

Physik der Materie II

FSU Jena - SS 2008

Übungsserie 02 - Lösungen

Stilianos Louca

29. Mai 2008

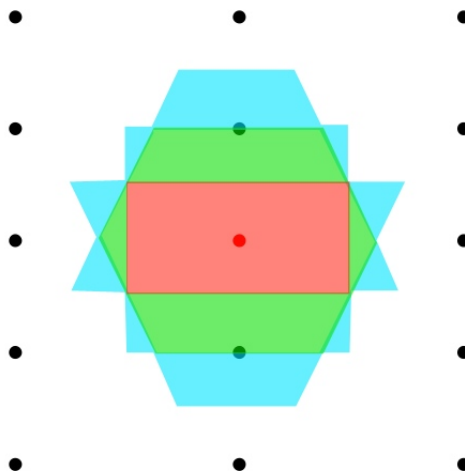
Aufgabe 01

Die Millerschen Indizes hkl sind gegeben durch $(hkl) = \left(\frac{\alpha}{s_x} \frac{\alpha}{s_y} \frac{\alpha}{s_z} \right)$ wobei s_x, s_y, s_z jeweils die Schnittpunkte der Ebene mit den Achsen sind, und α die kleinste positive Zahl ist so dass $h, k, l \in \mathbb{Z}$ sind. Im Falle $s_i = 0$, wird eine Translation des Koordinatenursprungs vorgenommen. Somit ergeben sich die Millerschen Indizes für die eingezeichneten Ebenen wie folgt:

- a) (010)
- b) (001)
- c) $(11\bar{1})$
- d) Translation des Koordinatenursprungs nach links: $(\bar{1}10)$
- e) Translation des Koordinatenursprungs nach oben: $(10\bar{1})$
- f) Translation des Koordinatenursprungs nach unten: $(\bar{1}\bar{1}1)$

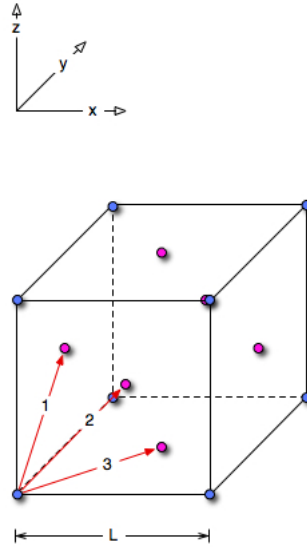
Aufgabe 02

Die n -te Brillouin-Zone um den Gitterpunkt p ist definiert als die Punktmenge die von p durch durchqueren von genau $n - 1$ Bragg-Ebenen erreicht werden kann. Unten werden die 3 ersten Brillouin-Zonen des speziellen Gitters illustriert:



Aufgabe 03

- a) Betrachten ein kubisch flächenzentriertes Gitter, der Kanten-Länge L :



Wählen die in der Abbildung eingezeichneten primitiven Translationen $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ (von einem Eckpunkt zu den benachbarten Flächenpunkten). Diese sind gegeben durch

$$\vec{a}_1 = \frac{L}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = \frac{L}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_3 = \frac{L}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

wobei der Koordinatenursprung im erwähnten Eckpunkt liege. Das Volumen V_e der Elementarzelle ist gegeben durch

$$V_e = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{L^3}{8} \det \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{L^3}{4}$$

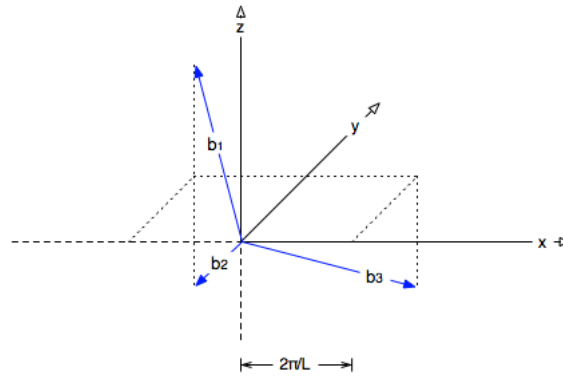
Somit sind die primitiven Translationen des reziproken Gitters gegeben durch

