David
Lars

Blatt 7

1)

a) Ein Bravaisgitter ist dadurch definiert, dass jeder ~~Punkt~~ Gitterpunkt durch eine Linearkombination der Gittervektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ & $\vec{a}_3$ $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ erreichbar ist.
Beim reziproken Gitter ist jeder Punkt ebenfalls durch eine Linearkombination $\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ der reziproken Gittervektoren erreicht werden. Genügt leider nicht als Begründung $\Rightarrow 0$ P.

b) $\vec{b}_1 = \frac{2\pi\, \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$ $\quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi\, \vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$ $\quad b_3 = \frac{2\pi(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$

Ab jetzt ohne Vektorpfeile....

$$b_1 \cdot (b_2 \times b_3) = \frac{8\pi^3}{(a_1(a_2 \times a_3))^3} \cdot (a_2 \times a_3) \cdot ((a_3 \times a_1) \times (a_1 \times a_2))$$

mit: $a \times b \times c = b(ac) - c(ab)$

$$= \frac{8\pi^3}{(a_1(a_2\times a_3))^3} (a_2 \times a_3) \cdot a_1 \big(\underbrace{((a_3 \times a_1) \cdot a_2)}_{a_1((a_2 \times a_3) \cdot a_1)} - a_2 \underbrace{((a_3 \times a_1) a_1)}_{=0}\big) = \frac{8\pi^3}{a_1(a_2 \times a_3)}$$

$$b_1' = \frac{2\pi(b_2 \times b_3)}{b_1(b_2 \times b_3)} \qquad b_2', b_3' \text{ analog}$$

$$b_1' = \frac{(2\pi)^3}{(a_1(a_2 \times a_3))^2} \left(\frac{8\pi^3}{a_1(a_2 \times a_3)}\right)^{-1} (a_3 \times a_1) \times (a_1 \times a_2)$$

$$= \frac{1}{a_1(a_2 \times a_3)} \big(a_1 \underbrace{((a_3 \times a_1) a_2)}_{a_1(a_2 \times a_3)} - a_2 \underbrace{((a_3 \times a_1) a_1)}_{=0}\big)$$

$$= a_1$$

$$b_2' = \frac{(2\pi)^3}{8\pi^3} \frac{a_1(a_2 \times a_3)}{(a_1(a_2 \times a_3))^2} \cdot (a_1 \times a_2)(a_2 \times a_3)$$

$$= \frac{1}{a_1(a_2 \times a_3)} \cdot \big(a_2 \cdot ((a_1 \times a_2) \cdot a_3) - a_3 \underbrace{(a_1 \times a_2) \cdot a_2}_{=0}\big)$$

$$= a_2$$

$$b_3' = \frac{(2\pi)^3}{8\pi^3} \frac{a_1(a_2 \times a_3)}{(a_1(a_2 \times a_3))^2} (a_2 \times a_3) \times (a_3 \times a_1)$$

$$= \frac{1}{a_1(a_2 \times a_3)} \big(a_3((a_2 \times a_3) \cdot a_1) - a_1(a_2 \times a_3) \cdot a_3\big)$$

$$= a_3$$

Das reziproke Gitter eines reziproken Gitters ist wieder das direkte Gitter $\Rightarrow 2$ P

Ok. Hätte man auch anschaulich argumentieren können, aber ~~so~~ was solls

Aufgabe 2)

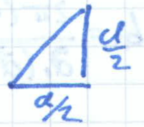
a)

sc) Prim. Vektoren: $\vec{x}_1 = a\vec{e}_x$, $\vec{x}_2 = a\vec{e}_y$, $\vec{x}_3 = a\vec{e}_z$

$\vec{b}_i$? $-1P$ $\quad b_i = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_i$

b) fcc) Prim. Vektoren: $\vec{x}_1 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$; $\vec{x}_2 = \begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}\cdot\frac{a}{2}$; $\vec{x}_3 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$

f $\quad -0.5\cdot$ f



Was sollen so Skizzen bitte nützen?

