2. Übungsblatt: Lösungen

Besprechung 10./11. Oktober 2007

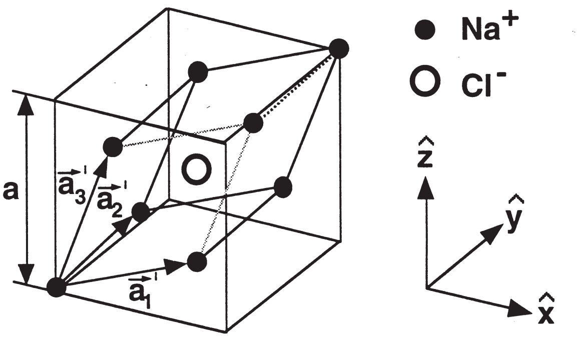
Aufgabe 1: *NaCl-Struktur*

1. Die kubische Elementarzelle enthält 4 NaCl-Einheiten: Die Na-Ionen liegen in den Ecken (8, Gewicht 1/8) und auf den Flächen (6, Gewicht 1/2), die Cl-Ionen auf den Kanten (12, Gewicht 1/4) und im Zentrum (1, Gewicht 1).

   Na^+: $a(0,0,0)$; $a(1/2,1/2,0)$; $a(1/2,0,1/2)$; $a(0,1/2,1/2)$;
   Cl^-: $a(1/2,1/2,1/2)$; $a(0,0,1/2)$; $a(0,1/2,0)$; $a(1/2,0,0)$;

2. Die primitive Einheitszelle enthält nur eine NaCl-Einheit: Na^+: $a(0,0,0)$; Cl^-: $a(1/2,1/2,1/2)$. Sie wird aufgespannt durch:

$$\begin{aligned} \mathbf{a_1}' &= a/2(\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{y}}); \\ \mathbf{a_2}' &= a/2(\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{z}}); \\ \mathbf{a_3}' &= a/2(\hat{\mathbf{y}}+\hat{\mathbf{z}}); \end{aligned}$$



Das Volumen dieser Einheitszelle beträgt $V = \mathbf{a}'_1 \cdot (\mathbf{a}'_2 \times \mathbf{a}'_3) = a^3/4$.

Aufgabe 2: *Packung von harten Kugeln*

Struktur	Kantenlänge(n)	Kugelradius	Volumen der Einheitszelle (EZ)	Kugeln pro EZ	Füllfaktor
sc	a	a/2	a^3	1	$\pi/6\approx 0.52$
fcc	a	$a/2\sqrt{2}$	a^3	4	$\pi\sqrt{2}/6\approx 0.74$
hcp	a,c=$a\sqrt{8/3}$	a/2	$6a^3/\sqrt{2}$	6	$\pi\sqrt{2}/6\approx 0.74$

Aufgabe 3: *Bragg-Bedingung*

Aus $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$ und $\mathbf{G} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ folgt

$$\begin{aligned} |\mathbf{k}_0| &= |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0 - (\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})| \\ &= |\mathbf{k}_0 - \mathbf{G}|, \end{aligned}$$

und somit

$$k_0^2 = k_0^2 - 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{G} + G^2.$$