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_e} \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{2\pi}{L} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

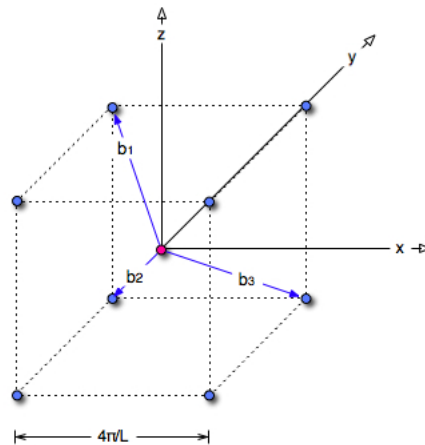
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_e} \cdot \vec{a}_1 \times \vec{a}_3 = \frac{2\pi}{L} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_e} \cdot \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{L} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

- b) Tragen die Vektoren $\vec{b}_i$ im kartesischen System auf



und sehen dass das entstehende reziproke Gitter kubisch Raumzentriert ist



wobei der Koordinatenursprung im Zentrum der Einheitszelle sitzt.

Aufgabe 04

Betrachten das Raumgitter mit den primitiven Translationen $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ und den entsprechenden primitiven Translationen $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ des reziproken Gitters.

Lemma 1: Sind h, k, l die Millerschen Indizes einer Netzebene, so steht $\vec{g} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ senkrecht auf dieser Ebene.

Beweis: Zu den Netzebenen mit diesen Indizes gehört insbesondere auch die Ebene die die Punkte

$$\frac{\vec{a}_1}{h}, \frac{\vec{a}_2}{k}, \frac{\vec{a}_3}{l}$$

enthält. Sie ist gegeben durch

$$\vec{r} = \frac{\vec{a}_1}{h} + s \cdot \underbrace{\left(\frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_1}{h} \right)}_{\vec{v}_1} + t \cdot \underbrace{\left(\frac{\vec{a}_3}{l} - \frac{\vec{a}_1}{h} \right)}_{\vec{v}_2}, \quad s, t \in \mathbb{R}$$

das heißt sie wird aufgespannt durch $\vec{v}_1, \vec{v}_2$. Doch es ist $\vec{g} \perp \vec{v}_1$, denn

$$\vec{g} \cdot \vec{v}_1 = \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 - \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = 2\pi (\delta_{22} - \delta_{11}) = 0$$

Analog ist auch $\vec{g} \perp \vec{v}_2$, so dass allgemein $\vec{g}$ senkrecht zur Ebene steht. $\square$

Lemma 2: Der Abstand der Ebene (hkl) vom Ursprung ist gegeben durch

$$d = \frac{2\pi}{\left| h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \right|}$$

Beweis: Der Abstand d einer gegebenen Ebene vom Ursprung ist gegeben durch

$$d = \vec{r} \cdot \frac{\vec{g}}{|\vec{g}|}$$

wobei $\vec{r}$ ein beliebiger Punkt auf der Ebene und $\vec{g}$ ein senkrecht auf der Ebene stehender Vektor sei. Speziell können wir wählen:

$$\vec{r} := \frac{\vec{a}_1}{h}, \quad \vec{g} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

so dass sich ergibt

$$d = \frac{\vec{a}_1}{h} \cdot \frac{h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3}{\left| h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \right|} = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1}{\left| h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \right|} = \frac{2\pi}{\left| h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \right|} \quad \square$$

Spezialfall ($MgAl_2O_4$): Betrachten ein kubisch primitives Gitter der Gitterkonstante a , das heißt mit den primitiven Translationen

$$\vec{a}_i = a \cdot \vec{e}_i$$

Die reziproken Gittervektoren sind gegeben durch

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi a^2}{V_e} \cdot \vec{e}_2 \times \vec{e}_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot \vec{e}_1, \quad \vec{b}_2 = -\frac{2\pi}{a} \cdot \vec{e}_2, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot \vec{e}_3$$

so dass sich der Abstand der (212) Ebene vom Ursprung ergibt als

$$d = \frac{2\pi}{\left| 2\vec{b}_1 + \vec{b}_2 + 2\vec{b}_3 \right|} = \frac{a}{3}$$