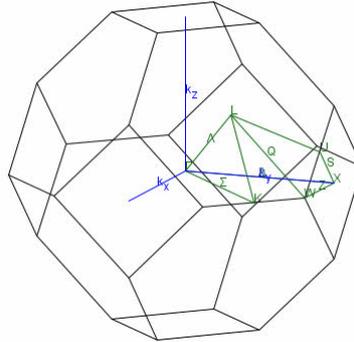


Punkte hoher Symmetrie des fcc-Gitters

Thomas Macher

09.06.2011



Dieses Studentenprojekt, erstellt im Rahmen der Vorlesung “513.001 Molecular and Solid State Physics”, soll eine möglichst anschauliche Herleitung der sogenannten Punkte hoher Symmetrie der ersten Brillouin-Zone des kubisch flächenzentrierten (fcc) Gitters feilbieten. Als wesentliches Werkzeug hierzu diente das [Brillouin zone applet](#). Um die intuitivste aller Fragen - Wozu eigentlich? - gleich vorweg zu beantworten, seien im Folgenden zwei wesentliche Anwendungen angeführt:

1. Beugungsbedingung. Die Brillouin-Konstruktion ergibt alle Wellenvektoren \vec{k} , die vom Kristall reflektiert werden können. Berücksichtigt man, dass der Betrag von $\|\vec{k}\| = k$ gegeben ist durch: $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, so kann man ein Gefühl für den Zusammenhang zwischen Gitterkonstante a des Kristalls (geht in die Entwicklung der Brillouin-Zone mit ein) und möglicher Wellenlänge λ und Einstrahlrichtung \vec{k} des zu brechenden Strahls bekommen.
2. Erstellung und Interpretation von Bandstrukturen. Um die Dispersionsrelation in bestimmten Raumrichtungen zu bestimmen, kann es hilfreich sein, besagte Richtungen und den Betrag des Wellenvektors näher zu kennen.

1 Zusammenfassung

EIN FCC-GITTER MIT GITTERKONSTANTE a IM DIREKTRAUM WIRD AUF EIN BCC-GITTER MIT GITTERKONSTANTE $\frac{4\pi}{a}$ IM K-RAUM ABGEBILDET.

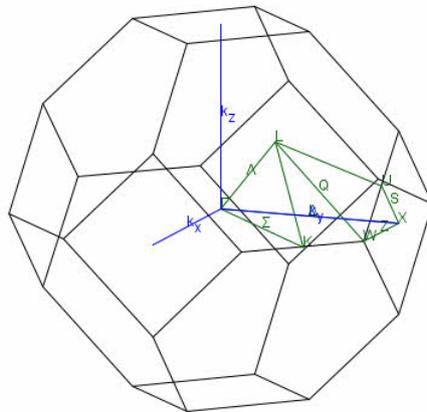


Abbildung 1: Erste Brillouin-Zone des fcc-Gitters. Brillouin zone applet

$$\begin{aligned}
 \vec{a}_1 &= \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \vec{a}_2 &= \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \vec{a}_3 &= \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 \vec{\Gamma L} &= \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} & \|\vec{\Gamma L}\| &= \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{2\pi}{a} & & \approx 0.87 \frac{2\pi}{a} \\
 \vec{\Gamma X} &= \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \|\vec{\Gamma X}\| &= \frac{2\pi}{a} & & = 1.00 \frac{2\pi}{a} \\
 \vec{\Gamma K} &= \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} \\ 0 \end{pmatrix} & \|\vec{\Gamma K}\| &= \frac{3}{2\sqrt{2}} \frac{2\pi}{a} & & \approx 1.06 \frac{2\pi}{a} \\
 \vec{\Gamma U} &= \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ 1 \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} & \|\vec{\Gamma U}\| &= \frac{3}{2\sqrt{2}} \frac{2\pi}{a} & & \approx 1.06 \frac{2\pi}{a} \\
 \vec{\Gamma W} &= \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \|\vec{\Gamma W}\| &= \frac{\sqrt{5}}{2} \frac{2\pi}{a} & & \approx 1.12 \frac{2\pi}{a}
 \end{aligned}$$

