Beweise sind in die Übung 3.2-3 verlegt.

1. *Kristallographisch äquivalente* Richtungen und Ebenen haben immer den gleichen Satz an Miller Indizes.
2. Die Richtung **[hkl]** steht immer **senkrecht** auf der Ebene **(hkl)**.
3. Die Abstände d_{hkl} zwischen zwei benachbarten Ebenen sind direkt aus den Indizes berechenbar. Die Formeln für nichtkubische Gittersysteme können etwas kompliziert sein, aber im *kubischen* Gittersystem gilt ganz einfach:

$$d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$$

- Im Zähler steht offensichtlich der *Betrag* des weite oben kurz angesprochenen reziproken Gittervektors mit den Komponenten **(hkl)**! Damit ist auch schon hinreichend klar, warum die gewählte "reziproke" Definition der Miller Indizes für Ebenen sehr vorteilhaft ist.

In der "Einführung in die Materialwissenschaft II" werden wir sehen, daß die Miller Indizes noch weiterführen. Zum Beispiel treten sie direkt in den Formeln auf, die die Beugung von Wellen, z.B. Röntgenstrahlen, in Kristallen beschreiben.

- Aber zunächst wollen wir die obigen Beziehungen einüben

Übung 3.2-3

Beziehungen und Rechnungen mit Miller Indices

Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu 3.2.1