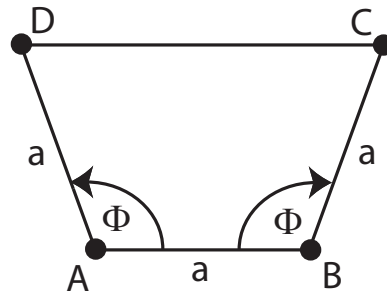


1. Übungsblatt: Lösungen

Besprechung 3./4. Oktober 2004

Aufgabe 1: Rotationssymmetrie

Befolgen wir die Anleitung aus der Aufgabenstellung, erhalten wir ein Trapez mit $\overline{AB} = a$, $\overline{AD} = a$, $\overline{BC} = a$, da letztere ja aus der Rotation um A resp. B hervorgehen.



Da C und D ebenfalls Gitterpunkte sind, muss die Strecke $\overline{CD} = (1 - 2 \cos \Phi)a$ ein ganzzahliges Vielfaches von a sein, der Periode des Gitters. Dies gilt nur für $\cos \Phi = 1, -1, -1/2, 0$ und $1/2$, also für $\Phi = 0^\circ (360^\circ), 180^\circ, 120^\circ, 90^\circ$ und 60° , was $n=1, n=2, n=3, n=4$ und $n=6$ entspricht.

Aufgabe 2: Reziprokes Gitter

a) Beweis durch Ausrechnen, z.B.

$$\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi$$

$$\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 0,$$

da $\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = 0$. Bemerkung: Das Spatprodukt ist ein zyklischer Ausdruck.

b) Gegeben seien die Bravais-Gittervektoren $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ mit ganzzahligen n_i . Das reziproke Gitter mit den Gittervektoren $\mathbf{G}$ ist dann definiert durch die Bedingung $\exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}) = 1$. Entsprechend ist das reziproke des reziproken Gitters mit den Gittervektoren $\mathbf{K}$ festgelegt durch die Bedingung $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{G}) = 1$.

Zeige zunächst, dass jedem Vektor $\mathbf{R}$ ein Vektor $\mathbf{K}$ zugeordnet ist. Da das Skalarprodukt kommutativ ist, erfüllt jeder Vektor $\mathbf{R}$ auch die Bedingung für $\mathbf{K}$. Alle Vektoren $\mathbf{R}$ gehören damit zum reziproken des reziproken Gitters.

Zur Vollständigkeit muss man noch zeigen, dass umgekehrt jeder Vektor $\mathbf{K}$ auch zum Bravais-Gitter gehört. Wir nehmen dazu an, es gäbe einen Vektor $\mathbf{r}$ des reziproken reziproken Gitters, welcher nicht zum Bravais-Gitter gehört. Dann ist also $\mathbf{r} = x_1 \mathbf{a}_1 + x_2 \mathbf{a}_2 + x_3 \mathbf{a}_3$ mit mindestens einem nichtganzzahligen x_i . Für dieses i wäre dann $\exp(i\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{r}) = \exp(2\pi i x_i) \neq 1$, was ein Widerspruch zur Definition des reziproken reziproken Gitters ist.

c) Mit $\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$ reduziert sich die Behauptung auf:

$$(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3) = (2\pi)^2$$

Diese Identität ist erfüllt aufgrund der Orthogonalitätsrelationen $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$ und der Lagrangeschen Identität $(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})$. Das Spatprodukt $\mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3)$ ist das Volumen der

reziproken Einheitszelle aufgespannt von $\mathbf{g}_1$, $\mathbf{g}_2$ und $\mathbf{g}_3$. Dementsprechend ist $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ das Volumen der primitiven Einheitszelle im Bravais-Gitter.

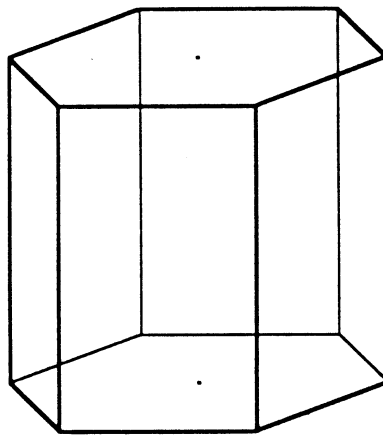
- d)* Im Experiment werden Interferenzmaxima beobachtet, wenn der Impulsübertrag auf den Kristall ein reziproker Gittervektor ist, d.h. wenn $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}$ ist (mit $\mathbf{k}_0$ dem einfallenden Vektor), wobei $|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}|$ (Laue). Bei beliebiger Orientierung des Kristalls und beliebigem $\mathbf{k}_0$ wird man daher in der Regel keine Interferenzmaxima finden. Was kann man tun: 1. Die Wellenlänge des einfallenden Strahles variieren, bis die Bedingung erfüllt ist. 2. Oder mit einem endlich breiten Spektrum von Wellenlängen einstrahlen. 3. Oder den Kristall so lange orientieren, bis man die Interferenzbedingung erfüllt. Hinweis: die genauen Techniken werden noch in der Vorlesung behandelt werden, ebenso die Ewald-Konstruktion.

Aufgabe 3: Bravais-Gitter

- a) Alle Koeffizienten gerade: einfach kubisches Gitter mit primitiven Gittervektoren $\mathbf{a}_1 = 2\hat{\mathbf{x}}$, $\mathbf{a}_2 = 2\hat{\mathbf{y}}$, $\mathbf{a}_3 = 2\hat{\mathbf{z}}$. Falls alle Koeffizienten ungerade sind, erhalten wir ebenfalls ein einfach kubisches Gitter jedoch um $(1,1,1)$ versetzt.
- b) Mögliche Gittervektoren haben entweder die Form $2l\hat{\mathbf{x}} + 2m\hat{\mathbf{y}} + 2n\hat{\mathbf{z}}$ oder $(2l+1)\hat{\mathbf{x}} + (2m+1)\hat{\mathbf{y}} + 2n\hat{\mathbf{z}}$ (und zyklisch). Es handelt sich dabei um ein kubisch flächenzentriertes Gitter mit den primitiven Gittervektoren $\mathbf{a}_1 = \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}$, $\mathbf{a}_2 = \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}$, $\mathbf{a}_3 = \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{z}}$.

Aufgabe 4: Punktsymmetrien

Die hexagonale Einheitszelle hat folgende Symmetrien:



- eine 6-zählige vertikale Rotationsachse
- drei vertikale Symmetrieebenen, welche gegenüberliegende Ecken des Hexagons (vertikale Kanten der Einheitszelle) verbinden
- drei vertikale Symmetrieebenen, welche gegenüberliegende Kantenmitten des Hexagons (Mitten der vertikalen Flächen der Einheitszelle) verbinden
- eine horizontale Symmetrieebene auf halber Höhe
- drei 2-fache horizontale Rotationsachsen, welche die Mittelpunkte gegenüberliegender Rechtecke verbinden.
- drei 2-fache horizontale Rotationsachsen, welche die vertikalen Kanten der Rechtecke in der Mitte schneiden
- ein Inversionszentrum in der Mitte der Zelle.

Die Ecken des hexagonalen Gitters bilden kein Bravais-Gitter, da nicht alle Eckpunkte durch Linearkombination von zwei Basisvektoren $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ erreicht werden können. Stattdessen ergibt sich das hexagonale Gitter als Bravais-Gitter mit einer Basis aus 2 Punkten A, B (siehe Figur unten). Die Basisvektoren $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ sind gleich lang und schliessen einen Winkel von 60° ein.