2 Einheitszelle und primitive Elementarzelle des fcc-Gitters

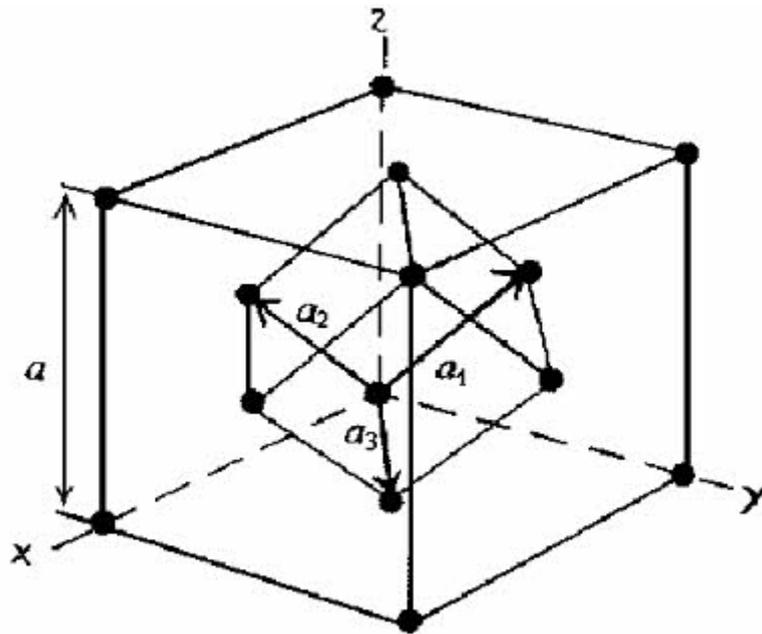


Abbildung 2: Konventionelle Einheitszelle und rhomboedrische primitive Elementarzelle des fcc-Gitters. *Kubisch* flächenzentriert \Rightarrow Gitterkonstante $a = b = c$. Quelle: Kittel.

Die *konventionelle Einheitszelle* des fcc-Gitters wird von einem Würfel mit Gitterpunkten an den Würfeleckenpunkten, sowie Gitterpunkten an den Flächenmittelpunkten gebildet. Das Volumen eines Würfels mit Kantenlänge a beträgt bekanntlich¹ a^3 . Die Einheitszelle beinhaltet 4 Gitterpunkte. Die Gitterpunkte an den Würfel-Ecken werden jeweils von 8 aneinander angrenzenden Würfeln geteilt. Die flächenzentrierten Gitterpunkte werden zwischen je zwei benachbarten Würfeln geteilt. Macht zusammen $8 * \frac{1}{8} + 6 * \frac{1}{2} = 4$.

Die *primitive Elementarzelle* des fcc-Gitters erhält man, indem man ausgehend von einem Würfeleckenpunkt (am frei wählbaren Koordinaten-Ursprung) diesen mit den Gitterpunkten in den Flächenmittelpunkten verbindet. Das von den so gewonnenen primitiven Gittervektoren aufgespannte Rhomboeder heißt primitive Elementarzelle. Die Wahl, welchen der Vektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ man in welche Ebene legt ist natürlich frei - man muss sie nur konsequent beibehalten².

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{y} + \vec{z}) \hat{=} \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{z} + \vec{x}) \hat{=} \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{y}) \hat{=} \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

¹Skeptiker mögen sich des Spatproduktes bedienen.

$$V = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \left[a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \times a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = a^3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = a^3$$

²Hier wird versucht die Wahl in Anlehnung an die LV-Unterlagen zu treffen, um unnötige Verwirrung zu vermeiden.

Das Volumen der primitiven Einheitszelle erhält man über das Spatprodukt³:

$$V_{EZ} = \vec{a}_3 * (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \left[\frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{a^3}{8} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}}_{=2} = \frac{a^3}{4}$$

Der Vergleich beider Volumina zeigt, dass die primitive Elementarzelle genau ein Viertel des Volumens der konventionellen Einheitszelle einnimmt. Die primitive Elementarzelle enthält per Definition / Konstruktion genau einen Gitterpunkt. Die primitiven Gittervektoren schließen untereinander jeweils einen Winkel⁴ von 60° ein.

