

Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

1 Die Struktur des Kristalls

1.1 Tetraederwinkel

Die Winkel zwischen den tetraedrischen Bindungen der Diamantstruktur sind dieselben wie die Winkel zwischen den Raumdiagonalen aneinandergrenzender Würfel. Bestimmen Sie mit Hilfe der elementaren Vektorrechnung die Größe dieses Winkels.

1.2 Die Millerschen Indizes

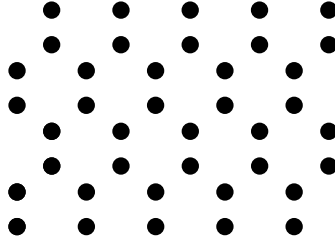
Man betrachte die Ebenen mit den Millerschen Indizes (100) und (001); das Gitter habe fcc-Struktur, und die Indizes beziehen sich auf die übliche kubische Zelle. Dabei sind die Translationen gerade die Kanten $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$ und $\hat{\mathbf{z}}$ des Würfels mit Länge a . Wie lauten die Indizes dieser Ebenen, wenn sie sich auf die primitiven Achsen beziehen? (Die primitive Zelle ist ein Rhomboeder gebildet durch $\hat{\mathbf{a}} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}})$, $\hat{\mathbf{b}} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$, und $\hat{\mathbf{c}} = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{z}} + \hat{\mathbf{x}})$.)

1.3 hcp–Struktur

Zeigen Sie, dass das Verhältnis c/a für eine hexagonal dichtgepackte Kristallstruktur gleich $\sqrt{8/3} \approx 1.633 \dots$ ist. Wenn c/a deutlich größer ist als dieser Wert, so kann man sich die Kristallstruktur aus unsauber gestapelten Ebenen von dichtgepackten Atomen aufgebaut denken.

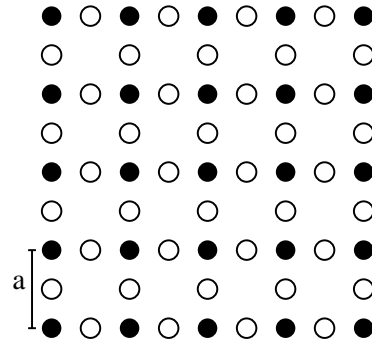
1.4 Bravais–Gitter (1)

Finden Sie für das abgebildete Honigwabengitter eine geeignete Basis und zeichnen Sie ein Bravais–Gitter ein.

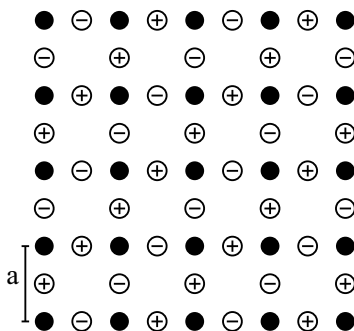


1.5 Kupfer–Sauerstoff–Ebenen

(a) Alle Hochtemperatur-Supraleiter besitzen in ihrer Kristallstruktur als zentrale Bausteine Kupfer-Sauerstoff-Ebenen. Die schwarzen Atome in der Zeichnung sind die Kupferatome, während die weißen die Sauerstoffatome darstellen. Der Gitterabstand der Kupferatome sei a . Der Einfachheit halber betrachten wir das Problem nur im zweidimensionalen Fall. Welche Rotationssymmetrie liegt vor? Skizzieren Sie das Bravais-Gitter, geben Sie ein Paar primitiver Gittervektoren an und finden Sie die Einheitszelle samt Basis.



(b) In La_2CuO_4 sind die Kupfer-Sauerstoff-Ebenen nicht wirklich eben. Die Sauerstoffatome sind ein bisschen aus der Ebene nach oben (+) oder nach unten (−) versetzt. Geben Sie wie in (a) die Rotationssymmetrie, die primitive Zelle und das Bravais-Gitter an. Kann man die Gitterkonstante a beibehalten?



