

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I

WS 2020/2021

Allgemeine Fragen

- 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?
- Was ist die erste Brillouin-Zone? Wie ist sie definiert?
- Wie ist der Zusammenhang zwischen den Vektoren des reziproken Gitters und den Gitterebenen des direkten Gitters?

2 Strukturanalyse

2.1 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 (siehe Aufgabe 1.2).

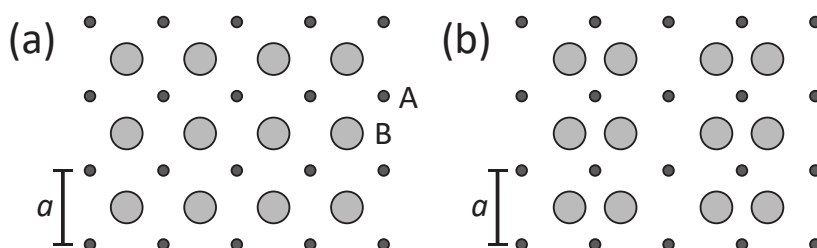


Abbildung 1: Fiktiver 2D-Ionenkristall. (a) Das Gitter sei quadratisch und die großen B-Atome seien zentriert zwischen den A-Atomen. (b) Die B-Atome seien spiegelsymmetrisch um $\pm\delta a$ aus dem Zentrum verschoben.

- Zeichnen Sie das reziproke Gitter und die ersten zwei Brillouin-Zonen für das Gitter vor und nach der Verzerrung.
- Vergleichen Sie diese mit dem Punktgitter und der Wigner-Seitz-Zelle des direkten Gitters vor und nach der Verzerrung.

2.2 Volumen der Brillouin-Zone

Seien $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ und \mathbf{a}_3 die primitiven Vektoren des Bravais-Gitters und $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ und \mathbf{b}_3 diejenigen des reziproken Gitters. Zeigen Sie, dass

(a) $\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$ und

(b) das Volumen der ersten Brillouin-Zone gleich $\frac{(2\pi)^3}{V_c}$ ist, wobei V_c das Volumen der primitiven Zelle des Kristalls ist.

2.3 Reziprokes Gitter eines hexagonalen Raumgitters

Betrachten Sie ein Raumgitter mit hexagonaler Symmetrie (Achsen und Winkel der konventionellen Einheitszelle mit $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| \neq |\mathbf{a}_3|$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$). Wählen Sie geeignete primitive Gittervektoren mit diesen Eigenschaften, wobei \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 einen Winkel von 60° zueinander einschließen. Benutzen Sie diese, um die primitiven Gittervektoren des reziproken Gitters zu definieren. Es ist geschickt, $\mathbf{a}_1 \parallel \hat{\mathbf{e}}_1$ und $\mathbf{a}_3 \parallel \hat{\mathbf{e}}_3$ zu wählen, wobei $\hat{\mathbf{e}}_1$ und $\hat{\mathbf{e}}_3$ die Einheitsvektoren in x- und z-Richtung sind. Welche Translationssymmetrie besitzt das reziproke Gitter? Durch welche Symmetrioperationen kann man das reziproke Gitter wieder in das Raumgitter überführen? Welche Volumina haben die primitive Zellen des Raumgitters und des reziproken Gitters?