3 Die reziproken Gittervektoren

Aus der Fourierreihenentwicklung einer Funktion f(r), die die Periodizität ($\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$) des Bravaisgitters besitzt, folgt unmittelbar⁵ $\vec{k} = \vec{G}$ und $e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1$ oder anders ausgedrückt: $\vec{G}\vec{R} = 2\pi n$, mit $n \in \mathbb{N}$. Reziproke Gittervektoren \vec{G} , die diese Bedingung erfüllen, sind:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_{EZ}} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{4}}{\frac{a^3}{4}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \hat{=} \frac{2\pi}{a} (-\vec{x} + \vec{y} + \vec{z}) \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_{EZ}} = \frac{2\pi}{a} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \hat{=} \frac{2\pi}{a} (+\vec{x} - \vec{y} + \vec{z}) \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_{EZ}} = \frac{2\pi}{a} \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \hat{=} \frac{2\pi}{a} (+\vec{x} + \vec{y} - \vec{z}) \end{aligned}$$

Durch den Vergleich mit den primitiven Translationsvektoren anderer Raumgitter erkennt man, dass es sich hierbei um ein kubisch raumzentriertes (bcc) Gitter mit Gitterkonstante $\frac{4\pi}{a}$ handelt.

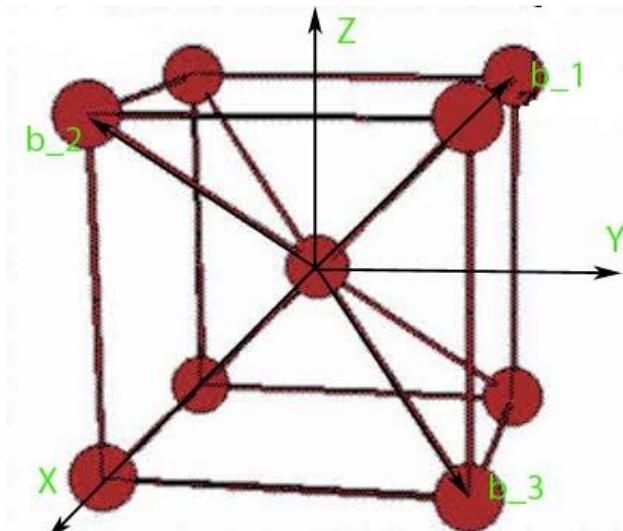


Abbildung 3: Reziprokes Gitter eines fcc-Bravais-Gitters. [Quelle](#)

³Analog könnte man natürlich auch $\vec{a}_1 * (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ wählen. $[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]_i = \epsilon_{ijk} a_{2j} a_{3k}$

⁴ $\cos \alpha = \frac{\vec{a}_1 \vec{a}_2}{|\vec{a}_1| |\vec{a}_2|} = \frac{\frac{a^2}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}}{\frac{a^2}{4} \sqrt{2} \sqrt{2}} = \frac{1}{2}$ und daraus folgt: $\alpha = 60^\circ$

⁵siehe LV oder z.B. "R. GROSS UND A. MARX"

So entsprechen zum Beispiel die Raumdiagonalen des betrachteten Würfels den reziproken Gittervektoren doppelter Länge. Die Konstruktion des reziproken Gittervektors, der z.B. zwei Gitterpunkte entlang in der $[0, 1, 0]$ Richtung verbindet, erhält man gemäß Abbildung 3.

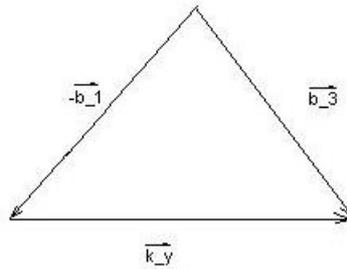


Abbildung 4: Konstruktion der Gitterkonstante des reziproken fcc-Gitters.

$$\vec{k}_y = \vec{b}_1 + \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \left[\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und damit } \|\vec{k}_y\| = \frac{4\pi}{a} . \text{ Dies}$$

entspricht der Gitterkonstanten des reziproken Gitters⁶. Analoges Vorgehen für \vec{k}_x und \vec{k}_z ergibt:

$$\vec{k}_x = (\vec{b}_3 + \vec{b}_2) = \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{k}_y = (\vec{b}_3 + \vec{b}_1) = \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{k}_z = (\vec{b}_1 + \vec{b}_2) = \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

FAZIT: EIN FCC-GITTER MIT GITTERKONSTANTE a IM DIREKTRAUM WIRD AUF EIN BCC-GITTER MIT GITTERKONSTANTE $\frac{4\pi}{a}$ IM K-RAUM ABGEBILDET.

