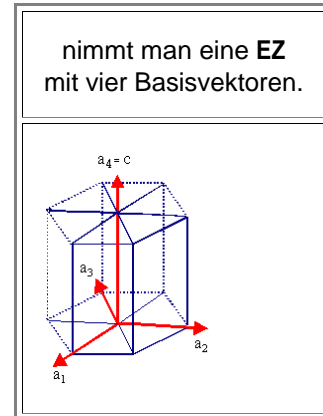
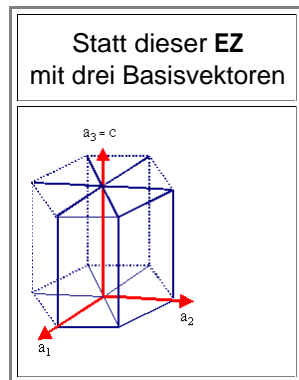


Vierer-Indizierung im hexagonalem Gitter

Viererindizierung von Richtungen

Advanced

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



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

$$\begin{aligned}u &= 1/3 (2U - V) \\v &= 1/3 (2V - U) \\t &= -(u + v) \\w &= W\end{aligned}$$

- 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 $\langle uvtw \rangle$ 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 **a₁, a₂** und **c** des hexagonalen Gitters.

Diese Basisvektoren des reziproken Gitters seien **g₁, g₂** und **g₃**. Sie ergeben sich für das hexagonale Gitter zu

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

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

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

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 **G = hg₁ + kg₂ + lg₃** auszudrücken als

$$g = hg'_1 + kg'_2 + ig'_p + lg'_3$$

Wobei die gestrichelten Vektoren die Basisvektoren des **pseudoreziproken** Gitters sind. Der Basisvektor **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

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

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

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

$$g'_3 = \frac{1}{c^2} \cdot c$$

Das *pseudoreziproke* Gitter ist also mit dem realen Gitter bis auf die Länge der Basisvektoren identisch.

- Der große Vorteil des pseudoreziproken Gitters 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 $\underline{r} = \langle uvtw \rangle$ und ein Vektor des pseudoreziproken Gitters durch $\underline{g} = (hkil)$, dann gilt für das Skalarprodukt

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

- d.h. man kann rechnen wie in einem cartesischen System.

Produkte zwischen Vierervektoren derselben Sorte sind etwas komplizierter, es gilt: Für

$$\underline{r}_1 = \langle u_1 v_1 t_1 w_1 \rangle$$
$$\underline{r}_2 = \langle u_2 v_2 t_2 w_2 \rangle$$

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

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

Ähnlich im pseudoreziproken Gitter. Für

$$\underline{g}_1 = (h_1 k_1 i_1 l_1)$$
$$\underline{g}_2 = (h_2 k_2 i_2 l_2)$$

- ist das Skalarprodukt

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