

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I WS 2018/2019

1 Kristallstruktur

Allgemeine Fragen

- (a) Geben Sie die Rechenvorschrift für die Indizierung von Richtungen und Ebenen in Kristallen an.
- (b) Wie ist das reziproke Gitter definiert? Wie lautet der Zusammenhang zwischen den reziproken Gittervektoren und den primitiven Vektoren des direkten Gitters eines drei- und zwei-dimensionalen Gitters?
- (c) Was ist die erste Brillouin-Zone? Wie ist sie definiert?

1.4 Das Diamantgitter

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

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

1.5 Die Millerschen Indizes

Wir betrachten die Ebenen mit den Millerschen Indizes (100) und (001) in einem Gitter mit kubisch flächenzentrierter (fcc)-Struktur. Die Indizes beziehen sich auf die konventionelle kubische Zelle. Dabei sind die Translationen gerade die Kanten \hat{x} , \hat{y} und \hat{z} des Würfels mit Länge a . Wie lauten die Indizes dieser Ebenen, wenn sie sich auf die primitiven Achsen beziehen? (Hinweis: Die primitive Zelle ist ein Rhomboeder gebildet durch $\hat{a} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$, $\hat{b} = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$, und $\hat{c} = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})$.)

1.6 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.

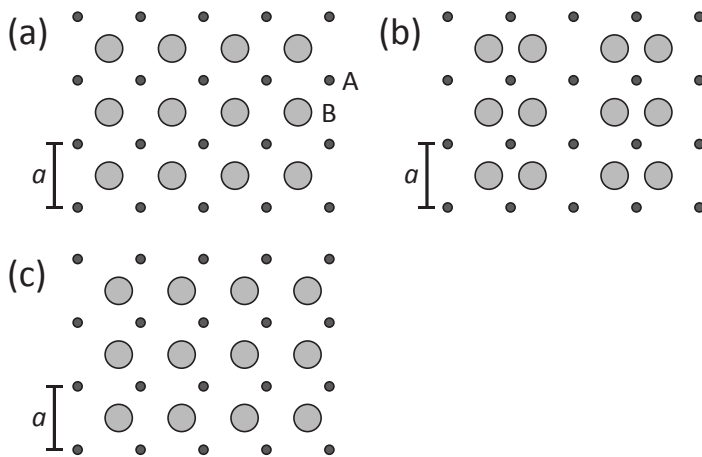


Abbildung 1: Fiktiver 2D-Ionenkristall. Die kleinen dunklen A-Atome seien negativ, die großen hellen B-Atome positiv geladen. (a) Das Gitter sei quadratisch und die großen B-Atome seien zentriert zwischen den A-Atomen. (b) Die B-Atome seien spiegelsymmetrisch um $\pm\delta a$ aus dem Zentrum verschoben.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