4 Erste Brillouin-Zone

Die Konstruktion der ersten Brillouin-Zone entspricht der Konstruktion der ersten Wigner-Seitz-Zelle im reziproken Gitter. Wie bereits festgestellt, ist das reziproke Gitter des fcc-Gitters ein bcc-Gitter. Ausgehend vom raumzentrierten Gitterpunkt - den man der Einfachheit halber in den (frei wählbaren) Koordinatenursprung legt - werden die Ortsvektoren zu den nächstgelegenen Gitterpunkten eingezeichnet. An den halbierten Ortsvektoren werden Flächen senkrecht darauf aufgespannt und miteinander geschnitten.

⁶Ein Würfel im Ortsraum wird in einen Würfel im k-Raum abgebildet.

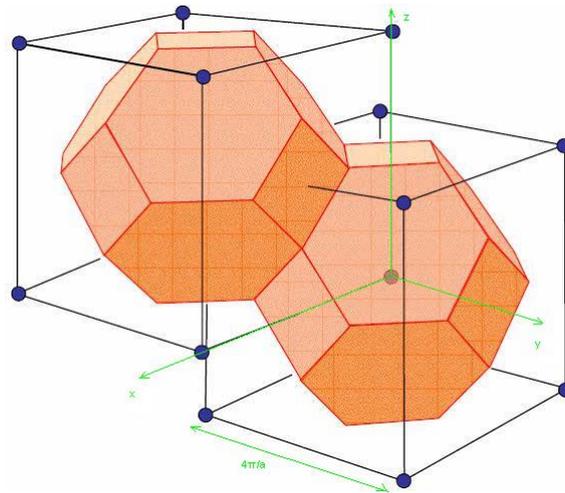


Abbildung 5: Erste Brillouin-Zone des fcc-Gitters bildet ein stumpfes Oktaeder. Quelle: "R. GROSS UND A. MARX"

Die durch $\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \pm 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$ dargestellten Gittervektoren sind Flächennormalen der 8 Sechseckflächen. Die

Flächennormalen auf die 6 Vierecke entsprechen $\frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, sowie $\frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$.

5 Punkte hoher Symmetrie

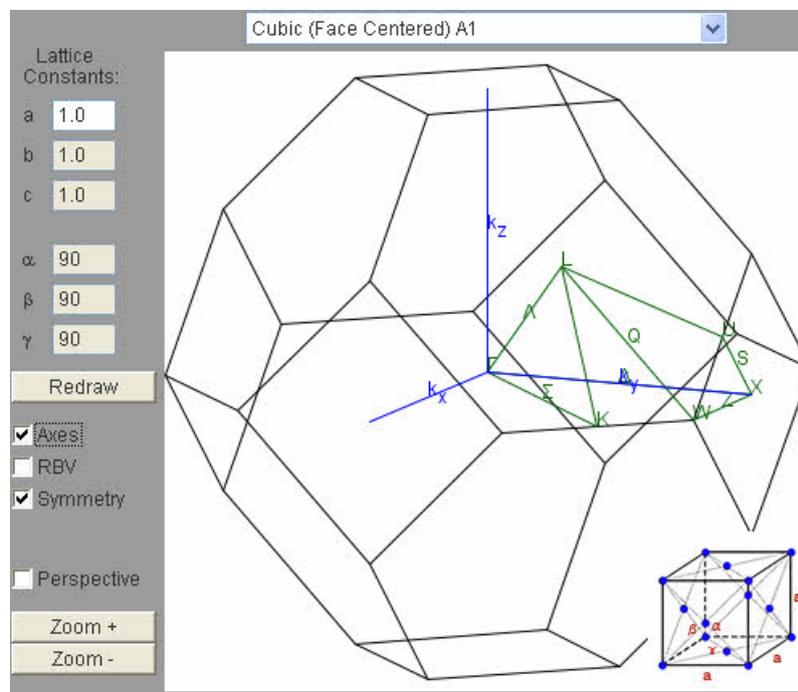


Abbildung 6: Erste Brillouin-Zone des fcc-Gitters mit den Punkten hoher Symmetrie. Quelle: Brillouin zone applet

