Physik der Materie II

FSU Jena - SS 2008

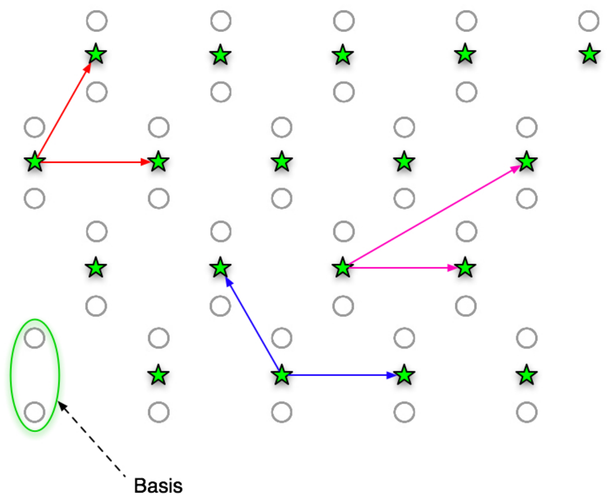
Übungsserie 01 - Lösungen

Stilianos Louca

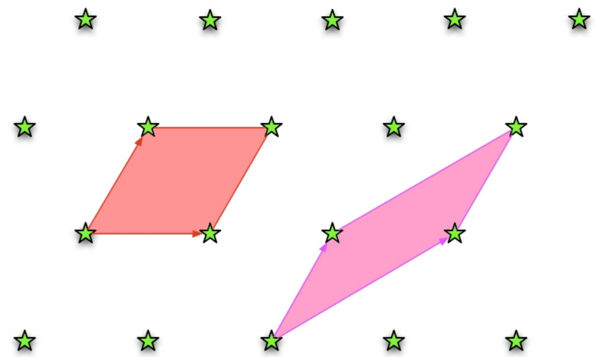
26. April 2008

Aufgabe 01

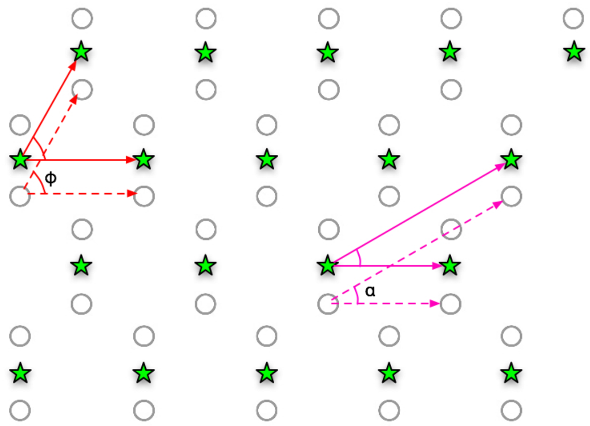
Fassen jeweils zwei, unmittelbar übereinander stehende Teilchen als Basis zusammen und deuten diese als einen neuen separaten Punkt ★. Die Gesamtheit dieser neuen Punkte ergibt das Bravais-Gitter:



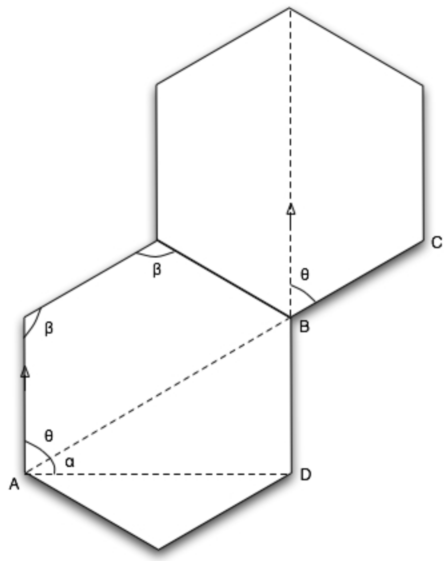
Illustriert sind außerdem 3 verschiedene paare *primitiver Translationsvektoren* (jeweils eine Farbe). Jedes Paar spannt durch ganzzahlige Linearkombinationen das gesamte Raumgitter auf.
Im folgenden werden beispielsweise zwei Elementarzellen illustriert, jeweils aufgespannt durch 2 primitive Translationsvektoren.



