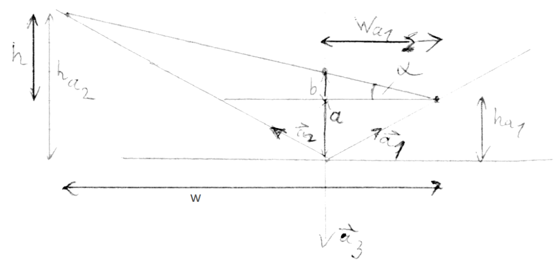
## Aufgabe 2.1

Zu diskutieren ist die Berechnung von $i$, alle weiteren Indizes ergeben sich bekanntermaßen. Auf die Betrachtung des Vektors $\vec{c}$ kann daher verzichtet werden. Das Koordinatensystem wurde so gewählt, dass der Winkel zwischen den Vektoren 120° beträgt.
Für den Fall, dass die Ebene parallel zu $\vec{a}_2$ oder $a_1$ ist, ist die Länge der Achsenabschnitte bei den jeweils anderen Vektoren der Ebene offensichtlich nur durch ein Vorzeichen voneinander verschieden. ($|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3| = 1$)




Es sei daher eine Ebene gegeben, die die Koordinatenachsen entlang $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ bei $a_1$ und $a_2$ schneidet. Ziel ist im folgenden die Berechnung von $-a_3 := a_3'$ aus diesen Achsenschnittpunkten.

$$a_3' = a + b, \quad a = h_{a_1} = \sin 30° a_1, \qquad b = \tan\alpha \cdot w_{a_1}, \quad \tan\alpha = \frac{h}{w} \tag{1}$$

$$w_{a_1} = \frac{\sqrt{3}}{2} a_1, \quad h = h_{a_2} - h_{a_1} = \frac{1}{2}(a_2 - a_1), \quad w = \frac{\sqrt{3}}{2}(a_1 + a_2) \tag{2}$$

$$\Rightarrow a + b = \frac{1}{2}\left[a_1 + a_1 \frac{(a_2 - a_1)}{(a_1 + a_2)}\right] = \frac{1}{2(a_1 + a_2)}\left[a_1^2 + a_1 a_2 + a_1 a_2 - a_1^2\right] = \frac{a_1 a_2}{a_1 + a_2} \tag{3}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{a_3} = -\left(\frac{a_1 + a_2}{a_1 a_2}\right) = -\left(\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2}\right) \quad \Rightarrow \quad i = -(h + k) \tag{4}$$

## Aufgabe 2.3

(a) Wie dargestellt kann man mit der Wood-Notation zwar Drehungen beschreiben, diese beziehen sich jedoch immer auf das gesamte Koordinatensystem, dadurch bleibt der Winkel zwischen den jeweiligen Gittervektoren gleich. Nur in der Matrixschreibweise lassen sich durch die Möglichkeit der Linearkombination beliebige Winkel realisieren.

(b) Wie beschrieben, lässt sich die Wood-Notation anwenden, sofern die Winkel die selben sind. Da die Substratwinkel orthogonal zueinander sind, muss die Orthogonalität der Adsorberwinkel gezeigt werden:

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = m_{11} m_{21} + m_{22} m_{12} = m_{11} m_{21} - m_{11} m_{12} = 0 \quad \checkmark \tag{5}$$

Durch geometrische Überlegungen folgt der Drehwinkel $\alpha$:

$$\tan\alpha = \frac{m_{12}}{m_{11}} \tag{6}$$

(c)
- $\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & n \end{pmatrix}$
- $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$ oder $\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$
- $(\sqrt{2}m \times \sqrt{2}n)$ R45°
- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$R30°
- $(\sqrt{7} \times \sqrt{7})$R19,11°, $\quad \tan\alpha = \frac{\sqrt{3}}{5} \quad \Rightarrow \quad \alpha \approx 19{,}11°$