- Γ ... Koordinatenursprung

- K ... Mittelpunkt der Schnittgeraden zweier Sechseck-Flächen
- U ... Mittelpunkt der Schnittgeraden einer Sechseckfläche mit einer Viereck-Fläche
- W ... Schnittpunkt zweier Sechseck-Flächen mit einer Viereck-Fläche
- X ... Mittelpunkt der Viereck-Flächen, entspricht Koordinatenachsen des Orts- oder Direktraumes
- L ... Mittelpunkt der Sechseck-Fläche

Es gibt natürlich mehrere Strategien, um fragliche Punkte zu benennen. Eine Möglichkeit wäre es, streng der Brillouin-Zonen-Konstruktion zu folgen:

1. Darstellen der Ortsvektoren zu den nächstliegenden Gitterpunkten (in primitiven Translationsvektoren des reziproken Gitters).
2. Halbieren der Länge dieser Vektoren. Die somit erhaltenen Vektoren bezeichnen X und L in den jeweiligen Raumrichtungen.
3. Anschliessendes Aufspannen von Flächen senkrecht zu den zuvor gewonnenen (halbierten) Vektoren.
4. Schneiden dieser Flächen miteinander. Die Mittelpunkte der Schnittgeraden liefern K und U .
5. Schnittpunkt zweier Sechseck-Flächen mit einer Viereck-Fläche ergibt W .

X und L werden nach genau diesem Rezept beschrieben. Die Konstruktion von K , U und W wird etwas anschaulicher dargestellt.

5.1 L

Wie in Kapitel 3 bereits erläutert, handelt es sich beim reziproken Gitter des fcc-Gitters mit Gitterkonstante a um ein bcc-Gitter mit der Gitterkonstanten $\frac{4\pi}{a}$. Der Vektor vom Raumzentrierten Gitterpunkt zu einem der Eckpunkte entspricht also einer halben Raumdiagonale eines Würfels mit Kantenlänge $\frac{4\pi}{a}$. Halbieren selbigen Vektors im Zuge der Brillouin-Zonen-Konstruktion liefert:

$$\vec{\Gamma L} = \frac{1}{4} \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$\|\vec{\Gamma L}\| = \frac{\sqrt{3}\pi}{a} \quad (2)$$

5.2 X

Selbige Überlegung führt zu der Erkenntnis, dass der Ortsvektor von einem Raumzentrierten Gitterpunkt zum nächsten in Richtung der Koordinatenachsen des Direktraum-Gitters verläuft, und genau $\frac{4\pi}{a}$ beträgt.⁷ Halbieren selbigen Vektors im Zuge der Brillouin-Zonen-Konstruktion liefert:

$$\vec{\Gamma X} = \frac{1}{2} \frac{4\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\|\vec{\Gamma X}\| = \frac{2\pi}{a} \quad (4)$$

