Struktur der Materie SS12 Übungsserie 2

Robert Müller

21. Oktober 2012

2.1 Die Kosinusdefinition des Skalarprodukts lautet:

$$\frac{\vec{a_1}\vec{a_2}}{|a_1||a_2|} = \frac{\frac{a^2}{4}\cdot(-1)}{3\frac{a^2}{4}} = -\frac{1}{3} = \cos\gamma$$

Der Winkel lautet also: $\gamma = arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = \underline{109,47}$

2.2 Die Ebene mit dem Index $(100)_{xyz}$ schneidet die Primitiven Achsen in $2\vec{a_1}$, $\vec{a_2}$ im Unendlichen und in $2\vec{a_3}$.
Hieraus folgt für die Kehrwerte: $\left(\frac{1}{2}0\frac{1}{2}\right)$
Also lautet der Millersche Index: $\underline{(100)_{xyz} = (101)_{a_1a_2a_3}}$
Die Ebene mit dem Index $(001)_{xyz}$ schneidet die $\vec{a_i}$ in $(\infty 22) \Rightarrow (022)$.
Somit erhalten wir: $\underline{(001)_{xyz} = (011)_{a_1a_2a_3}}$

2.3 Der Abstand der Atome im gleichseitigen Teildreieck der hexagonalen Grundstruktur beträgt a. Der Abstand der Atome vom Mittelpunkt des Dreiecks beträgt nach Pythagoras:

$$r^2 = \frac{4}{9}a^2 - \frac{1}{9}a^2 = \frac{1}{3}a^2 \Rightarrow r = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

Die Atome der B-Lage, deren Projektion genau über den Dreiecksmittelpunkten liegt, haben den Abstand $\frac{c}{2}$ vom Dreiecksmittelpunkt der A-Lage. Der Abstand aller Atome untereinander beträgt a, also folgt wiederum mit Pythagoras:

$$\begin{aligned}
a^2 &= \frac{c^2}{4} + r^2 \\
a^2 &= \frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4} \\
1 &= \frac{1}{3} + \frac{1}{4}\frac{c^2}{a^2} \\
\Rightarrow \frac{c^2}{a^2} &= \frac{8}{3} \\
\Rightarrow \frac{c}{a} &= \sqrt{\frac{8}{3}}
\end{aligned}$$

2.4 a) Entlang der Würfelkanten sind die Atome am dichtesten gepackt, die Kantenlänge des Würfels beträgt also $a = 2r$.

$\Rightarrow$ Volumen des Würfels: $\underline{V_E = a^3 = 8r^3}$
Die Einheitszelle enthält wiederum 8 Atome zu je einem Achtel, also:
$\underline{V_A = \frac{4}{3}\pi r^3}$
$\Rightarrow$ Packungsdichte: $\varrho = \frac{V_A}{V_E} = \underline{\frac{\pi}{6}}$

b) Die dichteste Packung ist in diesem Fall entlang der Raumdiagonalen. Die Länge der Raumdiagonalen ist also $4r$. Somit gilt: $\underline{a = \frac{4}{\sqrt{3}}r}$
Da die Einheitszelle zwei Atome enthält gilt:

$$\begin{aligned}
V_E &= a^3 = \frac{64}{3\sqrt{3}r^3} \\
V_A &= \frac{8}{3}\pi r^3 \\
\Rightarrow \varrho &= \underline{\frac{\sqrt{3}\pi}{8}}
\end{aligned}$$

c) Die dichteste Packung ist entlang der Flächendiagonalen. Es ist also die Länge dieser Diagonalen $4r$. Somit folgt bei 4 Atomen in der EZ:

$$\begin{aligned}
2a^2 &= 16r^2 \\
a &= \sqrt{8}r \\
V_E &= 8\sqrt{8}r^3 \\
V_A &= \frac{16}{3}\pi r^3 \\
\Rightarrow \varrho &= \underline{\frac{\pi}{3\sqrt{2}}}
\end{aligned}$$

d) Die Einheitszelle ist ein Prisma mit einer Raute als Grundfläche, deren Kantenlänge dem doppelten Atomradius entspricht: $2r = a$
Die Höhe ergibt sich aus 2.3, also erhalten wir bei 2 Atomen in der EZ:

$$\begin{aligned}
c &= \sqrt{\frac{8}{3}}a = 2\sqrt{\frac{8}{3}}r \\
V_E &= \frac{a^2}{3}\sqrt{3}c = 16\sqrt{2}r^3 \\
V_A &= \frac{8}{3}\pi r^3 \\
\Rightarrow \varrho &= \underline{\frac{\pi}{6\sqrt{2}}}
\end{aligned}$$

e) Der dichteste Abstand zwischen zwei Atomen beträgt $\frac{1}{8}$ der Raumdiagonalen der EZ, welche ansonsten der fcc-Struktur entspricht, allerdings enthält die EZ von Diamant 8 Atome:

$$
\begin{aligned}
8r &= \sqrt{a} \\
a &= \frac{8}{\sqrt{3}} r \\
V_E &= \frac{512}{3\sqrt{3}} r^3 \\
V_A &= \frac{32}{3} \pi r^3 \\
\Rightarrow \varrho &= \underline{\frac{\sqrt{3}\pi}{16}}
\end{aligned}
$$