Zusatzaufgabe: Bravais–Gitter (2)

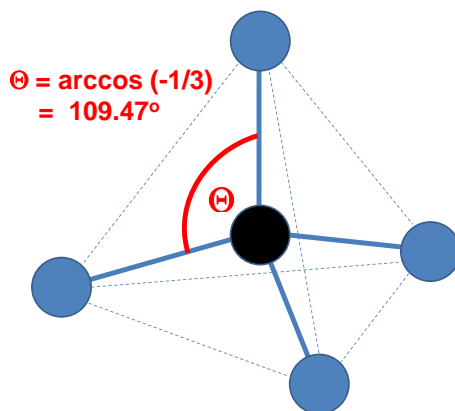
Geben Sie die fünf möglichen zweidimensionalen Bravais–Gitter an!

Lösungen der Übungsaufgaben zur

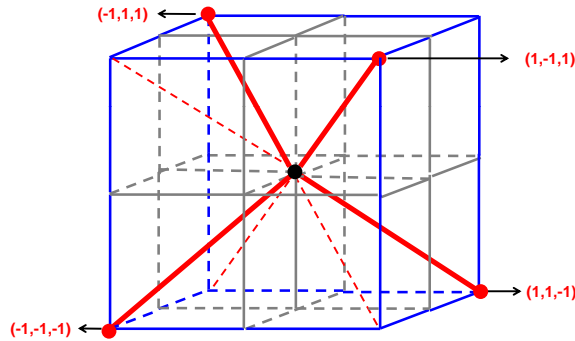
Festkörperphysik I, WS 2010/2011

1 Die Struktur des Kristalls

1.1 Tetraederwinkel



Der Tetraederwinkel θ ist definiert als der Winkel zwischen den Verbindungsstrecken zwischen dem Tetraedermittelpunkt und je zwei Ecken, wie es in der Figur für das Methan-Molekül dargestellt ist. Zur Bestimmung des Tetraederwinkels kann man die Tatsache benutzen, dass das Tetraeder aus den Hälften der vier möglichen Raumdiagonalen eines Würfels konstruiert werden kann. Um einen geeigneten Koordinatenursprung zu bekommen benutzen wir die unten abgebildete Konstruktion aus 8 Würfeln,



in denen die vier Tetraederkeulen durch die Vektoren $\mathbf{a}_1 = \{-1, 1, 1\}$, $\mathbf{a}_2 = \{1, -1, 1\}$, $\mathbf{a}_3 = \{1, 1, -1\}$ und $\mathbf{a}_4 = \{-1, -1, -1\}$ beschrieben werden. Der Winkel zwischen je zwei der Vektoren \mathbf{a}_i und \mathbf{a}_j ($i \neq j$) lässt sich dann wie folgt aus dem Skalarprodukt von \mathbf{a}_i und \mathbf{a}_j berechnen:

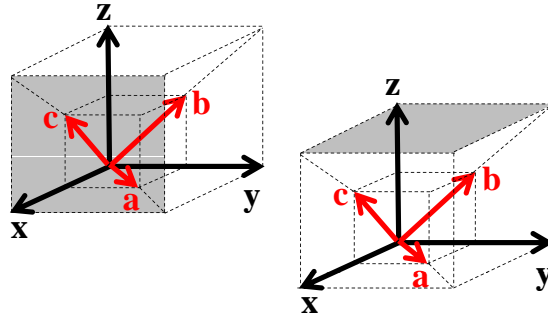
$$\begin{aligned}\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j &= \|\mathbf{a}_i\| \|\mathbf{a}_j\| \cos \theta \\ \cos \theta &= \frac{\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j}{\|\mathbf{a}_i\| \|\mathbf{a}_j\|} \\ \theta &= \arccos \frac{\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j}{\|\mathbf{a}_i\| \|\mathbf{a}_j\|}\end{aligned}$$

Man findet:

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j &= -1 \quad \forall i, j \\ \|\mathbf{a}_i\| &= \|\mathbf{a}_j\| = \sqrt{3} \\ \cos \theta &= \frac{\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j}{\|\mathbf{a}_i\| \|\mathbf{a}_j\|} = -\frac{1}{3} \\ \theta &= \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109.47122 \dots^\circ\end{aligned}$$

man beachte, dass die Würfel diagonalen, welche zum Tetraeder beitragen, ausschliesslich zu Würfeln gehören, die nur eine gemeinsame Kante, jedoch keine gemeinsame Fläche aufweisen. Nur so ist gewährleistet, dass man das negative Vorzeichen beibehält, und der Tetraederwinkel ein stumpfer Winkel ist.

1.2 Die Millerschen Indizes

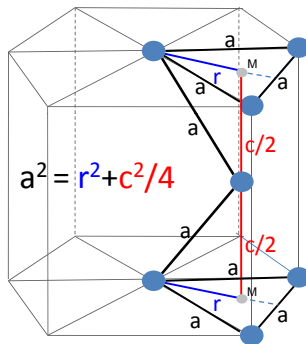


a) Die $(100)_{xyz}$ -Ebene schneidet die primitive Achse **a** im Punkt (200) (vgl. obige Abbildung). Sie liegt parallel zu **b** (das bedeutet Schnitt im Unendlichen) und schneidet **c** im Punkt (002). gemäß ihrer Definition erhält man die Millerschen Indizes in der von **a**, **b** und **c** aufgespannten Basis, indem man die Kehrwerte des Zahlentripels $(2\infty 2) \rightarrow (\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ bildet und dann die drei kleinsten ganzen Zahlen sucht, die zueinander im selben Verhältnis stehen. Man erhält demnach $(101)_{abc}$ als neue Millersche Indizes.

b) Analog verfährt man im Fall der $(001)_{xyz}$ -Ebene: sie verläuft parallel zu **a**, Schnittpunkte mit **b** und **c** sind $(0, 2, 0)$ und $(0, 0, 2)$ was zu dem Zahlentripeln $(\infty 22) \rightarrow (\infty \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ und somit zu den Millerschen Indizes $(011)_{abc}$ führt.

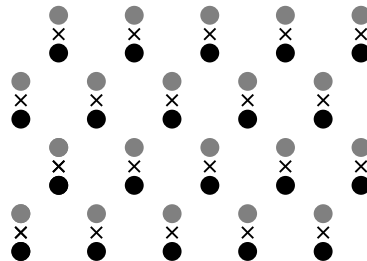
1.3 hcp-Struktur

Die Grundfläche der primitive Zelle der hcp-Struktur ist hexagonal und somit aufgebaut aus gleichseitigen Dreiecken der Seitenlänge a (vgl. Abbildung). Die Atome der zweiten Lage liegen genau über dem Mittelpunkt dieser Dreiecke, und zwar um die Länge $c/2$ in der \hat{c} -Richtung verschoben. Der Mittelpunkt M der gleichseitigen Dreiecke liegt im Abstand $r = 2h/3 = a/\sqrt{3}$ (h =Höhe der gleichseitigen Dreiecke) von den Atomen der Grundfläche entfernt. Da der Abstand zu allen nächsten Nachbarn a beträgt, kann man zur Bestimmung von c den Satz von Pythagoras benutzen: $a^2 = r^2 + c^2/4$. Daraus ergibt sich das Verhältnis $c/a = \sqrt{8/3}$.



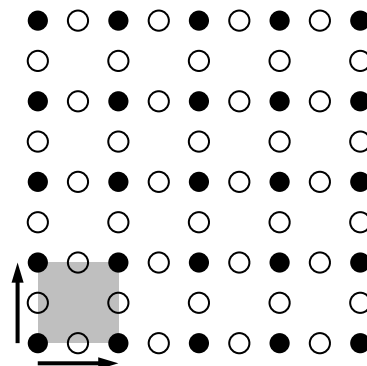
1.4 Bravais-Gitter (1)

Eine Basis besteht aus einem schwarzen und einem grauen Atom. Ein mögliches Bravaisgitter ist durch die Kreuze gekennzeichnet. Man beachte, daß nicht jede symmetrische Anordnung von Punkten auch ein Bravaisgitter ist!

