

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I WS 2018/2019

1 Kristallstruktur

Allgemeine Fragen

- (a) Wie lautet die Definition eines Kristalls? Was versteht man unter Gitter und Basis?
- (b) Wie ist das Bravais-Gitter definiert? Die dreidimensionale Bravais-Gitter werden anhand ihrer Punktgruppe sieben Kristallsystemen zugeordnet. Geben Sie die Kristallsysteme und die zugehörigen Bravais-Gitter an.
- (c) Diskutieren Sie den Unterschied zwischen einer primitiven und konventionellen Gitterzelle. Wie wird die primitive Gitterzelle konstruiert?
- (d) Wie ist die Koordinationszahl definiert?

1.1 Bravais-Gitter

- (a) Finden Sie für das in Abb. 1 abgebildete Honigwabengitter eine geeignete Basis und zeichnen Sie das Bravais-Gitter. Welche Symmetrie besitzt das Bravais-Gitter?

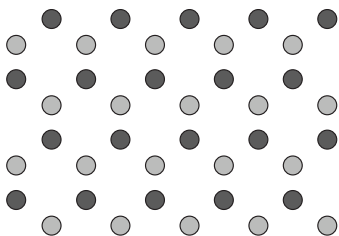


Abbildung 1: Zweidimensionales Honigwabengitter.

- (b) Geben Sie die fünf möglichen zweidimensionalen Bravais-Gitter an!

1.2 Kupfer-Sauerstoff-Ebenen

Alle Kupferoxid-basierten Hochtemperatur-Supraleiter besitzen in ihrer Kristallstruktur als zentrale Bausteine Kupfer-Sauerstoff-Ebenen. Der Gitterabstand der Kupferatome sei a .

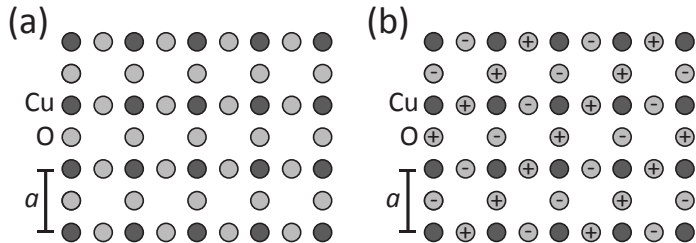


Abbildung 2: Kupfer-Sauerstoff-Ebene. Die dunklen Atome sind die Kupferatome, während die hellen die Sauerstoffatome darstellen. Rechts sind die Sauerstoffatome ein bisschen aus der Ebene nach oben (+) oder nach unten (−) versetzt.

- (a) Wir betrachten das Problem zunächst in zwei Dimensionen (Abb. 2, linkes Bild). Welche Rotationssymmetrie liegt vor? Skizzieren Sie das Bravais-Gitter, geben Sie eine geeignete Basis und ein Paar primitiver Gittervektoren an und bestimmen Sie die Einheitszelle.
- (b) In La_2CuO_4 sind die Kupfer-Sauerstoff-Ebenen nicht wirklich eben (Abb. 2, rechtes Bild). 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?

1.3 Die sc-, bcc-, fcc- und hcp-Struktur

- (a) In einer einfach kubischen (sc: simple cubic) Kristallstruktur sitzen lediglich an den Ecken eines Würfels Atome. Die Berührungspunkte der Atome liegen deshalb entlang der Würfelkanten und die Gitterkonstante a beträgt $2r$, wobei r der Radius der Atome (Ionen) ist. Berechnen Sie den Volumenanteil, den die Atome in der Elementarzelle der sc-Kristallstruktur einnehmen. Diskutieren Sie in diesem Zusammenhang die Anzahl der Atome der Einheitszelle und benennen Sie die Koordinationszahl.
- (b) Wie ändert sich der Volumenanteil beim Übergang von einem sc zu einem kubisch raumzentrierten (bcc: body-centered cubic) Gitter? Welche der beiden Kristallstrukturen nutzt den Raum besser aus? Diskutieren Sie die Anzahl der Atome sowie die Koordinationszahl der primitiven und konventionellen Einheitszelle der bcc-Struktur.
- Die gemessenen Werte für die Dichte und Gitterkonstante von Eisen betragen $\rho_{\text{Fe}} = 7.86 \text{ g/cm}^3$ und $a_{\text{Fe}} = 2.87 \times 10^{-10} \text{ m}$. Können Sie aus diesen Messwerten darauf schließen, ob die Kristallstruktur einfach kubisch oder kubisch raumzentriert ist? Die Masse eines Eisenatoms beträgt $m_{\text{Fe}} = 9.28 \times 10^{-26} \text{ kg}$.
- (c) α -Co hat eine hcp-Struktur (hcp: hexagonal closed packed) mit den Gitterkonstanten $a = 2.51 \text{ \AA}$ und $c = 4.07 \text{ \AA}$. β -Co hat dagegen eine fcc-Struktur (fcc: face centered cubic) mit der kubischen Gitterkonstante von 3.55 \AA . Wie groß ist der Dichteunterschied der beiden Erscheinungsformen?
- (d) Natrium zeigt eine Phasenumwandlung von einer bcc- zu einer hcp-Struktur bei $T = 23 \text{ K}$. Berechnen Sie die hcp-Gitterkonstante unter der Annahme, dass bei der Phasenumwandlung die Dichte gleich bleibt, das c/a Verhältnis der hcp-Struktur ideal ist und die kubische Gitterkonstante $a' = 4.23 \text{ \AA}$ beträgt.