Aus der Graphik sind außerdem jeweils die zwischen den Gittervektoren eingeschlossenen Winkel φ bzw. α abzulesen:



Durch geometrische Überlegungen folgt $\varphi = \frac{\pi}{3}$. Betrachten wir nun zwei aneinander grenzende Sechsecke

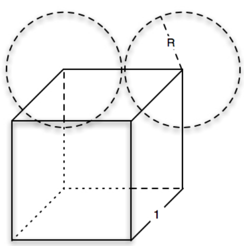


so sieht man sofort dass die Linien AB und BC parallel sind. Somit ist $\hat{\alpha} = \widehat{CAD}$ und ferner

$$2\vartheta + 2\beta = 2\pi \quad \overset{\beta=\frac{2\pi}{3}}{\longrightarrow} \quad \vartheta = \frac{\pi}{3} \quad \overset{\vartheta+\alpha=\frac{\pi}{2}}{\longrightarrow} \quad \alpha = \frac{\pi}{6}$$

Aufgabe 02

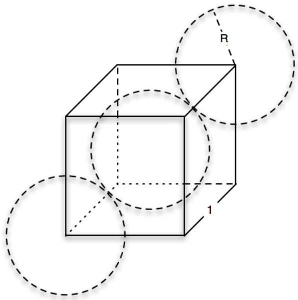
Betrachten zunächst ein kubisch primitives Gitter (Kantenlänge 1) wobei die Basis aus einzelnen, gleich-großen Kugeln mit dem Radius R besteht.



Aus dem Bild ist abzulesen: eine maximale Raumausfüllung wird genau dann erreicht wenn $R = \frac{1}{2}$ ist. Dann ergibt sich der Anteil des durch die Kugeln gefüllten Volumens als

$$\rho_p = 8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{\pi}{6}$$

Betrachten wir nun ein kubisch raumzentriertes Gitter (Kantenlänge 1) mit analoger Basis:



so muss

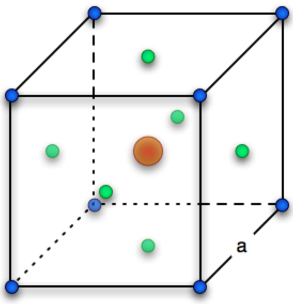
$$R = \min\left\{\frac{\sqrt{3}}{4}, \frac{1}{2}\right\} = \frac{\sqrt{3}}{4}$$

sein. Somit ergibt sich eine maximale durch die Kugeln erbrachte Raumausfüllung von

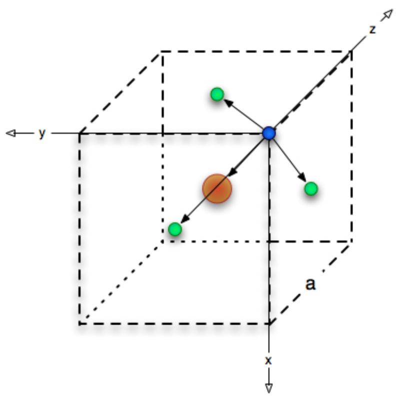
$$\rho_r = \left[8 \cdot \frac{1}{8} + 1\right] \cdot \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} > \rho_p$$

Aufgabe 03

a) Die Struktur von $BaTiO_3$ wird im folgenden Bild illustriert



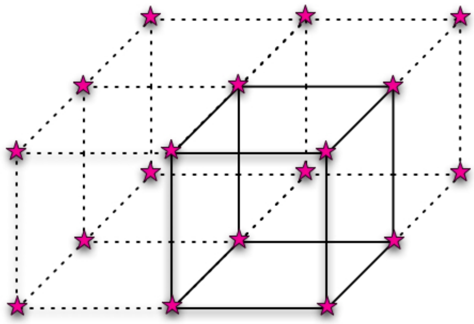
b) Aufgrund der Summenformel von $BaTiO_3$ muss die Basis genau 1 Ba, 1 Ti und 3 O Atome enthalten. Eine mögliche Basis wäre unten illustriert



Setzen wir den Koordinatenursprung in das Ba Atom, so ergeben sich die Vektoren $\vec{r}_b, \vec{r}_t, \vec{r}_{o_1}, \vec{r}_{o_2}, \vec{r}_{o_3}$ jeweils zu dem Ba, dem Ti und den O Atomen als:

$$\vec{r}_b = \vec{0}\ ,\ \vec{r}_t = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\ ,\ \vec{r}_{o_1} = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}\ ,\ \vec{r}_{o_2} = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\ ,\ \vec{r}_{o_3} = \frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

c) Das dazugehörige Bravais Gitter ergibt sich als kubisch primitiv.



d) 3 mögliche primitive Translationen werden unten dargestellt: