

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I WS 2020/2021

1 Kristallstruktur

1.4 Kupfer-Sauerstoff-Ebenen

Alle Kupferoxid-basierten Hochtemperatur-Supraleiter besitzen in ihrer Kristallstruktur als zentrale Bausteine Kupfer-Sauerstoff-Ebenen. Der Gitterabstand der Kupferatome sei a . Der Einfachheit halber betrachten wir das Problem nur im zweidimensionalen Fall.

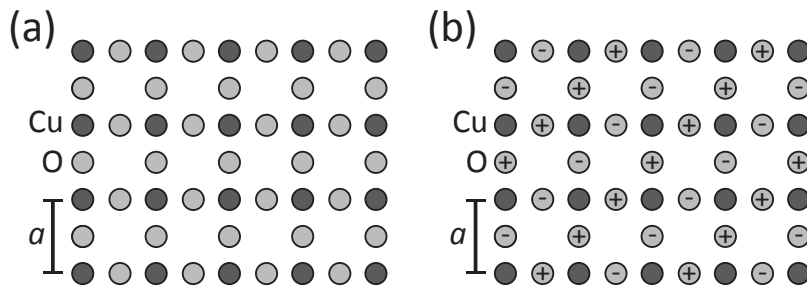


Abbildung 1: Kupfer-Sauerstoff-Ebene. Die dunklen Atome sind die Kupferatome, während die hellen die Sauerstoffatome darstellen. Rechts sind die Sauerstoffatome ein bisschen aus der Ebene nach oben (+) oder nach unten (-) versetzt.

- Betrachten Sie zunächst die unverkippte Kupfer-Sauerstoff-Ebene (siehe Abb. 1(a)). 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.
- In La_2CuO_4 sind die Kupfer-Sauerstoff-Ebenen nicht wirklich eben (siehe Abb. 1(b)). 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?

1.5 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 einfach kubischen (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 $T = 23 \text{ K}$. Zeigen Sie zuerst, dass das Verhältnis c/a für eine hexagonal dichtgepackte Kristallstruktur (hcp) gleich $\sqrt{8/3} \simeq 1.633 \dots$ ist. 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.

1.6 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.