

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I
WS 2016/2017**1 Kristallstruktur****1.6 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 einfach kubischen (sc-Struktur) 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 einfach kubischen (sc-Struktur) 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 (sc) oder kubisch raumzentriert (bcc) 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.

1.7 Das Diamantgitter

Das Bravais-Gitter von Diamant ist kubisch flächenzentriert. Die Basis besteht aus zwei Kohlenstoffatomen bei den Atompositionen $(0, 0, 0)$ und $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$.

- Geben Sie einen Satz primitiver Translationsvektoren an.
- Wie viele Atome befinden sich in der konventionellen kubischen Einheitszelle ?
- Wie groß ist die Koordinationszahl ?

1.8 Zweidimensionales Gitter

Abbildung 1(a) zeigt ein zweidimensionales Gitter eines Ionenkristalls, das aus zwei Atomen A und B mit negativer bzw. positiver Ladung aufgebaut ist.

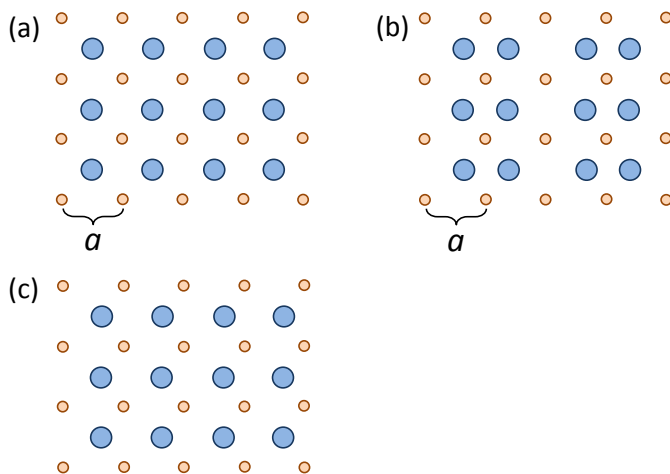


Abbildung 1: Fiktiver 2D-Ionenkristall. Die kleinen roten A-Atome seien negativ, die großen blauen B-Atome positiv geladen. (a) Das Gitter sei quadratisch und die großen B-Atome seien zentriert zwischen den A-Atomen. (b) Die B-Atome seien spiegelsymmetrisch um $\pm \delta a$ aus dem Zentrum verschoben. (c) Alle B-Atome seien in Phase um δa aus dem Zentrum verschoben.

- Geben Sie eine Basis für die Atome der Elementarzelle an.
- Welches Punktgitter beschreibt die Translationssymmetrie des abgebildeten Kristalls vollständig? Geben sie primitive Gittervektoren an.
- Der Kristall mache eine Gitterphasenumwandlung. Dabei werden die B-Atome im Zentrum benachbarter Einheitszellen spiegelsymmetrisch längs der horizontalen Achse um $\pm \delta a$ gegeneinander verschoben wie in Abb. 1(b) gezeigt. Geben Sie die neuen primitiven Basis- und die Gittervektoren an. Welche Translationssymmetrie hat das Gitter nun?
- Beschreiben Sie, wie man die Wigner-Seitz-Zelle erhält, und skizzieren Sie diese für das Gitter vor und nach der Verzerrung.
- Zeichnen Sie das reziproke Gitter und die ersten zwei Brillouin-Zonen für das Gitter vor und nach der Verzerrung.
- Wir nehmen nun an, dass die B-Atome in Phase (in jeder der ursprünglichen Zellen gleich) um δa verschoben werden [Abbildung 1(c)]. Wie ändert sich die Translationssymmetrie gegenüber (a)?
- Welche der beiden Verzerrungen (b) und (c) koppelt an ein externes elektrisches Feld?