⁷siehe auch Kapitel 3

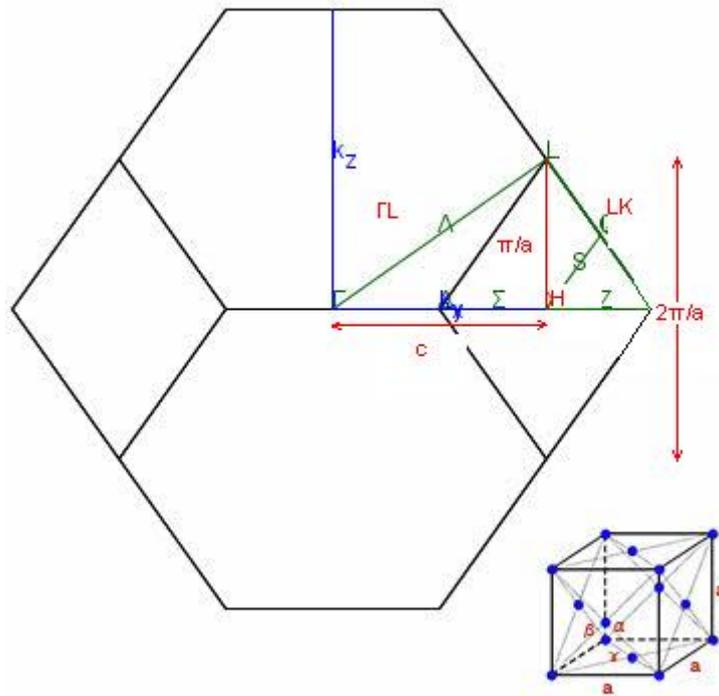


Abbildung 7: Bestimmung von \vec{K} in mit Hilfe der $(1\bar{1}0)$ Ebene der Brillouin-Zone

5.3 K

Für das Auffinden von \vec{K} wird eine geeignete Projektion des stumpfen Oktaeders auf eine Ebene gewählt, derart, dass möglichst viele bekannte Punkte in dieser Ebene liegen⁸. Die Ebene $(1\bar{1}0)$ erweist sich als zweckmäßig. Für den Beweis, dass der Abstand zwischen zwei Sechseck-Mittelpunkten genau $\frac{2\pi}{a}$ beträgt, sei zugunsten des Textflusses auf Kapitel 6 verwiesen. $\|\vec{\Gamma L}\| = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}$ ist bereits bekannt. Somit ergibt sich in dieser Ebene ein rechtwinkliges Dreieck $\Gamma L H$ ⁹ mit den Seitenlängen $\frac{\sqrt{3}\pi}{a}$, $\frac{\pi}{a}$, und c . Pythagoras liefert $c = \sqrt{3\frac{\pi^2}{a^2} - \frac{\pi^2}{a^2}} = \frac{\pi}{a}\sqrt{2}$. Ein Vergleich der beiden ähnlichen Dreiecke $\Gamma L H$ und $L K H$ liefert: $\frac{\|L K\|}{\frac{\pi}{a}} = \frac{\frac{\sqrt{3}\pi}{a}}{\frac{\sqrt{2}\pi}{a}} \Rightarrow \|L K\| = \sqrt{\frac{3}{2}}\frac{\pi}{a}$. Pythagoras angewandt auf das all umschließende Dreieck $\Gamma L K$ liefert $\|\vec{\Gamma K}\| = \frac{\pi}{a}\sqrt{3 + \frac{3}{2}} = \frac{3}{\sqrt{2}}\frac{\pi}{a}$.

Die normierte Richtung von $\vec{\Gamma K}$ lautet, aus einfacher Überlegung: $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Richtung mal Betrag liefert den gesuchten Vektor:

$$\vec{\Gamma K} = \frac{3}{2} \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\|\vec{\Gamma K}\| = \frac{3}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{a} \quad (6)$$

5.4 W

Nun sei das Sechseck in der Ebene (111) betrachtet. Zur Betrachtung wird das Dreieck $L K W$ herangezogen. ($\|L K\|$ ist bereits bekannt.) Der Winkel zwischen $L K$ und $L W$ beträgt gemäß **Allgemeinwissen**

⁸Um zu vermeiden, dass man mit Projektionen eines Vektors auf eine Ebene rechnen muss. Natürlich auch möglich, aber aufwendiger. ;)

⁹H sei ein Hilfspunkt um die Zuordnung zu den Dreiecken zu vereinfachen.

