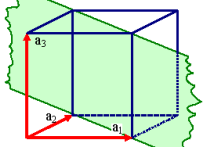
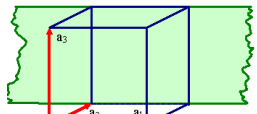
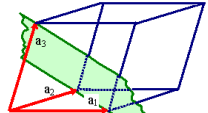


### 3.1.2 Notation von Richtungen und Ebenen im Gitter

#### Miller-Indizes

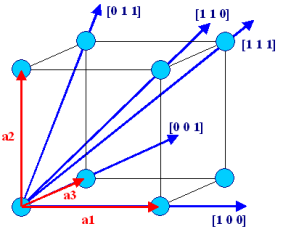
Wer [Übungsaufgabe 3.3-1](#) gemacht oder zumindest angeschaut hat, ist über ein gewisses Sprachproblem gestolpert: Es wird eine "**Raumdiagonalebene**" eingeführt, und auch sonst werden **Ebenen in einem Gitter/Kristall** prominent herausgestellt.

- Wenn man nicht beschreibend bleiben will ("die Ebene, die beim Atom oben links beginnt und durch die Atome ... führt"), gibt man sich am besten eine mathematische Definition, die alle möglichen Fälle einschließt. Man macht das überall auf der Welt mit den sogenannte **Miller-Indizes**, die wie folgt definiert sind:

Definition (und Rezept)		Kubisches Gitter Schnittpunkte bei $1, 1, \infty$ <b>Indizes (110)</b>
Eine <b>Ebene</b> in einem <b>Gitter</b> wird durch <b>drei ganze Zahlen</b> indiziert, indem man		Kubisches Gitter Schnittpunkte bei $\infty, 1, \infty$ <b>Indizes (010)</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>den Ursprung der <b>EZ</b> <b>nicht</b> in die zu indizierende Ebene legt, sondern in eine <b>Nachbarebene</b>;</li> <li>die <b>Schnittpunkte</b> der Ebene mit den Basisvektoren bestimmt (wenn kein Schnittpunkt vorhanden ist, entspricht das "<math>\infty</math>");</li> <li>das erhaltene Zahlentripel <b>reziprok</b> darstellt und die resultierenden Brüche durch Erweitern ganzzahlig macht; aus <math>\infty</math> wird dabei <b>0</b>. <b>Nicht erlaubt</b> ist Kürzen, falls die reziproken Zahlen keine Brüche sind (aus den Schnittpunkten <math>1/2, 1/2, 1/2</math> erhält man <b>2, 2, 2</b> und nicht <b>1, 1, 1</b>).</li> <li>Auftauchende <b>negative</b> Zahlen werden durch einen Überstrich dargestellt (in HTML nicht so einfach darstellbar, wir schreiben stattdessen mit '-'Zeichen)</li> <li>Das Zahlentripel <b>hkl</b> wird in <b>runde</b> Klammern (<b>hkl</b>) gesetzt, falls es sich um eine <b>spezifische</b> Ebene handelt, und in <b>geschweifte</b> Klammern <b>{hkl}</b>, falls die Gesamtheit <b>aller kristallographisch gleichwertigen Ebenen</b> mit denselben Indizes gemeint ist.</li> </ul>		Triklines Gitter Schnittpunkte bei $1, 1, 1$ <b>Indizes (111)</b>

- Das mag zunächst etwas verquer erscheinen - es ist aber ungeheuer nützlich, denn mit den so gewonnenen Zahlen (= **Miller-Indizes**) läßt sich famos rechnen!

Wenn wir schon dabei sind, definieren wir gleich noch die **Miller-Indizes für Richtungen**:

Definition (und Rezept)	
Eine <b>Richtung</b> in einem <b>Gitter</b> wird durch <b>drei ganze Zahlen</b> indiziert, indem	<p> <math>\langle 100 \rangle</math> = alle Würfelkanten  <math>\langle 110 \rangle</math> = alle Flächendiagonalen  <math>\langle 111 \rangle</math> = alle Raumdiagonalen, z.B. alle 8 Permutationen der Indizes:  <math>[111], [1\bar{1}1], [\bar{1}11], [11\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [\bar{1}1\bar{1}], [1\bar{1}1]</math> </p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>der Ursprung der <b>EZ</b> auf die gewünschte Richtung gelegt wird;</li> <li>ein Vektor in der gewünschten Richtung in kleinstmöglichen ganzzahligen Komponenten der Basisvektoren ausgedrückt wird;</li> <li>auftauchende negative Zahlen durch einen Überstrich dargestellt werden (in HTML nicht so leicht darstellbar, wir schreiben stattdessen mit dem Minus ["-"] oder Strich [" '"]) und</li> <li>das erhaltene Zahlentripel <b>uvw</b> in <b>eckige</b> Klammern <b>[uvw]</b> gesetzt wird, wenn es sich um eine <b>spezifische</b> Richtung handelt, und in <b>spitze</b> Klammern <b>&lt;uvw&gt;</b>, wenn die <b>Gesamtheit aller kristallographisch gleichwertigen</b> Richtungen gemeint ist.</li> </ul>	

Übungsaufgabe

Aufgabe 3.1-2

**Rechnen mit Miller-Indizes**

Wir können bereits hier 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 schenken wir uns hier. Wer's genauer wissen will, benutzt den [Link](#).

1. Die Richtung **[hkl]** steht immer *senkrecht* auf der Ebene **(hkl)**.
2. Die **Abstände**  $d_{hkl}$  zwischen zwei direkt benachbarten Gitterebenen sind direkt aus den Indizes berechenbar. Die Formeln für [nichtkubische Gittersysteme](#) können etwas kompliziert sein, aber in unseren *kubischen* Gittern gilt ganz einfach:

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

- Damit wird klarer, warum die gewählte "reziproke" Definition der Miller-Indizes für Ebenen sehr vorteilhaft ist.

Damit haben wir aber die Thematik "Rechnen mit Miller-Indizes" nur gestreift. Sobald man zum Beispiel Röntgenstrukturanalytik betreibt, d.h. aus Röntgenbeugungsmessungen den Kristall rekonstruieren will, wird man heftigst mit Miller-Indizes hantieren.

Fragebogen

Einfache Fragen zu 3.1.2