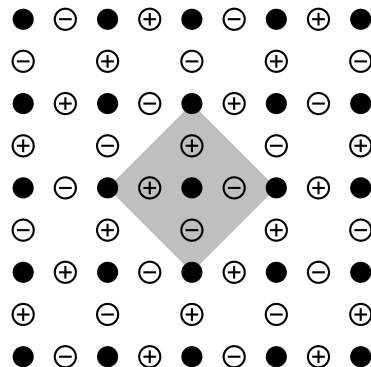


1.5 Kupfer-Sauerstoff-Ebenen

(a) Die Einheitszelle liegt in den Quadranten und die Basis besteht aus einem Kupferatom mit zwei Sauerstoffatomen. Als primitive Gittervektoren nehme man die Seiten der Einheitszelle. Die Rotationssymmetrie ist vierzählig.



(b) Man entnehme die Lösung der Zeichnung. Der neue Gitterabstand beträgt nun $\sqrt{2}a$. Die primitive Zelle enthält vier Sauerstoffatome. Die Rotationssymmetrie ist jetzt nur noch zweizählig.



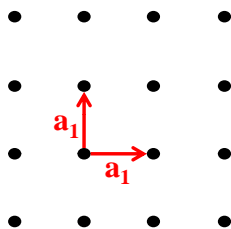
Zusatzaufgabe: Bravais-Gitter (2)

Die allgemeine Darstellung der Gitter-Translation lautet

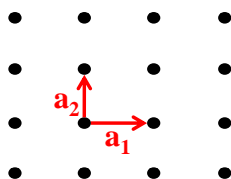
$$\begin{aligned} \mathbf{t}_n &= n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad ; \quad n_1, n_2 \in \mathbf{Z} \\ \cos \varphi &= \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2}{||\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2||} \end{aligned}$$

Damit können wir in zwei Dimensionen die folgenden fünf Fälle unterscheiden:

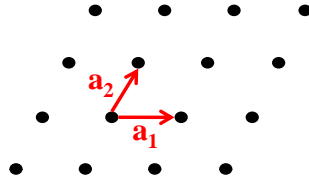
1. $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$; $\varphi = \frac{\pi}{2} \rightarrow$ quadratisch, Einheitszelle: *Quadrat*



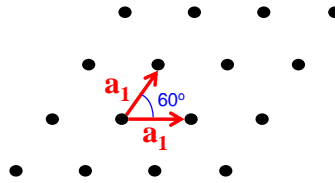
2. $|\mathbf{a}_1| \neq |\mathbf{a}_2|$; $\varphi = \frac{\pi}{2} \rightarrow$ rechteckig, Einheitszelle: *Rechteck*



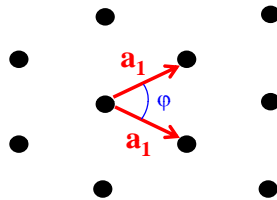
3. $|\mathbf{a}_1| \neq |\mathbf{a}_2|$; $\varphi \neq \frac{\pi}{2} \rightarrow$ schiefwinklig, Einheitszelle: *Parallelogramm*



4. $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$; $\varphi = \frac{\pi}{3} \rightarrow$ hexagonal, Einheitszelle: *Raute* (60°)



5. $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$; $\varphi \neq \frac{\pi}{2}, \neq \frac{\pi}{3} \rightarrow$ trigonal,



oder $|\mathbf{a}_1| \neq |\mathbf{a}_2|$; $\varphi = \frac{\pi}{2}, \rightarrow$ rechtwinklig zentriert