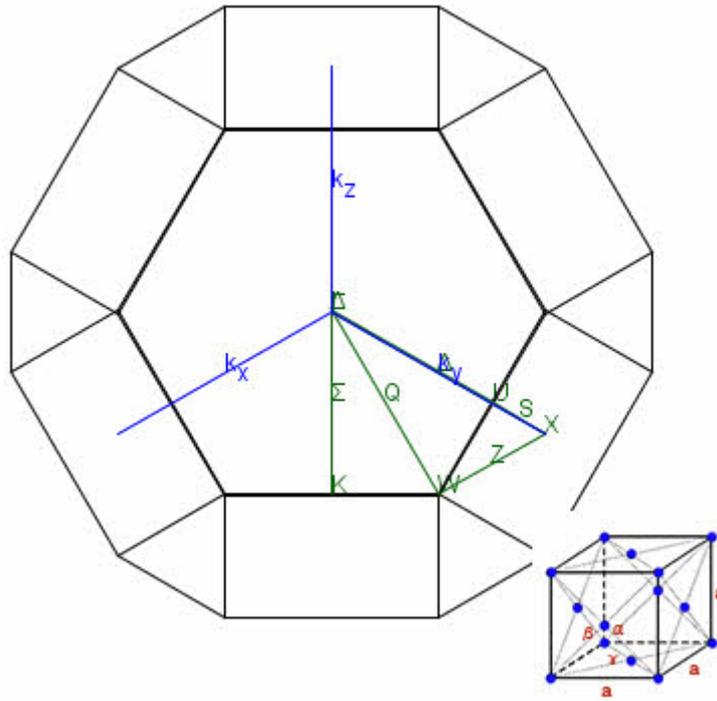


Abbildung 8: Bestimmung von W mit Hilfe des Dreiecks LKW in der Ebene (111).

über Sechsecke 30° .

$$\frac{|KW|}{|LK|} = \tan 30^\circ = \frac{1}{\sqrt{3}} \Rightarrow |KW| = \frac{|LK|}{\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{a}$$

Sei l die Seitenlänge der Sechs und Vierecke, so kann diese nun gemäß $l = 2|KW| = \frac{2}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{a} = \sqrt{2} \frac{\pi}{a}$ angegeben werden.

Die normierte Richtung von \overrightarrow{KW} ergibt sich durch kurze Überlegung zu $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

$$\overrightarrow{KW} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{a} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\|\overrightarrow{KW}\| = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{a} \quad (8)$$

Um nun den gesuchten Vektor $\overrightarrow{\Gamma W}$ zu erhalten, ist $\overrightarrow{\Gamma K}$ mit \overrightarrow{KW} zu addieren.

$$\overrightarrow{\Gamma W} = \overrightarrow{\Gamma K} + \overrightarrow{KW} = \frac{3}{2} \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$\|\overrightarrow{\Gamma W}\| = \sqrt{5} \frac{\pi}{a} \quad (10)$$

5.5 U

Betrachtet wird das stumpfe Oktaeder in der Ebene (010). Zunächst betrachtet man das Offensichtliche.

Die normierte Richtung von \overrightarrow{XU} ergibt sich zu $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Der Betrag entspricht der halben Seitenlänge

l , und somit:

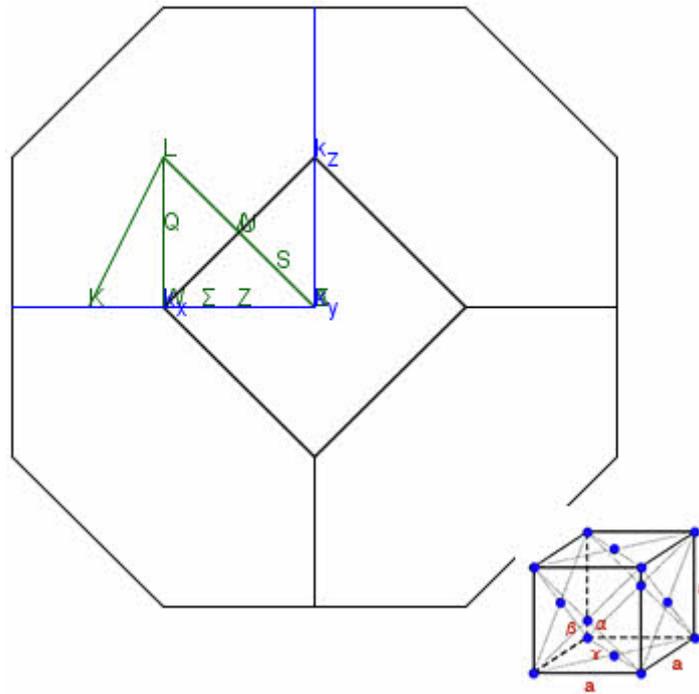


Abbildung 9: Ansicht der Ebene (010) zur Bestimmung von U.