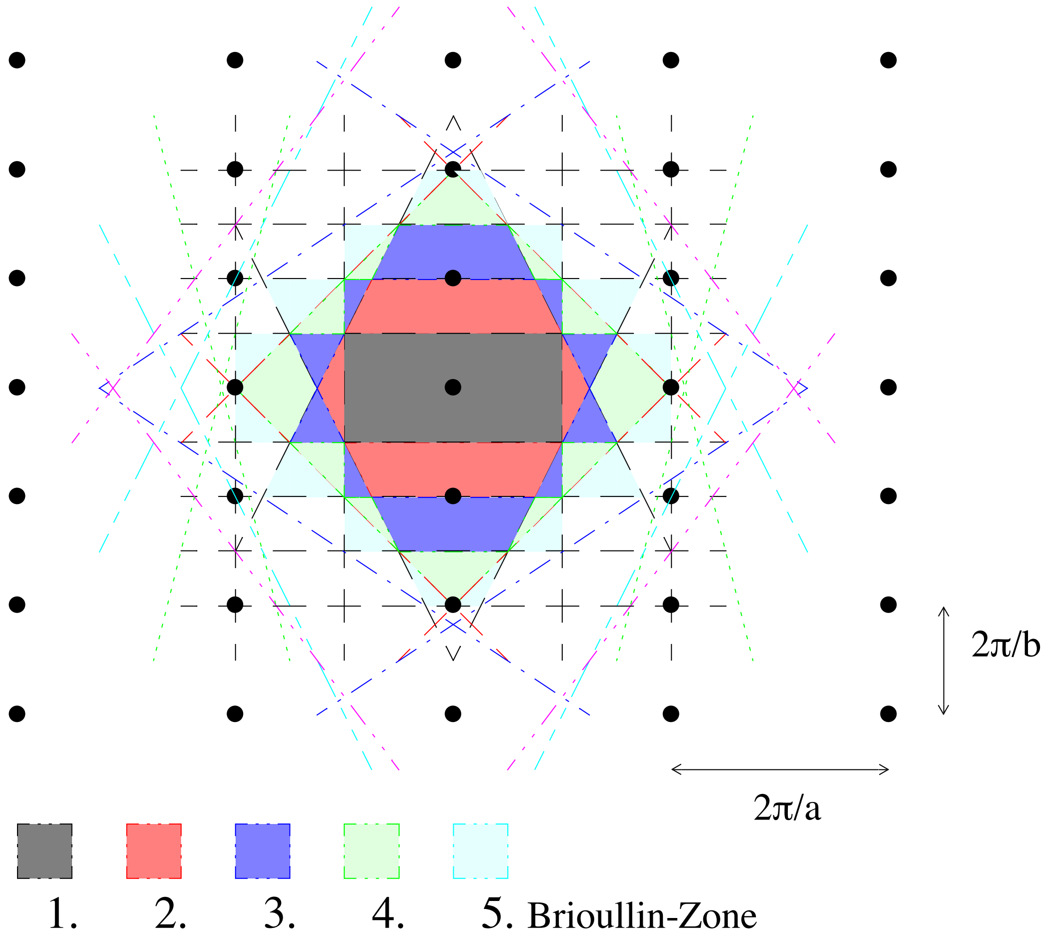
Daraus ergibt sich das gesuchte Resultat

$$\mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{G}} = \frac{1}{2}|\mathbf{G}|.$$

Geometrische Bedeutung der Bragg-Bedingung: Die linke Seite der letzten Gleichung bestimmt die Komponente von $\mathbf{k}_0$ entlang der Richtung von $\mathbf{G}$. Rechts steht die halbe Länge von $\mathbf{G}$.
Die Spitze des Vektors $\mathbf{k}_0$ muss also auf einer Ebene senkrecht zur Verbindungsgerade zwischen dem Ursprung und dem Gitterpunkt $\mathbf{G}$ des reziproken Gitters liegen, welche die Verbindungsgerade in der Mitte schneidet (Bragg-Ebene). Mit anderen Worten: $\mathbf{k}_0$ mit Anfangspunkt im Zentrum der reziproken primitiven Einheitszelle (bzw. der 1. Brillouin-Zone, siehe Aufgabe 4) hat seinen Endpunkt auf dem Brillouin-Zonenrand.

Aufgabe 4: *Die Brillouin-Zonen*

Das reziproke Gitter ist ebenfalls rechteckig mit den Gittervektoren $(2\pi/a)\hat{\mathbf{k}}_x, (2\pi/b)\hat{\mathbf{k}}_y, a = b/2$. Den Bragg-"Ebenen"entsprechen im zweidimensionalen k-Raum die Mittelsenkrechten auf den Gittervektoren des reziproken Gitters (gestrichelt gezeichnete Linien).
Konstruktionshilfe: Die (n+1)-te Brillouin-Zone (BZ) besteht aus den Punkten, die von der n-ten BZ aus erreicht werden können, indem nur eine Bragg-Ebene überquert wird (und die natürlich nicht zur (n-1)-ten BZ gehören!). Zudem müssen die Flächen der BZ gleich sein (Bild farbig)!



Bemerkung: Durch Verschieben der Teilstücke der höheren Brillouinzonen um reziproke Gittervektoren kommen diese wieder in der ersten BZ zu liegen und decken sie vollständig ab. Daraus sieht man, dass auch alle höheren Brillouinzonen primitive Einheitszellen des reziproken Gitters sind.