$$b_1 = 2\pi \frac{\vec{x}_2 \times \vec{x}_3}{\vec{x}_1 \cdot (\vec{x}_2 \times \vec{x}_3)} \qquad b_2 = 2\pi \frac{\vec{x}_3 \times \vec{x}_1}{\vec{x}_1 \cdot (\vec{x}_2 \times \vec{x}_3)} \qquad b_3 = \frac{2\pi\ \vec{x}_1 \times \vec{x}_2}{\vec{x}_1 \cdot (\vec{x}_2 \times \vec{x}_3)}$$

$$\vec{x}_2 \times \vec{x}_3 = \frac{a^2}{4}\begin{pmatrix}-1\\-1\\1\end{pmatrix} \quad \Big| \quad \cancel{a_3}\ \vec{x}_3 \times \vec{x}_1 = \frac{a^2}{4}\begin{pmatrix}-1\\1\\-1\end{pmatrix} \quad \Big| \quad \vec{x}_1 \times \vec{x}_2 = \frac{a^2}{4}\begin{pmatrix}1\\-1\\-1\end{pmatrix}$$

$$\vec{x}_1 \cdot (\vec{x}_2 \times \vec{x}_3) = -\frac{a^3}{4}$$

$$b_1 = 2\pi \frac{a^2}{4} \cdot \begin{pmatrix}-1\\-1\\1\end{pmatrix} \cdot \frac{-4}{a^3} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\1\\-1\end{pmatrix} \quad \Big| \quad b_3 = 2\pi \frac{a^2}{4}\begin{pmatrix}1\\-1\\-1\end{pmatrix} \cdot \frac{-4}{a^3} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix}$$

$$b_2 = 2\pi \frac{a^2}{4}\begin{pmatrix}-1\\1\\-1\end{pmatrix} \cdot \frac{-4}{a^3} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\-1\\1\end{pmatrix} \checkmark$$

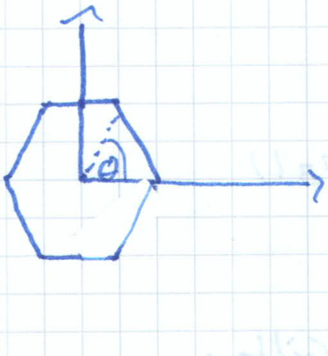
bcc) prim Vektoren: $x_1 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix}$ $\quad \vec{x}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\\1\end{pmatrix}$ $\quad x_3 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\-1\end{pmatrix}$

also: $\frac{a}{2} \rightarrow \frac{2\pi}{a}$ ✓

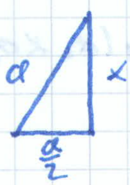
c) da kommt mit den Ergebnissen von (b) wieder ein fcc-Gitter raus, weil ein bcc-Gitter das reziproke Gitter eines fcc-Gitters ist und man somit das reziproke Gitter eines reziproken Gitters berechnet. ✓

⇒ 1,5 P wg. grober Schnitzer

Aufgabe 3)



$$\vec{a}_1 = a\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} \checkmark \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{3}\\0\end{pmatrix} \checkmark \quad a_3 = c\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \checkmark$$



$$a^2 = \frac{1}{4}a^2 + x^2 \Leftrightarrow x^2 = \frac{3}{4}a^2$$
$$\Rightarrow x = \frac{\sqrt{3}}{2}a$$

$$b_1 = \frac{2\pi\, \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \; ; \; b_2 = \frac{2\pi\, \vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \; ; \; b_3 = \frac{2\pi\, \vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{ac}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{3}\\-1\\0\end{pmatrix} \; ; \; \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = ac\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \; ; \; \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{a^2}{2\sqrt{3}}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{a^2 c}{2} \cdot \sqrt{3}.$$

$$\Rightarrow b_1 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}\begin{pmatrix}\sqrt{3}\\-1\\0\end{pmatrix} \checkmark \; ; \; b_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \checkmark \; ; \; b_3 = \frac{2\pi}{c}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \checkmark$$

Also: $a \rightarrow \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$ & $c \rightarrow \frac{2\pi}{c}$

$$|b_1| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \; ; \; |b_2| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \; ; \; \vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 = -\frac{8\pi^2}{3a^2}$$

$$\arccos\left(\frac{\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2}{|\vec{b}_1| \cdot |\vec{b}_2|}\right) = \Theta = \arccos\left(-\frac{1}{2}\right) = 120^\circ \checkmark$$

$$|a_1| = |a_2| = a$$

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = 2\pi = \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2$$

$$\sphericalangle(\vec{a}_1, \vec{b}_1) = \sphericalangle(\vec{a}_2, \vec{b}_2) = \arccos\left(\frac{2\pi}{4\pi} \cdot \sqrt{3}\right)$$

$$= \arccos\left(\frac{1}{2}\sqrt{3}\right) = \Theta = 30^\circ \checkmark$$

$$\sphericalangle(\vec{a}_3, \vec{b}_3) = 0^\circ \checkmark$$

$\Rightarrow$ 3P