$$\|\overrightarrow{XU}\| = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{a} \quad (11)$$

$$\overrightarrow{XU} = \frac{1}{2} \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (12)$$

Um nun den gesuchten Vektor $\overrightarrow{\Gamma U}$ zu erhalten, ist $\overrightarrow{\Gamma X}$ mit \overrightarrow{XU} zu addieren.

$$\overrightarrow{\Gamma U} = \overrightarrow{\Gamma X} + \overrightarrow{XU} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 2 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$\|\overrightarrow{\Gamma U}\| = \frac{\pi}{a} \sqrt{\frac{1}{4} + 4 + \frac{1}{4}} = \frac{3}{\sqrt{2}} \frac{\pi}{a} \quad (14)$$

6 Anhang

Nun sei noch der Beweis erbracht, dass der Abstand zwischen zwei angrenzenden Sechseck-Flächenmittelpunkten genau $\frac{2\pi}{a}$ beträgt, so wie es in Kapitel 5.3 stillschweigend akzeptiert wurde.

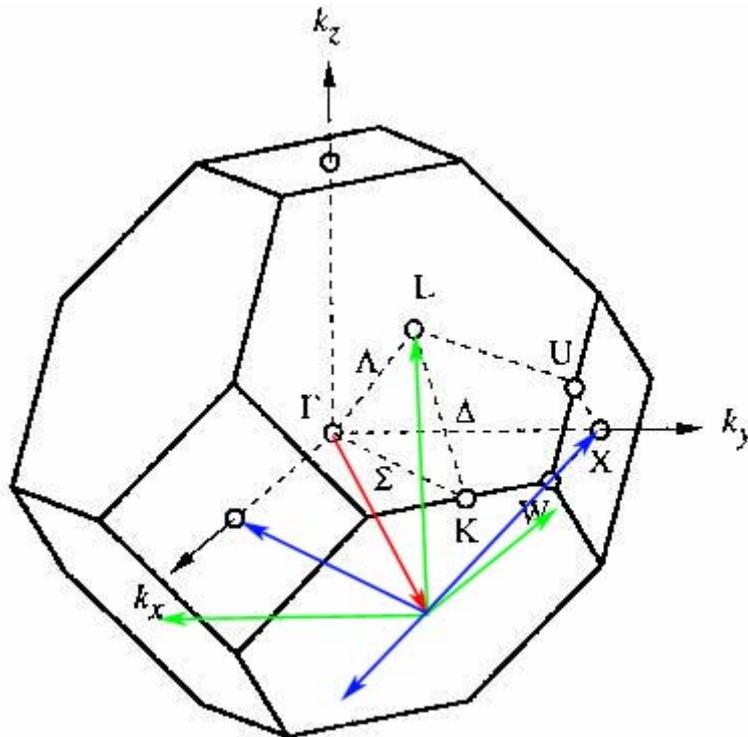


Abbildung 10: Ausgehend von der Flächennormalen $\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ (roter Ortsvektor) sind die Vektoren zu den angrenzenden Sechs und Vierecken zu bestimmen.

Ausgehend von dem durch $\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ (roter Ortsvektor) definierten Flächenmittelpunkt zu den Mittelpunkten der 3 angrenzenden Sechsecke (grün) erhält man:

$$\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ +1 \end{pmatrix} - \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Man kann sich leicht davon überzeugen, dass dies den Flächennormalen der nicht an das durch $\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ definierte Sechseck angrenzenden Vierecke entspricht.

Der Betrag dieser Vektoren ist $\frac{2\pi}{a}$ w.z.b.w.

Der Gauß halber sei noch selbige Überlegung im Bezug auf die angrenzenden Vierecke (blau) geliefert:

$$\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -2 \end{pmatrix} - \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \\ +1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \\ +1 \end{pmatrix}$$

Abermals kann man sich leicht davon überzeugen, dass dies den Flächennormalen, der nicht an das durch $\frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ definierte Sechseck angrenzenden Sechsecke entspricht.